FOKUS

ANG

KÜNSTLICHE INTELLIGENZ

02 EDITORIAL
03 AUDIOPFADE DER ANG
04 SCHULPROJEKTE
05 WIR SUCHEN DICH
06 ANG VORSTAND
08 ERDGESCHICHTE UND LANDSCHAFTEN IM KANTON AARGAU
09 SOMMEREVENT
10 AUSBLICK PODCAST
12 DIE CERN-EXKURSION: DEN KLEINSTEN TEILCHEN SO NAH
14 SCIENCE CORNER
15 IBM EXKURSION
18 PortrAlts
22 EVOLUTIONÄRE OPTIMIERUNG UND GENETISCHE ALGORITHMEN
26 AI = ARATIONAL INTELLIGENCE?
30 WIE VERLÄSSLICH IST KÜNSTLICHE INTELLIGENZ?
34 DAS MIRACLE PROJEKT
42 DER COMPUTER LERNT DIE SPRACHE DER CHEMIKER
47 IMPRESSUM

EDITORIAL

Bestimmt haben Sie es bemerkt: Nach insgesamt elf Ausgaben in A5-Grösse erscheint der Fokus neu im Magazin-Format. Aber das ist noch lange nicht alles! Neben einem neuen Format und modernem Layout, dürfen Sie sich auch auf einige inhaltliche Änderungen freuen. Wir haben uns entschieden, den Fokus thematisch stärker zu fokussieren und uns jeweils pro Ausgabe ganz einem Thema zu widmen und dieses von verschiedenen Seiten von Experten auf dem Gebiet beleuchten zu lassen. Zudem werden wir in der im Herbst startenden Vortragsreihe auch Vorträge zu diesem Thema organisieren. Wie Sie der Titelseite unschwer entnehmen können, ist das Thema des ersten Fokus im neuen Kleid «künstliche Intelligenz». AI (artificial intelligence) ist heutzutage in aller Munde und beginnt sich langsam aber sicher in unseren Alltag einzuschleichen. Was aber ist genau unter Intelligenz zu verstehen und in welchen Applikationen ist diese «künstliche Intelligenz» zum Beispiel schon heute zu finden? Auf diese und weitere Fragen finden Sie Antworten in dieser Ausgabe.

Natürlich wird der Fokus aber auch weiterhin die Funktion der ANG-Mitgliederinformation behalten und über die wichtigsten Aktivitäten und Neuerungen wie z.B. die Einführung des ANG-Podcasts «andersch kompliziert?!» informieren. Wir wünschen Ihnen viel Vergnügen beim Lesen des Fokus im frischen Look und freuen uns Sie hoffentlich bald an einem der nächsten Events begrüssen zu dürfen.

Adrian Zwyssig / Sophia Pantasis
ANG Co-Präsidium

AUDIOPFADE DER ANG

Draussen wird es immer wärmer und die Pflanzen haben wieder das satte Grün der Vorjahre erreicht. Warum nicht einmal nach draussen gehen und dabei sogar noch etwas Spannendes über den Lebensraum der Auen lernen? Der Auen Audiopfad im oberen Aarauer Schachen bietet einen Rundgang mit zehn Posten mit Audio-QR-Codes. Es ist geplant den Auen-Audiopfad dieses Jahr etwas zu erneuern und weitere spannende Elemente einzubauen. Natürlich werden Sie zur gegebenen Zeit darüber informiert!

Nicht nur in der Natur, sondern auch im städtischen Gebiet ist die ANG mit einem Audiopfad vertreten. Der Aarauer Stadtbach Audiopfad beleuchtet mit seinen 34 Posten die Geschichte und viele spannende Aspekte des Stadtbachs. Machen Sie sich ein Bild und besuchen Sie unsere Webseite für einen ersten Eindruck. Natürlich ersetzen Bilder nicht das wahre Erlebnis draussen!

www.ang.ch > audiopfade (oder izi.travel App benutzen)

Infos Audiopfade

Adrian Zwyssig ©

Adrian Zwyssig ©

SCHULPROJEKTE

Der Auftrag das Interesse an Naturwissenschaften zu fördern, ist fest in unseren Statuten verankert. Allerdings ist dies für uns auch eine Herzensangelegenheit. Wir engagieren uns schon seit mehreren Jahren mit unseren *ANG Schulprojekten* in Primarschulen. Wir sind der festen Überzeugung, dass ein früher Kontakt mit den Prinzipien des Forschens und naturwissenschaftlichen Phänomenen einen positiven Einfluss haben kann auf das Bild der Naturwissenschaften. Eine wichtige Vorraussetzung ist aber, dass die Experimente auch fachmännisch durchgeführt und gut betreut sind. Es ist wichtig, dass die Schüler und Schülerinnen sich auch wirklich Gedanken machen über die Experimente, um der «Hands on – minds off»-Tendenz entgegen zu wirken.

In der ANG übernimmt ein achtköpfiges Kernteam unter der Leitung von Dr. Fritz Wenzinger diese Aufgabe. Im letzten Jahr konnten auf diese Weise über 300 Primarschüler von solchen Erfahrungen mit experimentellem Forschen profitieren. Auch dieses Jahr sind die Terminkalender des ANG Schulteams prall gefüllt. Im Sinne einer Weiterentwicklung läuft im Moment eine Abstimmung mit dem bald in Kraft tretenden Lehrplan 21. Da unsere Experimente den Aufbau von Grundlagenwissen und auch allgemeine Fähigkeiten, welche beim experimentellen Forschen notwendig sind, fördern, sind wir im Grundgedanken dem Lehrplan 21 mit seiner Kompetenzorientierung aber schon sehr nahe.

WIR SUCHEN DICH!

Wir suchen neue Vorstandsmitglieder.

Voraussetzungen: Interesse eigene Ideen einzubringen
und umzusetzten. Jeder kann mitmachen!

Bitte kontaktieren Sie uns unter: praes@ang.ch

ANG VORSTAND

SOPHIA PANTASIS // CO-PRÄSIDIUM

ADRIAN ZWYSSIG // CO-PRÄSIDIUM

FRITZ WENZINGER // SCHULPROJEKTE

URSULA FISCHER // FINANZEN

ALOIS ZWYSSIG // AKTUAR

PHILIPPE JUON // WEBSITE SCIENCE CORNER

CYRILL BRUNNER // EXKURSIONEN & VORTRÄGE

ANDRIN WACKER // MARKETING/SPONSORING

RUDOLF FÜCHSLIN // BEISITZ

WALTER FASLER // BEISITZ

Unser Vorstand engagiert sich aktiv in der Wissensverbreitung von Naturwissenschaften. All unsere Projekte werden durch aussergewöhnliches Engagement der Vorstandsmitglieder gestaltet und getragen. Unsere Zusammensetzung hat sich in den letzten Jahren stark verändert. Ein Teil des Vorstands ist in der aktuellen Forschung tätig (Doktoranden in Biologie, Pharmazie, Chemie-Lehrforschung) sowie ein Professor for Applied Complex Systems Science, aber auch aus anderen beruflichen Bereichen kommende Vorstandsmitglieder übernehmen aktive Funktionen (Sales Manager, Kaufmännische Angestellte, Lehrer, Schulleiter, Wirtschaftsprüfer sowie Sales Area Manager). Dieses breite Spektrum an Persönlichkeiten durchmischt unsere Aktivitäten stark und lässt eine spannende Entwicklung der Projekte zu. Wir schätzen ein dynamisches Umfeld und sind auch immer auf der Suche nach neuen, kreativen und motivierten Vorstandsmitgliedern aus allen Bereichen!

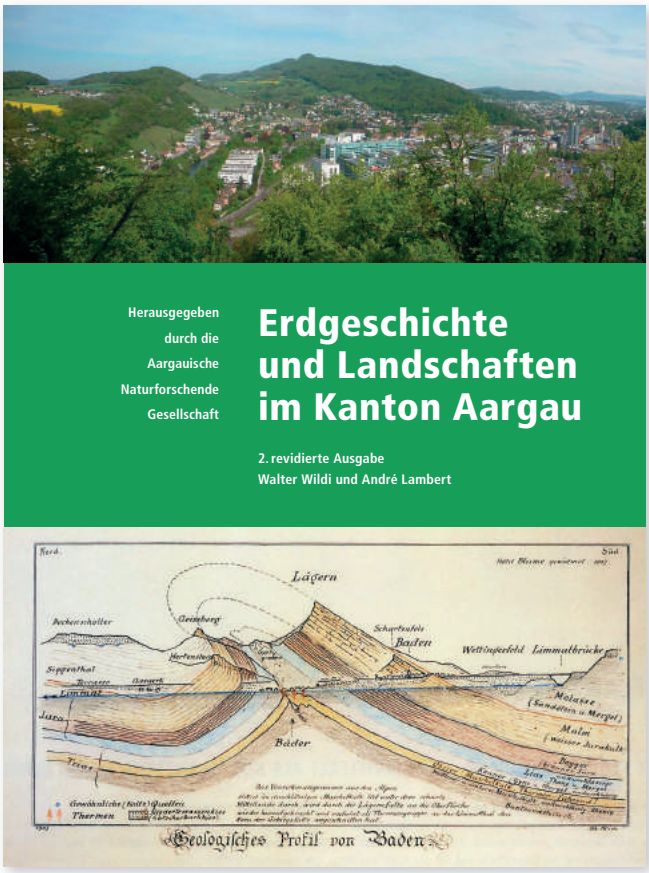
ERDGESCHICHTE UND LANDSCHAFTEN IM KANTON AARGAU

Das seit 1994 vergriffene Buch von 1983 erscheint im August 2019 als Neuauflage: Die beiden Geologen Walter Wildi und André Lambert haben das Buch überarbeitet und auf den neusten Stand des Wissens gebracht. So werden unter anderem die Gletschergeschichte neu und der in den 80er Jahren entdeckte Permo-Karbon-Trog beschrieben. Die vielen Abbildungen wurden neu konzipiert und sind nun farbig. Es kommen neue Aufschlüsse vor und die Literatur wurde nach über 35 Jahren aktualisiert. Das Buch kann ab Ende August im Buchhandel für Fr. 25.– + MWSt (ANG-Mitglieder für Fr. 20.– + MWSt) erworben werden.

BUCHVERNISSAGE

AM ANG-SOMMEREVENT
24. AUGUST 2019
18 UHR, NATURAMA AARAU

Anmeldung bis 20. August an: info@ang.ch



ANG SOMMER-EVENT

24. AUGUST 2019

AB 18 UHR / NATURAMA AARAU

Anmeldung bis 20. August an info@ang.ch

WIE DAS SCHWARZE LOCH UND SEIN BILD ZUSTANDE KAMEN

Vortrag von Dr. Fritz Gassmann, Physiker (ehem. PSI)

Die Überlegungen von Einstein, die zur Voraussage von schwarzen Löchern führten, sind einfach zu verstehen. Interferenzringe bei einer Lochkamera zeigen, wo die Grenzen der Auflösung liegen und was man tun kann, um sehr weit entfernte Objekte zu sehen. 1931 wurden zufällig Radiosignale entdeckt, die ihren Ursprung ausserhalb des Sonnensystems hatten und aus der Richtung des Milchstrassenzentrums kamen. In der Folge wurden immer grössere Radioteleskope gebaut und zu immer kleineren Wellenlängen vorgestossen, um weiter entfernte Objekte wahrnehmen und besser auflösen zu können. Um die leuchtende Umgebung des schwarzen Loches M87* abzubilden, musste ein virtuelles Radioteleskop entwickelt werden, dessen Durchmesser so gross wie derjenige der Erde ist. Der Referent erklärt die damit zusammenhängenden Herausforderungen und wagt einen Blick in die Zukunft der Astronomie.

Fritz Gassmann, Limmatstrasse 6, 5412 Vogelsang, gassmann@bluewin.ch

PROGRAMM

AB 18 UHR	EINTREFFEN IM NATURAMA
18.30-19 UHR	BUCHVERNISSAGE: ERDGESCHICHTE UND LANDSCHAFTEN IM KANTON AARGAU
19 UHR-20.30 UHR	GRILLIEREN TERASSE NATURAMA
20.30 UHR	VORTRAG: WIE DAS SCHWARZE LOCH UND SEIN BILD ZUSTANDE KAMEN
21 UHR	DESSERTBUFFET UND KAFFEE

AUSBLICK PODCAST
«andersch kompliziert!?»

Nach dem Motto «kompliziert isch andersch», haben wir uns von der ANG vorgenommen einen Podcast auf die Beine zu stellen, welcher einfach mal «andersch kompliziert» ist. Es erwarten sie spannende Gespräche mit nationalen Persönlichkeiten, die unter anderem eine Verbindung zu den mathematisch-naturwissenschaftlichen Fächern, der Medizin oder der Psychologie haben. Und wie unser Titel schon verrät - «andersch kompliziert!?» - wollen wir es etwas «andersch» machen, die Dinge verständlich erklären und die Ausrede, «das ist zu kompliziert», nicht gelten lassen. Freuen sie sich auf die ersten Podcasts, welche sie im Laufe des Sommers auf unserer homepage www.ang.ch finden werden.

Einen kleinen Ausschnitt aus dem Gespräch mit Prof. Dr. Elsbeth Stern haben wir transkribiert und für sie schon mal als Vorgeschmack hier abgedruckt. In unserem 1-stündigen Gespräch mit Frau Prof. Stern haben wir darüber gesprochen, was die Forschung unter Intelligenz versteht, was der IQ ist und wie dieser gemessen wird, was der Flynn Effekt ist und noch vieles mehr!

Podcast #2 Was ist Intelligenz?

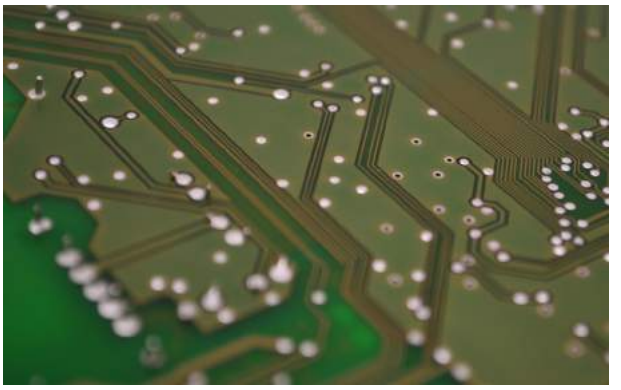
mit Prof. Dr. Elsbeth Stern / Professur für Lehr- und Lernforschung, ETH Zürich

ANG: Frau Professor Stern, können sie uns erklären was genau Intelligenz ist?

Prof. Elsbeth Stern: Intelligenz ist eine Fähigkeit, die nach allem was wir wissen nur Menschen mitbringen. Im Mittelpunkt steht schlussfolgerndes Denken. Dass wir also aus bestehendem Wissen, neues Wissen ableiten können. In dem wir abstrahieren, in dem wir generalisieren, in dem wir eben die Regeln des schlussfolgernden Denkens anwenden. Also induktives Denken und deduktives Denken. Dies ist etwas, das nur Menschen können. Man muss ihnen nicht alles sagen, sie können aus dem, was sie wissen Neues ableiten. Und das können sie unterschiedlich gut.

ANG: Dann braucht es also Intelligenz um Wissen anzusammeln? Oder wie hängt dies genau zusammen?

Prof. Elsbeth Stern: Man braucht natürlich Intelligenz um Wissen erst einmal zu sortieren. Und zwar so zu sortieren, dass man auch etwas Neues daraus ableiten kann. Wenn ich zum Beispiel einen guten Begriff von Säugetier habe und ich erfahre jetzt plötzlich etwas über einen Wombat, also das australische Säugetier. Ich weiss nicht, wie das Wombat aussieht, ob es Fell hat oder nicht. Aber ich weiss, dass es keine Eier legt und auch andere Eigenschaften von Säugetieren hat. Das ist dann eben Intelligenz! Wenn ich einen Überbegriff nutzen kann, um neue Informationen einzuordnen. Und dies ist schlussfolgerndes Denken.



ANG: Man muss also in Kategorien denken können?

Prof. Elsbeth Stern: Ja, ich brauche Konzepte und Kategorien. Das Wissen über allgemeine Kategorien kann ich nutzen, um über einen neuen Vertreter dieser Kategorie (wie im Beispiel der Säugetiere), den ich bisher noch nicht kannte, Neues in Erfahrung zu bringen. Und dies ohne, dass ich diesen Vertreter jemals gesehen hätte. Dank diesem schlussfolgernden Denken bin ich zum Beispiel nicht in jedem Moment auf die Wahrnehmung angewiesen. Das können im Prinzip alle Menschen. Wenn es aber sehr abstrakt und komplex wird unterscheiden sie sich eben.

ANG: In ihrem Buch «Intelligenz - Grosse Unterschiede und ihre Folgen» habe ich gelesen, dass man oft von Arbeitsgedächtnis spricht. Könnte man sagen, dass die Intelligenz unserem Arbeitsgedächtnis und in Analogie dem Arbeitsspeicher eines Computers (RAM) entspricht?

Prof. Elsbeth Stern: Ich habe ein Problem damit, wenn man die Computer Analogie übertreibt. Vor allem bei der Festplatte! Bei den RAM (Arbeitsspeicher) würde es ja vielleicht noch gehen. Aber die Festplatte ist nicht wie unser Langzeitgedächtnis. In der Festplatte bleibt alles so abgespeichert, wie ich es abgelegt habe. In unserem Langzeitgedächtnis ändern sich die Dinge jedoch ständig. Wenn neue Informationen eingehen, wenn ich zum Beispiel etwas Neues über Säugetiere höre, dann kann sich mein ganzes Wissen über Säugetiere ändern. Wichtig ist ebenfalls, dass beim menschlichen Langzeitgedächtnis jede eingehende Information auch etwas an den Informationen ändert, welche sozusagen um diese herum gespeichert sind. Das ist der Unterschied. Deshalb sollte man die Computer Analogie nicht übertreiben.

ANG: Das wäre dann meine nächste Frage gewesen: wie weit kann man die Computer Analogie treiben...?

Prof. Elsbeth Stern: Das Arbeitsgedächtnis mit dem Arbeitsspeicher RAM zu vergleichen ist eine mögliche Analogie, aber auch nicht alles. Ich würde sagen, dass das Arbeitsgedächtnis Intelligenz ermöglicht. Es ermöglicht vor allen Dingen Ziele, auch mehrere Ziele gleichzeitig, zu behandeln. Es ermöglicht uns auch Bedürfnisse zurückzustellen. Dies unterscheidet uns von Tieren. Wenn sie einem Tier Fressen hinlegen, dann kennt es kein Halten mehr. Währenddessen können wir uns überlegen: «Ist es strategisch klug, das jetzt zu machen? Sollte ich einer kurzfristigen Belohnung nachgeben oder eher auf etwas Langfristiges warten?» Dies wird alles in unserem Frontalhirn gesteuert. Wir haben den Begriff Arbeitsgedächtnis dafür entwickelt, da hier eingehende Informationen und bestehendes Wissen zusammenkommen.

... MEHR GIBT ES BALD ALS PODCAST ZU HÖREN!

DIE CERN-EXKURSION: DEN KLEINSTEN TEILCHEN SO NAH

Am 13. Oktober machte sich eine Gruppe von 40 ANG-Mitgliedern auf die seit langem grösste Exkursion der ANG auf in Richtung Genf ins weltweit grösste Laboratorium für Teilchenphysik, dem CERN. Gegründet 1954 war das Conseil européen pour la recherche nucléaire die europäische Antwort auf den rasanten Fortschritt der Amerikaner und Russen im Bereich der Nuklearphysik. Die 12 Mitgliedstaaten, darunter die Schweiz, platzierten das Laboratorium aufgrund der Schweizerischen Neutralität in Meyrin bei Genf, woraus sich im Laufe der Zeit eine der wichtigsten Forschungsanstalten für Teilchenphysik entwickelte. Heute zählt das CERN 22 Mitgliedstaaten sowie Dutzende von assoziierten bzw. kollaborierenden Nationen wie den Forschungsschwergewichten USA und Japan.

Das CERN ist seit seiner Gründung für seine Pionierleistungen in der Physik, wie auch in der Ingenieurskunst weltweit bekannt. Um neue Einblicke in die Welt der kleinsten Teilchen zu gewinnen, bedarf es hoher Energien, welche im CERN mittels Teilchenbeschleuniger erreicht werden. Dabei werden am CERN in erster Linie zyklische Beschleuniger (genannt Zyklotron) verwendet, sprich Systeme, in welche Teilchen wie Protonen reingegeben werden und dann auf eine kreisförmige Bahn geschickt werden, wobei man sie konstant mithilfe von Magneten beschleunigt und ihnen damit eine wunschgemäss hohe kinetische Energie gibt. Der erste Zyklotron (Synchro-Zyklotron) wurde bereits 1957 in Betrieb genommen und blieb bis 1990 in Verwendung. Der zweite Zyklotron (Protonen-Synchroton) wurde 1959 fertiggestellt und wird seither immer noch als Vorbeschleuniger für die beiden grossen Beschleuniger verwendet. Nachdem man realisierte, dass immer grössere Energien notwendig sind, um tiefer in die Materie hineinblicken zu können, genehmigte man dem CERN den Ausbau über die Grenze hinweg. Die Folge war der sieben Kilometer lange Super-Protonen-Synchroton (SPS) 1976 und der spätere Umbau zum Protonen-Antiprotonen-Collider, welcher es erlaubte, die seit längerer Zeit theoretisch postulierten W- und Z-Bosonen als Bestandteil der elektroschwachen Energie nachzuweisen. Die elektroschwache Energie ist dabei eine der vier zentralen Energien in dem Standardmodell genannten aktuellen Modell der Teilchenphysik, um den Aufbau unseres Universums vom Urknall bis heute zu beschreiben und erklären. Nebst der elektroschwachen Kraft beinhaltet das aktuelle Standardmodell noch die alltagsbekannte elektromagnetische Kraft und Gravitation sowie die starke Kraft, welche u.a. für die Zusammensetzung der Atomkernbestandteile wie Protonen und Neutronen verantwortlich ist.

Eine Stufe weiter ging dann der Large Electron-Positron Collider (LEP) 1989, welcher mit 27 Kilometer Umfang der grösste Beschleuniger seiner Zeit war. Mithilfe der hohen Energien konnte die exakte Masse der W- und Z-Bosonen berechnet und das langjährige Rätsel um die Anzahl leichter Neutrinos geklärt werden. Die Genialität des LEP lag jedoch nicht so sehr in den Entdeckungen durch ihn, sondern in der Möglichkeit zur Umnutzung in einen Beschleuniger, welcher höhere Energien erreichen konnte: Der heutige Large Hadron Collider (LHC). Bereits in der Planung des LEPs wurde die Umnutzung eingeplant, sodass ab 2000 der Umbau relativ elegant bewerkstelligt werden konnte. Während im LEP noch die deutlich leichteren Elektronen und Positronen verwendet wurden, wollte man mit dem LHC Protonen auf die Reise schicken, was eine Erhöhung der Energie um einen Faktor 70 bedeutete und entsprechende Ansprüche an Kühlung von Magneten, Detektoren und Materialien stellte. So muss beispielsweise ein einzelner Magnet, welcher zum Beschleunigen eines Protons verwendet wird, auf eine Temperatur von -271.3 °C gekühlt werden; das ist notabene noch knapp 2 °C vom absoluten Nullpunkt entfernt, wo sich keine Teilchen mehr bewegen. Derart tiefe Temperaturen sind notwendig, damit die Elektromagnete mit möglichst wenig elektrischem Widerstand betrieben werden können und damit maximale Effizienz erreichen.

2008 wurde der LHC fertiggestellt, 2009 wurde er schliesslich das erste Mal in einem Experiment getestet. Der Beschleuniger ist jedoch nur ein Teil, genauso bedeutend sind die Detektoren, in welchen die Kollisionen von hochenergetischen Protonen überhaupt erfolgen und beobachtet werden. Der LHC hat aktuell vier grosse Detektorenkammern, welche wie der Beschleunigerring selber rund 100 Meter unter dem Erdboden liegen und in gewaltigen Kavernen von mehreren Dutzend Metern Umfang untergebracht sind. Die beiden bisher wichtigsten Detektoren sind der ATLAS und CMS, beide widmen sich der Suche nach dem sogenannten Higgs-Boson, einer Theorie namens Supersymmetrie und noch kleineren Teilchen als Leptonen und Quarks, den Bestandteilen von Elektronen und Protonen. Der grösste Durchbruch wurde mittlerweile bzgl. des Higgs-Boson erreicht, welches 2012 entdeckt wurde. 1964 postulierten François Englert und Peter Higgs die Existenz eines Teilchens, welches überhaupt erst die Masse der Elementarteilchen erzeugt und nannten es Higgs-Boson. Dieses letzte Teilchen konnte bis dato nicht experimentell nachgewiesen werden, ist aber eines der zentralen Elemente des Standardmodells.

Im Verlaufe unserer Exkursion zum CERN bekamen wir eine Führung zum CMS-Detektor, welcher mit seinen 14‘000 Tonnen der schwerste Detektor am CERN ist. Da zum Zeitpunkt unseres Besuches gerade das elektromagnetische Feld des Beschleunigers heruntergefahren wurde, war der Zugang zum CMS-Detektor direkt nicht möglich, doch die umfangreichen Erklärungen unserer Guides verdeutlichten die Dimensionen und Aufbau des Detektorsystems sehr gut. Er besteht aus drei Detektorschichten: dem innersten Siliziumdetektor (gelber Kreis), den beiden mittleren Kalorimetern aus über 80‘000 Blei-Wolframoxid-Kristallen als Photodioden (elektromagnetischer Kalorimeter, blauer Kreis) und Messing/Silizium (hadronischer Kalorimeter, silberner Kreis) und dem äusseren, markanten Myonendetektor (rot-silberner Kreis). Die Myonenkammer ist dabei eines der wichtigsten Teile des Detektors, welcher wiederum aus Dutzenden kleinen, mit Gas gefüllten (85% Argon, 15% CO_2) Driftkammern besteht, in denen eine hohe Spannung angelegt wird, um die Bewegung von Myonen (ein dem Elektron verwandtes Teilchen mit deutlich höherer Masse) zu messen.

Von besonderem Interesse am CERN ist die Datenaufnahme und -verarbeitung. Der CMS-Detektor ist mit einer 70 Megapixel-Kamera zu vergleichen, welche pro Sekunde rund 40 Millionen Aufnahmen macht. Die resultierende Datenmenge wäre unfassbar gross (ca. 4 – 6 Petabyte; die Grösse einer handelsüblichen Festplatte liegt bei 1 Terabyte, also ein Faktor 5000 tiefer), sodass spezielle Systeme programmiert und eingebaut wurden, welche nur einen Bruchteil der Bilder tatsächlich speichern. Da schlussendlich auch nur ein Bruchteil der Kollisionen in einem Detektor auch tatsächlich interessante Aufnahmen liefern, kann man relativ elegant Mechanismen einbringen, welche nach diesen relevanten Mustern suchen und die anderen Aufnahmen verwerfen. Dennoch generieren die Experimente am LHC geschätzt rund 30 Petabyte pro Jahr. Eine so hohe Datenmenge bedarf auch einer entsprechenden hohen Rechenkapazität, welche das CERN in Analogie zu dem in den 90er Jahren von ihnen entworfenen World Wide Web, mithilfe des Ansatz des verteilten Rechnens bereitstellt. Einerseits arbeitet man mit rund 170 auf der Welt verteilten Cluster-Computern, andererseits nutzt man ungebrauchte Kapazität auf normalen Heimrechnern von den Tausenden beteiligten Forschern.

Am Abend machte sich die muntere, von den vielen Eindrücken begeisterte Gruppe wieder auf den Heimweg nach Aarau… selbstverständlich aber mit einem richtigen Gruppenfoto vor dem beeindruckenden Besucherzentrum. Auch hier sieht man wieder: Wir sind nur ein kleiner Punkt im Vergleich zu der grossen Welt der Physik!

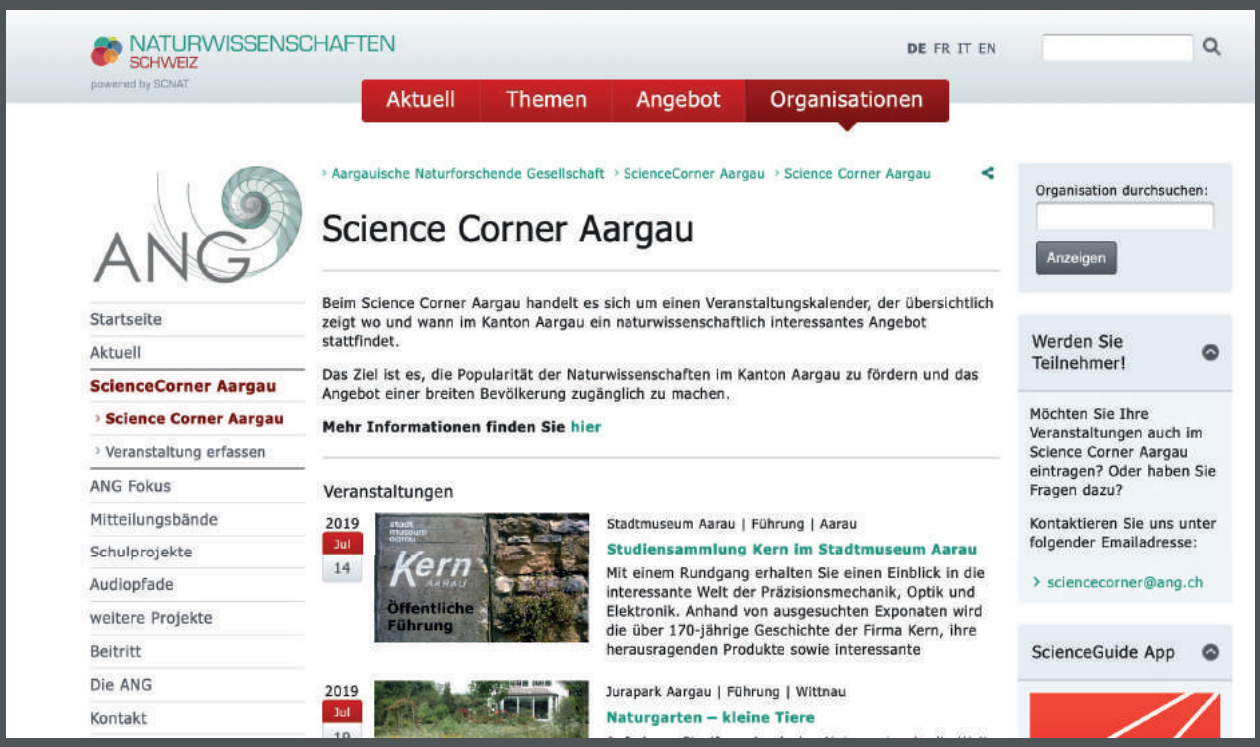
Autor: Cyrill Brunner

SCIENCE CORNER

Beim Science Corner Aargau handelt es sich um einen naturwissenschaftlichen Veranstaltungskalender, der übersichtlich zeigt, wo und wann im Kanton Aargau eine naturwissenschaftlich interessante Veranstaltung stattfindet.

Für weitere Informationen besuchen Sie unsere Homepage www.ang.ch

Benutzen Sie auch die App «ScienceGuide» für Android und iOS, um über naturwissenschaftliche Freizeitangebote auf dem Laufenden zu bleiben (www.scienceguide.ch).



EXKURSION

IBM Research Center in Rüschlikon
Freitagnachmittag, 20.9.2019

Künstliche Intelligenz, Quantencomputer, hochaktuelle Forschung in der IT? Interessiert? Dann schnell anmelden, die Teilnehmerzahl ist begrenzt!

Die ANG organisiert bei genügend Anmeldungen einen spannenden Besuch an einem Freitagnachmittag ans IBM Research Center in Rüschlikon. Geführt wird der Nachmittag durch einen absoluten Experten im Bereich künstliche Intelligenz und neuster IT Technologien. Bei Ihrem Besuch erhalten Sie eine Einführung in die Geschichte und Aktivitäten des Forschungslabors.

Anmeldeschluss:
23.07.2019

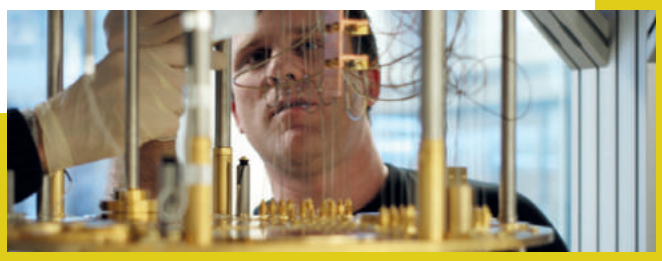
Anmeldungen an:
exkursion@ang.ch

Ansprechsperson:
Cyrill Brunner

Durchführung: Freitagnachmittag den 20.9.2019, voraussichtlich 13.30 bis 16.30 Uhr

Kosten: 60.00 CHF anstatt 120.00 CHF für ANG Mitglieder
Nichtmitglieder müssen 120.00 CHF bezahlen oder können ANG Mitglied werden, um vom Spezialpreis zu profitieren. Reise- und Verpflegungskosten sind selbst zu tragen.

Wir freuen uns auf Ihre Anmeldung zu dieser einmaligen Chance, Forschung in der IT auf höchstem Niveau hautnah zu erleben!



ARTIFICIAL

INTELLIGENCE

PortrAlts

Dr. Rolfs Frank / 38

Motto: [ô] <- Licht

Superkraft: Es gibt zu viele Krankheiten, deshalb Heilkräfte.

Kurz nach dem Frühstück. Es ist Sonntag. Wie gewohnt streife ich im Netz durch die fotografischen Meldungen, folge Blogs und Gerüchten, welche neue Kamera demnächst auf dem Markt erscheint.

Da ich meine Fähigkeiten in der Portraitfotografie verbessern möchte, fällt mir der Artikel mit den vielen Bildern von unterschiedlichen Menschen auf. Natürliche Bilder von Menschen ungleicher Hautfarben. Männer, Frauen und auch Kinder verschiedenen Alters lächeln in die Kamera. Ich will mich schon den nächsten Einträgen zuwenden, möchte ich doch gern in Schwarz-Weiß und auf Film portraitieren, doch ich bleibe an dem Artikel hängen. Keine der abgebildeten Personen existiert, sagt die Schlagzeile. Alles falsch? Ich bin verwundert, denn die Fotos sind auf den ersten, schnellen Blick gar nicht so schlecht. Nun, sie sind nicht gerade so meisterlich wie die Werke von Philippe Halsmann, Richard Avedon oder anderer Vorbilder wie Steve McCurry und Annie Leibovitz, dennoch sind es Bilder, die mancher wohl nicht gleich wieder löschen würde.

Alle Portraits sind von einer künstlichen Intelligenz (KI, englisch AI) erschaffen *(Abb.1)* und stammen aus der Arbeit von Wissenschaftlern des Unternehmens NVIDIA, welches Grafikprozessoren für Heimcomputer und Spielekonsolen entwickelt. Der Bildgenerator nutzt dabei künstliche neuronale Netzwerke und Algorithmen zu unüberwachtem Lernen aus früheren Arbeiten und kombiniert diese mit anderen Methoden, mit denen effizient und interaktiv Eigenschaften eines Fotos auf ein anderes übertragen werden können. Dabei musste die KI eine Woche lang trainiert werden, erstellt dann allerdings sehr wirklichkeitsnahe «PortrAIts» (1-2, ein Video der Autoren dazu kann man hier ansehen: 3, eine weiterführende Beschreibung der Technik kann hier nachgelesen werden: 4).

Eine rasante Entwicklungsgeschwindigkeit. Vielleicht sollte ich mein Hobby aufgeben denke ich. Jetzt kommen zu all den guten Fotografen mit denen ich mich gedanklich vergleiche und eigentlich immer verliere auch noch die Computer.

Ich schaue mir die «PortrAIts» in der Publikation der Wissenschaftler genauer an, konzentriere mich auf die kleineren Bilder und zoome hinein. Ich finde zwei Punkte die wie ausradiert oder verwaschen erscheinen. Manchmal hat das Haar keine Struktur oder ist unstimmig, weichgezeichnet. Die nur im Anschnitt zu sehende Person neben dem Kind mit den dunkelblonden Haaren wirkt deformiert. Alle Bilder sind technisch bedingt digital und kein einziges Bild ist Schwarz-Weiß. Dennoch sind einige Bilder erstaunlich überzeugend. Die Algorithmen des Bildgenerators stehen zur freien Verfügung (5) und können mit entsprechendem Vorwissen verwendet werden. So wurde vor kurzem zu Demonstrationszwecken und zur Steigerung des öffentlichen Bewusstseins bezüglich der neuen Technologie die Webseite https://thispersondoesnotexist.com erstellt, die bei jedem neuen laden ein neues «PortAIt» generiert. Angeregt durch die Kommentare unter dem Artikel denke ich nun auch über die potentiellen Gefahren nach. Gefälschte Profile in sozialen Medien, Falschinformationen, Propaganda und die Möglichkeit der Übertragung der Technologie auf Videos und vielleicht sogar Gespräche über Skype. Tatsächlich werden bereits Vorstufen des neuen Algorithmus verwendet, um Gesichter von Personen des öffentlichen Lebens auf pornografisches Material zu übertragen. Ich denke an Wahlkampf, Erpressung und die Funktion zum Gesichtertausch bei Snapchat. Lustige Katzenohren auf Köpfen von Menschen sind einfach als Fälschung zu erkennen. Mit der Identifizierung von manipuliertem

oder gefälschtem Fotomaterial tun wir uns jedoch sehr schwer. Dies wurde 2017 zum Beispiel mittels Onlinetest und Studie von britischen Wissenschaftlern belegt (6). Den Fragebogen der Studie kann man zur Selbstüberprüfung immer noch abrufen (7). Ich frage mich, ob uns künstliche Intelligenz eigentlich auch bei der Erkennung von Bildmanipulationen helfen kann. Interessanterweise ist dies genau eine Ansatzmöglichkeit und sogar in Entwicklung bei Adobe, der Firma die Bildmanipulation und -verbesserung mittels Photoshop anbietet (8). Das passt irgendwie denke ich, denn vor einigen Monaten habe ich gelesen, wie künstliche Intelligenz bzw. maschinelles Lernen die Leistung einiger meiner Photoshopwerkzeuge verbessert.

Ich denke dabei irgendwie an Computerviren und Antivirenprogramme und beende meine Lektüre für diesen Sonntagmorgen, begebe mich in mein Badezimmer und entwickle den Film mit meinen neuesten Portraitversuchen. Ich betrachte die Ergebnisse und glaube, dass noch ein wenig Übung erforderlich ist. Außerdem befürchte ich, dass die «PortrAIts» womöglich schneller besser werden als meine Fähigkeiten.

Quellen:

1. https://arxiv.org/pdf/1812.04948.pdf
Karras T, Laine S, Aila T. A Style-Based Generator Architecture for Generative Adversarial Networks. arXiv. 2018.

2. https://arxiv.org/pdf/1406.2661.pdf
Goodfellow IJ, Pouget-Abadie J, Mirza M, Xu B, Warde-Farley D, Ozair S, et al. Generative Adversarial Networks. arXiv. 2014.

3. http://stylegan.xyz/video

4. https://www.lyrn.ai/2018/12/26/a-style-based-generator-architecture-for-generative-adversarial-networks/

5. https://github.com/NVIabs/stylegan

6. https://cognitiveresearchjournal.springeropen.com/track/pdf/10.1186/s41235-017-0067-2 Nightingale SJ, Wade KA, Watson DG. Can people identify original and manipulated photos of real-world scenes? Cogn Res Princ Implic. 2017; 2:30.

7. https://warwickpsych.qualtrics.com/jfe/form/SV_a34DwCbDSIcGgiF

8. http://openaccess.thecvf.com/content_cvpr_2018/papers/Zhou_Learning_Rich_Features_CVPR_2018_paper.pdf
Zhou P, Han X, Morariu VI, Davis LS. Learning Rich Features for Image Manipulation Detection. openaccessthecvfcom

Abbildung 1: Von einer künstlichen Intelligenz erstellte Bilder (aus 1).

EVOLUTIONÄRE OPTIMIERUNG UND GENETISCHE ALGORITHMEN

MSc. Weyland Mathias / 34

Motto: Willst du glücklich sein im Leben, trage bei zu andrer Glück, denn die Freude, die wir geben, kehrt ins eigne Herz zurück.

Superkraft: Biegen der Zeit

Vor genau 15 Jahren habe ich mich in meiner Maturaarbeit mit dem Thema «Evolutionäre Optimierung» befasst. Ich habe darin zusammen mit meinem Klassenkameraden Cédric Huwyler genetische Algorithmen verwendet, um eine knifflige mathematische Fragestellung zu beantworten.

Dies war mein erster Kontakt mit dem Feld der künstlichen Intelligenz. Damals hat die Aargauische Naturforschende Gesellschaft unsere Arbeit prämiert. Zweifellos hat diese Auszeichnung meinen Werdegang mitbestimmt; und so ist es kein Zufall, dass mich das Thema bis heute nicht losgelassen hat und sogar Gegenstand meiner Forschung geworden ist. Ich möchte deshalb die Gelegenheit nutzen, um in diesem Artikel eine kurze Einleitung in genetische Algorithmen vorzustellen.

Genetische Algorithmen sind Verfahren, die dazu verwendet werden, für eine formalisierte Fragestellung eine gute Lösung zu finden. Beispiele für solche Fragestellungen aus verschiedenen Gebieten könnten sein:

• «Welches Flügelprofil generiert einen hohen Auftrieb?» (Aerodynamik/Aviatik)
• «Welche Antennenform hat einen hinreichenden Antennengewinn?» (Elektromagnetismus/Hochfrequenztechnik), oder sogar
• «In welcher Reihenfolge muss ich die einzelnen Geschäfter besuchen, um möglichst rasch mit meinem Samstags-Einkauf fertig zu werden?» (Alltagsmathematik).
• Genetische Algorithmen sind besonders dann geeignet, wenn die Antwort auf die Fragestellung nicht ohne weiteres berechnet werden kann. Sie beruhen darauf, gewisse Lösungsmöglichkeiten auszuprobieren und, falls sich diese als gut herausstellen, diese Ansätze weiter zu verfeinern, um eine noch bessere Lösung zu finden. Die grundlegenden Konzepte wurden der Natur abgeschaut, wo die Eigenschaften eines Individuums in Genen codiert sind. Diese Eigenschaften tragen zur «Fitness» dieses Individuums bei. Hat ein Individuum eine hohe Fitness, so steigen die Chancen, sich fortzupflanzen und so Nachfahren zu erzeugen zu können (Selektion). Da diese Nachfahren genetisch ähnlich sind, werden sie vermutlich eine ähnlich hohe Fitness haben. Unter Einbezug von genetischen Mutationen können diese Nachfahren sogar noch fitter sein. Es ist aber ebenso möglich, dass eine genetische Mutation den gegenteiligen Effekt hat und die Fitness reduziert. Diese Individuen haben in Folge davon weniger Chancen, sich fortzupflanzen, und diese Gene hätten dann in der Population nicht Bestand. Höher entwickelte Arten haben sogar gelernt, ihre Gene mit geschlechtlicher Fortpflanzung zu vermischen (Rekombination) und auf diese Art eine noch höhere Fitness der Nachfahren zu erzielen.

Genetische Algorithmen nutzen dieses in der Natur beobachtete Phänomen, um die eingangs genannten Probleme zu lösen. Dabei werden die relevanten Eigenschaften (Flügelprofil, Antennenform, oder Reihenfolge der zu besuchenden Geschäfter) codiert. Vielfach handelt es sich einfach um eine Abfolge von Zahlen, beispielsweise einer Serie von Koordinaten, welche das Flügelprofil bestimmen. Für den Einkaufsbummel würde jedem Geschäft eine Zahl zugewiesen und die Reihenfolge der Geschäfte durch die Abfolge dieser Geschäfte-Nummern definiert werden. Ist die Codierung etabliert, wird in einer Computersimulation eine ganze Population von «Individuen» erstellt, üblicherweise Tausende, manchmal gar Millionen. Diese Individuen tragen eine völlig zufällige genetische Information. Sie stellen damit Flügelprofile dar, die in den allermeisten Fällen wohl völlig unmöglich zu bauen oder, wenn überhaupt, dann doch sehr ineffizient wären. Nichts desto trotz wird die Fitness eines jeden Individuums bestimmt. Was in der Natur den Grad der Anpassung an die Umwelt und damit den Fortpflanzungschancen bestimmt, entspricht in genetischen Algorithmen der Tauglichkeit der codierten Eigenschaften, die gestellte Aufgabe zu lösen. Für den Einkaufsbummel würde dazu die Zeit berechnet, um alle Einkäufe zu erledigen. Falls dabei der Weg kreuz und quer durch die ganze Stadt führt, resultiert daraus

eine geringere Fitness als wenn Geschäfte, welche nahe beisammen sind, nacheinander besucht werden. Erschwerend kommt hinzu, dass eine zufällige Zahlenfolge vorschreiben könnte, dasselbe Geschäft zweimal zu besuchen oder aber eines ganz auszulassen. Dieser Fehler muss mit einer geringen Fitness bestraft werden. Die Tauglichkeit des Flügelprofils würde mit einer physikalischen Simulation untersucht und quantifiziert werden.

Ist jedem Individuum der Population eine Fitness zugewiesen, erfolgt der Selektionsschritt. Dabei wird entschieden, welche Individuen die Chance erhalten, sich «fortzupflanzen», also Nachfahren mit ähnlichen Eigenschaften zu erzeugen. Dem Vorbild aus der Natur folgend werden also Individuen mit einer hohen Fitness ausgewählt und Nachfahren mit zunächst identischen Eigenschaften erzeugt. Der Einfachheit halber wird die Populationsgrösse dabei konstant gehalten. Hat beispielsweise das fitteste Drittel die Gelegenheit, sich fortzupflanzen, so soll jedes Individuum drei Nachfahren erzeugen. Es ist an dieser Stelle auch möglich, etwas raffinierter vorzugehen und die Anzahl Nachfahren proportional zur Fitness zu wählen. So oder so, nimmt die genetische Diversität der Population in diesem Schritt ab, denn all die zur Lösung der Fragestellung ungeeigneten Individuen, welche gleichwohl mit ihren Eigenschaften zur genetischen Diversität beitragen, haben keine Gelegenheit, ebendiese Eigenschaften an Nachfahren weiterzugeben. Auch hier ist es übrigens möglich, es der Natur gleichzutun und die codierten Eigenschaften zweier Individuen mit hoher Fitness im Sinne einer geschlechtlichen Vermehrung zu verbinden.

In einem nachfolgenden Mutationsschritt wird ein gewisses Mass an genetischer Diversität wieder in die Population eingeführt: Die codierten Eigenschaften aller Individuen werden leicht perturbiert. Damit werden genetische Mutationen simuliert, welche auch in der Natur zu zufälligen Änderungen der genetisch codierten Information führen. Diese neue Population von Individuen beschreibt nun Flügel, Antennen oder Einkaufs-Strategien, welche im Durchschnitt vermutlich etwas besser sind als ihre Vorfahren. Die Population hat also insgesamt an Fitness zugenommen (ein Sachverhalt, der nebenbei bemerkt in der Natur nur stimmen könnte, wenn sich die Umwelt nicht ebenfalls mit der Zeit verändern würde).

Durch fortlaufende Wiederholung des Selektions- und Mutationsschrittes evolviert mit der Zeit – nach hunderten oder tausenden von Generationen – eine Population, welche die in der Fragestellung formulierte Aufgabe gut lösen kann. Die Fitness in dieser Population ist höher als zu Beginn, wenngleich einzelne Individuen durch Mutation die Aufgabe nicht zufriedenstellend lösen. Das Verfahren gibt keine Garantie, dass die gefundenen Lösungen die bestmöglichen sind, aber manchmal reicht es auch wenn der Einkauf am Samstag ein gewisses Ausmass an Mühseligkeit nicht überschreitet …

Abschliessend bleibt die Frage offen, was diese genetischen Algorithmen mit künstlicher Intelligenz (dem Schwerpunkt dieser FOKUS-Ausgabe) zu tun haben. Dass diese Verfahren künstlich sind (im Sinne dass sie in einem Computer ablaufen), ist wohl unbestritten. Eine grundlegende Eigenschaft von intelligenten Systemen ist die Fähigkeit, Probleme zu lösen. Genetische Algorithmen werden verwendet, um Probleme zu lösen und erfüllen deshalb diese Eigenschaft. Eine weitere Eigenschaft intelligenter Systeme ist die Fähigkeit zu lernen. Auch dies wird von genetischen Algorithmen erfüllt, zumal die Population eben von Generation zu Generation lernt, eine gewisse Aufgabe zu lösen.

HELVETAS

GLOBAL Happiness

Was brauchen wir zum Glücklichsein?

DIE SONDERAUSSTELLUNG VON HELVETAS

17. MAI 2019 – 1. MÄRZ 2020

globalhappiness.ch

naturama

Museum+Natur

AI = ARATIONAL INTELLIGENCE?

Prof. Dr. Ruedi M. Füchslin / 52

Motto: Schaffe nur ausreichend Möglichkeiten, dann wird sich ein Weg zum Ziel finden.

Superkraft: Kojak is my hero.

Wenn moderne KI – Systeme Entscheidungen treffen, geschieht dies nicht ohne Vernunft (irrational), aber ohne dass die Grundlage dieser Entscheidung in sinnvolle Sprache gefasst und damit diskutierbar wird. Dies nenne ich arationales Entscheiden: die Resultate mögen vernünftig sein, der Weg zu ihnen ist nur technisch verstehbar. Diese Form des Entscheidens ist typisch für Künstliche Intelligenz und stellt uns vor neue Herausforderungen, sobald KI ausserhalb einer rein technischen Sphäre zum Einsatz kommen.

Rationalität beinhaltet, dass wir unsere Gedanken und Handlungen so strukturieren, dass wir sie erklären und Andere überzeugen können; rationale Gedanken können in Sprache gefasst werden. Klassische rationale Entscheidungsfindung, ob nun in Managementprozessen, in der medizinischen Diagnose oder in irgendwelchen anderen computergestützten Expertensystemen basiert in der Regel auf einer Abfolge von sprachlich festgeschriebenen Prozessschritten. «Sprachlich» ist hierbei das Schlüsselwort. Diese, entweder in Alltagssprache oder einer formalen Kunstsprache (z.B. einer Programmiersprache) verfassten Handlungsanweisungen sind, eine entsprechende Ausbildung vorausgesetzt, für Menschen versteh- und diskutierbar. Üblicherweise bedienen sich diese Sprachen verschiedener abstrakter Begriffe, deren Verständnis vorausgesetzt wird.

Datenbasierte Künstliche Intelligenz, häufig in Form neuronaler Netzwerke, funktioniert anders. Ohne auf die technischen Details einzugehen kann ein neuronales Netzwerk verstanden werden als eine verbundene Struktur sogenannter künstlicher Neuronen. Ein einzelnes Neuron hat viele Eingänge und einen Ausgang und agiert als Schwellwertschalter. Wie die einzelnen Eingänge gewichtet werden und bei welchem Schwellwert das Neuron zu «feuern» beginnt, wird dabei durch Parameter («Gewichte») festgelegt. Neuronale Netze müssen «trainiert» werden. Training bedeutet, dass die Gewichtsparameter, welche die Funktion des neuronalen Netzes bestimmen, sukzessive so verändert werden, dass eine gestellte Aufgabe immer besser erfüllt wird. Entscheidend ist, dass diese Gewichte die Funktionsweise des neuronalen Netzes vollständig bestimmen, aber keine direkte Bedeutung tragen. Hat man ein neuronales Netz dazu trainiert, aus einer Vielzahl von Ferienfotos diejenigen mit einem Sonnenuntergang herauszufiltern, wird man mit Verblüffung feststellen, dass dies erstaunlich gut funktioniert. Betrachtet man dann die Werte dieser Gewichtsparameter ist dort nichts zu finden, was auch nur im Entferntesten an einen Sonnenuntergang erinnert. Das neuronale Netz entscheidet zwar in der Regel richtig, ob ein Foto einen Sonnenuntergang zeigt oder nicht; es tut dies aber nicht auf der Basis von irgendwelchen, für uns durchschaubaren Abstraktionen oder Begriffsbildungen, sondern auf eine Art und Weise, welche zwar vollständig determiniert ist, aber ohne jegliche sprachliche Repräsentation auskommt. Ich nenne die Entscheidungsfindung eines neuronalen Netzes deswegen arational. Sie ist zwar datengestützt (schliesslich wurde das neuronale Netz mit realen Daten trainiert) und deterministisch (zweimal dasselbe Bild, sollte zweimal dasselbe Resultat ergeben); die Entscheidung ist also nicht irrational. Es fehlt aber eine sprachliche Repräsentation der Entscheidungsgrundlage. Den Ergebnissen dieser Entscheidungsprozesse mögen wir als Menschen sehr wohl zustimmen, wir können ihn zwar technisch nachvollziehen, aber nicht auf einer inhaltlichen Ebene verstehen. Der Unterschied zwischen einer rationalen und einer arationalen Entscheidungsfindung liegt nicht im Ergebnis, sondern in der Repräsentation des Entscheidungsfindungsprozesses.

Die Konsequenzen der Unterscheidung zwischen rationalem und arationalem Entscheiden sind gesellschaftspolitisch hochrelevant. KI wird immer öfter nicht nur zur Klassifizierung von Ferienfotos, sondern auch zur Einstufung von Risiken, Diagnosen im medizinischen Bereich und der Organisation komplexer

Abläufe in der Industrie verwendet. Bei Fragestellungen, welche den rein technischen Bereich übersteigen und gesellschaftliche Wertfragen tangieren, stellt uns arationale Entscheidungsfindung vor neue Probleme. Wir alle wissen, wie schwierig es ist, komplizierte Bewertungen in Sprache zu fassen. Jede/r weiss, was ein Sonnenaufgang ist, aber es erweist sich als überraschend schwierig, sprachbasierte Kriterien anzugeben, mit denen ein solcher auf einem Bild zweifelsfrei erkannt wird. Dies wird noch viel anspruchsvoller bei Begriffen wie «Fairness» oder «Verhältnismässigkeit». Der Vorteil einer in Sprache gefassten Entscheidungsfindung besteht aber darin, dass sie diskutiert, mithin sprachlich weiterverarbeitet werden kann. Wenn Methoden der künstlichen Intelligenz zum Beispiel im Bereich der Gesundheitsfürsorge oder zur Analyse von Bewerbungsunterlagen angewendet werden, ist aber breite Diskussion und gesellschaftlich abgestützte Weiterentwicklung nötig.

Meiner Ansicht nach, wäre es nun falsch, auf die Möglichkeiten der KI auch in diesen Bereichen zu verzichten. Notwendig ist aber zu diskutieren, wie arationale Entscheidungsfindung einerseits begründet und in eine dem Diskurs zugängliche Struktur eingebettet werden kann und andererseits, wenn schon nicht verstanden, so doch wenigstens interpretiert werden kann. Interpretation dient nicht nur dem reinen Verstehen, sondern auch ganz direkten, technischen Zwecken. Ein Beispiel: Trainingsverfahren für neuronale Netze liefern nie 100-prozentige Ergebnisse. D. h.: selbst wenn neuronale Netze in der Regel sehr gut arbeiten, muss man immer davon ausgehen, dass ein gewisser Prozentsatz ihrer Entscheidungen falsch ist. Weiss man aber nicht, warum ein neuronales Netz so entscheidet, wie es entschieden hat, kann man einen Fehler nicht vom Erkennen eines uns noch nicht bekannten Musters unterscheiden. Diagnostiziert ein neuronales Netz eine Erkrankung in einem Fall, wo ausgebildete Fachpersonen kein Problem zu erkennen vermögen, kann dies eine Fehldiagnose sein. Es ist aber durchaus möglich, dass das neuronale Netz eine Korrelation erkannt hat, welches in der medizinischen Fachliteratur noch nicht bekannt ist. Im medizinischen Kontext ist dies nicht unbedingt ein grosses Problem; schliesslich können weitere Tests durchgeführt werden oder weitere Fachpersonen zugezogen werden. Bei der Verwendung von künstlicher Intelligenz im Bereich der Kriminalitätsbekämpfung sehe ich da schon weitergehende Probleme.
Eine Frage drängt sich offensichtlich auf: Neuronale Netze sind der Funktionsweise des menschlichen Nervensystems nachempfunden. Auch wenn das menschliche Nervensystem im Detail sicherlich komplizierter als ein künstliches neuronales Netz ist, so fragt es sich doch, wieso wir Menschen dann rational entscheiden, wenn wir davon ausgehen, dass ein neuronales Netz dies auf arationale Art und Weise tut. Ich halte es für durchaus plausibel, dass unser Verständnis biologischer neuronaler Netze zwar wesentliche Aspekte der Funktionsweise von Nervensystemen erfasst (dazu gehört durchaus auch Bildverarbeitung und Lernfähigkeit), aber noch nicht ausreicht, um das Phänomen Sprache und die Bildung abstrakter Begriffe hinreichend abzubilden. Das bedeutet dann natürlich auch, dass die aufgrund unseres noch nicht vollständigen Verständnisses konstruierten technischen Analoga zwar viele « niedere» Funktionen richtig nachbilden, aber höheren Funktionen des Denkens damit noch nicht in einem Computer abgebildet werden können (ob dies überhaupt möglich ist, ist eine vollständig offene Frage).

Diese Überlegungen könnten einem dazu veranlassen zu glauben, rationale Entscheidungsfindung sei eine höhere Form des Denkens als seine arationale Entsprechung. Ich glaube nicht, dass dies der Fall ist. Sich auf abstrakte Begriffe abstützendes Entscheiden ist schwierig und zeitaufwendig. Sein Vorteil liegt darin, dass wir in einigermassen übersichtlichen Situationen die Werkzeuge der Logik verwenden können und diese eine hohe Genauigkeit aufweisen. In Situationen mit vielen Parametern, speziell wenn einige dieser Parameter auch noch unbekannt sind, sind logische Überlegungen recht unhandlich. Arationales Denken kann in diesen Fällen überlegen sein. Hier drängt sich der Vergleich mit Kahnemanns «Schnelles Denken/Langsames Denken» auf. Kahnemann diskutiert aber viel weitergehende psychologische Phänomene. Die hier gezogene Unterscheidung zwischen rationalem und arationalem Entscheiden vergleicht menschliches Denken mit maschinellen Prozessen.

Gegeben die endliche Grösse des menschlichen Gehirns, kann ich mir vorstellen, dass die Evolution eine optimale Balance zwischen rationalem und arationalem Denken geschaffen hat. Aus technischer Perspektive ergibt sich nun eine interessante Frage: Da Grössenbeschränkungen bei Computersystemen relativ einfach zu überwinden sind, wird es interessant sein, zu sehen, in welche Richtung sich diese Balance entwickeln wird. Werden riesige, arational entscheidende neuronale Netze letztlich mächtiger als beschränkte, aber rational argumentierende menschliche Gehirne? Wird es möglich sein, neuronale Netze zu verstehen und damit zu programmieren (und nicht nur zu trainieren)? Oder wird sich eine Mischung der beiden Ansätze als optimal herausstellen?

What the Cell ?!?

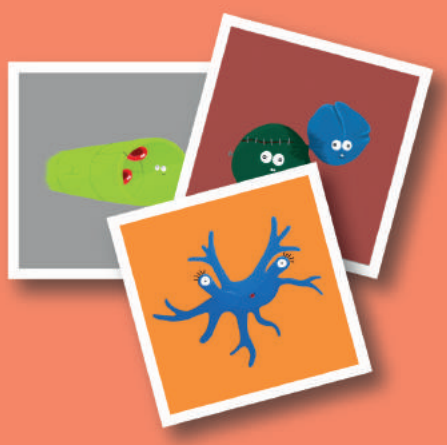
Das Quartett

Das perfekte Geschenk für Wissenschafts-begeisterte.

Jetzt von 20% Rabatt* profitieren. Einfach Code **ang012019** auf www.whatthecell.ch einlösen.

*gültig bis Ende September 2019

Das Memory



www.whatthecell.ch

WIE VERLÄSSLICH IST KÜNSTLICHE INTELLIGENZ?

Eriksson Salomé / 29

Motto: Take it easy - but take it!

Wunschsuperkraft: Zeitkontrolle

Künstliche Intelligenz (KI) findet sich überall in unserem Alltag: Das Navigationsgerät findet für uns eine Route von A nach B, und das Musikprogramm Spotify schlägt uns anhand unserer bisherigen Playlists neue Musik vor, die wir wahrscheinlich ebenfalls mögen. Doch wer garantiert uns, dass diese Programme auch zuverlässig funktionieren? Beim Navigationsgerät und Spotify gibt uns das Wissen, dass sie bisher immer funktioniert haben, Zuversicht. Und selbst wenn sie das mal nicht tun würden, ist es meistens auch nicht so tragisch.

KI wird aber auch immer mehr in Bereichen eingesetzt, in denen falsche Antworten ernste oder sogar katastrophale Folgen haben können. Zum Beispiel kann IBM Watson heute schon zur Unterstüzung von Krebsbehandlungen eingesetzt werden[1], und selbstfahrende Autos kommen immer näher an die Realität. Für solche Anwendungsgebiete brauchen wir stärkere Kontrollmechanismen. Zum Glück stehen uns dafür mehrere Instrumente zur Verfügung. Die Informatik beschäftigt sich nämlich schon lange damit, das Vertrauen in die Korrektheit von Algorithmen zu verbessern oder sogar zu garantieren, dass ein Algorithmus immer richtige Antworten liefert.

Test an Beispielen

Die am weitesten verbreitete Methode zur Fehlersuche ist die Software auf Testinstanzen laufen zu lassen, von welchen man die richtige Antwort kennt. Antwortet die Software auf einer Testinstanz falsch, weiss man, dass sie noch Fehler beinhaltet. Je mehr Testinstanzen man hat, desto zuversichtlicher kann man sein, dass die Software korrekt ist.

Stellen wir uns vor, wir entwickeln eine KI, welche lernen soll das Computerspiel Sokoban zu spielen. In diesem Spiel muss ein Arbeiter in einem Warenhaus Boxen zu vorgegebenen Zielpositionen schieben (da die Boxen keine Griffe haben, kann man sie nicht ziehen). Während der Entwicklung dieses Programmes würden wir auch immer wieder verschiedene Levels testen wollen. Falls die KI uns bei einem Level sagt, es sei unlösbar, obwohl wir selbser eine Lösung gefunden haben, wissen wir, dass wir nochmals über die Bücher gehen müssen. Sobald sie aber mehrere tausend Levels korrekt gelöst hat, können wir relativ zuversichtlich sein, dass sie korrekt spielt.

Für nicht sicherheitskritische KIs ist diese Art von Fehlersuche meist ausreichend. Doch selbst wenn man tausend (oder eine Million) Testinstanzen hat, auf der die Software sich korrekt verhält, hat man keinerlei Garantien, dass sie sich auch auf der nächsten Instanz korrekt verhält. Testing kann nur die Existenz von Fehlern nachweisen, nicht deren Abwesenheit.

Formale Verifikation

Um die Abwesenheit von Fehlern zu garantieren, kann man die Korrektheit eines Programmes mathematisch beweisen. Bei unserer Sokoban KI könnte man zum Beispiel beweisen, dass sie alle möglichen Bewegungsabfolgen erwägt und somit eine Lösung findet, falls es eine gibt. Wenn in der Forschung neue Algorithmen für Probleme gefunden werden, wird normalerweise zumindest das generelle Konzept des Algorithmus formal verifiziert. Konkrete Implementierungen werden hingegen kaum verifiziert, da sie durch verschiedene Optimierungen oft zu komplex sind.

Es gibt spezialisierte Software, sogenannte Theorembeweiser, welche die Erarbeitung eines mathematischen Beweises automatisieren. Solche Programme wurden zum Beispiel schon erfolgreich eingesetzt, um Beweise für offene mathematische Fragen zu finden[2]. Allerdings können auch diese Programme nicht immer einen Beweis erarbeiten (oder müssten dafür jahrelang rechnen). Indem man Optimierungen weglässt und den Algorithmus auf das Wesentliche reduziert, kann man die Beweisfindung einfacher machen; dadurch verliert man jedoch an Performance.

Zertifizierende Algorithmen
Ein Mittelweg zwischen Testen und formaler Verifikation liegt darin, dass das Programm zusammen mit seiner Antwort eine Erklärung respektive ein Zertifikat abgibt. Wir kennen das aus der Schule: die richtige Antwort alleine ist zwar nett, aber nur wenn man den Lösungsweg angibt, kann der Lehrer sehen, dass man das Problem auch verstanden hat und nicht nur glücklich geraten hat. Solch ein Zertifikat garantiert zwar nicht, dass man alle Probleme richtig löst, aber es beweist, dass man dieses konkrete Problem korrekt beantwortet hat.

Unsere Sokoban KI zertifiziert ihre Antwort bei lösbaren Levels schon alleine dadurch, dass sie das Level vorspielt. Aber wenn das Level unlösbar ist, wird es schwieriger. Vielleicht ist bei diesem Level eine Box in einer Ecke (welche nicht die Zielposition ist). Dann kann die KI sagen «egal was ich mache, ich kann diese Box nicht aus der Ecke schieben». Oder genereller kann die KI argumentieren «egal was ich mache, ich kann nur diese Menge von Spielzuständen erreichen und diese Box ist in keinem davon im Ziel».

Je nach Programm können diese Zertifikate sehr verschieden aussehen und auch verschieden komplex sein. Das Vorpsielen eines Levels von Sokoban können wir als Menschen noch gut nachvollziehen. Andere Zertifikate können aber zu komplex sein und werden stattdessen von anderen Programmen, einem sogenannten Verifizierer, überprüft. In diesem Fall stellt sich dann natürlich die Frage «Wie können wir uns sicher sein, dass der Verifizierer korrekt ist?», frei nach dem Motto «Wer überwacht die Wächter?». Glücklicherweise sind Verifizierer im Normalfall deutlich kleinere und einfachere Programme, und können in vielen Fällen mithilfe von Theorembeweisern (oder sogar von Hand) überprüft werden.

Explainable AI
Obwohl zertifizierende Algorithmen eine Art Erklärung für ihre Antwort geben, ist diese Erklärung im Allgemeinen nicht für menschliches Verständnis gedacht. Es gibt aber gute Gründe, dass eine KI sich dem Menschen verständlicher machen soll. Einerseits fällt es uns leichter, eine Antwort zu akzeptieren, wenn wir den Gedankengang dahinter verstehen. Andererseits kann uns eine Erklärung auch helfen, Fehler oder ungewollten «Bias» zu entdecken. Insbesondere in statistischen Methoden wie Deep Learning kann die KI ungewollte Schlüsse ziehen, wenn die Testdaten einen Bias beinhalten. So kann zum Beispiel eine KI, welche ein Ranking von Bewerbungen erstellen soll, hauptsächlich weisse Männer hoch einstufen, da in der Vergangenheit meistens weisse Männer eingestellt wurden.

In einem anderen Beispiel haben Forscher aufgezeigt, wie wichtig und hilfreich sogenannte «explainable AI» sein kann. Dazu haben sie eine KI erstellt, welche Bilder von Huskies von Bildern von Wölfen unterscheiden soll[3]. Die KI hat generell gut funktioniert, aber auch beispielsweise einmal einen Husky fälschlicherweise als Wolf klassifiziert. Als die KI gefragt wurde, welche Teile des Bildes zur Entscheidung beigetragen haben, hat sie den Schnee hervorgehoben, welcher auf dem Husky-Bild zu sehen war. Da die Testbilder, mit der die KI trainiert wurde, Wölfe nur im Schnee gezeigt haben, hat die KI also den naheliegenden aber falschen Schluss «Schnee = Wolf» gezogen. Mithilfe von Erklärungen kann solch ein ungewollter Bias entdeckt werden, wodurch man neue Testdaten besser auswählen kann, so dass sie diesen Bias nicht mehr aufweisen.

Künstliche Intelligenz hat unser Leben deutlich vereinfacht, indem es Denkarbeit leistet, zu der wir nicht oder nur mit sehr viel Aufwand fähig sind. Wie wir am Beispiel der Huskies und der Wölfe sehen, bedeutet dies allerdings nicht, dass die KI immer korrekt ist. Doch durch die hier vorgestellten Verfahren stehen uns mächtige Werkzeuge zur Verfügung, um die Schlussfolgerungen der KI zu verstehen und überprüfen, und uns so besseren Gewissens auf die KI verlassen zu können.

[1] https://www.ibm.com/us-en/marketplace/clinical-decision-support-oncology

[2] McCune, W. 1997. Solution of the robbins problem. Journal of Automated Reasoning 19(3):263–276.

[3] Marco Tulio Ribeiro, Sameer Singh, Carlos Guestrin. „Why Should I Trust You?": Explaining the Predictions of Any Classifier. arXiv:1602.04938

Wir planen und realisieren komplexe Vorhaben in den Bereichen Energie, Umwelt, Bau und Verkehr.

Für gesellschaftlich relevante Lösungen, die auch morgen überzeugen.

www.tbf.ch

tbfpartner
Planer und Ingenieure

100 % reiner Wasserstrom.

Naturstrom, produziert im Eniwa Kraftwerk an der Aare.

Eniwa AG · Industriestrasse 25 · CH-5033 Buchs AG
T +41 62 835 00 10 · info@eniwa.ch · www.eniwa.ch

eniwa

DAS MIRACLE PROJEKT

Prof. Dipl.-Ing. Dr. sc. ETH Rauter Georg / 38

Motto: Aktiv gemeinsam die Zukunft gestalten durch technischen Fortschritt

Wunschsuperkraft: Zeit anhalten

Vom Knochenschneiden mit mechanischen Werkzeugen zu Lasern

Archäologische Funde aus der Steinzeit zeigen, dass Menschen mechanische Werkzeuge wie Sägen, Schaber, Messer und Bohrer seit jeher als Instrumente benutzt haben, um Operationen am menschlichen Körper durchzuführen [14]. An den Prinzipien des Schneidens, Zertrennens und Bohrens hat sich seit damals nicht viel geändert. Die chirurgischen Instrumente sind natürlich präziser, feiner und ausgeklügelter geworden und zudem auch steril, aber sie funktionieren alle nach einfachen Grundprinzipien der Mechanik. Vor allem bei orthopädischen Eingriffen und bei allen Operationen, bei denen Knochen abgetragen oder bearbeitet werden müssen, treten verhältnismässig grosse Kräfte und Momente auf, die auch das umliegende Gewebe beeinflussen. Beispielsweise erzeugt Sägen und Bohren hohe Reibungskräfte, die sich als Hitze auf das umliegende Gewebe auswirken. Auch mechanische Deformationen treten an der Schnittstelle auf und verschliessen beispielsweise das poröse Knochengewebe. Die notwendige Blutversorgung der Zellen nahe der Schnittstelle scheint dadurch beeinträchtigt zu sein. Wie Versuche am Knochen von Minischweinen gezeigt haben, entsteht durch oszillierende mechanisch schneidende Messer (Piezoosteotome) eine glatte Knochenoberfläche an der Schnittfläche. Im Vergleich dazu erzeugt ein Schnitt mit einem Laser mit einer Wellenlänge von 2.94[nm] (einem Erbium-doped Yttrium Aluminium Garnet Laser, kurz Er:YAG Laser) eine offene, poröse Schnittfläche [4]. Die schnellere Heilung der Knochenschnitte nach der Operation mit dem Laser führen die Forscher auf die fundamental anderen physikalischen Effekte beim Schneiden mit Laser zurück. Während mechanische Werkzeuge durch Interaktionskräfte zwischen Werkzeug und Knochen Späne abtragen, umliegendes Gewebe quetschen und Reibung erzeugen, verdampfen beispielsweise Er:YAG Laser mit einer Pulsdauer im Millisekunden-Bereich und einer Pulsenergie im Joule-Bereich einen mineralischen Hauptbestandteil (den Hydroxyapatit) des Knochens. Der Schnitt entsteht von Laserpuls zu Laserpuls durch Abtragen von kleinen beinahe zylindrischen, sich überlappenden Löchern. Knochenschneiden mit Laser erfolgt also kontaktlos und erzeugt daher auch weniger Vibrationen [12]. Die Wärme, die der Laser erzeugt, wird hauptsächlich zum Verdampfen des Knochens im Schnitt benötigt und breitet sich weit weniger im angrenzenden Gewebe aus als die Reibungswärme beim mechanischen Schneiden. Die befürchtete thermische Zerstörung des umliegenden Gewebes durch Laser konnte für Laserschnitte bis zu 22[mm] Tiefe in Versuchen an Schafknochen widerlegt werden [15]. Weitere Vorteile von Laserosteotomie (Knochenschneiden mit Laser) gegenüber mechanischen Knochenschnitten sind die höhere Präzision der Schnittposition und Schnitttiefe, sowie schmalere Schnitte, beliebige Form der Schnitte, sowie der schnellerer Knochenaufbau im Heilungsprozess [3, 8].

CARLO®, der erste Roboter für Knochenschneiden mit Laser

Die Kombination der vielen Vorteile von Laserosteotomie gegenüber konventioneller Knochenbearbeitung hat zur Entwicklung des weltweit ersten Roboters für Laserosteotomie durch die Firma Advanced Osteotomie Tools (AOT AG, Basel), einem Spinn-Off der Universität Basel geführt: CARLO® (kurz für «Cold Ablation Robot-guided Laser Osteotome» [2], ursprünglich patentiert als «Computer Assisted and Robot guided Laser-Osteotome» [6]). Dieses so genannte Laserosteotom besteht aus einem seriellen Roboter (ein Roboter, der aus einer Abfolge von Gelenken und danach starren Verbindungsstücken besteht, wie der menschliche Arm) und einem Laserkopf. Im Laserkopf befinden sich optische Komponenten wie Linsen, die den Laserstrahl fokussieren sowie Düsen für Wasserspray zum Kühlen und Spülen des Laserschnittes. Der Roboter wird für das zielgenaue und zeitlich abgestimmte Führen des Laserstrahls verwendet. Die Bewegungen des Roboters werden in der Regel an Computertomographie-Daten (CT-Daten) des jeweiligen Patienten vorgeplant. Die Ausrichtung des Roboters am Patienten und dabei die Übertragung des Referenzkoordinatensystems im CT-Datensatz wird über ein optisches, dreidimensionales Echtzeitvermessungssystem bewerkstelligt (optoelectronical tracking system). Hierfür muss der Bediener, meist der ausführende Chirurg, zuerst eine Schraube mit mehreren Markern in den Knochen des Patienten einschrauben, sodass die Bewegung des Knochens als Gesamtes ständig vermessen werden kann. In den Laserkopf des Roboters wurden ebenso Marker eingearbeitet. Somit kann die relative Position und Ausrichtung des Roboters gegenüber dem Knochen gemessen werden. Wird der Knochen zum Beispiel während der Operation bewegt, so unterbrechen Laser und Roboter ihre

Arbeit und der Roboter folgt dem Knochen an seine neue Position, um die Arbeit dort fortzusetzen. Das genaue Orientieren des CT-Datensatzes am Patientenknochen erfolgt vor dem Start des Schneideprozesses. Hierfür muss der Bediener mit der Spitze eines Stiftes, der ebenso mit Markern besetzt ist, auf die Referenzpunkte auf dem Patientenknochen zeigen, welche auf einem Bildschirm mit dem CT-Datensatz angezeigt werden. Ist dieser Schritt abgeschlossen, so kennt der Roboter seine Position, die des Patienten und auch die des geplanten Schnittes. Sollte jemand den Patienten oder Roboter berühren, so wird aus Sicherheitsgründen die Arbeit am Patienten gestoppt. Generell ist bei der Intervention von jeglichem Gerät mit Laserstrahlung das Tragen von entsprechenden Schutzbrillen für das Personal verpflichtend.

Die ersten Interventionen mit einem robotergeführten Laserosteotom: 2019

Studien mit CARLO® an menschlichen Leichen wurden bereits erfolgreich absolviert und konnten frühere Resultate mit Tiermodellen bestätigen. Neben der hohen Schnittgenauigkeit konnte auch gezeigt werden, dass Laserosteotomie trotz der geringen Schnittgeschwindigkeit mit konventionellen Operationsmethoden zeitlich mithalten kann. Während mechanische Schnitte schnell ausgeführt sind, benötigen die Rekonstruktion und Osteosynthese wegen der fehlenden Planung, den Schnittungenauigkeiten, und der Positionierungsungenauigkeit der Implantate viel Zeit. Umgekehrt dauert die Laserosteotomie mit dem Roboter länger, jedoch lassen sich die geschnittenen Knochen mit den Implantaten (dies sind eventuell Implantate aus körpereigenem Knochenmaterial ausgeschnitten an einer anderen Stelle des Patienten) schnell und mit wenig Relativbewegungsmöglichkeiten verbinden. Die Innovation der Laserosteotomie steckt also nicht nur in der Verwendung von Lasern, die den Knochen nach dem Schneiden schneller heilen lassen. Sie steckt auch in der präoperativen Planung und der Möglichkeit Schnitte nicht nur geradlinig auszuführen. Beispielsweise können neue Schnittgeometrien wie Sinusmuster oder ein Schwalbenschwanzprofil geplant werden. Die ausgeschnittenen Knochenteile und Implantate passen danach wie Puzzleteile zusammen und besitzen bereits beim Zusammenstecken Stabilität [2]. Zur Fixierung werden, wenn überhaupt, nur wenige zusätzliche Schrauben benötigt. Entsprechend ist auch eine Nachfolgeoperation zum Entfernen der Schrauben kürzer wenn nicht gar überflüssig. Noch dieses Jahr (2019) wird CARLO® bei den ersten Patienten für Kiefer und Gesichtschirurgie zum Einsatz kommen. Derzeit scheinen nur noch die relativ hohen Anschaffungskosten des ersten Laserosteotoms und der grosse Platzbedarf im Operationssaal allein für das Schneiden des Knochens limitierende Faktoren zu sein.

Die Zukunft der Laserosteotomie: das MIRACLE-Projekt

Auch wenn es scheint als wäre das Ende der technologischen Fahnenstange mit dem Laserosteotom CARLO® schon bald erreicht, so ist dem wahrscheinlich noch lange nicht so. Allerdings wird der nächste Schritt in der Entwicklung der Laserosteotomie als Gesamtpaket noch ein paar Jahre auf sich warten lassen.

Für eine Laserosteotomie mit dem Roboter CARLO® muss der Chirurg den Körper des Patienten öffnen und den zu schneidenden Knochen frei legen. In einem Projekt an der Universität Basel wird seit 2015 am «Nachfolger» von CARLO® gearbeitet. Mit diesem soll der gesamte Eingriff minimalinvasiv ablaufen. Dies bedeutet, dass dem Chirurgen ein kleiner etwa ein Zentimeter grosser Schnitt in der Haut des Patienten ausreichen soll, um einst dieselben chirurgischen Eingriffe durchführen zu können wie mit CARLO® zum jetzigen Zeitpunkt. Allerdings, auf minimalinvasive Weise. Um diesen neuen Meilenstein in der Chirurgie zu erreichen benötigt es allerdings ein kleines Wunder aus jetziger Sicht. Dieses Wunder soll allerdings bereits in einigen Jahren Realität werden. Zumindest als funktioneller Prototyp, wenn es nach den Forschern rund um das «MIRACLE-Projekt» an der Universität Basel am «Department of Biomedical Engineering» geht. MIRACLE, zu Deutsch «Wunder», steht in dem Projekt als Akronym für «Minimal-Invasive Robot-Assisted Computer-guided LaserosteotomE», was so viel wie Roboterendoskop für computergesteuertes Knochenschneiden mit Laser bedeutet. Die grosse Herausforderung in diesem Projekt besteht vor allem darin bisher verwendete Technologien so zu verkleinern, dass der Laser in einem beweglichen Endoskop unterkommen kann. Gleichzeitig soll jedoch auch noch Platz für die Aktuierung des beweglichen Endoskops selbst bleiben sowie einen Arbeitskanal, eine Kamera, Spray, einen

Kanal zum Absaugen und andere Messinstrumente, um den Knochenschnitt in Echtzeit zu vermessen und den gerade geschnittenen Gewebetyp zu bestimmen. Bei so gut wie jeder Komponente stösst das Projekt an die Grenzen der Physik und zudem soll an Stellen operiert werden, die von aussen nicht einsehbar sind. Am Ende wird dann auch noch das Implantat mit Schlüssellochtechnologie im Körper wie ein 3D-Puzzle zusammengebaut und befestigt. So unlösbar die Aufgabe erscheint, so kann das Projekt MIRACLE bereits mit ersten Ergebnissen aufwarten. Erste Implantate werden bereits über die beiden Spinn-Offs der Universität Basel «Di Meliora» und «Ad Mirabiles» vertrieben. Auch ist die Planungssoftware, welche im MIRACLE-Projekt eingesetzt und nach wie vor erweitert wird bereits im Universitätsspital Basel für Diagnose und Patientenaufklärung in ausgewählten Abteilungen im Einsatz. Auch im Anatomischen Institut der Universität Basel wird sie bereits für Ausbildungszwecke mit Medizinstudenten eingesetzt. Die grosse Neuheit dieser Planungssoftware ist, dass sie CT-Daten und Magnetresonanztomograph-Daten (MRT-Daten) direkt nach ihrer Aufnahme in 3D mit hoher Auflösung, grosser Wiederholfrequenz (für beide Augen) auf Brillen für Virtuelle Realität (VR) darstellen kann. Der Träger der Brille kann mit den virtuellen 3D Daten einfach interagieren, unterschiedliche Gewebearten in verschiedenen Farben darstellen, das 3D Modell beliebig skalieren und von allen Seiten, ja auch von innen her ansehen [7]. Bald soll auch diese Planungs- und Medizindatenvisualisierungssoftware als kommerzielles Produkt erhältlich sein. Insgesamt arbeiten vier Forschungsgruppen am MIRACLE Projekt. Dies sind das «Bio-Inspired RObots for MEDicine-Lab» (BIROMED-Lab) unter der Leitung von Prof. Dr. Georg Rauter, die «Biomedical Laser and Optics Group» (BLOG) unter der Leitung von Prof. Dr. Azhar Zam, die «Planning and Navigation Group» am «Center for Image Analysis and Navigation» (CIAN) unter der Leitung von Prof. Dr. Philippe Cattin und die «Smart Implants Group» am «Hightech Forschungszentrum» (HFZ) unter der Leitung von Prof. Dr. Hans-Florian Zeilhofer. Alle vier Gruppen sind am Department of Biomedical Engineering der Universität Basel angesiedelt. Sie arbeiten in Allschwil, Kanton Basel-Landschaft unter einem Dach. Denn kurze Wege um sich auszutauschen sind einer der wichtigsten Faktoren für erfolgreiche interdisziplinäre Forschung.

Die ersten Anwendungsgebiete für das MIRACLE Osteotom

Derzeit steht als erste klinische Anwendung das halbseitige Ersetzen von Kniegelenken (Unikondylar Knee Arthroplasty) im Fokus. Da das Kniegelenk die grösste Knochendicke aufweist (etwa 5[cm]), soll bei dieser Anwendung gezeigt werden, dass das MIRACLE Osteotom diesen und damit auch jeden anderen Knochen im Körper problemlos schneiden kann. Es sind jedoch auch andere Anwendungsgebiete wie der Zugang zum Gehirn ohne Gehirnerschütterung durch Bohren und Sägen angedacht oder auch knochenmark- und bandscheibenschonende Operationen an der Wirbelsäule (siehe Bild 1). Die Eingriffe mit dem MIRACLE Osteotom werden zuerst basierend auf CT-Daten oder MRT-Daten des jeweiligen Patienten geplant. Im Operationssaal führt der Chirurg das robotische Endoskop bei dessen Befestigung an einem robotischen Endoskophalter mit Hand an den Eintrittspunkt in den Körper. Daraufhin kann der Chirurg das robotische MIRACLE Osteotom über eine robotische Bedienerkonsole steuern. Diese Konsole gibt dem Chirurgen Rückmeldung über die Kräfte, die auf die Spitze des Endoskops wirken. Das MIRACLE Osteotom im Körper soll über eine Brille für erweiterte Realität (Augmented Reality) dargestellt werden, da man von aussen nicht mehr sehen und verstehen kann, wie sich das flexible Endoskop durch den Körper schlängelt. Sobald der Chirurg das MIRACLE Osteotom an den Zielort bewegt hat, «saugt» sich dieses am Knochen fest und beginnt dann autonom aber unter Aufsicht des Chirurgen die Schnitte, wie in der Planung festgelegt, auszuführen. Da Knochengewebe seine Form zwischen der Planung und dem chirurgischen Eingriff beibehält, scheint eine semiautonome Ausführung der Schnitte nach dem personalisierten Plan sinnvoll.

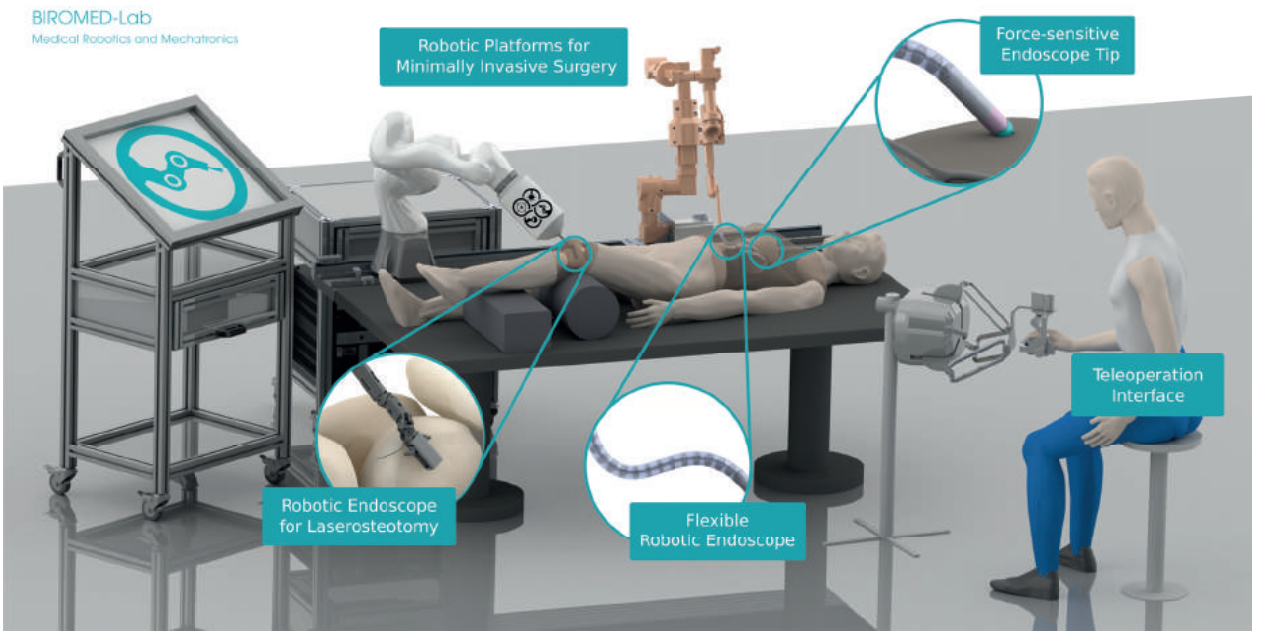


Bild 1: Übersichtsbild verschiedener Komponenten des MIRACLE-Projekts bei einer Intervention am Knie und einer Intervention an der Wirbelsäule mit Zugang durch den Bauchraum. Die Steuerung der MIRACLE Roboter wird von einem Chirurgen an einer robotischen Steuerkonsole mit Kraftfeedback vorgenommen. (Dieses Bild wurde von Manuela Eugster, BIROMED-Lab, DBE, Uni Basel zur Verfügung gestellt).

Der intelligente Miniaturroboter für das MIRACLE Projekt

Ein zentraler Punkt für das MIRACLE-Projekt ist die Integration verschiedenster Technologien in einem Gerät, dem MIRACLE Osteotom. Diese Integration findet am BIROMED-Lab statt, wo Lasersysteme von BLOG, eigene Miniatursensoren und auch solche der Planning and Navigation Group in einem flexiblen robotischen Endoskop zusammengeführt werden. Das MIRACLE Osteotom muss so konzipiert sein, dass alle Komponenten in einem robotischen Endoskop mit einem Durchmesser von einem Zentimeter Platz finden und gut zusammenarbeiten. Zeitliche Synchronisation der vielen verschiedenen Komponenten ist eine grosse Herausforderung, da standardisierte Schnittstellen nicht bei allen Komponenten von Haus aus vorhanden sind. Zudem arbeiten gerade die Komponenten für die Lasersysteme auf deutlich höheren Abtastraten als robotische Hardware, wo Abtastraten im Kiloherz-Bereich üblich sind. Je nach Lasersystem werden Abtastraten im Mikrosekunden-Bereich und kürzer erwartet. Auch wird zur Echtzeitüberwachung der Schnitttiefe ein Optical Coherence Tomograph verwendet, der in einer Sekunde Datenmengen im Gigabyte Bereich erzeugen kann. Diese Daten müssen in Echtzeit verarbeitet werden [5], damit das robotische Endoskop beispielsweise weiss, ob es noch weiter schneiden darf, ob es die gewünschte Schnitttiefe schon erreicht hat, oder ob der Roboter den Laser an eine neue Stelle bewegen soll. Auch fallen beim Schneiden mit dem Laser weitere Daten an, die Rückschlüsse auf den eben geschnittenen Gewebetyp geben sollen. Hier werden zwei verschiedene Methoden verfolgt: i) Laser-Induced Breakdown Spektroscopy (LIBS) [1] und ii) akustische Schockwellenmessungen mit Fiber-Bragg-Gratings und Miniaturmikrophonen [13]. Bei LIBS wird das reflektierte Lichtspektrum am Schnittpunkt analysiert; Jedes Gewebe absorbiert beim Verdampfen mit Laser unterschiedliche Lichtanteile und der reflektierte Lichtanteil lässt so Rückschlüsse auf das gerade geschnittene Gewebe zu. Ähnlich verhält es sich bei der akustischen Analyse der Schockwellen, welche durch die kurzen Laserimpulse beim Schneiden entstehen. Die Schallwellen werden

je nach Frequenzbereich entweder besser mit dem Mikrophon oder mit einer Glasfaser, in die bewusst kleine Defekte (Fiber-Bragg-Gratings) eingearbeitet wurden, gemessen. Alle Analysemethoden verwenden Methoden aus dem Feld der künstlichen Intelligenz, um die grossen Datenmengen in kürzester Zeit automatisiert analysieren zu können und dem Roboter zu helfen die richtigen Entscheidungen zu treffen oder Informationen an den Chirurgen weiterzuleiten. Die Echtzeitdatenanalyse und Klassifizierung der Daten macht das kleine MIRACLE Osteotom zum intelligenten Miniaturroboter.

Bild 2: Die Spitze des MIRACLE-Osteotoms (End-Effektor) kann sich auf dem Knochen festsaugen und den Laser mitsamt allen Sensoren über den Knochen führen. Sollte der Arbeitsraum des End-Effektors zu klein sein für die geplanten Schnitte, so können die Beinchen an einer neuen Stelle fixiert werden und das MIRACLE Osteotom kann sich so auf dem Knochen fortbewegen, sprich gehen. (Copyright für dieses Bild liegt bei Frank Brüderli, Brüderli Longhini AG).

Die Spitze des robotischen Endoskops, der sogenannte End-Effektor, ist selbst ein kleiner Roboter, der entsprechend alle anderen Technologien beinhalten wird. Sobald das robotische Endoskop die gewünschte Position im Körper erreicht hat, koppelt sich der End-Effektor mechanisch vom Rest des Endoskops ab und bleibt nur noch über Datenkabel und Antriebsstränge verbunden. Diese mechanische Entkopplung reduziert die Übertragung von Störungen vom robotischen Endoskophalter auf das robotische Endoskop und damit auch den End-Effektor. Da der End-Effektor direkt auf dem Knochen sitzt, den er schneidet, kann der Patienten sogar während der Operation leicht bewegt werden ohne, dass sich dies auf die Genauigkeit des Knochenschnittes auswirken sollte. Mit kleinen Beinen, die sich am Knochen festsaugen können, bewegt der kleine End-Effektor den Laser und alle Überwachungssensoren über den Knochen (siehe Bild 2). Sollte der Arbeitsraum zu klein werden, kann der End-Effektor auch die Beinchen lösen, an einer neuen Stelle wieder fixieren und so den End-Effektor nachziehen. Die Endoskop Spitze kann sich somit auf dem Knochen fortbewegen. Die besondere Bauweise des End-Effektors und der aktuierten Beinchen als Parallelroboter (dies bedeutet, dass mehrere Antriebsstränge parallel, also gleichzeitig und koordiniert aktuiert werden müssen) erlaubt hohe Positionierungs- und Orientierungsgenauigkeit sowie grosse Kräfte bezogen auf die Baugrösse. Der Regler, der den End-Effektor steuert muss eine koordinierte Bewegung von vier Antriebssträngen realisieren, während er aber nur drei Bewegungsfreiheitsgrade steuert. Diese Besonderheit von mehr Antrieben als Bewegungsmöglichkeiten benötigt einen Echtzeitoptimierungsalgorithmus, der die gewünschte Bewegung des End-Effektors auf die einzelnen Antriebe umrechnet. Die einzelnen Antriebe können nicht unabhängig voneinander bewegt werden. Dies ist ähnlich wie in einem Spinnennetz: wenn man an einem Faden zieht, bewegen sich gleichzeitig alle anderen Fäden mit. Die Planung und semiautonome Ausführung der End-Effektorbewegung für das MIRACLE Osteotom benötigt also auch intelligente Regler, Planung und Zustandsüberwachung [11, 10, 9].

Die einzelnen Bausteine für das MIRACLE Projekt sehen bereits vielversprechend aus und sind teilweise als Einzelkomponenten kommerziell verfügbar. Das gesamte MIRACLE System soll als medizinischer Prototyp in spätestens drei Jahren getestet werden, um dann möglichst bald als zertifiziertes Medizinprodukt umgesetzt zu werden. Wir hoffen so den Patienten möglichst kurze, minimal invasive, gut geplante und ebenso ausgeführte Operationen am Knochen zu ermöglichen. Dies soll das gewünschte Operationsresultat ermöglichen und zwar bei kurzer Genesungszeit und nur kleinen bis gar keinen Folgeoperationen, bei denen Fixierungsschrauben und Platten wieder entfernt werden.

Danksagung
Das MIRACLE Projekt wird von der Werner Siemens Foundation in Zug finanziell unterstützt.

Literatur

[1] Hamed Abbasi, Georg Rauter, Raphael Guzman, Philippe C Cattin, and Azhar Zam. Differentiation of femur bone from surrounding soft tissue using laser induced breakdown spectroscopy as a feedback system for smart laserosteotomy. In Biophotonics: Photonic Solutions for Better Health Care VI, volume 10685, page 1068519. International Society for Optics and Photonics, 2018.

[2] Marcello Augello, Cyrill Baetscher, Mireille Segesser, Hans-Florian Zeilhofer, Philippe Cattin, and Philipp Juergens. Performing partial mandibular resection, fibula free flap reconstruction and midfacial osteotomies with a cold ablation and robot-guided er: Yag laser osteotome (carlo)–a study on applicability and effectiveness in human cadavers. Journal of Cranio-Maxillofacial Surgery, 46(10):1850–1855, 2018.

[3] Marcello Augello, Waldemar Deibel, Katja Nuss, Philippe Cattin, and Philipp Jürgens. Comparative microstructural analysis of bone osteotomies after cutting by computer-assisted robot-guided laser osteotome and piezoelectric osteotome: an in vivo animal study. Lasers in medical science, 33(7):1471–1478, 2018.

[4] Kyung-won Baek, Waldemar Deibel, Dilyan Marinov, Mathias Griessen, Michel Dard, Alfredo Bruno, Hans-Florian Zeilhofer, Philippe Cattin, and Philipp Juergens. A comparative investigation of bone surface after cutting with mechanical tools and er: Yag laser. Lasers in surgery and medicine, 47(5):426–432, 2015.

[5] Yakub A Bayhaqi, Alexander Navarini, Georg Rauter, Philippe C Cattin, and Azhar Zam. Neural network in tissue characterization of optical coherence tomography (oct) image for smart laser surgery: preliminary study. In Third International Seminar on Photonics, Optics, and Its Applications (ISPhOA 2018), volume 11044, page 1104402. International Society for Optics and Photonics, 2019.

[6] Alfredo E Bruno, Hans-Florian Zeilhofer, and Philipp Jürgens. Carlo-computer assisted and robot guided laser-osteotome, August 30 2012. US Patent App. 13/497,520.

[7] Hirter Christoph. Wenn der Arzt mit dem Ingenieur. Technical report, Basler Zeitung, Wirtschaft, Juli 2018.

[8] Waldemar Deibel, Adrian Schneider, Marcello Augello, Alfredo E Bruno, Philipp Juergens, and Philippe Cattin. A compact, efficient, and lightweight laser head for carlo: integration, performance, and benefits. In Novel optical systems design and optimization XVIII, volume 9579, page 957905. International Society for Optics and Photonics, 2015.

[9] Manuela Eugster, Philippe C Cattin, Azhar Zam, and Georg Rauter. A parallel robotic mechanism for the stabilization and guidance of an endoscope tip in laser osteotomy. In 2018 IEEE/RSJ International Conference on Intelligent Robots and Systems (IROS), pages 1306–1311. IEEE, 2018.

[10] Manuela Eugster, Patrick Weber, Philippe Cattin, Azhar Zam, Gabor Kosa, and Georg Rauter. Positioning and stabilization of a minimally invasive laser osteotome. In Proceedings of The Hamlyn Symposium on Medical Robotics, pages 21–22. Imperial College London and the Royal Geographical Society, 2017.

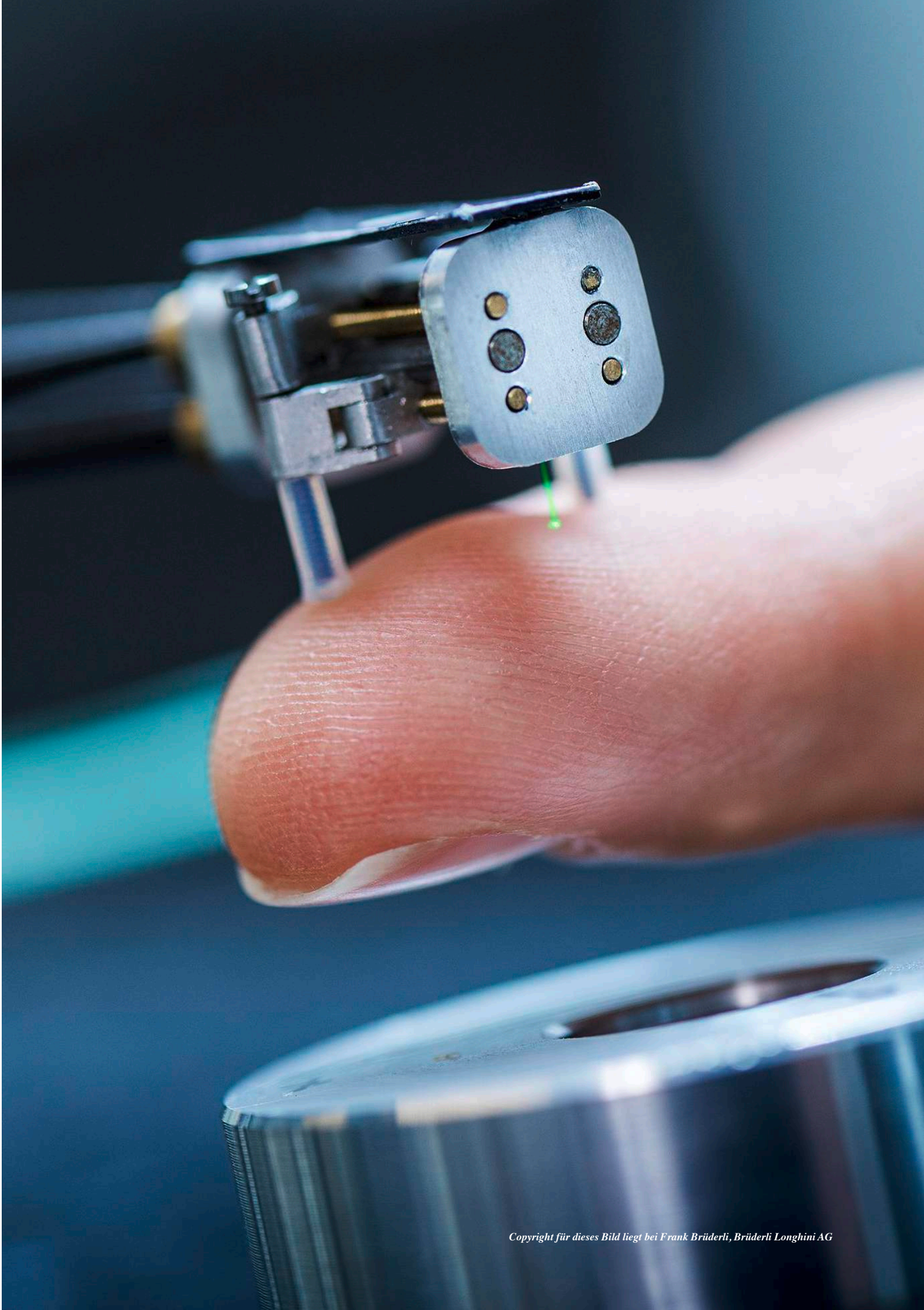
[11] Manuela Eugster, Patrick Weber, and Georg Rauter. Medical endodevice.

[12] Herve K Nguendon Kenhagho, Georg Rauter, Raphael Guzman, Philippe C Cattin, and Azhar Zam. Comparison of acoustic shock waves generated by micro and nanosecond lasers for a smart laser surgery system. In Advanced Biomedical and Clinical Diagnostic and Surgical Guidance Systems XVI, volume 10484, page 104840P. International Society for Optics and Photonics, 2018.

[13] Hervé Nguendon Kenhagho, Sergey Shevchik, Fatemeh Saeidi, Neige Faivre, Bastian Meylan, Georg Rauter, Raphael Guzman, Philippe Cattin, Kilian Wasmer, and Azhar Zam. Characterization of ablated bone and muscle for long-pulsed laser ablation in dry and wet conditions. Materials, 12(8):1338, 2019.

[14] Jürgen Piek, Gundula Lidke, Thomas Terberger, Ulrich von Smekal, and Michael Robert Gaab. Stone age skull surgery in mecklenburg-vorpommern: a systematic study. Neurosurgery, 45(1):147–151, 1999.

[15] Stefan Stübinger, Katja Nuss, Michaela Pongratz, Jill Price, Robert Sader, Hans-Florian Zeilhofer, and Brigitte von Rechenberg. Comparison of er: Yag laser and piezoelectric osteotomy: an animal study in sheep. Lasers in surgery and medicine, 42(8):743–751, 2010.



Copyright für dieses Bild liegt bei Frank Brüderli, Brüderli Longhini AG

DER COMPUTER LERNT DIE SPRACHE DER CHEMIKER

Brunner Cyrill / 29

Motto: Tell me and I forget. Teach me and I remember. Involve me and I learn. (Benjamin Franklin)

Wunschsuperkraft: In der Zeit zurückreisen zu können, um einige der grössten Persönlichkeiten der Geschichte kennen lernen zu dürfen

Experten aus dem Feld der künstlichen Intelligenz suchen stets nach Möglichkeiten, ihre Ansätze auf neue, schwierige Probleme anzuwenden, und es gibt nicht sehr viel Schwierigere als das Wirkstoffdesign. Es bedarf einige 100 bis 1‘000 Substanzen mit geringer Aktivität aus ersten Tests, damit schlussendlich ein einzelnes, zugelassenes Medikament herauskommt. Limitationen liegen dabei schon von Beginn weg in der für ein erstes Testen (genannt Screening) verwendeten Bibliothek an Substanzen. Je grösser und diverser diese ist, umso wahrscheinlicher findet man auch erste aktive Substanzen. Grosse Pharmafirmen haben in der Regel Bibliotheken von rund 1-2 Millionen Substanzen, doch der mögliche chemische Raum an Substanzen liegt bei 10^{60}, einem schier unendlich grossen Raum [1]. Gleichermassen kostet die Entwicklung eines Medikamentes heute ca. 2.5 Milliarden Dollar, weshalb Firmen wie Pfizer und Roche auch entsprechend in Systeme basierend auf künstlicher Intelligenz investieren [2]. Computer-basierte Ansätze können nun einerseits auf einen viel grösseren Suchraum zurückgreifen, andererseits erlauben sie ein schnelleres, gezielteres Testen von vorhergesagten Substanzen, sodass man nicht 1-2 Millionen Substanzen über Wochen hinweg testen muss, sondern noch maximal einige Tausend in wenigen Tagen.

Künstliche Intelligenz ist in der Entwicklung neuer Wirkstoffe auf jeder Stufe anwendbar, von der Identifizierung neuer Zielstrukturen (sprich Proteinen) über das virtuelle Screening nach neuen Ausgangssubstanzen bis hin zu Synthesevorhersagen und der Optimierung der Eigenschaften einer Leitsubstanz. Aufgrund dieses riesigen Feldes kann hier nur ein sehr limitierter Einblick gewährt werden, weshalb auf diverse Reviews für einen weitergehenden Einblick in die Materie verwiesen wird [3 – 6].

Grundsätzlich lässt sich ein Wirkstoff mit Computer-basierten Methoden auf zwei Wegen finden: Liganden- oder Struktur-basiert. Erster bedarf Informationen über Substanzen mit bekannter Aktivität gegenüber dem gewünschten Protein ohne dessen Struktur zu kennen; letzteres hingegen basiert auf bekanntem, strukturellen Wissen über ein Protein, sodass eine Substanz in oder an dieses Proteinen hineinmodelliert werden kann. Maschinelles Lernen wurde bisher in erster Linie Liganden-basiert eingesetzt, da Ansätze der künstlichen Intelligenz grundsätzlich eine grosse Datenmenge benötigen, was fast ausschliesslich bei Liganden mit bekannter Aktivität der Fall ist. Der grundlegende Ablauf ist dabei stets relativ ähnlich: Datensammlung, Datenbeschreibung, Training eines maschinellen Lernprozesses, Validierung des Modells, Anwendung auf eigenes Problem.
Der entscheidende erste Schritt ist dabei die Datengrundlage. Eine gute, saubere und korrekt annotierte Datengrundlage ist matchentscheidend, denn mittels maschinellen Lernens kann ein Computer so ziemlich alles lernen, dummerweise auch falsche Fakten. Eine der am häufigsten verwendeten Datenbanken ist ChEMBL des Europäischen Bioinformatischen Instituts [1], aber auch Patentinformationen oder interne Datenbanken sind geläufig, wo möglich.

Anschliessend beschreibt man zuerst sein Datenset auf eine Computer-lesbare Art und Weise mithilfe eines Deskriptors; bekanntlich kennt der Computer ja nur Zahlen. Deskriptoren sind im Prinzip wie eine Art Sprache, in welcher Eigenschaften eines Moleküls erfasst und mathematisch umgesetzt werden. Dabei kann ein Deskriptor Aspekte wie Substrukturen (z.B. ein Benzolring [7]), quantenchemische Eigenschaften (z.B. Partialladungen [8]), Interaktionspunkte (z.B. Wasserstoffbrückendonor [9]), die Konnektivität von Atomen [10] oder einer gewichteten Kombination all dieser wie z.B. der WHALES-Deskriptor erfassen [11]. Neuere Ansätze verwenden dabei auch effektive Beschreibungen eines Moleküls über den SMILES-Code, einer Buchstaben-basierten Beschreibung der zweidimensionalen Form eines Moleküls. Da ein Deskriptor so etwas wie eine Sprache ist, kann es natürlich durchaus sein, dass nicht jeder Deskriptor für jede Aufgabe gleich gut geeignet ist (sprich die wichtigen Eigenschaften der Moleküle entscheidend erfasst), so wie wir nicht jeden Gegenstand in jeder Sprache gleich gut beschreiben können (z.B. Geborgenheit auf Deutsch hat kein direkt passendes Gegenstück auf Englisch). Schwierig sind häufig dreidimensionale Aspekte oder Stereochemie.

Ist die Datenbank beschrieben, teilt man seine Daten auf in Testdaten (i.d.R. 85–90% aller Daten) und Validierungsdaten. Mit den ersteren trainiert man das Modell seiner Wahl, wobei von Deep Neural Networks bis hin zu einfachen Regressionsmodell alles möglich ist. Hierbei geht der Computer in einem iterativen Prozess durch die Testdaten durch und versucht zu lernen, welche Eigenschaften führen zu aktiven Substanzen und welche nicht. Zur Überprüfung der Qualität des Modells verwendet man dann das Validierungsset, sprich

dem Modell noch unbekannt Daten und vergleicht die Vorhersage des Modells mit den tatsächlich bekannten und berechnet dabei den Fehler des Modells. Dieser klassische Ansatz gibt allerdings nur limitiert Aufschluss über die Leistung des Modells, denn häufig sind solche Ansätze ein wenig eine Blackbox. Eine kürzlich veröffentlichte Publikation stellte einen Ansatz vor, in welchem der gesamte Lernprozess visuell dargestellt wird. Hierbei konnten sie zeigen, dass ein spezifisches Modell nicht wirklich den Inhalt der Bilder erkannte, sondern Bildbeschriftungen im Bild, während ein anderes Modell tatsächlich den Inhalt richtig erkannte [12]. Beispiele von Anwendungen gibt es unzählige, zwei spezielle seien aber hier hervorgehoben. Eine in der Chemie und im Wirkstoffdesign höchst anspruchsvolle Aufgabe ist die Vorhersage der Synthese, sprich man lässt den Computer vorhersagen, wie ein Molekül zu synthetisieren ist. Segler *et al*. verwendeten einen Algorithmus namens Monte Carlo Search Tree und liessen ihr Modell auf der Basis von 11 Millionen Reaktionen Chemie lernen. Das Ergebnis: Die Vorhersagen des Modells waren qualitativ gleichwertig zu Ergebnissen aus der Literatursuche, dem heutigen Goldstandard in der synthetischen Chemie [13].

Ein anderes Modell von Gupta *et al*. namens Generative Recurrent Network wurde auf ähnliche Weise auf der ChEMBL-Datenbank trainiert, sodass das Modell mithilfe von SMILES lernte, wie Moleküle zusammengesetzt sind [14]. Gleiches ging auch für Peptide, wo das Modell die Aminosäuren basierend auf einer anderen Datenbank lernte [15]. Diese Modelle lernen also ähnlich einer Sprache die Grammatik der Moleküle oder Peptide und können dann neue Moleküle bilden. Dieser Ansatz wurde für Peptide mit Wirkung gegen Krebszellen sowie für die Entwicklung neuer Moleküle gegen nukleäre Rezeptoren erfolgreich getestet [16, 17].
Mithilfe einer etwas anderen Form eines Recurrent Neural Networks konnten Forscher aus der schwedischen Pharmafirma AstraZeneca Substanzen generieren, welche bezüglich diverser Eigenschaften wie Löslichkeit, Aufnahmefähigkeit im Darm etc. optimale Eigenschaften aufwiesen [18].

Die Möglichkeiten für weitere Anwendungen von künstlicher Intelligenz in diesem Sektor ist gewaltig gross und wird sicherlich auf die eine oder andere Weise ein fixer Bestandteil in der zukünftigen Entwicklung von Medikamenten spielen. Ein entscheidender Vorteil der Computer-basierten Methoden ist ihre Kosteneffizienz, der grösste Nachteil ihre grosse Abhängigkeit von bestehenden Daten. Entsprechend ist die Entwicklung von Modellen mit tieferer Datenabhängigkeit ein besonders wichtiger Aspekt, damit die künstliche Intelligenz auch dann erfolgreich Moleküle vorhersagen kann, wenn es sich noch um ein komplett neues Protein handelt.

Literatur

1. Gaulton, A., et al., ChEMBL: a large-scale bioactivity database for drug discovery. Nucleic Acids Res, 2012. 40(Database issue): p. D1100-7.

2.Sullivan, T. A Tough Road: Cost To Develop One New Drug Is $2.6 Billion; Approval Rate for Drugs Entering Clinical Development is Less Than 12%. 2019 [cited 2019 30.4.2019]; Available from: https://www.policymed.com/2014/12/a-tough-road-cost-to-develop-one-new-drug-is-26-billion-approval-rate-for-drugs-entering-clinical-de.html.

3.Vamathevan, J., et al., Applications of machine learning in drug discovery and development. Nat Rev Drug Discov, 2019.

4. Schneider, G., Automating drug discovery. Nat Rev Drug Discov, 2018. 17(2): p. 97-113.

5. Schneider, G. and D.E. Clark, Automated De Novo Drug Design - «Are we nearly there yet?». Angew Chem Int Ed Engl, 2019.

6. Schneider, G., Generative Models for Artificially-intelligent Molecular Design. Mol Inform, 2018. 37(1-2).

7. Durant, J.L., et al., Reoptimization of MDL keys for use in drug discovery. J Chem Inf Comput Sci, 2002. 42(6): p. 1273-80.

8. Stanton, D.T. and P.C. Jurs, Development and use of charged partial surface area structural descriptors in computer-assisted quantitative structure-property relationship studies. Analytical Chemistry, 1990. 62(21): p. 2323-2329.

9. Reutlinger, M., et al., Chemically Advanced Template Search (CATS) for Scaffold-Hopping and Prospective Target Prediction for ‚Orphan' Molecules. Mol Inform, 2013. 32(2): p. 133-138.

10. Rogers, D. and M. Hahn, Extended-Connectivity Fingerprints. Journal of Chemical Information and Modeling, 2010. 50(5): p. 742-754.

11. Grisoni, F., et al., Scaffold-Hopping from Synthetic Drugs by Holistic Molecular Representation. Scientific Reports, 2018. 8(1): p. 16469.

12. Lapuschkin, S., et al., Unmasking Clever Hans predictors and assessing what machines really learn. Nature Communications, 2019. 10(1): p. 1096.

13. Segler, M.H.S., M. Preuss, and M.P. Waller, Planning chemical syntheses with deep neural networks and symbolic AI. Nature, 2018. 555(7698): p. 604-610.

14. Gupta, A., et al., Generative Recurrent Networks for De Novo Drug Design. Mol Inform, 2018. 37(1-2).

15. Muller, A.T., J.A. Hiss, and G. Schneider, Recurrent Neural Network Model for Constructive Peptide Design. J Chem Inf Model, 2018. 58(2): p. 472-479.

16. Grisoni, F., et al., Designing Anticancer Peptides by Constructive Machine Learning. ChemMedChem, 2018. 13(13): p. 1300-1302.

17. Merk, D., et al., De Novo Design of Bioactive Small Molecules by Artificial Intelligence. Mol Inform, 2018. 37(1-2).

18. Olivecrona, M., et al., Molecular de-novo design through deep reinforcement learning. J Cheminform, 2017. 9(1): p. 48.

IMPRESSUM

FOKUS SCHLUSSREDAKTION ANG
Sophia Pantasis
Adrian Zwyssig

GRAFIK & DESIGN
Pantasis Grafik & Interaction Design
Veronika Pantasis, www.pantasis.ch

KONTAKT
Sophia Pantasis, Adrian Zwyssig
praes@ang.ch

AUFLAGE
600 Exemplare

Druck
Onlineprinters GmbH, Rudolf-Diesel-Strasse 10, 91413 Neustadt a.d. Aisch, Deutschland

PRODUKTION
Aargauische Naturforschende Gesellschaft, Feerstrasse 17, 5001 Aarau

COPYRIGHT
Alle Rechte vorbehalten.

ISSN: 2297-4962

Das Kernkraftwerk Gösgen produziert Strom für 1,5 Millionen Schweizer Haushalte. Besuchen Sie unsere Ausstellung oder machen Sie eine Werksbesichtigung.

Telefon 0800 844 822, www.kkg.ch

Kernkraftwerk Gösgen

Mehr Freizeit für weniger Geld.

Mit dem AKB Freizeitportal schenken wir Ihnen attraktive Freizeitangebote.

akb-freizeitportal.ch

Am richtigen Ort.ch

Aargauische Kantonalbank