

Künstliche Intelligenz in der Medikamentenentwicklung: Ein Blick hinter die Kulissen

Die Universität Bonn erforscht mit neuen Methoden, wie „Machine Learning“-Modelle Arzneiwirkung vorhersagen und interpretierbar machen.

Fortschritte in der Medikamentenforschung durch verbesserte Erklärungen von Machine Learning-Modellen

Die Entwicklung von Medikamenten ist ein komplexer Prozess, der zunehmend von innovativen Technologien wie „Machine Learning“ beeinflusst wird. An der Universität Bonn konzentriert sich eine Forschungsgruppe darauf, die Vorhersagekraft dieser Technologien zu optimieren. Ein zentrales Anliegen ist es, die recht oft als „Black Box“ bezeichneten Modelle verständlicher zu machen, um deren Einsatz in der pharmazeutischen Forschung zu verbessern.

Warum sind Erklärungen entscheidend?

In der Studie wurde herausgefunden, dass verschiedene algorithmische Varianten ähnliche Vorhersagen für die Aktivität von Wirkstoffmolekülen liefern, die jedoch durch unterschiedliche Annahmen zustande kommen. Diese Divergenz erschwert die Interpretation und kann somit den praktischen Nutzen der Modelle einschränken. Der Bedarf an Transparenz ist nicht nur für die Wissenschaftler selbst, sondern auch für Entwickler und letztlich die Patienten von großer Bedeutung, da

unklare Ergebnisse Verzögerungen in der Entwicklung wirksamer Therapien verursachen können.

Innovativer Ansatz zur Erklärung von Vorhersagen

Die Forscher setzten auf den sogenannten Support Vector Machine (SVM)-Algorithmus, um die Aktivität potenzieller Medikamente zu prognostizieren. Durch die Anpassung eines Konzepts aus der Spieltheorie, den Shapley-Werten, konnten sie analysieren, wie einzelne Atome eines Moleküls zur Gesamtergebnisvorhersage beitragen. Dies ist vergleichbar mit einem Teamspiel, wo jeder Spieler eine Rolle im Endergebnis spielt.

Herausforderungen und Lösungen

Die größte Herausforderung lag in der Entwicklung einer Methode, die eine schnelle und präzise Berechnung der Shapley-Werte ermöglicht. Dank dieser neuen Herangehensweise können nun große Datenmengen effizient ausgewertet werden, was zu einer verbesserten Vergleichbarkeit von Erklärungen verschiedener Modellsysteme führt.

Breite der Anwendungsmöglichkeiten

Die Methode zur effektiven Berechnung der Shapley-Werte ist nicht nur auf die pharmazeutische Forschung beschränkt, sondern kann in verschiedenen Anwendungsgebieten eingesetzt werden. Diese Vielseitigkeit macht die Ergebnisse der Bonner Studie besonders wertvoll, da sie zur Rationalisierung von „Machine Learning“-Modellen in unterschiedlichen Kontexten beitragen können.

Ausblick auf die Zukunft

Ein zentrales Anliegen der (künftigen) Forschungen wird es sein,

die Ergebnisse der eingesetzten Modelle noch verständlicher zu machen. Dies könnte die wechselseitige Interpretation chemischer und algorithmischer Erklärungen verbessern und letztlich zu effektiveren Medikamentenführungen führen. Die Fähigkeit, Vorhersagen zu erklären, wird in der modernen Forschung als Schlüssel zur Verbesserung und Beschleunigung der Medikamentenentwicklung erkannt.

- **NAG**

Details

Besuchen Sie uns auf: n-ag.de