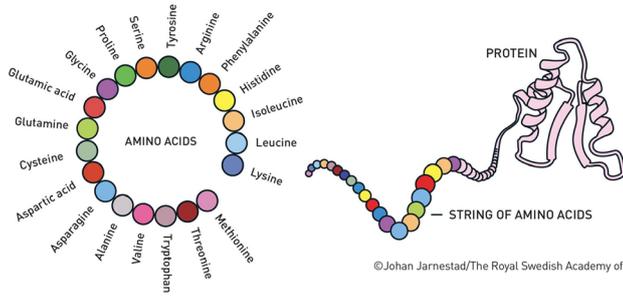


פרס נובל לכימיה 2024

ענבל סלומון חי¹



חומצות אמינו. על ידי השוואת הרצף שאת המבנה שלו מנסים לחזות לרצפים שהמבנה שלהם ידוע, ובעזרת פונקציות לחישוב אנרגיה, ניסו לחשב את המבנה בעל האנרגיה הנמוכה ביותר, מתוך הנחה שהוא היציב ביותר. ככל שהתפתחו התוכנות, הצליחו להגיע לחיזוי קרוב יותר למציאות.

ב-2003 הצליח דיוויד בייקר לסנתז חלבון חדש שלא היה דומה לאף חלבון ידוע. מאז הצליחה קבוצתו לייצר הרבה חלבונים חדשים היכולים לשמש תרופות, חיסונים, ננו-חלקיקים וחיישנים זעירים.

ב-2020 הציגו דמיס הסביס וג'ון ג'ימפר מודל מבוסס בינה מלאכותית, AlphaFold2, שבעזרתו אפשר לחזות ברמת דיוק גבוהה ביותר את המבנה המרחבי של כל 200 מיליון החלבונים שחוקרים זיהו. בשלב זה הם גם אפשרו לחוקרים להוריד את התוכנה למחשב ולנסות אותה. מאז השתמשו במודל יותר משני מיליון חוקרים לשימושים שונים, ובהם הבנת עמידות לאנטיביוטיקה ויצירת אנזימים לפירוק פלסטיק.

AlphaFold היא תוכנה מבוססת בינה מלאכותית מסוג "רשתות נוירונים מלאכותיות". בשלב הראשון, התוכנה מחפשת בבנק המידע של החלבונים (המכיל יותר מ-180,000 מבנים של חלבונים) חלבונים בעלי רצף חומצות אמינו הדומה לרצף של חלבון שאת המבנה שלו רוצים לחזות. לפי רמת הדמיון ברצף, אפשר להגדיר עד כמה החלבונים קרובים אבולוציונית. לצירופים של חומצות אמינו שנשמרו לאורך האבולוציה, או שהשתנו באופן מתואם לאורך האבולוציה, יש כנראה קשר לתפקיד החלבון, ולכן מניחים שהצירופים האלה יתקיימו גם במבנה התלת-ממדי של החלבון (חומצות אמינו שאינן בהכרח קרובות זו לזו ברצף יהיו סמוכות זו לזו במבנה התלת-ממדי של החלבון הפעיל). בהסתמך על מידע זה, המודל מנסה לנבא מה יהיה מבנה החלבון, ומשווה אותו למבנים מוכרים של חלבונים מתוך בנק המידע של החלבונים. בהסתמך על ההשוואה בין המבנה הידוע לבין המבנה שהאלגוריתם ניבא, רשת הנוירונים לומדת כיצד עליה להשתנות כדי לשפר את ביצועיה, כך שבסופו של דבר תצליח לנבא בצורה הטובה ביותר את מבני החלבונים.

מקורות

לצפייה ברשימת המקורות למאמר זה יש להכנס [לקישור](#).

פרס נובל בכימיה לשנת 2024 הוענק לשלושה חוקרים שפיתחו כלים מבוססי בינה מלאכותית לבניית חלבונים ייחודיים ולחיזוי המבנה המרחבי של חלבונים. מחצית הפרס הוענקה ל**דיוויד בייקר** מאוניברסיטת וושינגטון והמכון הרפואי הווארד יוז בארצות הברית (David Baker, University of Washington and Howard Hughes Medical Institute, USA), על בניית סוגים חדשים של חלבונים בעלי מבנה מסוים; ומחציתו השנייה התחלקה בין **דמיס הסביס** (Demis Hassabis) וג'ון ג'ימפר (John Jumper) מחברת גוגל דיפמינד באנגליה (Google DeepMind, UK), שהצליחו לבנות מודל לחיזוי המבנה המרחבי המורכב של חלבונים מתוך רצף חומצות האמינו שלהם. חלבונים הם בין המולקולות החשובות ביותר לחיים על פני כדור הארץ. הם ממלאים תפקיד חשוב בבניין תאים, ומשתתפים בכל התהליכים המתרחשים בגוף החי. המגוון המדהים של חלבונים בטבע מורכב מרצפים שונים של עשרים חומצות אמינו בלבד. חומצות האמינו מתחברות ביניהן בקשר פפטידי ויוצרות שרשרת ארוכה שיכולה להגיע עד מאות ואף אלפי חומצות אמינו. השרשרת מתקפלת בהשפעת גורמים שונים, ובהם קשרים בין שיירים של חומצות אמינו, מסיסות, משיכה ודחייה חשמלית. תהליך זה יוצר מבנה תלת-ממדי מורכב, שבו חומצות אמינו שהיו רחוקות זו מזו בשרשרת יכולות להיות סמוכות זו לזו (ראו איור)². המבנה התלת-ממדי המדויק חיוני לתפקוד החלבון: אם החלבון, מתקפל בצורה שגויה, הוא לרוב לא יתפקד כראוי, ויישלח למחזור (ראו כתבתם של שמחה סרביניק ובוריס חיימוב על "תעלומת קיפול החלבון" בגליון 32 של "על כימיה").

בעבר היה אפשר לדעת את המבנה התלת-ממדי של חלבון רק על ידי מדידות ישירות על גבישים של החלבון, בעזרת קריסטלוגרפיה של קרני רנטגן. במשך שנים הושקע מאמץ רב לפתח שיטה לחיזוי המבנה התלת-ממדי של חלבון לפי רצף חומצות האמינו שלו, כדי לייצר חלבונים בעלי מבנה ותפקוד ייעודיים (ראו כתבתה של שירן ברבר-צוקר על "פיתוח חלבונים בעזרת בינה מלאכותית" בגליון 40 של "על כימיה"). חברת גוגל אף יזמה תחרות דו-שנתית לחיזוי מבנה חלבונים מתוך רצף חומצות האמינו, שבה הושגו תחזיותיהם של המתחרים השונים למבנים שנמצאו בשיטות ניסיוניות. המתחרים שהציגו את התחזיות הקרובות ביותר למציאות זכו בתחרות. היתרון של בינה מלאכותית הוא יכולתה לעבד כמות גדולה מאוד של מידע בצורה יעילה ובזמן קצר. על בסיס מאגר הידע של החלבונים שהמבנה והרצף שלהם ידועים, השתמשו חוקרים בבינה מלאכותית כדי לחזות את המבנה של רצף מסוים של

1 עורכת עיתון על-כימיה, חברת צוות בקבוצת הכימיה, המחלקה להוראת המדעים, מכון ויצמן למדע.

2 האיור הפתוח לשימוש לא מסחרי נלקח מאתר פרס נובל.

פרס נובל לכימיה 2024 - הוראת הכימיה לאן?

ענבל סלומון חי¹

בינה מלאכותית (באנגלית - Artificial intelligence, או בקיצור AI) היא ענף מחקר בינתחומי החותר להקנות למחשב יכולות חשיבה ויכולות ביטוי הקרובות לדרכי החשיבה ולדרכי הביטוי האנושיות. בינה מלאכותית יוצרת (או גנרטיבית, בקיצור GenAI) היא סוג של בינה מלאכותית שיכולה ליצור תכנים חדשים על סמך תבניות שאותן למדה מתוך נתונים קיימים, הכוללים תמונות, שירים, טקסטים ותכנים אחרים. לקריאה נוספת והעמקת ההבנה במגוון הפעולה של בינה מלאכותית ובתהליך ההתפתחות של התחום אנו ממליצים על הקישורים הבאים: [ערך בינה מלאכותית בויקיפדיה](#), והכתבה [קיצור תולדות הבינה המלאכותית באתר מכון דוידסון](#).

רמת ה"מזו" (Meso-level) ורמת ה"מקרו" (Macro-level). כלים ברמת ה"מיקרו" כבר נמצאים בשימוש, באמצעים כמו "מערכות הוראה חכמות" (Intelligent tutor systems), שיכולים לשפר את ההוראה, על ידי ניתוח נתונים מביצועי תלמידים. אצלנו בארץ, כלי הגורפר בסביבת פט"ל מאפשר לחלק את התלמידים בכיתה לקבוצות לפי האופן שבו הם משיבים לסדרה של שאלות בנושא מסוים בכימיה. החלוקה לקבוצות מאפשרת למורה לקיים הוראה מותאמת לתלמידים בכל קבוצה, באופן שיענה על התפיסות השגויות שלהם (Feldman-Maggor et al, 2024; Nazaretsky et al., 2022). ברמת ה"מזו", מאחר שחלק מן המשימות בכימיה הן משימות כתיבה, אפשר להשתמש בבינה מלאכותית ליצירת מאגר מידע גדול מהעבודות הכתובות של התלמידים, שיכול לשמש מורים ותלמידים. ברמת ה"מקרו", מתאפשר ריכוז ידע ברמה מוסדית שיכול לסייע בקבלת החלטות ברמת תוכניות הלימודים.

עדיין מוקדם לומר כיצד אפשר להשתמש בכלי בינה מלאכותית כדי להועיל לתלמידי הכימיה באותה מידה שבה הם משמשים לקידום המחקר על מבנה חלבונים. עם זאת, מחקרים ראשוניים מצביעים על כך שהפוטנציאל טמון ביצירתיות של קהיליית הוראת הכימיה. קרוב לוודאי שההתפתחויות המהירות בתחום הבינה המלאכותית יובילו לשינויים משמעותיים גם בשימוש בטכנולוגיה זו בהוראת הכימיה (Holme, 2024).

מקורות

לצפייה ברשימת המקורות למאמר זה יש להכנס [לקישור](#).

פרס נובל בכימיה ופרס נובל בפיזיקה הוענקו השנה על פיתוח של כלים מבוססי בינה מלאכותית, המקדמים את המחקר בכימיה ובפיזיקה. בפיזיקה הפרס ניתן ל**ג'ון הופפילד** (John J. Hopfield) ו**ג'פרי הינטון** (Geoffrey E. Hinton) על פיתוח כלים המאפשרים למידת מכונה ברשתות עצבים מלאכותיות. בכימיה הפרס הוענק ל**דיוויד בייקר** (David Baker), **דמיס הסביס** (Demis Hassabis) ו**ג'ון ג'מפר** (John Jumper) שפיתחו כלים מבוססי בינה מלאכותית לבניית חלבונים ייחודיים ולחיזוי המבנה המרחבי של חלבונים, כלי האלפא פולד.

מצד אחד עלו ביקורות וחששות בקהילייה המדעית, כיוון שפרסים במחקר בכימיה ובפיזיקה ניתנו על פיתוחים בתחום למידת מכונה ובינה מלאכותית. אולם, ייתכן שהענקת הפרסים הללו מבשרת את תחילתו של עידן חדש, שישפיע גם על הדרך שבה מלמדים ומכשירים את המדענים החדשים. במקביל לשימוש בכלי בינה מלאכותית בקידום המדע, יש פוטנציאל לשימוש ביישומי בינה מלאכותית גם בהוראת מדעים. נושא השימוש בבינה מלאכותית בהוראת הכימיה צובר תאוצה בשנים האחרונות, והדבר ניכר בכמות גדולה של מאמרים המתפרסמים בעיתוני הוראת המדעים בכלל ובעיתוני הוראת הכימיה בפרט (Holme, 2024; Yuriev et al., 2024).

השימוש בבינה מלאכותית יוצרת בחינוך מביא עימו כמה אתגרים, ובהם החשש שסטודנטים ינצלו את הכלים לצורך רמאות, וכן חוסר מהימנות של המידע המתקבל מכלים של בינה מלאכותית יוצרת. אלא שבצד הסוגיות הללו, ההתפתחות המהירה של טכנולוגיות בינה מלאכותית מאפשרת מגוון שימושים בהוראה, כגון: יצירת חומרי למידה איכותיים, פתרון בעיות ודיאלוג מתקדם, העשויים לשנות את הדרך שבה נלמדת הכימיה ולהפוך את ההוראה למותאמת ללומד ולאינטראקטיבית יותר.

מחקר בתחום מדעי הנתונים זיהה אתגרים מרכזיים בעבור תלמידים העובדים עם בסיסי נתונים גדולים בבנייה והבנה של מודלים. מחקר זה יכול לסייע בהבנת

הצרכים והציפיות בעת פיתוח כלים להוראת כימיה על בסיס בינה מלאכותית. בתחום מדעי הנתונים, מחלקים את האתגר לשלוש רמות: רמת ה"מיקרו" (Micro-level),



1 עורכת עיתון על-כימיה, חברת צוות בקבוצת הכימיה, המחלקה להוראת המדעים, מכון ויצמן למדע. הכתבה מבוססת על המאמר:

Holme, T. (2024) Education Implications of Artificial Intelligence-Based Chemistry and Physics Nobel Prizes. *Journal of Chemical Education*, 101, 11, 4533–4534.