

Press release**Technische Universität Berlin****Stefanie Terp**

02/21/2022

<http://idw-online.de/en/news788813>Cooperation agreements, Research results
Chemistry, Economics / business administration, Information technology, Materials sciences, Medicine
transregional, national**TU Berlin: BIFOLD - neuer KI-Algorithmus generiert innovative Substanzen auf Basis von gewünschten Eigenschaften****Funktion bestimmt Form Neuer KI-Algorithmus generiert innovative Substanzen auf Basis von gewünschten Eigenschaften**

In der Medizin, in der Batterieforschung oder in der Materialwissenschaft – überall sind Wissenschaftler*innen auf der Suche nach innovativen Substanzen. Dabei können die Forscher*innen oft sehr detailliert die gewünschten chemischen und physikalischen Eigenschaften bis auf die atomare Ebene vorhersagen. Allein der Raum aller potenziellen chemischen Verbindungen ist so riesig, dass es Jahre dauern würde, bis die geeignete Substanz gefunden wird. Eine interdisziplinäre Forschergruppe des Berlin Institute for the Foundations of Learning and Data (BIFOLD) an der Technischen Universität Berlin hat jetzt einen KI-Algorithmus entwickelt, der mithilfe von KI sogenanntes inverses chemisches Design umsetzt und so gezielt Moleküle auf Basis ihrer gewünschten Eigenschaften generiert. Ihre Publikation „Inverse design of 3d molecular structures with conditional generative neural networks“ erschien jetzt in dem renommierten Magazin Nature Communications.

Die Suche nach geeigneten Molekülen für spezielle medizinische oder industrielle Anwendungen ist ein extrem aufwändiger und teurer Prozess. „Rein hypothetisch existieren unfassbar viele mögliche Strukturen, von denen aber nur ein winziger Bruchteil die speziellen chemischen oder physikalischen Eigenschaften hat, die in einer bestimmten Anwendung gefragt sind“, erläutert Dr. Kristof Schütt, BIFOLD Junior Fellow an der TU Berlin. In den letzten Jahren wurde eine Fülle von Methoden entwickelt, die in der Lage sind, die chemischen Eigenschaften und energetischen Zustände von gegebenen Substanzen mit Hilfe von KI vorherzusagen. Selbst mit diesen effizienten Methoden erweist sich die Suche nach Molekülen mit spezifischen Eigenschaften in der Praxis als schwierig, da nach wie vor eine überwältigende Anzahl an Kandidaten durchsucht werden muss.

Die Struktur-Eigenschaftsbeziehung wird umgedreht

Die BIFOLD-Wissenschaftler konzentrierten sich daher auf das sogenannte inverse Moleküldesign, bei dem die Struktur-Eigenschafts-Beziehung umgedreht wird: Die Struktur gibt nicht die Eigenschaften vor, sondern die Eigenschaften definieren die Struktur. Die Herausforderung besteht darin, direkt molekulare Strukturen zu konstruieren, die einer bestimmten Gruppe von Eigenschaften entsprechen. Der entwickelte KI-Algorithmus basiert auf einem sogenannten tiefen generativen neuronalen Netz, in dessen Entwicklung Vorwissen über grundsätzliche, physikalische Gegebenheiten eingeflossen ist. Das Netz lernt nur anhand einiger tausend Beispielmoleküle die komplexen Zusammenhänge zwischen chemischen Strukturen und ihren Eigenschaften. „Danach können verschiedene Eigenschaftsprofile vorgegeben werden und das generative neuronale Netz, schlägt dazu eine überschaubare Menge an passenden Molekülen und Verbindungen vor. Nur diese Kandidaten müssen dann von den Chemiker*innen untersucht werden“, erläutert Kristof Schütt. Die Wissenschaftler konnten zeigen, dass dieses inverse chemische Design sogar dann funktioniert, wenn das gesuchte Eigenschaftsprofil nur teilweise von den bereits bekannten Beispielmolekülen abgedeckt wird.

Das interdisziplinäre Team erwartet, dass derartige Algorithmen, im Zusammenspiel mit weiteren KI-getriebenen Ansätzen und quantenchemischen Methoden, die Suche nach neuen Molekülen und Materialien in vielen praktischen Bereichen stark beschleunigen können. Klaus-Robert Müller, BIFOLD Co-Direktor und Professor für maschinelles Lernen an der TU Berlin, ergänzt: „Ich sehe hier ein enormes Potential, wenn sowohl das Entwerfen der Moleküle als auch deren Analyse und Simulation mit Methoden der künstlichen Intelligenz unterstützt werden. Dies kann zum Beispiel bei der Entwicklung von Medikamenten hilfreich sein oder die Suche nach neuartigen Materialien für Batterien und Solarzellen beschleunigen.“

Publikation:

Niklas W. A. Gebauer, Michael Gastegger, Stefan S. P. Hessmann, Klaus-Robert Müller and Kristof T. Schütt, Nature Communications: „Inverse design of 3d molecular structures with conditional generative neural networks“

<https://doi.org/10.1038/s41467-022-28526-y>

Weitere Informationen erteilt Ihnen gern:

Prof. Dr. Klaus-Robert Müller

BIFOLD/TU Berlin

Tel.: 0049 (0)30 314-78621

Email: klaus-robert.mueller@tu-berlin.de