Westfälische Hochschule

Wissen.
Was praktisch zählt.

Künstliche Intelligenz für die biomolekulare Simulation

Autoren: Ann-Kathrin Brüggemann, Lisa Sophie Kersten, Felix Bänsch und Achim Zielesny

Die computergestützte Simulation komplexer biomolekularer Vorgänge hat sich zu einem wichtigen Zweig der modernen Lebenswissenschaften entwickelt. Eine an der Westfälischen Hochschule entwickelte offene mesoskopische Simulationssoftware ermöglicht die Untersuchung von biologischen Membranen und ihrer spezifischen Wechselwirkung mit Peptiden und Proteinen auf der Mikrosekundenzeitskala [1, 2]. Das genaue Verständnis dieser Protein-Membran-Wechselwirkungen spielt in der modernen biologischen, pharmakologischen und medizinischen Forschung eine bedeutende Rolle.

Für eine mesoskopische Simulation müssen die grundlegenden chemischen Moleküle in geeignete Fragmente zerlegt und gemittelte physikalische Kräfte zwischen diesen Fragmenten bestimmt werden. Dies erfolgt auf Basis molekularmechanischer Kraftfelder und erfordert außerordentlich zeitintensive Rechnungen, die sich über viele Wochen und Monate erstrecken können. Das vorliegende Projekt befasst sich daher mit der Entwicklung „künstlich intelligenter“ (KI) maschineller Lernsysteme, die die aufwendigen Rechnungen auf wenige Sekunden abkürzen sollen. Dazu werden den KI-Lernsystemen berechnete Daten als Beispiele zur Verfügung gestellt – aber anders als eine Datenbank lernt ein KI-System diese Beispiele nicht einfach auswendig, sondern „erkennt“ im besten Falle die wirklichen nichtlinearen Zusammenhänge. Schließlich kann ein entsprechend trainiertes KI-System für schnelle Vorhersagen von physikalischen Kräften zwischen bisher nicht berechneten Fragmentpaaren Anwendung finden, was zu einer erheblichen Vereinfachung und Beschleunigung der darauf aufbauenden biomolekularen Simulationen beiträgt.

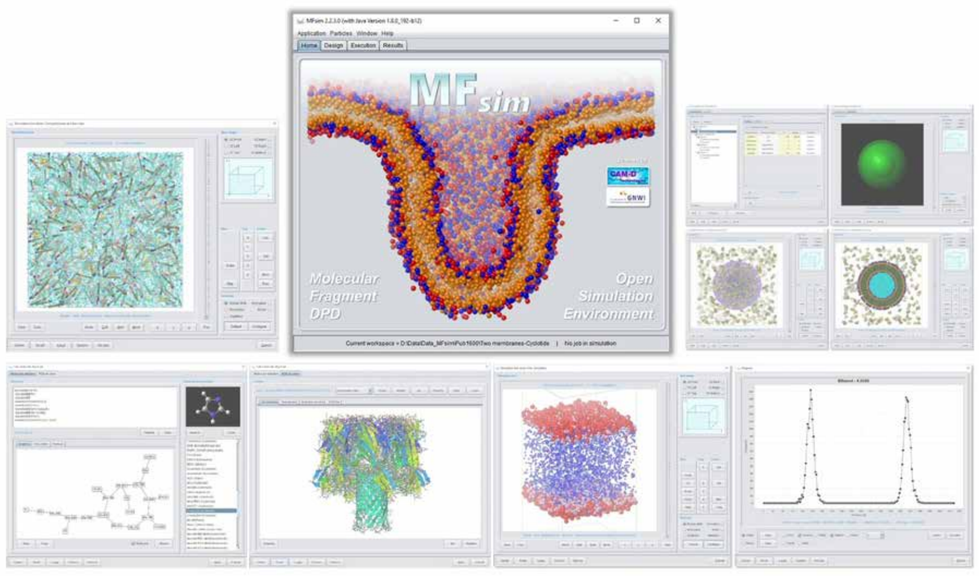

Abb. 1:
Die MFsim-Simulationssoftware ermöglicht die Untersuchung von biologischen Membranen und ihrer Wechselwirkungen mit Peptiden und Proteinen.

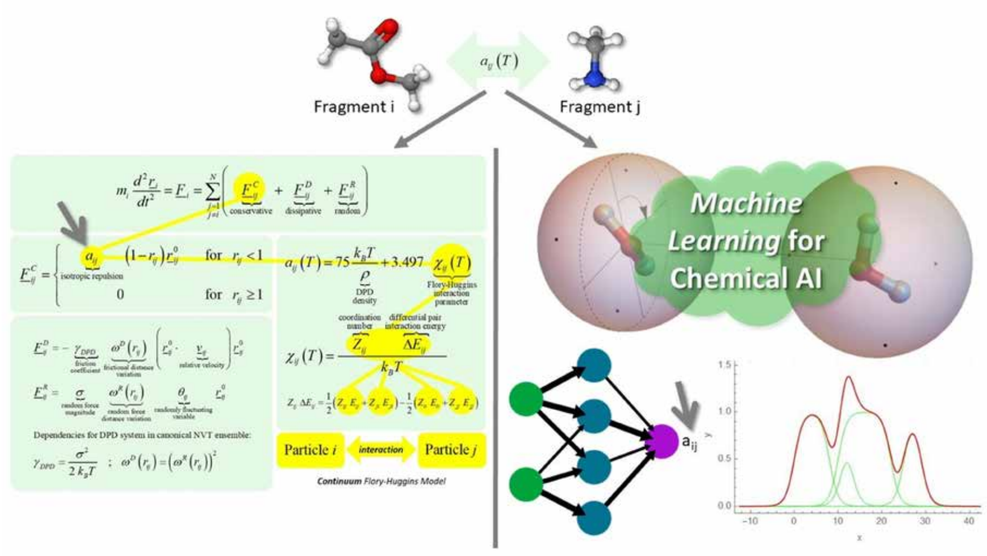

Abb. 2:
Berechnung der Kräfte zwischen Molekülfragmenten und ihre Bestimmung durch ein intelligentes Lernsystem.

[1] K. van den Broek, M. Daniel, M. Epple, J.-M. Hein, H. Kuhn, S. Neumann, A. Truszkowski and A. Zielesny, MFsim - an open Java all-in-one rich-client simulation environment for mesoscopic simulation. In: Journal of Cheminformatics (2020), 12:29

[2] A. Truszkowski, K. van den Broek, H. Kuhn, A. Zielesny and M. Epple, Mesoscopic Simulation of Phospholipid Membranes, Peptides, and Proteins with Molecular Fragment Dynamics, Journal of Chemical Information and Modeling (2015), 55(5), 983-997

Kontakt

Prof. Dr. Achim Zielesny
August-Schmidt-Ring 10
45665 Recklinghausen
Tel.: +49 02361 915 -530
E-Mail: achim.zielesny@w-hs.de

Westfälische Hochschule
Fachbereich Maschinenbau und Facilities Management
www.w-hs.de