



KÜNSTLICHE INTELLIGENZ: ZWISCHEN WUNDERGLAUBE UND WISSENSCHAFT – „DER DIGITALE CHEMIKER“

Fellowbericht

Andreas Dreuw

DOI: 10.11588/fmk.2022.2.92713

**MARSILIUS-
KOLLEG**

2021 / 2022



KÜNSTLICHE INTELLIGENZ: ZWISCHEN WUNDERGLAU- BE UND WISSENSCHAFT

"Der digitale Chemiker"

Künstliche Intelligenz oder „*Artificial Intelligence*“ (AI), wie es im Englischen und für uns noch futuristischer heißt, ist derzeit in aller Munde. In den neuesten Hollywood-Filmen wollen intelligente Maschinen die Weltherrschaft erringen und intelligente Roboter in die unendlichen Weiten des Weltalls aufbrechen. Aber auch in wissenschaftlichen Forschungsanträgen dürfen die „*Buzzwords*“ AI oder etwas moderater „*Machine Learning*“ (ML) nicht mehr fehlen. In der Tat gibt es mittlerweile sehr viele sinnvolle Anwendungen von AI/ML, zum Beispiel in der Sprach- und Mustererkennung. Das AI/ML basierte Computerprogramm *AlphaGo* hat es geschafft, den besten menschlichen Go-Spieler zu schlagen, was lange Zeit für unmöglich gehalten wurde. Und im wissenschaftlicheren Kontext schafft es das AI-Programm *AlphaFold*, Proteinstrukturen mit bisher nicht da gewesener Zuverlässigkeit vorherzusagen.

AI ALS BLACKBOX

AI/ML kann mit vielen Daten schnell umgehen. Allerdings benötigt AI/ML bereits viele Daten, an denen es trainieren kann. So hat *AlphaGo* zum Beispiel umgerechnet 20.000 Jahre gegen sich selbst bzw. eine Kopie von sich Go gespielt, bevor es gegen den menschlichen Gegner angetreten ist. Im Allgemeinen gilt: Je mehr Trainingsdaten zur Verfügung stehen, desto „besser“ werden die Voraussagen, insofern die Trainingsdaten zuverlässig, repräsentativ, objektiv und genau genug sind. In der Sprach- oder Bildererkennung ist es in der Regel sehr einfach, solche Daten zu erzeugen oder zu bekommen, im naturwissenschaftlichen Kontext ist dies nicht

notwendigerweise der Fall. AI/ML Methoden werden häufig als schwarze Kiste dargestellt, eine sogenannte „*Blackbox*“, in die man vorne Daten hineinsteckt und hinten eine Antwort herausbekommt. Das liegt daran, dass man nicht weiß, warum die AI/ML diese spezielle Antwort gibt. Im Klartext heißt das: Der Erkenntnisgewinn bei Verwendung von AI/ML ist bisher klein bis gar nicht vorhanden. Einerseits vollbringt AI/ML also große wissenschaftliche und nichtwissenschaftliche Leistungen, andererseits ist der Erkenntnisgewinn minimal. Auch sind bis dato viele wichtige mathematische Grundlagen unverstanden.

„DER DIGITALE CHEMIKER“

Mit diesem Dilemma im Hinterkopf sind wir, Jan Schuhr (Jurist und Rechtsphilosoph), Robert Scheichl (Mathematiker) und ich (Theoretischer Chemiker) in unser Marsilius-Projekt gestartet. Wie viel Wissenschaft steckt in AI/ML, ist es die gesellschafts- und wissenschaftsverändernde Wunderwaffe für alles? Oder ist es bloß ein Hype wie manch anderer? Besitzt AI/ML klare Grenzen und wird sogar manchmal hinderlich? Unvorstellbar war für uns drei, dass AI/ML eines Tages alles dominiert und dass Wissenschaftler:innen auf die schwarze Kiste starren, die Antwort auf eine Frage bekommen – möglicherweise 42 –, keine Ahnung haben, warum, sich ratlos anschauen, mit den Schultern zucken und sagen: „Egal, wenn die schwarze Kiste das sagt, dann ist das eben so.“ Das ist sicherlich überzogen und übertrieben negativ dargestellt, aber herauszufinden, wo AI/ML in unseren Wissenschaftsbereichen sinnvoll und wo es eher hinderlich ist, das war die Kernfrage unseres gemeinsamen Marsilius-Projekts, in dem ich selbst mich mit der chemischen Seite befasst habe.

Die Frage, die ich zu beantworten suchte, ist: „Kann es ‚den digitalen Chemiker‘ geben, oder wird es beim ‚digitalen Laboranten‘ bleiben?“ Nicht herabgestuft werden sollte dabei die wichtige Tätigkeit vieler Laborant:innen, die mit ihren technischen und handwerklichen Fähigkeiten zahlreiche von Chemiker:innen erdachte Reaktionen erst zur Realität machen. Ein häufig verwendetes Bild ist dabei das des chemischen Raumes, dem Raum aller möglichen Verbindungen. In diesem Bild ist ‚der (digitale) Chemiker‘ der Kapitän des Raumschiffs, das in die unbekanntesten Weiten des chemischen Raumes vordringt und diese erkundet. ‚Der (digitale) Laborant‘ ist es hingegen, der neue Welten besiedelt und urbar macht. Wenn man dieses Bild auf die AI/ML überträgt, kann man auch fragen: Kann AI/ML bei der Entde-

ckung völlig neuer Verbindungen helfen oder ist sie/es immer nur darauf beschränkt, sich innerhalb einer bereits bekannten Verbindungsklasse zu bewegen?

DAS POTENZIAL VON AI FÜR DIE (THEORETISCHE) CHEMIE

Heutzutage wird AI/ML in zunehmendem Maße in der Chemie verwendet, vor allem für die datenbasierte Vorhersage optimaler Verbindungen mit Funktionen. Für diese gibt es keine bekannten Struktur-Funktions-Beziehungen, aber z. B. viele Daten für die Phototoxizität eines Moleküls, d. h. seine Giftigkeit für den Menschen unter Lichteinstrahlung. Mithilfe von AI/ML ist es heute möglich, eine solche Vorhersage zu treffen, wenn auch noch immer mit einer relativ großen Fehlerquote. Der Zusammenhang zwischen der Struktur des Medikaments und der Phototoxizität bleibt jedoch weiterhin unverstanden.

Diese Art der Anwendung von AI/ML wird in der Chemie heute häufig beobachtet. Man trainiert eine AI/ML mit experimentellen oder berechneten Daten zu einer bestimmten Molekülklasse und verwendet dann die AI/ML, um im Rahmen der Molekülklasse eine bestimmte Eigenschaft zu optimieren. Als konkretes Beispiel sei hier eine theoretische Untersuchung meines Kollegen Prof. Mikkelsen an der Universität Kopenhagen genannt, in der Moleküle zur Sonnenenergiespeicherung optimiert wurden. Zu diesem Zweck wurden zunächst Trainingsdaten von 5000 Molekülen der Molekülklasse der Norbornadiene theoretisch erzeugt und zum Training einer AI/ML verwendet, mit der man anschließend 1025 verschiedene Norbornadiene untersuchen konnte. Dadurch wurden die theoretisch „besten“ Moleküle zur Verwendung als Sonnenenergiespeicher identifiziert. In diesem Zusammenhang ist die Verwendung von AI/ML sehr sinnvoll, da man dieselben Rechnungen für sehr viele Moleküle sehr oft hintereinander ausführen müsste. Das ist etwas, das eine AI/ML wesentlich schneller mit einem nicht zu großen zusätzlichen Fehler leisten kann.

Betrachten wir diese Anwendung der AI/ML etwas genauer, stellen sich einige Fragen. Als Erstes sollte man danach fragen, wie genau die Vorhersagen der AI/ML tatsächlich sind. Da gibt es zwei wesentliche, limitierende Faktoren: Zum einen die Qualität der Daten und zum anderen die Menge der Trainingsdaten. Die Qualität der Daten entspricht der Genauigkeit, die man bestenfalls erreichen kann. Die Menge der Trainingsdaten bestimmt, wie nahe man an die Qualität der Daten herankommt. Im

oben beschriebenen Beispiel heißt das konkret, dass die Vorhersage der AI/ML nicht besser sein kann als die Genauigkeit der Rechenmethode, mit der die Daten der 5000 Trainingsmoleküle generiert wurden. In diesem Fall ist das unproblematisch, da man den statistischen Fehler dieser Rechenmethode kennt. Problematischer wird es, die Qualität der vorhandenen Daten zu beurteilen, wenn sie experimentell gemessen oder gar statistisch erhoben worden sind. Da muss besondere Vorsicht walten und die Daten müssen eingehend auf ihre Qualität überprüft werden. In wissenschaftlicher Hinsicht muss man für in AI/ML Methoden verwendete Daten denselben Anspruch stellen wie für das wissenschaftliche Arbeiten in Allgemeinen: Sie sollten objektiv, unbeeinflusst, nachvollziehbar und bewertbar sein.

Eine weitere Frage, die nach der erfolgreichen Vorhersage eines „optimalen“ Norbornadiens im obigen Beispiel sofort aufkommt, lautet: Kann man diese AI/ML auch für andere Moleküle als Norbornadiene verwenden? Die Antwort auf die Frage lautet ganz klar: Nein. Denn es handelt sich um eine speziell trainierte „Intelligenz“ und Transferleistungen gehören nicht in ihr Repertoire. Dies steht im Gegensatz zu klassischer chemischer Forschung, in der in den Ergebnissen nach Mustern und allgemeinen physikalischen Gesetzmäßigkeiten gesucht wird, die dann als Regeln formuliert werden. Diese abstrahierten Regeln sind dann meistens auch auf viele andere Substanzklassen übertragbar und häufig sogar im gesamten chemischen Raum anwendbar. Daher erscheint es manchmal sinnvoller, die Daten mit Blick auf Gesetzmäßigkeiten zu analysieren, als viel Zeit auf das Trainieren einer AI/ML zu verwenden, die einem zwar am Ende eine Antwort gibt, das chemische Verständnis aber auf der Strecke bleibt.

Kommen wir nun zur ursprünglichen Frage meines Projekts zurück: Kann es einen „digitalen Chemiker“ geben? Mit Blick auf die derzeit existierende AI/ML bin ich davon überzeugt, dass die datenbasierten Methoden ihre wichtigen und richtigen Anwendungsbereiche in der Chemie besitzen – vor allem immer dann, wenn man auf Hochdurchsatzverfahren abzielt, d. h. man viele sich wiederholende Tätigkeiten oder Rechnungen vorzunehmen hat. Jedoch sind die derzeitigen AI/ML Verfahren nicht in derselben Weise wie ein:e kreative:r Chemiker:in in der Lage, unbekannte Welten des chemischen Raumes zu erschließen, da sie nicht auf Moleküle anwendbar sind, die im chemischen Raum weit außerhalb des Trainingssatzes liegen. Nun könnte man in Zukunft versuchen, einen „digitalen Chemiker“ mit allen publizierten chemischen Daten zu trainieren. Allerdings sind in der Literatur grundsätzlich nur

die Daten gelungener Experimente zu finden, und bekannterweise lernen Forschende – also auch Chemiker:innen – am allermeisten aus ihren vielen Fehlversuchen.

AUSSICHT

Aktuell stehen wir erst am Anfang der datengetriebenen Wissenschaft und bereits jetzt hat AI/ML einen festen und gerechtfertigten Platz unter den wissenschaftlichen Methoden eingenommen. Die Digitalisierung hält außerdem weiterhin verstärkt Einzug in die chemischen Laboratorien in Form des digitalen Laborbuchs. Vielleicht hat man schon bald Zugang zu viel mehr gut katalogisierten, zuverlässigen Daten, die in ihrer Vielzahl und Qualität eines Tages einflussfrei und objektiv sind. Auch gibt es Ansätze in Richtung erklärbarer AI/ML, die es erlauben Gesetzmäßigkeiten zu finden und mithilfe von AI/ML abzuleiten. Man wird sehen. Der „digitale Laborant“ ist bereits da, den „digitalen Chemiker“ sehe ich allerdings noch in weiter Ferne.

Das Marsilius-Stipendium war eine großartige Erfahrung. Man hat die verschiedenen Themen der anderen Marsilius-Stipendiat:innen inter- und transdisziplinär, offen und vorbehaltlos in den wöchentlichen Treffen diskutieren und so den eigenen Horizont erweitern können. Innerhalb unseres Projekts habe ich viel Neues über die mathematischen Grundlagen der AI/ML, Rechtsphilosophie und Rechtsprechung von Robert und Jan gelernt und die sehr freundliche Diskussionsatmosphäre und angenehmen Treffen unseres Teams sehr genossen. Am Ende unseres Marsilius-Projekts bin ich davon überzeugt, dass AI/ML allein nicht die Lösung für alles sein wird, sondern nur im Wechselspiel mit etablierten wissenschaftlichen Methoden neues Wissen schaffen und somit zu Fortschritt führen wird.

