

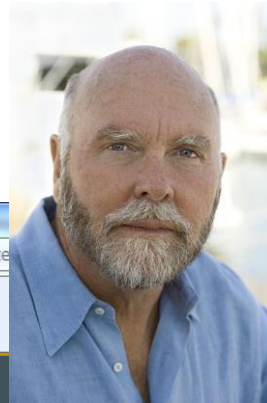
# 2024年ノーベル化学賞



- David Baker (ワシントン大学教授)
- タンパク質構造の最適化問題
  - コンピュータで解くのではない
  - ネット上にいる**ゲーマー**たちの力で解いてもらう
  - タンパク質構造予測ゲーム
  - リリースは2012年
- Demis HassabisとJohn Jumper (DeepMind)
  - AlphaFoldの開発
  - 機械学習によるタンパク質構造予測
  - AlphaZero

# 生命とは情報である

- 生命とは情報である
  - Life is all about information
- Life is software that runs biological robots.
  - by Craig Venter



Home » [Comp. Sci. / Eng., News, Origin Of Life](#) » [Craig Venter: Life is robotic software. Well then, information isn't material.](#)

## Craig Venter: Life is robotic software. Well then, information isn't material.

July 15, 2012 Posted by News under [Comp. Sci. / Eng., News, Origin Of Life](#) [4 Comments](#)

From "Venter: Life Is Robotic Software" (Creative Evolution Headlines, July 15, 2012)

Advertisements

**GENEWIZ**  
Gene Synthesis

# バイオ情報処理

- バイオ情報の処理にはAIや計算機科学の知識が駆使されている
- 情報工学者の関与は不可欠である
  - 遺伝子解析
  - タンパク質構造予測
  - 遺伝子ネットワーク推定

# タンパク質構造予測

- タンパク質は、20種類のアミノ酸から成っており、その線形結合で表すことができる。線形結合から、一意に立体構造を決めることができる。
- アミノ酸配列だけではそのタンパク質の生化学的機能を特定するには不十分であり、本来の三次元構造を得ることで生化学的機能が予測できる。
- AIの手法やコンピュータネットワークが駆使されている

# タンパク質構造予測

アミノ酸配列

どれだけ重要か？

解けたらノーベル賞！！

チューリング賞

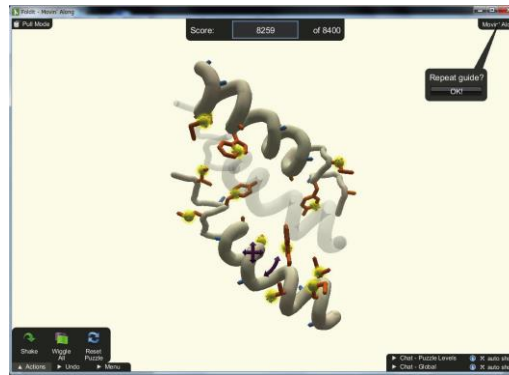
ノーベル医学生理学賞

しかし、とても**難しい**

20年以上コンピュータを駆使しているが解けていなかった。。。 



# Foldit!



- タンパク質の3次元折り畳み
- マルチプレイヤーのオンラインゲーム
  - プレイヤーは互いに競い合って次々に難しいレベルに進み、与えられたタンパク質の正しい折り畳みを探す
  - 共同作業による闘争本能
- 「普通の人にゲームをやってもらって、最終的にノーベル賞候補になってもらうのが目標だ」
  - 開発者のゾラン・ポポヴィッチ



# Foldit!

- 生物学を知らなくても解けるように設計されている
  - プレイヤーは一連の問題を解いていく
  - はじめは構造が知られているが公表されていないタンパク質の問題
  - その途中に専門知識を学ぶ
  - その後で、まだ解かれていない構造に進み、最新成果に貢献できるようになる
- 人間の直観を利用する問題が多い
  - パターンを見つける



[http://www.youtube.com/watch?v=iYMU5cMTdeY&feature=player\\_detailpage](http://www.youtube.com/watch?v=iYMU5cMTdeY&feature=player_detailpage)



# Foldit!

- 著名な学術雑誌*Nature*に論文が掲載された
- Last author は 57,999人のFoldit players
- 一部の上級者たちが作り上げた立体構造は世界有数のコンピューター予測を超えて良い成績を収めることが多々あった

Published as: *Nature*. 2010 August 5; 466(7307): 756–760.

- 学歴:大学院レベルの人は4分の1程度.
- 国別:多い順に, アメリカ, イギリス(ここまでに約半数), ドイツ, フランス, ポーランド, スウェーデン, オランダ, オーストラリア, ロシア, ポルトガル
- 年代で:3分の2が35歳以下だが, トップ50では4分の3が36 歳以上
- 「ゲーム中毒になって7ヵ月で2日を除いて毎日やっていた」
- 「とにかく人よりハイスコアを出したいという一心でがんばった」

structures with a multiplayer online game

, Adrien Treuille<sup>1,3</sup>, Janos Barbero<sup>1</sup>, Jeehyung Lee<sup>1</sup>, Michael  
y<sup>2,4</sup>, David Baker<sup>2</sup>, Zoran Popović<sup>1</sup>, and 57,000 Foldit players<sup>5</sup>

ence & Engineering, University of Washington

University of Washington

ence, Carnegie Mellon University

unts of problem solving effort playing computer games. Simple  
tasks have been successfully crowd-sourced through games: ii- iii, but  
ex scientific problems can be similarly solved with human-directed  
prediction is one such problem: locating the biologically relevant  
tein is a formidable computational challenge given the very large size  
describe Foldit, a multiplayer online game that engages non-  
duction problems. Foldit players interact with protein structures using  
d user-friendly versions of algorithms from the Rosetta structure  
while they compete and collaborate to optimize the computed energy.  
vers excel at solving challenging structure refinement problems in  
which substantial backbone rearrangements are necessary to achieve burial of hydrophobic  
residues. Players working collaboratively develop a rich assortment of new strategies and





- # Foldit!
- David Baker (ワシントン大学教授)
  - タンパク質構造の最適化問題
    - コンピュータで解くのではない
    - ネット上にいる**ゲーマー**たちの力で解いてもらう
    - タンパク質構造予測ゲーム
    - リリースは2012年
  - Demis HassabisとJohn Jumper (DeepMind)
    - AlphaFoldの開発
    - 機械学習によるタンパク質構造予測
    - AlphaZero

# Foldit!

- 教科書の6.1節

