



CONNECT

Smarte Arzneimittelforschung

Hintergrund

Künstliche Intelligenz wird immer greifbarer. Dabei gibt es verschiedene Arten der KI, wobei am häufigsten auf das maschinelle Lernen zurückgegriffen wird. Im Gesundheitswesen können durch KI bislang ungenutzte Chancen ermöglicht werden – beispielsweise in der Arzneimittelforschung. Wussten Sie, dass es heutzutage rund 2,6 Milliarden US-Dollar kostet, um einen neuen Wirkstoff auf den Markt zu bringen? Und nicht nur, dass das Procedere kostenintensiv ist: letztendlich schaffen es nur 10 Prozent der Wirkstoffkandidaten nach den Phase-1-Studien auf den Markt, was gleichzeitig ein hohes wirtschaftliches Risiko für die Unternehmen darstellt.

Erstaunliche Möglichkeiten durch KI

Die Arzneimittelforschung baut darauf, eine kontinuierlich wachsende Anzahl potenzieller Wirkstoffe so zu kombinieren, um die Optimierung von Medikamenten zu erreichen. Um dies zu ermöglichen ist es notwendig riesige Datenmengen effektiv und exakt zu bewältigen, wodurch KI sich als optimaler Partner herausgestellt hat. Große Mengen an maschinenlesbaren Daten bieten der Forschung und Entwicklung von Arzneimitteln nicht nur die Möglichkeit neue Erkenntnisse zu gewinnen, sondern stellen gleichzeitig eine große Herausforderung dar, da die Ableitung der Erkenntnisse durch die steigende Datenmenge zunehmend erschwert wird. Eine weitere Herausforderung besteht darin, dass es auch immer schwieriger wird, einen ganzheitlichen Überblick über die wichtigsten Veränderungen und Entwicklungen in angrenzenden Forschungsbereichen zu behalten, was speziell in der Entwicklung von Arzneimitteln nicht unbeachtet bleiben sollte. Dennoch bleiben laut aktuellen Studien rund 80 Prozent der medizinischen Daten nach ihrer Erhebung ungenutzt.

Die Erforschung und Entwicklung von Medikamenten stellen ein Problem dar, das sich mittels intelligenter Automatisierung lösen lässt. Aus der Vielzahl an möglichen Kombinationen von Wirkstoffmolekülen, kriert sich ein spannendes Optimierungsproblem für KI-Anwendungen mit dem Ziel mögliche Leitverbindungen zu erkennen und die Validierung des Wirkstoffziels sowie der Gestaltung der Wirkstoffstruktur vorzunehmen. Auf diese Weise war es auch möglich innerhalb eines kurzen Zeitraums potenzielle Covid-19 Behandlungen zu identifizieren. Hierbei wurde beispielsweise ein Medikament, das regulär zur Behandlung von rheumatischer Arthritis verwendet wird, zur Bekämpfung der Entzündungsreaktionen des Virus identifiziert. Erstmals wurde dabei KI hinzugezogen, um basierend auf einem bereits existierenden Medikament, ein neues Problem zu lösen.

Den Nutzen der intelligenten Automatisierung haben mittlerweile einige Unternehmen erkannt und sich zum Vorteil gemacht. Ein Beispiel dafür ist Pfizer, denen es 2020 noch nicht möglich war, ihre Bibliothek, die Daten zu rund 4,5 Milliarden kommerziell verfügbaren Wirkstoffen enthält,



Your Connection
to MedTech & Pharma
Expertise

automatisch zu durchsuchen. Zum heutigen Zeitpunkt ist das Unternehmen in der Lage ihre gesamte Datenbank in einem Zeitraum von 48 Stunden zu durchsuchen und somit die Identifizierung möglicher neuer Medikamente maßgeblich zu beschleunigen.

Ergebnisse zeigen, dass über 40 Prozent der Start-ups in der Arzneimittelforschung mit KI-Anwendungen arbeiten, um chemische Repositorien nach möglichen Arzneimittelkandidaten zu durchsuchen. Weitere 28 Prozent verwenden KI zur Identifizierung neuer Zielmoleküle und 17 Prozent zur Abbildung eines computergestützten Moleküldesigns. Man geht davon aus, dass innerhalb der nächsten 10 Jahre alle großen Pharmaunternehmen KI als festen Bestandteil der Arzneimittelforschung integriert haben werden.

Dennoch ist wichtig, dass eine rationale Erwartungshaltung eingenommen wird und nicht der Irrglaube verbreitet wird, dass KI die menschliche Expertise ersetzen könnte. KI soll in Zukunft dazu dienen Fachexperten zu unterstützen, dennoch muss es kontrolliert werden. Fachexperten werden auch in Zukunft Ansprechpartner bei der Definition von Daten für die KI-Analyse und bei der End-to-End Verifizierung der Ergebnisse sein.

Resultierend lässt sich sagen, dass Automatisierung in der Arzneimittelforschung und im gesamten Arzneimittelentwicklungsprozess eine wichtige Rolle in Zukunft einnehmen wird. Mit der richtigen Balance zwischen Menschen und Maschinen sowie zuverlässiger Kontrollen, um die jeweilige Aufgabenstellung strikt einzuhalten, wird KI bei der Erforschung neuer Medikamente eine entscheidende Rolle spielen.

Sie wollen mehr über Kooperationen zwischen Pharma- und IT-Unternehmen erfahren? Wir haben für Sie recherchiert und eine Reihe spannender Zusammenschlüsse gefunden. Überzeugen Sie sich selbst:



IT-UNTERNEHMEN	PHARMAUNTERNEHMEN	FACHBEREICH
IBM Corp.	Pfizer Inc.	Wirkstoffforschung
Microsoft Corp.	Novartis AG	Wirkstoffforschung
Nvidia Corp.	AstraZeneca Plc.	Wirkstoffforschung
Exscientia Ltd.	Sanofi-Aventis	Wirkstoffforschung
Owkin Inc.	Roche Holding AG	Wirkstoffforschung
Exscientia Ltd.	Bayer AG	Wirkstoffforschung
Google Quantum AI	Boehringer Ingelheim International GmbH	Wirkstoffforschung

© arcoro GmbH • www.arcoro.de



Your Connection
to MedTech & Pharma
Expertise