

FASZINATION CHEMIE

DIE INFORMATIONSPLATTFORM DER GDCh



Künstliche Intelligenz in der Arzneimittelforschung

 28-11-2019 (Letzte Änderung: 04-12-2019 15:52)

0
 0

Folge 19: Aktuelle Chemie 2019 - Medizin und Gesundheit



Die Digitalisierung greift in alle Bereiche unseres Lebens ein. Auch die Entwicklung neuer Medikamente, ein langwieriger und sehr teurer Prozess steht vor einer Zeitenwende. In allen Bereichen der Wertschöpfungskette eines Medikaments - beginnend von der Wirkstoffsuche bis zur klinischen Anwendung - fallen riesige Mengen (auch sensibler) Daten an, die in Zukunft ohne Data Science, Künstliche Intelligenz und maschinelles Lernen kaum noch handhabbar sind.

Beim Wissenschaftsforum Chemie, einer Tagung der Gesellschaft Deutscher Chemiker in Aachen im September 2019, gab es daher ein **Symposium zur Zukunft der Arzneimittelforschung im Zeichen der Künstlichen Intelligenz (KI)**. Das Symposium verdeutlichte, dass sich durch die Offenlegung von experimentellen Daten und das Zusammenspiel von Chemie und Künstlicher Intelligenz viele Vorteile in der Entwicklung neuer Medikamente und der effizienten Behandlung bestehender Krankheiten ergeben können. So kann z. B. maschinelles Lernen die Syntheseplanung automatisieren. Durch die Digitalisierung können Daten und Informationen schneller ausgetauscht und analysiert werden, Teams können sich gegenseitig helfen oder Fehlerquellen ausschließen und schneller zu besseren Ergebnissen kommen.

Neue Inhalte für das Studium nötig

Die Rolle und Aufgaben der medizinischen Chemiker werden sich im digitalen Zeitalter verändern. Dies wird mittelfristig auch Auswirkungen auf die inhaltliche Gestaltung des Chemiestudiums haben. Doch derzeit stecken Universität und Industrie in einem Dilemma. Einerseits benötigen forschende Chemie- und Pharmaunternehmen schon heute Chemikerinnen und Chemiker mit Digitalkompetenz und Kenntnissen in Data Science. Andererseits finden sich diese Inhalte in den Curricula der

meisten Chemiestudiengänge noch nicht wieder. Um das Studium nicht immer länger werden zu lassen, müssen bisherige Inhalte gekürzt oder auch gestrichen werden. Aber welche das sein könnten, darüber hat die Diskussion gerade erst begonnen.

Keiner kommt mehr ohne Data Science aus

Prof. Stefan M. Kast von der TU Dortmund und Vorsitzender der [GDCh-Fachgruppe „Computer in der Chemie“](#) sieht das Ganze pragmatisch: „Ein Chemiker sollte natürlich immer noch grundsätzlich ein Chemiker sein und bleiben. Daher müssen wir in der Ausbildung an wenigen Stellschrauben drehen, um eine große Hebelwirkung zu erzielen. Wir müssen die Themen Programmierung und Statistik stärker in den Pflichtbereich des Chemiestudiums einbinden. Dazu gehört ein effizientes Forschungsdatenmanagement, um den richtigen Umgang mit Daten zu lernen.“



Prof. Stefan Kast, TU Dortmund

Vorstellbar wäre aus seiner Sicht auch ein neuer Studiengang Data Science Master mit Schwerpunkt Chemie. „Die aktuellen Studierenden sind zwar in der Mehrzahl Digital Natives, das reicht aber nicht aus, digital produktiv zu sein“, betont Kast. „Sich allein mit einem Smartphone auszukennen oder in den sozialen Medien unterwegs zu sein heißt nicht, dass man Daten in ihrer Bedeutung analysieren oder z.B. eine App programmieren kann. Die Benutzung und Bedienung ist das eine, die produktive Weiterentwicklung vor dem Hintergrund der Lösung einer wissenschaftlichen Fragestellung das andere. Und in der Chemie gibt es keinen Bereich, der ohne Data Science auskommen wird.“

Ob Medizinalchemiker, Organikerin, Festkörperchemiker oder Katalyseforscherin - sie alle müssen sich mit der gleichen Fragestellung auseinandersetzen: Wie entwickle ich produktiv Funktionen und welche Chemie gehört dazu, um diese Funktionen zu realisieren? Die Medikamentenentwicklung ist beim Design neuer Wirkstoffe eine treibende Kraft, die Auswertung riesiger Datenmengen ist aber auch in der Materialforschung und Entwicklung omnipräsent, denn inverses Design und Architektur von neuen Molekülen und Verbindungen finden in vielen Bereichen der Chemischen Forschung und Industrie statt.

„Form follows Function“ als treibendes Prinzip in der Medikamentenentwicklung

Dieses Prinzip „Form follows Function“ ist auch bei Chemieunternehmen wie Bayer präsent. Dr. Franz von Nussbaum, Head Life Science Chemistry bei der Bayer AG und Vorsitzender der [GDCh-Fachgruppe „Medizinische Chemie“](#), sagt dazu: „Das Prinzip Form follows Function hat nicht nur Architekten, sondern auch die Medizinalchemiker schon immer angetrieben. Das Spannende ist: sowohl die Form - also die Molekülstruktur - als auch die Funktion - also die biologische Wirkung des Moleküls - sind allein schon sehr komplex. Man hofft, dass die Künstliche Intelligenz den Chemikerinnen und Chemikern dabei hilft, durch Analyse komplexer multidimensionaler Daten die Form und die Funktion von Wirkstoffmolekülen noch besser zu verstehen. Aus einem multidimensionalen Daten-Verständnis heraus hoffen wir, zukünftig Handlungsanweisungen für noch bessere Molekül-Strukturen zu erhalten und so den Sprung zu noch besseren Wirkstoffmolekülen mit noch „maßgeschneiderter“ Funktion zu schaffen. So kann Künstliche Intelligenz insbesondere beim Prinzip Form follows Function entscheidende Hilfestellung geben. Aber auch Synthesepanungen und Syntheseprozesse werden durch KI immer stärker begleitet werden.“



Dr. Franz von Nussbaum, Bayer AG

Ob die KI beispielsweise die Medikamentenentwicklung schneller macht, darüber sind sich die Experten noch nicht einig. Bestimmte Routinetätigkeiten werden dadurch sicher schneller durchgeführt werden können. Entscheidend aber ist, dass man mit Künstlicher Intelligenz extrem komplexe Datensammlungen noch schneller und besser analysieren und entschlüsseln kann. Das verschafft Forscherinnen und Forschern wiederum mehr Möglichkeiten, die richtige Kombination aus Funktion und Form der Wirkstoffe zu finden. „Der Einfluss der KI wird zunehmen, das liegt aber vor allem daran, dass wir uns hier in vielen Bereichen noch quasi im Kindergarten befinden. Wir müssen und werden noch viel lernen, um die KI richtig zu

beherrschen und sinnvoll einsetzen zu können. Künstliche Intelligenz kann dazu beitragen, individuelle Krankheitsgeschehen, individuelle Krankheitsbilder besser zu verstehen und in der Folge dann auch eine maßgeschneiderte Therapie für diese Krankheitsbilder anzubieten. Aber es ist auch klar, dass bessere Spezifität und Selektivität nicht automatisch mit geringeren Kosten für die Medikamentenentwicklung einhergehen wird. Aber diese Entwicklung wird einen positiven Effekt auf die Qualität der Medikamente und der medizinischen Behandlung haben“, ist von Nussbaum überzeugt.

Die menschliche Intelligenz wird weiterhin gebraucht werden

Auch wenn im Laboralltag selbstlernende Algorithmen zunehmend eine Rolle spielen werden - eines ist für Franz von Nussbaum sicher: „Wir werden glücklicherweise noch sehr lange Chemikerinnen und Chemiker im Labor brauchen. Wir haben aber auch noch überhaupt nicht das Potenzial der technischen Möglichkeiten vom Labor 4.0 ausgereizt. Von der Robotik, der Laborautomation, der Datenvernetzung bis zur Vernetzung der Laborgeräte - da ist noch viel Luft nach oben.“

Immerhin, der kreative Faktor, den Chemikerinnen und Chemiker einbringen, kann heute noch nicht vom Computer ersetzt werden - und letztlich sollte im Labor der Zukunft der Computer auch mehr als Partner, denn als Konkurrent betrachtet werden.

Wissenschaftliche Beratung:

Prof. Stefan Kast, Fakultät für Chemie und chemische Biologie, TU Dortmund

Dr. Franz von Nussbaum, Head Life Science Chemistry, Bayer AG



Dr. Jörg Wetterau

Labor für Kommunikation, Linsengericht

<http://www.labor-fuer-kommunikation.de/>

Kommentare

Keine Kommentare gefunden!

Neuer Kommentar

DIESEN ARTIKEL TEILEN



