



# FÜNF FRAGEN

## ZU KÜNSTLICHER INTELLIGENZ IN DER MEDIKAMENTENFORSCHUNG

AN PETER NUSSBAUMER

90

Proteine bestehen aus einer Kette verschiedener Aminosäuren, die sich zu komplizierten dreidimensionalen Strukturen aufrollen können. Die Software AlphaFold der Google-Tochter DeepMind kann diese 3D-Struktur anhand der Abfolge der Aminosäuren sehr genau vorhersagen.

**Herr Nussbaumer, wird die neue Software die Entwicklung neuer Medikamente revolutionieren?**

PETER NUSSBAUMER Für die Analyse von Proteinen ist das Programm sicher ein Meilenstein, keine Frage. Zur Entwicklung neuer Wirkstoffe tragen jedoch viele verschiedene Forschungsdisziplinen bei. Ein technischer Fortschritt auf einem Teilgebiet kommt natürlich dem gesamten Entwicklungsprozess zugute, er ist aber nur ein Teil des Puzzles. Eine Revolution erwarte ich also nicht.

**Wie könnte denn AlphaFold die Entwicklung neuer Medikamente voranbringen?**

Wir könnten mit AlphaFold beispielsweise eine neue räumliche Struktur eines Proteins erhalten, das an einer bestimmten Erkrankung beteiligt ist. Aus einer strukturellen Ähnlichkeit mit einem Protein mit bekannter Funktion ließe sich dann möglicherweise auch auf die Rolle des anderen Proteins schließen. Wir müssen jedoch auch daran

denken, was AlphaFold nicht kann: Es kann beispielsweise nicht vorhersagen, wie sich Proteine zeitlich verändern, wie ihre Struktur durch die Bindung anderer Proteine oder Wirkstoffe beeinflusst wird und wie die Seitenketten orientiert sind. Und was für die Entwicklung neuer Wirkstoffe besonders entscheidend ist: Die Software verrät uns auch nicht, wo und wie ein Molekül an ein Protein bindet.

**Welche Rolle spielt künstliche Intelligenz heute schon bei der Entwicklung neuer Medikamente?**

Die Antwort auf die Frage hängt auch davon ab, wie man künstliche Intelligenz definiert. Die Rechenkraft moderner Computer, neuronale Netzwerke und maschinelles Lernen helfen uns schon lange in der Wirkstoffforschung. Wir nennen das auch „Computerchemie“. Beispiele sind etwa der Strukturvergleich eines bekannten mit einem unbekanntem Protein oder die Nutzung und Auswertung der riesigen Datenmengen, die in der präklinischen Forschung anfallen. Auch für die Interpretation von Genaktivitätsmustern und die Vorhersage von Zielproteinen für die Medikamentenentwicklung ist die Computerchemie sehr nützlich. Künstliche Intelligenz wird künftig sicher an Bedeutung zunehmen, aber man darf davon keine Wunder erwarten.

**Wird AlphaFold auch beim LDC zum Einsatz kommen?**

Ich weiß nicht, ob und zu welchem Preis DeepMind die Software zur Verfügung stellen will. Ich vermute aber, dass zum jetzigen Zeitpunkt die Kosten den Nutzen für uns übersteigen würden. Vielleicht wird der Algorithmus ja auch offengelegt und damit zur „Open source“-Software.

**Halten Sie es für möglich, dass DeepMind in die Medikamentenentwicklung einsteigen könnte?**

Ich kenne die Pläne von Google nicht, aber zur Entwicklung neuer Medikamente gehört, wie gesagt, mehr als ein ausgeklügeltes Programm zur 3D-Analyse von Proteinen. Unsere Daten würde ich an das Unternehmen trotzdem nicht weitergeben. Für mich stellt sich im Moment eher die Frage, ob DeepMind aus der Strukturanalyse künftig einen kostenpflichtigen Service machen wird. Bislang haben Forschungsgruppen die Strukturdaten aus ihren Studien kostenlos zur Verfügung gestellt.

*Interview: Harald Rösch*

Peter Nussbaumer ist Geschäftsführer des Lead Discovery Center in Dortmund (LDC), einer Ausgründung von Max-Planck-Innovation zur Entwicklung neuer Medikamente.