

2021-004 vom 23.01.2021

EU fördert gemeinsames Projekt mit Helmholtz Zentrum

## TU Dortmund führt Künstliche Intelligenz, Chemische Biologie und Arzneimittelforschung zusammen

Das Helmholtz Zentrum München koordiniert das neue Innovative Training Network (ITN) „Advanced Machine Learning for Innovative Drug Discovery“. Beteiligt ist Prof. Paul Czodrowski von der Fakultät für Chemie und Chemische Biologie der TU Dortmund. Das Projekt wird von der Europäischen Union im Rahmen der Marie-Skłodowska-Curie-Maßnahmen mit 3,93 Millionen Euro gefördert. Rund 150.000 Euro davon gehen nach Dortmund.

Das Projekt Advanced Machine Learning for Innovative Drug Discovery (AIDD) wird fünfzehn Institutionen aus zehn europäischen Ländern und der Universität British Columbia (Kanada) zusammenbringen, die sechzehn Doktorandinnen und Doktoranden in enger Zusammenarbeit mit assoziierten Partnern aus den USA, Australien, China, Israel und anderen Ländern qualifizieren werden. Leiter des Projekts ist Dr. Igor Tetko, Institut für Strukturbiologie in München. Das Projekt baut auf die Erfahrungen des Instituts in der Qualifizierung von Doktorandinnen und Doktoranden für die translationale Forschung in der Arzneimittelforschung und Chemoinformatik auf. Das Institut betreute in drei vorangegangenen Projekten insgesamt 64 europäische Stipendiatinnen und Stipendiaten.

Künstliche Intelligenz (KI) und maschinelles Lernen werden zu einer immer wichtigeren Arbeitsgrundlage der chemischen Industrie. Die Anwendung der KI in diesem Bereich ist jedoch nicht einfach und erfordert umfangreiche Kenntnisse der Chemie. Das Ziel des neuen Netzwerks AIDD ist es, eine zukünftige Generation von Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftlern mit hervorragenden Fähigkeiten sowohl im Bereich des maschinellen Lernens als auch in der Chemie darauf vorzubereiten, die Arzneimittelforschung innovativ zu gestalten.

Die Stipendiatinnen und Stipendiaten werden Methoden zur Vorhersage der chemischen Reaktivität und ein interpretierbares Multi-Expertensystem für die Arzneimittelforschung entwickeln, Mikroskopie-Bilder und Strukturinformationen zur Abschätzung biologischer und toxischer Wirkungen von Molekülen integrieren und Berechnungsmodelle für das Design neuer Verbindungen validieren. Sie werden insbesondere auch von den Angeboten der kürzlich gestarteten Helmholtz-AI-Plattform profitieren. Die Möglichkeiten umfassen Seminare, Kurse, Tutorien und vor allem persönliche Interaktionen mit Prof. Fabian Theis, Leiter der Helmholtz Artificial Intelligence Corporation Unit und seinen Mitarbeiterinnen und Mitarbeitern. Die Aktivitäten sind eine wichtige Komponente der interdisziplinären Wirkstoffforschung am Helmholtz Zentrum München, die aufbauend auf neuen Erkenntnissen zu Krankheitsmechanismen neue Ansätze für Therapien entwickelt.

„Das Projekt AIDD verbindet theoretische Expertise mit dem Zugang zu wertvollen proprietären Daten und der Expertise der Industriepartner im Bereich der medizinischen und synthetischen Chemie und wird so innovative KI-Methoden beisteuern. Ein weiterer Schwerpunkt ist es, die nächste Generation von Forschern in der interdisziplinären Arzneimittelentdeckung auszubilden und damit einen wertvollen Beitrag für die zukünftige Forschung in Europa zu leisten“, sagt Koordinator Igor Tetko.

Mit den Marie-Sklodowska-Curie-Maßnahmen (MSCA) fördert die Europäische Union die internationale und sektorübergreifende Karriere von Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftlern. Die Maßnahmen sind Teil des europäischen Rahmenprogramms für Forschung und Innovation, Horizont 2020. Die Innovative Training Networks (ITN) sind die prestigeträchtigsten Projekte der MSCA mit typischen Erfolgsquoten von fünf bis zehn Prozent.

**Weitere Informationen:**

<http://ai-dd.eu/>

**Bildhinweis:**

Forscht gemeinsam mit dem Helmholtz Zentrum München: Prof. Paul Czodrowski von der TU Dortmund. Foto: Nikolas Golsch/TU Dortmund

**Ansprechpartner für Rückfragen:**

Prof. Paul Czodrowski

Fakultät für Chemie und Chemische Biologie der der TU Dortmund

Tel.: 0231-755 2703

E-Mail: [paul.czodrowski@tu-dortmund.de](mailto:paul.czodrowski@tu-dortmund.de)

Die Technische Universität Dortmund hat seit ihrer Gründung vor 52 Jahren ein besonderes Profil gewonnen, mit 17 Fakultäten in Natur- und Ingenieurwissenschaften, Gesellschafts- und Kulturwissenschaften. Die Universität zählt rund 34.300 Studierende und ca. 6.500 Mitarbeiterinnen und Mitarbeiter, darunter etwa 300 Professorinnen und Professoren. Das Lehrangebot umfasst rund 80 Studiengänge. In der Forschung ist die TU Dortmund in vier Profildbereichen besonders stark aufgestellt: (1) Material, Produktionstechnologie und Logistik, (2) Chemische Biologie, Wirkstoffe und Verfahrenstechnik, (3) Datenanalyse, Modellbildung und Simulation sowie (4) Bildung, Schule und Inklusion. Bis zu ihrem 50. Geburtstag belegte die TU Dortmund beim QS-Ranking „Top 50 under 50“ Rang drei der bundesdeutschen Neugründungen.