



ЗГУРОВСЬКИЙ

Михайло Захарович – академік НАН України, науковий керівник Навчально-наукового комплексу «Інститут прикладного системного аналізу» НТУУ «Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського»



ХІМІЧ

Олександр Миколайович – академік НАН України, заступник директора Інституту кібернетики імені В.М. Глушкова НАН України, академік-секретар Відділення інформатики НАН України

ШТУЧНИЙ ІНТЕЛЕКТ: ЗМІНА ПАРАДИГМИ У ФУНДАМЕНТАЛЬНИХ НАУКАХ

Нобелівські премії з фізики і хімії 2024 року

Цього року Нобелівський комітет відзначив преміями відразу у двох номінаціях проривні досягнення, основані на поєднанні класичних наук і штучного інтелекту. Нобелівську премію з фізики присуджено американському науковцю Джону Дж. Гопфілду (John J. Hopfield) з Принстонського університету і британсько-канадському інформатику, когнітивному психологу Джеффрі Е. Гінтону (Geoffrey E. Hinton) з Університету Торонто за «фундаментальні відкриття та винаходи, що уможливають машинне навчання за допомогою штучних нейронних мереж». У номінації з хімії Нобелівську премію отримали троє дослідників: американський біохімік та комп'ютерний біолог Девід Бейкер (David Baker) за «комп'ютерний дизайн білків», а також представники компанії Google DeepMind британський фахівець із систем штучного інтелекту Деміс Гассабіс (Demis Hassabis) і американський хімік та інформатик Джон Джемпер (John M. Jumper) за «прогнозування структури білка».

Ключові слова: Нобелівська премія з фізики 2024 року, Нобелівська премія з хімії 2024 року, Джон Гопфілд, Джеффрі Гінтон, Девід Бейкер, Деміс Гассабіс, Джон Джемпер, штучний інтелект, штучні нейронні мережі, машинне навчання, прогнозування структури білка.

У 2024 р. одразу двома Нобелівськими преміями – з фізики і з хімії – було відзначено проривні досягнення, які символізують нову еру в науці – еру, в якій поєднання класичних наук і штучного інтелекту (ШІ) стає вирішальним фактором для нових наукових проривів. Ці премії яскраво ілюструють, як інтеграція фізики, хімії, біології та обчислювальних методів дозволяє вирішувати проблеми, які раніше здавалися нерозв'язними.

У номінації з фізики Нобелівську премію отримали Джон Гопфілд і Джеффрі Гінтон за фундаментальні роботи в галузі штучних нейронних мереж, що ґрунтуються на фізичних принципах термодинаміки і статистичної механіки. Як зазначено у пресрелізі Нобелівського комітету, цьогорічні лауреати використали інструменти фізики для розроблення методів, що є основою сучасного потужного машинного навчання. Джон

Гопфільд створив асоціативну пам'ять, яка може зберігати й реконструювати зображення та інші типи шаблонів у даних, а Джеффрі Гінтон винайшов метод, який дозволяє автономно знаходити властивості в даних і в такий спосіб ідентифікувати конкретні елементи на зображеннях.

У галузі хімії Нобелівську премію отримали Девід Бейкер, Деміс Гассабіс і Джон Джампер за революційні здобутки в передбаченні білкових структур за допомогою ШІ. Їхні досягнення стали можливими завдяки поєднанню законів квантової хімії, біофізики і машинного навчання. Голова Нобелівського комітету з хімії Хайнер Лінке у виступі на пресконференції зазначив, що Девіду Бейкеру в 2003 р. «вдалося використати амінокислотні блоки для створення абсолютно нового білка, який не схожий на жоден інший відомий білок. Відтоді його дослідницька група один за одним продукувала нові білкові творіння, зокрема й ті білки, які можна використовувати як фармацевтичні препарати, вакцини, наноматеріали або крихітні сенсори. Деміс Гассабіс і Джон Джампер розробили модель штучного інтелекту для вирішення проблеми, над якою вчені билися вже більш як пів століття, — прогнозування складних структур білків. У 2020 р. вони презентували ШІ-модель AlphaFold2, за допомогою якої змогли передбачити структуру практично всіх 200 млн ідентифікованих білків. Від моменту появи AlphaFold2 нею скористалися вже понад 2 млн дослідників із 190 країн світу. І тепер перед ученими відкриваються широкі перспективи — наприклад, вони можуть передбачати структури білків і створювати нові білки, краще зрозуміти проблему стійкості до антибіотиків або робити зображення нових ферментів, що розкладають пластик».

Отже, Нобелівський комітет у 2024 р. відзначив нове явище в науці — синтез класичних наук і штучного інтелекту. Фундаментальні закони природи залишаються основою наукових досліджень, але саме ШІ стає ключовим інструментом для їх практичного застосування в складних системах. Така інтеграція не лише прискорює сам процес дослідження, а й

відкриває для науки нові горизонти, робить її більш міждисциплінарною і технологічно просунутою.

Розвиток штучного інтелекту. Штучний інтелект пройшов довгий шлях від абстрактних філософських роздумів античності до сучасних технологій, якими вже активно користуються і в науці, і в техніці, і в повсякденному житті. Ідея створення машин, здатних мислити, бере початок ще в працях давньогрецьких філософів, але реальні кроки до її втілення почалися лише у XX ст.

Одним із перших значущих проривів була робота англійського математика Алана Тюрінга (Alan Mathison Turing), який у 1950 р. запропонував тест для перевірки здатності машини до мислення, відомий сьогодні як тест Тюрінга. Його праці ознаменували початок ери обчислювальної науки та штучного інтелекту.

У 1956 р. на Дартмутській конференції було офіційно прийнято термін «штучний інтелект», запропонований Джоном Маккарті (John McCarthy). У цій конференції брали участь й інші видатні вчені, такі як Марвін Мінський (Marvin Minsky), Клод Шеннон (Claude E. Shannon), Герберт Саймон (Herbert A. Simon), які заклали основи розвитку методів машинного навчання, нейронних мереж та логічного моделювання мислення людини.

Важливим етапом у розвитку ШІ стала книга Марвіна Мінського і Сеймура Пейперта (Seymour Papert) «Перцептрони» (1969) — одна з перших фундаментальних праць з нейронних мереж. Не менш вагомий внесок зробили Герберт Саймон та Аллен Ньюелл (Allen Newell), розробивши програми для автоматичного логічного висновування та розв'язання задач.

Перші кроки на шляху до створення штучного інтелекту зробили математики та інформатики, які в 1980-х роках розробили методи виведення на основі логічних правил. Проте тоді обчислювальні ресурси були недостатніми для точного розв'язання складних задач, таких як, наприклад, розпізнавання образів. У цей період розпочалися дослідження, спрямовані на розуміння того, як біологічні систе-

ми, зокрема мозок, вирішують проблему розпізнавання. Ще в 1943 р. Воррен МакКаллох (Warren McCulloch) і Волтер Пітс (Walter Pitts) запропонували модель нейронної взаємодії, в якій нейрон обчислював зважену суму двійкових сигналів, визначаючи відповідний вихід, і ця робота стала відправною точкою для подальших досліджень штучних нейронних мереж.

Значний внесок у розвиток штучного інтелекту зробили й українські вчені, зокрема академіки Віктор Михайлович Глушков, Микола Михайлович Амосов і Олексій Григорович Івахненко. Віктор Глушков, один із засновників кібернетики в СРСР, створив концепцію автоматизованих систем управління, яка лягла в основу розвитку ШІ. Його проєкт Єдиної державної системи обробки інформації (ОГАС) мав стати першою автоматизованою системою управління економікою. Віктор Глушков розробив також математичні моделі для автоматизованих машин, які заклали фундамент для розвитку обчислювальної техніки та ШІ. Він одним із перших сформулював поняття «адаптація», «самоорганізація», «самовдосконалення» в контексті теорії автоматів, вважаючи дослідження таких систем одним з найважливіших завдань кібернетики.

У своїх дослідженнях В.М. Глушков зосереджувався на проблемах розуміння мов і автоматичного доведення математичних теорем, які він вважав найкращим способом моделювання інтелектуальної діяльності людини. Метод семантичних мереж, розроблений ним для розуміння змісту речень, став одним із перших у світі і привернув увагу міжнародної спільноти. Його доповідь на конгресі IFIP (International Federation of Information on Processing) у Мюнхені в 1961 р. стала справжньою сенсацією.

У 1970 р. Віктор Глушков започаткував науково-дослідницьку програму «Алгоритм очевидності», що лягла в основу системи автоматизованого доведення теорем (САД), яка успішно розв'язувала задачі з лінійної алгебри.

У галузі штучного інтелекту проводилися також дослідження з розпізнавання образів,

оброблення природної мови та автоматизації моторних функцій роботів — проєкт «штучної руки». У відділі академіка Миколи Амосова, якого Віктор Глушков запросив до Інституту кібернетики, розробляли інтелектуальні транспортні роботи (ТАЇР) і моделювали розумові процеси.

Метод групового врахування аргументів (МГУА), розроблений свого часу Олексієм Івахненком, і зараз широко використовують для побудови моделей складних систем на основі експериментальних даних. МГУА вирізняється принципом структурної ідентифікації і дає змогу синтезувати оптимальні структури нейронних мереж, а тому став одним із перших алгоритмів у цій галузі.

Хоча в ХХ ст. було досягнуто значних теоретичних успіхів у розвитку штучного інтелекту, його практичне впровадження значною мірою стримувалося обмеженістю обчислювальних ресурсів. Складні алгоритми, необхідні для машинного навчання, потребували потужностей, яких на той час не було. Інші перешкоди були пов'язані з обмеженням моделей перцептронів, відсутністю наборів великих даних та зменшенням інтересу до штучного інтелекту з боку науковців через недостатнє фінансування цього напрямку. Цей період іноді називають «зимою ШІ».

У ХХІ ст. напрям з розроблення штучного інтелекту отримав новий імпульс завдяки збільшенню обчислювальних потужностей і розвитку графічних процесорів (GPU). Хмарні обчислення також сприяли масштабуванню наукових досліджень. Крім того, поява великих масивів даних дозволила більш ефективно навчати моделі ШІ, що відкрило нові можливості для його застосування. Проривними методами стали алгоритми глибинного навчання (deep learning), які стимулювали розвиток нових галузей.

Інвестиції з боку урядів провідних держав світу, як-от США, Китай, країни ЄС, Японія, Велика Британія, а також технологічних гігантів, таких як Google, Facebook, Amazon, значно прискорили впровадження штучного інтелекту в промисловість, медицину та інші сектори

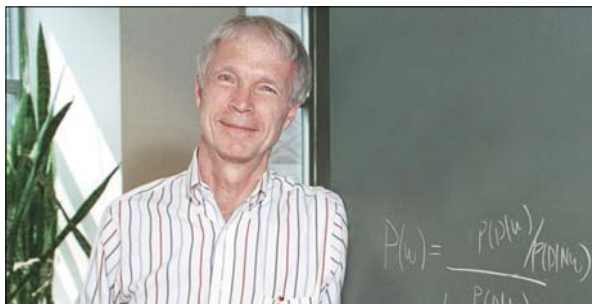


Фото: Denise Applewhite / Princeton University

Джон Дж. Гопфілд (John J. Hopfield) – американський фізик, почесний професор Принстонського університету, найбільш відомий своїми дослідженнями асоціативних нейронних мереж та розробленням мережі Гопфілда.

Народився 15 липня 1933 р. в Чикаго в родині фізиків Джона Джозефа Гопфілда (народився в Польщі як Ян Юзеф Хмільевський) і Гелен Гопфілд (уроджена Стафф).

Ступінь бакалавра здобув у Коледжі Свортмор у Пенсильванії в 1954 р., доктора філософії з фізики – в Корнельському університеті в 1958 р. Два роки працював у теоретичній групі в Bell Laboratories, потім викладав в Університеті Каліфорнії в Берклі, Принстонському університеті, Каліфорнійському технологічному інституті. Наразі є почесним професором кафедри молекулярної біології в Принстоні. У своїй докторській роботі описав взаємодію екситонів у кристалах, ввів термін «поляритон» для квазічастинок. У Bell Laboratories досліджував оптичні властивості напівпровідників, потім працював над кількісною моделлю для опису кооперативної поведінки гемоглобіну. У 1982 р. опублікував свою першу статтю з нейронауки, в якій представив новий тип штучної мережі, відомий зараз як мережа Гопфілда. Він є одним із піонерів гіпотези критичного мозку, першим пов'язав нейронні мережі з самоорганізованою критичністю. Джона Гопфілда нагороджено багатьма престижними науковими відзнаками, він є членом Американського фізичного товариства (1969), Національної академії наук США (1973), Американської академії мистецтв і наук (1975), Американського філософського товариства (1988).

У березні 2023 р. разом з іншими дослідниками штучного інтелекту підписав відкритий лист із закликом призупинити навчання систем ШІ, потужніших за GPT-4. На пресконференції в Принстоні з нагоди отримання ним Нобелівської премії розповів, що його дуже хвилюють нещодавні досягнення в галузі ШІ. «Як фізика мене дуже дратує те, що не піддається контролю», – пояснив він, а також порівняв ШІ з відкриттям ядерного поділу, що згодом призвело до створення ядерної зброї.

економіки. Сьогодні ШІ є рушійною силою наукових відкриттів. Цьогорічні Нобелівські премії одразу в двох номінаціях засвідчили, що поєднання штучного інтелекту з класичними науками зумовлює революційні зміни в методології наукових досліджень і розширює інструментарій для вирішення складних наукових проблем.

Нобелівська премія з фізики 2024 р. Отже, Нобелівську премію з фізики у 2024 р. було присуджено Джону Джозефу Гопфілду (John Joseph Hopfield) з Принстонського університету та Джеффрі Евересту Гінтону (Geoffrey Everest Hinton) з Університету Торонто за їхні фундаментальні відкриття, які уможливили розвиток машинного навчання на основі штучних нейронних мереж.

У 1980-х роках вчені досліджували переважно дві основні архітектури штучних нейронних мереж: рекурентні мережі (recurrent neural networks, RNN) та мережі прямого поширення (feedforward). Рекурентні мережі використовують зворотний зв'язок між вузлами, а мережі прямого поширення працюють через послідовні рівні – вхідний, вихідний та приховані. У цей період сталися значні прориви в обох напрямках, що дало поштовх стрімкому розвитку нейронних мереж.

Джон Гопфілд запропонував свою модель штучних нейронних мереж, що ґрунтується на фізичних законах термодинаміки та статистичної механіки. Ця робота, як і дослідження Джеффрі Гінтона, відкрила нові можливості для аналізу великих обсягів даних, що кардинально змінило наукові підходи й технології. Їхні відкриття ґрунтуються на застосуванні законів мінімізації енергії та статистичної механіки, які стали основою сучасних методів машинного навчання.

Гопфілдова мережа, створена у 1980-х роках, використовує концепцію енергетичних ландшафтів, що дозволяє нейронним мережам знаходити стабільні стани, пов'язані з певними патернами, або «спогадами». Ця модель демонструє, як нейронна мережа може автоматично коригувати свої параметри для досягнення мінімуму енергії, подібно до того, як фізичні

системи прагнуть до рівноваги. Тобто мережа намагається перейти до стану з мінімальною енергією, подібно до фізичних систем, що переходять у стабільні стани, щоб знизити вільну енергію. Як і у фізиці, де системи можуть «застрягати» в локальних мінімумах енергії, в гопфільдових мережах це явище використовують для моделювання асоціативної пам'яті та розпізнавання патернів.

Другий нобелівський лауреат з фізики Джеффри Гінтон зробив значний внесок у розвиток глибоких нейронних мереж та алгоритмів зворотного поширення помилок (backpropagation), які ґрунтуються на ключових фізичних принципах адаптації та оптимізації систем. Алгоритм зворотного поширення помилок нагадує процес градієнтного спуску, що є важливим для пошуку мінімуму потенційної енергії системи. Цей алгоритм дозволяє нейронній мережі навчатися через корекцію своїх параметрів.

Іншим напрямом досліджень Джеффри Гінтона були больцманівські машини, побудовані на принципах статистичної механіки. Больцманівський розподіл у фізиці визначає ймовірність, з якою система займе певний енергетичний стан. У машинному навчанні цей принцип використовують для моделювання стохастичних процесів у нейронних мережах, допомагаючи навчати мережі за допомогою ймовірнісних моделей.

Обидва вчені використовували концепцію самоорганізації, яка є фундаментальним принципом у фізиці. Самоорганізація — це процес, у якому система автоматично створює впорядковані структури без зовнішнього втручання. У нейронних мережах цей принцип дозволяє системам навчатися, адаптуючись до нових даних і поступово поліпшуючи здатність до розпізнавання та класифікації інформації.

Отже, відкриття Джона Гопфільда та Джеффри Гінтона ґрунтуються на фізичних принципах мінімізації енергії, статистичної механіки, ймовірнісних моделях та концепції самоорганізації. Ці принципи значною мірою вплинули на розвиток машинного навчання на основі нейронних мереж, що наразі відіграє важливу роль у прогресі сучасної науки і техніки та де-



Фото: Chloe Ellingson / Redux

Джеффри Е. Гінтон (Geoffrey E. Hinton) — британсько-канадський вчений-інформатик, когнітивний психолог, відомий своїми роботами в галузі штучних нейронних мереж. Його називають «хрещеним батьком ШІ». Праправнук відомого математика Джорджа Буля. Народився 6 грудня 1947 р. у Лондоні. Вчився у Королівському коледжі в Кембриджі, змінив багато спеціалізацій і зрештою отримав ступінь бакалавра з експериментальної психології (1970). Потім в Единбурзькому університеті здобув ступінь доктора філософії в галузі штучного інтелекту (1978). Через проблеми з пошуком фінансування в Британії переїхав до США, працював у Каліфорнійському університеті в Сан-Дієго та Університеті Карнегі—Меллона, з 1987 р. — на факультеті інформатики в Університеті Торонто, де й дотепер є почесним професором. Водночас у 2013–2023 рр. був співробітником компанії Google. Гінтон є одним з дослідників, які запропонували використовувати метод зворотного поширення помилок для тренування багатосарової нейронної мережі. Разом із Террі Сейновським винайшов машину Больцмана.

Джеффри Гінтон має багато престижних наукових відзнак, зокрема він лауреат премії Тюрінга (2018), яку ще називають «Нобелівською з обчислювальної техніки», перший лауреат премії Румельгарта (2001) за внесок у теоретичні основи людського пізнання. Він є членом Королівського товариства Канади (1996), Лондонського королівського товариства (1998), іноземним членом Інженерної академії США (2016) та Національної академії наук США (2023).

У травні 2023 р. Гінтон публічно оголосив про своє звільнення з Google, посилаючись на необхідність публічного обговорення свого занепокоєння щодо численних ризиків розвитку технології ШІ. Закликає терміново розпочати дослідження з безпеки ШІ, щоб зрозуміти, як керувати системами загального штучного інтелекту (AGI), які будуть розумнішими за людей і появу яких він очікує вже менше ніж через 20 років. На його думку, розвиток ШІ приведе нас до змін, які за масштабом можна порівняти з промисловою революцією чи появою електрики.



Фото: Uli Benz / TUM

Девід Бейкер (David Baker) –

американський біохімік, комп'ютерний біолог, професор біохімії Генрієтти та Обрі Девісів, дослідник Медичного інституту Говарда Г'юза та ад'юнкт-професор наук про геном, біоінженерії, хімічної інженерії, інформатики та фізики в Університеті Вашингтона. Започаткував методи проектування білків і передбачення їхньої тривимірної структури.

Народився в м. Сіетл (штат Вашингтон) 6 жовтня 1962 р. в єврейській родині вчених: батько – фізик, мати – геофізик, дід по матері, уродженець Риги, був професором математики в Ілінойському університеті. У 1984 р. здобув ступінь бакалавра в галузі біології в Гарвардському університеті, в 1989 р. – ступінь PhD з біохімії в Каліфорнійському університеті в Берклі в лабораторії нобелівського лауреата Ренді Шекмана, у 1993 р. закінчив докторантуру з біофізики в Каліфорнійському університеті в Сан-Франциско. Викладав на кафедрі біохімії Медичної школи Університету Вашингтона, потім у 2000 р. став дослідником Медичного інституту Говарда Г'юза. У 2012 р. заснував і очолив Інститут дизайну білка Університету Вашингтона. Його група розробила алгоритм Rosetta для ab initio прогнозування структури білка, який згодом було розширено до інструменту для проектування білків. Пізніше команда створила з використанням штучного інтелекту нову версію програми RoseTTAFold. Група також активно працює в галузі білкового дизайну. Відомі тим, що розробили перший штучний новий білок Top7.

Девід Бейкер – автор понад 600 наукових праць, член Національної академії наук США (2006), член Американської академії мистецтв і наук (2009), співзасновник понад дюжину біотехнологічних компаній, зокрема Prospect Genomics.

Роботи Бейкера відзначено численними нагородами, зокрема премією Овертона (2002), премією Ньюкомба Клівленда (2004), премією Фейнмана в галузі нанотехнологій (2004), міжнародною премією Саклера з біофізики (2008), премією Вайлі (2022), премією фонду BBVA (2022), премією «Прорив у науках про життя» (2021).

далі помітніше впливає на наше повсякденне життя.

Нобелівська премія з хімії 2024 р. Що стосується цього річної Нобелівської премії з хімії, то вона також пов'язана зі штучним інтелектом. Її присуджено професору Університету Вашингтона Девіду Бейкеру (David Baker) «за комп'ютерний дизайн білків» та представникам ШІ-підрозділу компанії Google – Демісу Гассабісу (Demis Hassabis) і Джону Джамперу (John Jumper) «за прогнозування структури білка». Їхні дослідження зосереджені на використанні обчислювальних методів і штучного інтелекту для вирішення складних проблем структурної біології.

Девід Бейкер тривалий час працював над проблемою використання обчислювальних методів для створення білків. Отримані ним результати дозволили не лише передбачати структури природних білків, а й створювати абсолютно нові білки з конкретними функціями, що раніше взагалі вважали неможливим. Дослідження Девіда Бейкера ґрунтуються на застосуванні фундаментальних законів фізики, хімії та біології.

Структура й функції білків визначаються різними типами взаємодій між амінокислотами, такими як ковалентні зв'язки, водневі зв'язки, ван-дер-ваальсові сили, гідрофобні ефекти, які й формують тривимірну структуру білка. Згідно із законами термодинаміки, білки набувають структури, яка мінімізує вільну енергію системи. Використовуючи обчислювальні алгоритми, Девід Бейкер здійснює пошук стабільних білкових конфігурацій на основі законів вільної енергії Гіббса, що дозволяє передбачати, як білкові ланцюги складаються у стабільні форми. Для цього застосовують методи молекулярної динаміки та градієнтного спуску.

Знання про тривимірну структуру білків дозволяють вченим зрозуміти їхню функцію і є практично значущими для пошуку нових ліків. Деміс Гассабіс і Джон Джампер на основі штучного інтелекту розробили модель AlphaFold, яка здійснила справжній революційний прорив у структурній біології, оскільки

дала змогу з надзвичайною точністю на основі амінокислотної послідовності передбачати тривимірні структури білків. В основі цієї моделі лежить фундаментальний біологічний принцип: послідовність амінокислот визначає форму білка, яка, своєю чергою, визначає його функції в клітині. Враховуючи ці закономірності, модель AlphaFold може точно передбачити кінцеву структуру білка.

У 2010 р. британський розробник комп'ютерних ігор, дизайнер, фахівець у галузі штучного інтелекту, програміст і нейробіолог Деміс Гассабіс заснував компанію DeepMind, яка спочатку розробляла ШІ-моделі для популярних ігор. У 2014 р. Google купив DeepMind, і вже за два роки розроблена ними модель перемогла гравця-чемпіона з го — однієї з найстаріших у світі настільних ігор. Після цього успіху команда зосередилася на більш важливих для людства проблемах. У 2018 р. вони зареєструвалися для участі в конкурсі проекту CASP з оцінки прогнозування структури білка, який проводився ще з 1994 р. Що два роки дослідники з усього світу отримували доступ до послідовностей амінокислот у білках, структуру яких щойно було визначено, але найкраща точність передбачення 3D-структури ледь досягала 40 %. DeepMind вийшов на конкурс зі своєю ШІ-моделлю AlphaFold, яка одразу показала результат у 60 %. Це був величезний прогрес, який здивував багатьох, але для практичних цілей точність передбачення мала становити принаймні 90 %.

Як не намагалася команда Гассабіса підвищити точність моделі, їм це не вдавалося, і дослідники були вже готові визнати, що зайшли в глухий кут. Зрушити справу з мертвої точки допомогли творчі ідеї нового співробітника DeepMind Джона Джемпера, хоча для цього й довелося докорінно реформувати модель.

Нова версія моделі — AlphaFold2 почала давати набагато кращі прогнози, і в 2020 р. на черговому конкурсі CASP для двох третин запропонованих білків показала точність передбачення, більшу за 90 %. Це був приголомшливий результат, і організатори CASP визнали, що мети конкурсу досягнуто.



Фото: Toby Melville / Getty Images

Деміс Гассабіс (Demis Hassabis) —

британський розробник комп'ютерних ігор, дизайнер, фахівець у галузі штучного інтелекту, програміст, нейробіолог, а також шахіст світового класу, засновник та керівник компанії DeepMind, радник уряду Великої Британії з питань штучного інтелекту.

Народився 27 липня 1976 р. в Лондоні, в родині грека-кіпріота та китаянки з Сінгапура. Грає в шахи з 4 років, у 13 років мав найвищий рейтинг Ело серед молодих шахістів, єдиний у світі п'ять разів перемагав в Олімпіаді інтелектуальних ігор. Склавши шкільні іспити на два роки раніше від однолітків, подав документи на вступ до Кембриджського університету, але йому порадили почекати через надто молодий вік. Тоді він розпочав свою кар'єру в індустрії комп'ютерних ігор, у 17 років займався спільним проектуванням і очолював програмування відомої гри-симулякра Theme Park разом із культовим дизайнером ігор Пітером Молін'є. Заробивши за два роки достатньо великі гроші, Деміс Гассабіс залишив роботу задля навчання в Квінз-коледжі Кембриджського університету на факультеті інформатики, який закінчив у 1997 р. з подвійною відзнакою. Після університету працював у компанії Пітера Молін'є Lionhead провідним програмістом зі штучного інтелекту, в 1998 р. заснував свою компанію Elixir Studios, яка випустила на ринок кілька відомих ігор-стратегій. Потім повернувся до науки, в 2009 р. здобув ступінь PhD з когнітивної нейронауки в Університетському коледжі Лондона (UCL), розробляв нові алгоритми ШІ, шукаючи натхнення в роботі людського мозку, досліджував механізми пам'яті та амнезії. У 2010 р. став одним із засновників стартапу DeepMind, який через два роки купив Google. Найвідоміші продукти DeepMind — AlphaGo, AlphaZero, AlphaStar, AlphaFold.

Член Королівської інженерної академії Великої Британії (2017), Лондонського королівського товариства (2018), член Academia Europaea (2023), лауреат премії Дена Девіда (2020), премії Вайлі (2022), премії Альберта Ласкера (2023) та багатьох інших.



Фото: Google DeepMind

Джон Джампер (John Jumper) — американський хімік і фахівець у галузі інформатики, директор компанії Google DeepMind.

Народився у 1985 р. у м. Літл-Рок (штат Арканзас, США). Дитинство та підліткові роки провів у рідному місті, навчався у школі, потім вступив в Університет Вандербільта — приватний дослідницький університет у Нашвіллі (штат Теннессі), де в 2007 р. здобув ступінь бакалавра з математики та фізики. Ступінь магістра з теоретичної фізики конденсованого середовища отримав у 2010 р. в Кембриджському університеті (Велика Британія), де навчався за стипендією Маршалла.

Наступні три роки працював в обчислювальній лабораторії D.E. Shaw Research у Нью-Йорку, де розробляв моделі для дослідження динаміки білків та інших макромолекул. У 2011 р. перейшов до Чиказького університету, де працював у галузі обчислювальної біології і застосовував машинне навчання для вивчення фізичних процесів згортання білка. У тому ж Чиказькому університеті в 2012 р. здобув ступінь магістра з теоретичної хімії, а в 2017 р. — ступінь PhD з хімії; його науковими керівниками були відомий хімік-теоретик Карл Фрід і Тобін Соснік.

Потім Джон Джампер перейшов на роботу в компанію з розроблення штучного інтелекту Google DeepMind, працював як дослідник над створенням моделі AlphaFold. З 2023 р. очолює Google DeepMind.

Джон Джампер — лауреат премії Вайлі з біомедичних наук (2022), премії VinFuture (2022), премії фонду BBVA з біології та біомедицини (2023), Канадської міжнародної премії Гайрндера (2023), премії Альберта Ласкера за фундаментальні медичні дослідження (2023), премії «Прорив у науках про життя» (2023), яку заснували Марк Цукерберг, його дружина Присцилла Чан, Сергій Брін та ін., «за розроблення моделі AlphaFold, яка точно передбачає структуру білка».

У 2021 р. журнал Nature вніс Джона Джампера до свого щорічного списку людей, які мають значення в науці.

У 2022 р. компанія відкрила код AlphaFold2 і зробила модель доступною для загального користування. За даними на 1 жовтня 2024 р., AlphaFold2 скористалися понад 2 млн дослідників із 190 країн світу. Це стало справжнім проривом у застосуванні інструментів штучного інтелекту та машинного навчання як у фундаментальних, так і в прикладних дослідженнях. Раніше для отримання білкової структури (якщо її взагалі вдавалося отримати) потрібні були роки, тепер це можна зробити за кілька хвилин. Модель штучного інтелекту не ідеальна, але вона оцінює правильність створеної нею структури, а отже, дослідники знають, наскільки надійним є прогноз.

Поява AlphaFold2 дала змогу значно прискорити дослідження в таких важливих напрямках, як стійкість до антибіотиків, лікування рідкісних захворювань, еволюційна біологія тощо.

8 травня 2024 р. компанія Google DeepMind оголосила про створення третьої версії моделі — AlphaFold 3, яка може передбачати структуру комплексів, утворених білками з ДНК, РНК, різними лігандами та іонами.

У всіх версіях моделі AlphaFold процес передбачення структури білка реалізується через моделювання різних типів взаємодій між атомами, таких як водневі зв'язки, гідрофобні ефекти, електростатичні взаємодії та багато інших. Модель побудовано на законах квантової хімії та класичної фізики, що дозволяє передбачати стабільні білкові структури. Використовуючи глибинні нейронні мережі, модель аналізує великі бази даних білкових структур — навчання мережі відбувалося на даних про близько 200 млн структур, що представляють майже всі відомі на сьогодні білки. Це дало змогу AlphaFold досягти виняткової точності у прогнозуванні.

До речі, Девід Бейкер також брав участь у конкурсі CASP з розробленим ним програмним забезпеченням Rosetta. Однак згодом він пішов іншим шляхом — замість того, щоб вводити в Rosetta амінокислотні послідовності й передбачати білкові структури, він почав вводити в модель бажану білкову структуру і отримувати пропозиції щодо її амінокислот-

ної послідовності, що й дозволило йому створювати абсолютно нові білки. Так само як і DeepMind, Девід Бейкер відкрив код своєї програми Rosetta, щоб нею могло користуватися все світове дослідницьке співтовариство, вдосконалюючи її і шукаючи нові сфери застосування. Після тріумфу AlphaFold2 на конкурсі CASP у 2020 р. Девід Бейкер зрозумів, який великий потенціал має ця модель штучного інтелекту, та інтегрував деякі її підходи до Rosetta, що значно полегшило розроблення нових білків. Останніми роками в лабораторії Бейкера один за одним з'являються неймовірні білкові творіння.

Отже, Нобелівська премія з хімії 2024 р. відзначила значний внесок у розвиток біоінженерії та структурної біології, здійснений завдяки використанню обчислювальних методів і алгоритмів штучного інтелекту.

Інтеграція класичних наук і штучного інтелекту: науковий прорив нобелівських лауреатів 2024 року. Інтеграція класичних наук, таких як фізика, хімія, біологія, з технологіями штучного інтелекту привела до значних наукових проривів. Цьогорічні нобелівські лауреати з фізики та хімії продемонстрували, як поєднання фундаментальних наукових принципів із потужними алгоритмами ШІ може суттєво змінити підхід до вирішення складних наукових проблем, які раніше потребували тривалих експериментів та значних ресурсів.

Джон Гопфілд і Джеффрі Гінтон показали, як закони фізики можна інтегрувати з методами машинного навчання для створення штучних нейронних мереж. Інтеграція ШІ в гопфілдовій мережі автоматизувала процес навчання та оптимізації мережі, що стало фундаментальним проривом у розвитку методів машинного навчання. Ця модель показала, як фізичні закони можна застосовувати для моделювання складних адаптивних систем, здатних до самостійного навчання. Інтеграція фізики ймовірностей із нейронними мережами в роботах Джеффрі Гінтона, присвячених больцманівським машинам, дозволила створити моделі, здатні на основі ймовірнісних підходів навчатися та оптимізувати свою роботу.

Джон Гопфілд і Джеффрі Гінтон використали також принцип самоорганізації, який є фундаментальним у фізиці складних систем, для створення моделей, здатних адаптуватися до нових даних.

Роботи нобелівських лауреатів у галузі хімії також є яскравими прикладами інтеграції фундаментальних законів фізики, хімії та біології зі штучним інтелектом. Структура й функції білків визначаються взаємодіями між амінокислотами — ковалентними, водневими зв'язками, ван-дер-ваальсовими силами, гідрофобними ефектами, завдяки яким і формується тривимірна структура білка, що, згідно із законами термодинаміки, характеризується мінімізацією вільної енергії системи. Девід Бейкер використав обчислювальні алгоритми, основані на принципах термодинаміки, методах молекулярної динаміки та градієнтного спуску, для пошуку нових білкових структур з конкретними функціями, що стало важливим проривом у галузі біоінженерії. Використання штучного інтелекту значно прискорило процес створення нових білків. Модель AlphaFold2, розроблена із застосуванням глибинних нейронних мереж для передбачення тривимірних білкових структур на основі амінокислотних послідовностей, стала найбільшим проривом у структурній біології.

Отже, вибір лауреатів з фізики та хімії, зроблений Нобелівським комітетом, демонструє нові можливості інтеграції класичних наук і штучного інтелекту, що дозволяють вирішувати проблеми, які раніше вважалися нерозв'язними, та прискорюють науково-технічний прогрес.

Міждисциплінарність та майбутнє науки. Міждисциплінарний підхід стає основою сучасної науки і значно розширює перспективи майбутніх досліджень. Класичні природознавчі науки відкривають фундаментальні закони природи, на основі яких будують нейронні мережі. Наприклад, закони термодинаміки регулюють мінімізацію вільної енергії в білках і забезпечують стабільність систем у нейронних мережах. Закони статистичної механіки пояснюють ймовірнісні процеси, що використовую-

ють для навчання нейронних мереж і моделювання складних систем.

Штучний інтелект відіграє вирішальну роль у практичному застосуванні цих законів до складних систем, таких як білки або нейронні мережі. ШІ істотно скорочує час, необхідний для вирішення складних обчислювальних завдань, як-от передбачення білкових структур або оптимізація нейронних мереж. Моделі ШІ можуть автоматично аналізувати великі обсяги даних, що є критично важливим для розв'язання задач, пов'язаних із білковим дизайном або машинним навчанням.

Отже, фізичні та хімічні закони забезпечують наукову основу, тоді як штучний інтелект дає інструменти для реалізації цих знань у складних системах. ШІ став рушійною силою, яка дозволяє застосовувати класичні закони

до великих обсягів даних, значно прискорюючи процеси дослідження та прогнозування.

Так, у роботах Джона Гопфілда і Джеффри Гінтона фізика відіграла ключову роль у створенні моделей штучних нейронних мереж. Зокрема, використання законів мінімізації енергії та статистичної механіки стало основою для моделювання адаптивних систем. Вчені застосували фізичні принципи для створення алгоритмів, здатних до навчання та оптимізації. У дослідженнях Девіда Бейкера, Деміса Гассабіса та Джона Джампера фізичні і хімічні закони допомогли описати взаємодії між атомами і молекулами, а ШІ прискорив процес прогнозування тривимірних білкових структур. Таке поєднання законів природи з алгоритмами машинного навчання відкриває широкі перспективи для подальшого прогресу в науці.

Michael Z. Zgurovsky

National Technical University of Ukraine "Igor Sikorsky Kyiv Polytechnic Institute", Kyiv, Ukraine

ORCID: <https://orcid.org/0000-0001-5896-7466>

Olexandr M. Khimich

V.M. Glushkov Institute of Cybernetics of the National Academy of Sciences of Ukraine, Kyiv, Ukraine

ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-8103-4223>

ARTIFICIAL INTELLIGENCE: A PARADIGM SHIFT IN THE BASIC SCIENCES

Nobel Prizes in Physics and in Chemistry 2024

This year, the Nobel Committee awarded prizes in two nominations for breakthrough achievements based on the combination of classical sciences and artificial intelligence. The Nobel Prize in Physics was awarded to American scientist John J. Hopfield from Princeton University and British-Canadian computer scientist and cognitive psychologist Geoffrey E. Hinton from the University of Toronto for “foundational discoveries and inventions that enable machine learning with artificial neural networks”. In the chemistry, the Nobel Prize was awarded to three researchers: American biochemist and computational biologist David Baker for “computer-aided protein design” and leading specialists of Google DeepMind, British artificial intelligence researcher Demis Hassabis and American chemist and computer scientist John M. Jumper for “protein structure prediction.”

Keywords: Nobel Prize in Physics 2024, Nobel Prize in Chemistry 2024, John Hopfield, Geoffrey Hinton, David Baker, Demis Hassabis, John Jumper, artificial intelligence, artificial neural networks, machine learning, protein structure prediction.

Cite this article: Zgurovsky M.Z., Khimich O.M. Artificial intelligence: a paradigm shift in the basic sciences. *Visn. Nac. Akad. Nauk Ukr.* 2024. (12): 17–26. <https://doi.org/10.15407/visn2024.12.017>