



Künstliche Intelligenz

Von der Steinzeit über mathematische Intuition, Moleküle und Galaxien bis hin zu Corona-Tests

Von künstlicher Intelligenz im Sinne von selbsttätig lernenden neuronalen Netzwerken war an dieser Stelle schon mehrfach die Rede [33–36]. Immer dann, wenn es um die Vorhersage bei einem komplexen System oder Sachverhalt geht und sehr viele Daten vorliegen, kann man versuchen, diese Daten mit einer selbstlernenden Maschine zu analysieren, d. h. eine Maschine verwenden, um Strukturen in den Daten zu finden, die einem Menschen mit seiner begrenzten Lern- und Denkkapazität nicht auffallen würden. Das hat vor 5 Jahren beim Brettspiel *Go* erstmals weltweit sichtbar so richtig gut funktioniert: Die Aufgabe beim *Go*, den richtigen nächsten Spielzug von mehr als 10^{171} möglichen Spielzügen zu finden, ist zwar so groß, dass sich das Ergebnis prinzipiell nicht berechnen lässt (die Anzahl der Atome im gesamten Universum bzw. der beim Schach möglichen Spielzüge liegt jeweils etwa bei vergleichsweise „schlappen“ 10^{80} Möglichkeiten). Aber eine Maschine (genannt *AlphaGo*) der britischen Firma *DeepMind*¹ konnte anhand vieler vorhandener *Go*-Partien und anschließendem Weiterspielen gegen sich selbst lernen, das Spiel besser zu spielen als die weltbesten Menschen (März 2016). Im Oktober 2017 wurde gezeigt, dass eine neue Maschine (*AlphaGo Zero*), die von Anfang an nur gegen sich selbst spielte, bei 100 Spielen gegen *AlphaGo* 100-mal gewann und weit besser als die Menschen gute Spielzüge finden kann. Seither versuchen die weltbesten *Go*-Spieler zu verstehen, was die Maschine macht. Sie gewinnt immer. Während der vergangenen 5 Jahre wurde diese Technik in den ver-

schiedensten Bereichen eingesetzt, wie an dieser Stelle in 2 Übersichten im Jahr 2021 dargestellt wurde: In der Medizin können Maschinen Flecken auf der Haut dermatologisch diagnostizieren (Krebs oder nicht?), Röntgenbilder beurteilen (dito), und vieles mehr [36].

Mittlerweile gibt es kaum noch eine Wissenschaft, in der nicht mit künstlicher Intelligenz (KI) gearbeitet wird. In der Sinnesphysiologie klassifizierte beispielsweise ein neuronales Netzwerk Moleküle nach deren Geruch [23] und konnte danach auch den Geruch von anderen (nicht im Training vorgekommenen) chemischen Substanzen vorhersagen. In der Chemie finden neuronale Netzwerke gangbare, aber bislang unbekannte Synthesewege [24, 26]. KI sucht und findet mittlerweile auch vollautomatisch Argumente beim Debattieren mit anderen Menschen, und das Militär verwendet neuronale Netzwerke, um Strategien des Einsatzes von Robotern bei gewaltsamen Auseinandersetzungen zu entwickeln [36]. Im Folgenden werden ganz unterschiedliche Bereiche vorgestellt, an die man zunächst eher nicht denkt, wenn es um KI geht und in denen gerade in jüngster Zeit enorme praktische Fortschritte gemacht wurden.

Archäologie

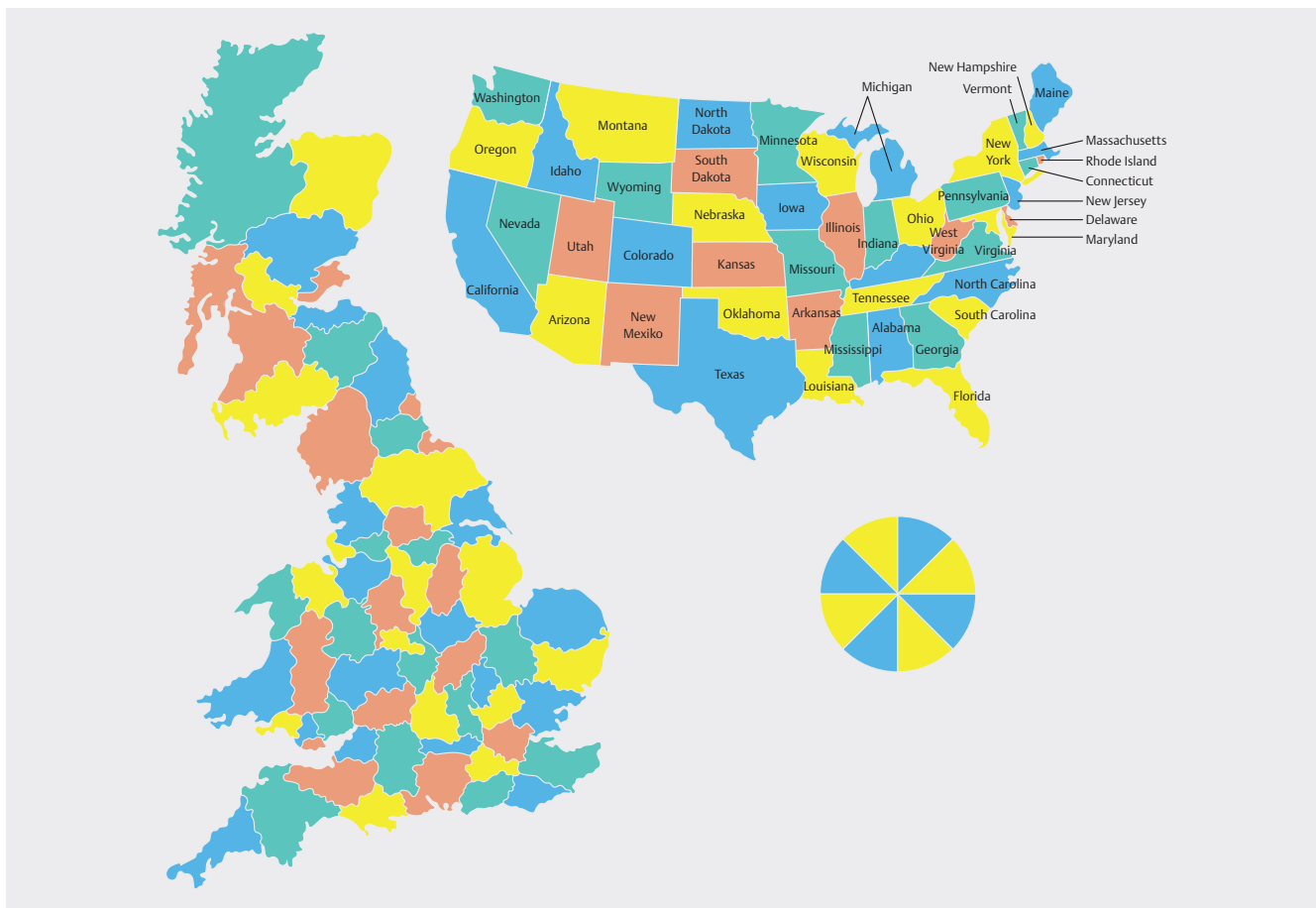
Noch relativ neu und wenig bekannt ist der Einsatz neuronaler Netzwerke in der Archäologie. So wurden ostafrikanische steinzeitliche Werkzeuge danach klassifiziert, in welchen Gruppierungen sie zusammen mit anderen Werkzeugen gefunden wurden. Es ging dabei um große Datenmengen (Funde aus Äthiopien, Kenia, Tansania, Eritrea, Somalia und Uganda), die unvoreingenommen – und das heißt vor allem: unbeeinflusst von bereits vorhandenen, aber kontroversen Theorien – in mittel- und neusteinzeitliche Werkzeugklassen unterschieden werden sollten. Dies gelang tatsächlich mittels KI [18], was bedeutet, dass die

Einteilung erstens nicht auf menschlichen Vorurteilen beruht und zweitens die in den vorhandenen Daten steckende Information optimal ausgenutzt wird. In einer anderen Studie wurden mexikanische Messer aus vulkanischem Glas (Obsidian) der in Zentralmexiko gelegenen Fundstelle *Xalasco* zunächst röntgenspektroskopisch auf ihre chemische Zusammensetzung untersucht. Mit KI wurden die 256 Artefakte dann mit Proben verglichen, die aus möglichen natürlichen Quellen (Steinbrüchen) stammten. Auf diese Weise konnte die Herkunft der Werkzeuge geklärt werden. Die meisten waren aus einem Material in der Nähe des Fundorts gefertigt, einige jedoch stammten aus weiter entfernt liegenden Quellen und belegen damit, dass zu dieser Zeit an diesem Ort bereits eine Kultur des Austauschs und Handels bestand [25].

Mathematische Intuition

Schon lange werden in der Mathematik Computer eingesetzt, wenn es viel zu „berechnen“ gibt. Seit es, angefangen mit dem Abakus vor mehr als 4000 Jahren, die ersten mechanischen Rechenmaschinen gibt, sind Menschen beim Rechnen langsamer als Maschinen, und seitdem die modernen Computer aufkamen, hat der Unterschied zwischen Mensch und Maschine nochmals um Größenordnungen zugenommen. „Computer sind dumm, aber schnell“, lautet seither die Devise, wenn Rechner gleichsam mit roher Gewalt Milliarden von Rechnungen pro Sekunde durchführen. Die Anwendungen von Computern in der Mathematik gehen mittlerweile jedoch weit über das bloße „Rechnen“ hinaus. Schon im Jahr 1976 wurde beispielsweise der mit Hilfe eines Computers erfolgte Beweis des *4-Farben-Theorems* [2] im allgemeinen Wissenschaftsblatt *Scientific American* publiziert. Im Jahr 1852 hatte der britische Mathematiker und Mitbegründer der Logik, Augustus De Morgan (1806–1871; besondere Bekanntheit erlangte er durch die beiden nach ihm benannten De Morganschen Ge-

¹ Das Unternehmen *DeepMind* wurde vom Neurowissenschaftler Demis Hassabis [35] zusammen mit Shane Legg und Mustafa Suleyman am 23. September 2010 als Startup gegründet und im Januar 2014 für etwa 400 Millionen US\$ an Google verkauft. Die Firma hat mittlerweile über 1000 Mitarbeiter und wird nach wie vor von Hassabis geleitet, der mittlerweile auf einer ganzen Reihe bestpublizierter wissenschaftlicher Arbeiten als Seniorautor fungiert.



► **Abb. 1** Landkarte der Bezirke der britischen Hauptinsel (links) und der Staaten der USA (rechts oben). Am Fall der USA kann man sehen, dass die Staaten Utah, Colorado, Neumexiko und Arizona sich an einem Punkt treffen. Wenn man nun diesen Punkt als gemeinsame Grenze gelten lassen würde, dann würde das 4-Farben-Problem gänzlich anders aussehen, denn im Falle der Aufteilung einer Fläche nach Art eines Kuchens grenzen am Mittelpunkt des Kuchens (rechts unten) genauso viele Flächen aneinander, wie der Kuchen Stücke hat (und man bräuchte zur Einfärbung entsprechend genau diese Anzahl an Farben). Beim 4-Farben-Problem gilt daher ein Punkt nicht als Grenze (nach Daten aus [42]).

setze), erstmals die folgende Frage aufgeworfen: Kann man jede Landkarte mit nur 4 Farben so einfärben, dass 2 angrenzende Länder immer unterschiedliche Farben haben (► **Abb. 1**)?

124 Jahre danach wurde die Frage mit „Ja“ beantwortet, was bei Mathematikern für viel Begeisterung, aber zugleich auch für viel Frust sorgte: Nachdem Wolfgang Haken den Beweis im Jahr 1976 beim alljährlichen Sommerkongress der Mathematiker in einem Vortrag dargestellt hatte, beschrieb ein Teilnehmer die Situation wie folgt [1]: „Am Ende seiner Ausführungen hatte ich erwartet, dass das Publikum in einen großen Beifall ausbrechen würde. Stattdessen reagierten sie mit höflichem Applaus! Ich war verwundert über die kühle Reaktion und bat diejenigen, die seinen Vortrag gehört hatten, um Erklärungen. Ein Mathematiker nach dem anderen äußerte sein Un-

behagen über einen Beweis, bei dem ein Computer eine wichtige Rolle spielte. Sie störten sich an der Tatsache, dass mehr als 1000 Stunden Computerzeit in die Überprüfung von etwa 100 000 Fällen geflossen waren, und vermuteten (hofften?) oft, dass in den Hunderten von Seiten Computerausdrucken ein Fehler verborgen sein könnte. Darüber hinaus bestand die Hoffnung, dass ein viel kürzerer Beweis gefunden werden könnte.“ Für viele Mathematiker der 1970er-Jahre waren Computer also zwar schnell, aber eben doch dumm, und ganz offensichtlich hofften sie auf einen eleganteren Beweis durch einen nachdenkenden Menschen.

Kenneth Appel und Wolfgang Haken waren sich durchaus der Tatsache bewusst, dass sie mit ihrem computerassistierten Beweis etwas Besonderes geschaffen hatten. Gegen Ende ihrer Darstellung im Scientif-

ic American schreiben sie: „Viele Mathematiker, insbesondere diejenigen, die vor der Entwicklung leistungsfähiger Computer ausgebildet wurden, sträubten sich dagegen, den Computer als ganz normales mathematisches Werkzeug zu behandeln. [...] Wenn viele Mathematiker sich an langen Beweisen stören, so mag das daran liegen, dass sie bis vor kurzem nur die Art von Methoden verwendet haben, die kurze Beweise liefern. [...] Unser Beweis des 4-Farben-Theorems deutet darauf hin, dass es Grenzen gibt für das, was in der Mathematik allein mit theoretischen Methoden erreicht werden kann. [...] Er deutet auch an, dass in der Vergangenheit die Notwendigkeit des Einsatzes von Computern bei mathematischen Beweisen unterschätzt wurde“

[2].² – Jeder einzelne dieser 4 Sätze stellte nichts weniger als eine Schockwelle für die zeitgenössischen Mathematiker dar.

Die Lösung des 4-Farben-Problems hatte eine neue Situation in der Mathematik geschaffen, wie der Mathematiker Robin Wilson ([41] Hervorhebung vom Autor) in einer zusammenfassenden Darstellung des Werks von Wolfgang Haken schreibt: „Ist das [überhaupt] ein Beweis? Und wenn ja, wie können wir wissen, dass es ein Beweis ist? Bedenken dieser Art und vor allem hinsichtlich des Einsatzes von Computern hielten an – und tun dies noch immer. Kann ein Beweis als gültig angesehen werden, wenn er nicht von Hand überprüft werden kann?“ Dass hier von der Überprüfung „von Hand“ die Rede ist, zeigt an, wie wenig sich Mathematiker darüber bewusst sind, wie sie arbeiten. Denn es kann hier nicht darum gehen, was Hände tun, sondern darum, was ein Mensch zu Denken in der Lage ist. Bekanntermaßen sind jedoch auch von Menschen hervorgebrachte mathematische Beweise in den letzten Jahren und Jahrzehnten zunehmend länger geworden – man denke nur an den Beweis der von Pierre de Fermat irgendwann in den Jahren 1637–1643 geäußerten *Großen Vermutung*³ durch Andrew Wiles aus dem Jahr 1995, der in 2 Arbeiten mit zusammen 138 Seiten publiziert ist und den nur wenige Menschen auf der Welt nachvollziehen können.

Man muss sich daher fragen, was es überhaupt heißt, dass ein Mensch einen Beweis nachvollziehen können muss, denn Computer sind beim Ausführen von Routineaufgaben zuverlässiger als Menschen, die müde und unaufmerksam werden und

Flüchtigkeitsfehler machen. Müssen also Menschen etwas denken können, damit es wahr sein – und deswegen auch angewendet werden – kann? In der Diskussion werden wir auf diese Frage nochmals eingehen. 22 Jahre nach dem Beweis des 4-Farben-Theorems wurde die Keplersche Vermutung mit Hilfe von Computern in einer Arbeit bewiesen [19], die ebenfalls einen beträchtlichen Umfang hat (121 Seiten), was wohl auch erklärt, dass zwischen Einreichung und Publikation 7 Jahre vergingen [3]. In den beiden angeführten Beispielen für mathematische Beweise mit der Hilfe des Computers dient dieser dazu, sehr viele (richtige und falsche) Lösungen zu berechnen und aufgrund der Ergebnisse dann deren Zahl systematisch einzuschränken und einen Weg zur richtigen Lösung zu finden. Computer sind also in der Tat schnelle „Rechenknechte“, wohingegen die Intuition beim Mathematiker liegt.

Anders verhält es sich, wenn man neuronale Netzwerke so einsetzt, dass sie mathematische Vermutungen widerlegen, ohne die Probleme wirklich zu kennen. Adam Wagner von der Universität Tel Aviv, Israel, programmierte ein neuronales Netz, um zufällige Beispiele für lange bestehende Vermutungen in der Graphentheorie zu erzeugen, einem Bereich der Mathematik, der sich mit der Untersuchung von Objekten aus Knotenpunkten und Verbindungen befasst [40]. Mathematiker hielten diese Vermutungen für wahr, konnten sie aber nicht beweisen. „Für jede Vermutung entwickelte Wagner ein Maß dafür, wie nahe ein Beispiel an der Widerlegung der Vermutung war. Wenn zum Beispiel eine Vermutung besagt, dass ein bestimmtes Problem nicht in weniger als 5 Schritten gelöst werden kann, wäre ein Beispiel mit 6 Schritten näher an der Widerlegung als eines mit 7, und eine Lösung mit 4 Schritten würde als Gegenbeispiel für die Vermutung dienen [und sie damit falsifizieren]“, beschreibt Matthew Sparkes [32] in einer zusammenfassenden Darstellung die Untersuchungen Wagners.

Das neuronale Netz erstellte erst Zufallsbeispiele und bewertete anhand dieser Maße ihre Eignung als Gegenbeispiel. Die KI verwarf die am schlechtesten bewerteten Beispiele und ersetzte sie dann durch weitere Zufallsbeispiele. Dann begann sie erneut mit der Bewertung. In Dutzenden

von Fällen war die KI nicht in der Lage, ein Beispiel zu finden, das die Theorie widerlegte, aber in 5 Fällen fand sie eine Lösung, die nachwies, dass die Vermutung falsch war. „Wir verwerfen einfach die schlechten Beispiele und lernen bei jeder Iteration von den besten Beispielen“, wird Wagner von Sparkes zitiert. Wagners Netzwerk lief auf seinem 5 Jahre alten Laptop und brauchte zwischen ein paar Stunden und ein paar Tagen, um jede der 5 Vermutungen zu widerlegen. Die Ergebnisse waren oft kontraintuitiv, und Wagner wird mit dem Satz zitiert: „Auf diese Konstruktionen wäre ich selbst dann nicht gekommen, wenn man mir Hunderte von Jahren Zeit gegeben hätte“ [32]. Das Netzwerk ist also besser als Menschen, wenn es um das Auffinden von Gegenbeispielen für Theoreme geht, also gleichsam darum, die Nadel(n) in einem großen mathematischen Heuhaufen zu finden. Obwohl es in diesem Fall schon schwerer fällt, kann man hier noch immer vom „dummen schnellen Rechnen“ (dem Testen einer riesigen Menge möglicher Lösungen) reden, dass der Computer besser kann als der Mensch.

Viel schwieriger ist der Zweifel an den Fähigkeiten des Computers jedoch dann, wenn er den Part der Intuition übernimmt, also einen Beweis findet und damit kreative Kopfarbeit leistet [37]. Eine am 1. Dezember im Fachblatt *Nature* online von Autoren der Firma *DeepMind* publizierte Arbeit zeigt an 2 Fällen, dass künstliche neuronale Netzwerke menschlichen Mathematikern Hinweise zur Entwicklung von Theoremen geben können [14]. „Diese Arbeit hat zu einer Vermutung auf dem Gebiet der Topologie und der Darstellungstheorie und zu einem bewiesenen Theorem über die Struktur von Knoten geführt“, stellt ein im Fachblatt *New Scientist* publizierter weiterer Kommentar von Matthew Sparkes [30] mit dem Titel „DeepMind KI arbeitet mit Menschen bei 2 mathematischen Entdeckungen [orig. Durchbrüchen] zusammen“ lapidar fest. Neuronale Netze wurden in diesem Fall mit mathematischen Konstrukten gefüttert, um in diesen Strukturen bzw. Mustern zu erkennen. Wie sich zeigte wurden hierdurch sowohl bekannte als auch neue Muster gefunden. Aufgrund dieser neuen Muster wiederum waren (menschliche) Mathematiker in der Lage, 2 neue Entdeckungen zu machen.

2 „Many mathematicians, particularly those educated before the development of high-speed computers, resist treating the computer as a standard mathematical tool. [...] If many mathematicians are disturbed by long proofs, it may be because until quite recently they only employed the kind of methods that produce short proofs. [...] Our proof of the four-color theorem suggests that there are limits to what can be achieved in mathematics by theoretical methods alone. [...] it also implies that in the past the need for computational methods in mathematical proofs has been underestimated.“

3 Die Vermutung lautet: Die Formel $a^n + b^n = c^n$ mit positiven ganzen Zahlen a, b, c, n hat nur Lösungen für $n = 1$ und $n = 2$.

Im ersten Fall ging es um *Knotentheorie*⁴, die sich mit Knoten befasst, wie sie in Seilen vorkommen (allerdings sind bei diesen Modellen die beiden Enden miteinander verbunden). Diese Theorie hat sowohl algebraische als auch geometrische Komponenten. Um ein neues Theorem über die Verbindung zwischen algebraischen und geometrischen Invarianten von Knoten zu erstellen, suchten neuronale Netzwerke nach Korrelationen zwischen ihnen, „und zwar sowohl nach einfachen Korrelationen als auch nach komplexen, subtilen bzw. kontraintuitiven. Die interessantesten dieser Hinweise wurden an menschliche Mathematiker zur Analyse und Verfeinerung weitergegeben. Einige davon erwiesen sich als bereits etablierte Mathematik, während andere völlig neu waren“ [31]. Auf diese Weise kam ein neues Theorem und dessen Beweis heraus. „Wir hatten nicht erwartet, dass es eine so eindeutige Beziehung zwischen diesen algebraischen und geometrischen Größen gibt, deshalb war ich sehr, sehr überrascht,“ zitiert Sparkes einen der beteiligten Autoren. Das zweite in der Arbeit beschriebene Beispiel zur KI-gestützten Beweisfindung stammt von Geordie Williamson von der Universität Sydney. Hierbei ging es um die Entdeckung einer Vermutung in der *Darstellungstheorie*⁵, die noch nicht bewiesen ist, aber mehr als

3 Millionen Beispiele erfolgreich überstanden hat. Die Autoren bemerken hierzu: „Dieser Fall zeigt, wie nicht triviale Erkenntnisse über das Verhalten großer mathematischer Objekte aus trainierten Modellen gewonnen werden können, sodass neue Strukturen entdeckt werden können“ [14].⁶

Halten wir fest: Computer, auf denen lernende simulierte neuronale Netzwerke laufen, wurden dazu genutzt, die mathematische Intuition von (in dieser Hinsicht begrenzten menschlichen) Mathematikern zu erweitern, ganz ähnlich wie vor 5 Jahren die Intuition menschlicher Go-Spieler um mögliche Spielzüge erweitert wurde, auf die menschliche Spieler faktisch in 3 Jahrtausenden nicht gekommen sind und theoretisch (aufgrund der Begrenztheit des menschlichen Geistes) wahrscheinlich nie gekommen wären. Für die Mathematik folgt unausweichlich: „Zukünftige Computer könnten die Mathematik an Orte bringen, die zu komplex sind, um ihnen mit unserem Gehirn zu folgen“, wie es im *New Scientist* schon 2015 formuliert wurde [3].

Molekularbiologie

Das menschliche Genom enthält den Code für die Produktion von mehr als 20 000 Proteinen, d. h. aus Aminosäuren gebildete Eiweißkörper. Dieser Code legt die Reihenfolge der Aminosäuren und deren Anzahl fest, denn Proteine sind nichts als Ketten von Aminosäuren, die auf bestimmte Art zusammengeknäuel – man sagt: „gefaltet“ – sind. Die Form, die bei der Faltung entsteht, hängt von den Aminosäuren und deren Reihenfolge ab und entsteht meist innerhalb weniger Millisekunden nachdem das Protein an den Ribosomen entstanden ist. Diese Form wiederum – man spricht von der räumlichen (3D-)Struktur – bestimmt die Funktion des Proteins. Durch zeitraubende Experimente wurden in den vergangenen 5 Jahrzehnten gut 180 000 Proteine im Hinblick auf ihre Struktur aufgeklärt, darunter etwa ein Drittel der Proteine im menschlichen Körper [4, 5]. Vor mehr als 50 Jahren wurde bereits vorgeschlagen,

diese Struktur aus der Abfolge der Aminosäuren zu berechnen. Zugleich war damals aber auch bekannt, dass diese Aufgabe sogar für kleine Proteine von nur 150 Aminosäuren unmöglich praktisch zu bewältigen war, weil die Möglichkeiten von dessen Faltung bei 2^{151} liegt (entspricht etwa $1,4 \times 10^{45}$), wenn man von 4 möglichen Aminosäuren an jeder Stelle des Proteins ausgeht. Seit einigen Jahren wurde daher von der genannten Firma *DeepMind* ein neuronales Netzwerk – genannt *AlphaFold* – trainiert, die Struktur eines Proteins aus der Reihenfolge von dessen Aminosäuren vorherzusagen.⁷ Ich verwende hier ganz bewusst den Terminus „vorhersagen“ und nicht „berechnen“, weil es wie beim Brettspiel Go, schlichtweg zu viele Möglichkeiten gibt, als dass sie sich mittels eines Algorithmus berechnen ließen [35]. Aber Zusammenhänge in Milliarden bestehender Strukturen zu erkennen und daraus dann erfolgreiche Vorhersagen zu machen, das war – wie beim genannten Brettspiel durch die KI *AlphaGo* – durchaus möglich. Im Jahr 2020 sagte *AlphaFold* im Rahmen eines Wettbewerbs die Struktur von 25 von 43 menschlichen Proteinen erfolgreich vorher [4]. Die Abweichung der Vorhersage vom gemessenen Wert betrug dabei bis zu 6,6 Ångström (Å)⁸ [28]. Im Sommer des Jahres 2021 geschah dann mit *AlphaFold2* – einer neueren Version dieser Software – der Durchbruch: Die Wissenschaftler von *DeepMind* publizierten im gleichen Heft vom 26. August des Fachblatts *Nature* gleich 2 Arbeiten zur Vorhersage der räumlichen Struktur von Proteinen mit erstens einer Genauigkeit, die derjenigen von Experimenten gleichkam (deren Ergebnisse ebenfalls Schwankungen von etwa 1,5 Å unterliegen [22]) und zweitens zur Struktur von 23 391 menschlichen Proteinen, was 98,5% der bekannten, beim Menschen vorkommenden Proteine entspricht [39].

Im Gegensatz zu früheren Netzwerken einschließlich des Vorgängers *AlphaFold* ver-

- 4 Die *Knotentheorie* ist ein Forschungsgebiet innerhalb der *Topologie* (die wiederum aus Geometrie und Mengenlehre hervorging). Bei ihr geht es keineswegs nur um Knoten in Seilen (wie diese geknüpft werden, sagt die *Knotenkunde*), sondern ganz allgemein um Strukturen wie z. B. in Räumen eingebettete Kreislinien. Sie hat Anwendungen in der Mathematik (z. B. in der nicht euklidischen Geometrie), Physik (der Quantenfeldtheorie) und mittlerweile auch in der Molekularbiologie beim Problem der Proteinfaltung.
- 5 Bei der *Darstellungstheorie* werden Elemente von Gruppen oder allgemeiner von Algebren mittels Homomorphismen auf lineare Abbildungen von Vektorräumen (Matrizen) abgebildet. Es geht also um homomorphe Abbildungen von Abbildungen (*homomorph* bedeutet, dass die Elemente aus der einen Menge so in die andere Menge abgebildet werden, dass sich ihre Bilder dort hinsichtlich der Struktur ebenso verhalten wie deren Urbilder in der Ausgangsmenge). Angewendet wird die *Darstellungstheorie* in fast allen Gebieten der Mathematik, so beispielsweise beim angeführten Beweis des Großen Satzes von Fermat durch Andrew Wiles. In der Physik wurde mittels der *Darstellungstheorie* die Existenz von Quarks postuliert.

- 6 „This case demonstrates how non-trivial insights about the behaviour of large mathematical objects can be obtained from trained models, such that new structure can be discovered.“

- 7 Zum Training dienten – vergleichsweise wenig (eben nur die erwähnten 180 000) – Daten zur Aminosäurereihenfolge und zur 3D-Struktur diesbezüglich bekannter Proteine.
- 8 Zum Vergleich: Ein Wasserstoffatom hat einen Durchmesser von etwa 0,5 Å, bei einem Kohlenstoffatom beträgt der Durchmesser 1,4 Å.

wendete *AlphaFold2* nicht nur lokale nahe Wechselwirkungen zwischen Atomen und Molekülen zu seiner Vorhersage, sondern auch entfernt liegende. Dies ging – selbst mit den Ressourcen von Google – nicht mehr „rein rechnerisch“ (d. h. durch noch mehr simulierte Neuronen, Verbindungen und Synapsengewichte), sondern dadurch, dass man grundlegende Prinzipien der Geometrie mittels entsprechender Algorithmen in die Software einbaute. So gilt für jegliche 3 Atome in einem Eiweißmolekül beispielsweise, dass die Summe der Längen zweier beliebiger Seiten des durch deren Koordinaten definierten Dreiecks größer oder gleich sein muss wie die Länge der verbleibenden Seite. Diese Operation wird etwa 200-mal wiederholt, um die Struktur des Proteins zu verfeinern [5]. Die Firma *DeepMind* ließ sich zudem nicht lumpen und stellte die mit *AlphaFold2* erzielten Ergebnisse kostenlos für die Allgemeinheit zur Verfügung: „Wir stellen unsere Vorhersagen der Gemeinschaft frei zur Verfügung⁹ und gehen davon aus, dass die routinemäßige Vorhersage von Strukturen in großem Maßstab und mit hoher Genauigkeit zu einem wichtigen Instrument wird, mit dem sich neue Fragen beantworten lassen“, bemerken die Autoren hierzu ebenso lapidar wie bescheiden [39], wenn man bedenkt, dass es hier um nichts Geringeres als um eine Revolution bei der Entwicklung künftiger Arzneimittel (oft in Form kleinerer Moleküle, die sich an bestimmte 3-dimensionale Strukturen von Proteinen anlagern, um zu wirken) geht.

Im Lichte dieser Tatsachen wundert es nicht, dass die Aufklärung von Proteinstrukturen durch KI vom Fachblatt *Science* als „Durchbruch des Jahres 2021“ gefeiert wurde [43]. „The breakthrough in protein folding is one of the greatest ever in terms of both the scientific achievement and the enabling of future research“, kommentiert dies dessen Chef-Herausgeber, Holden Thorp [44], in einem Begleit-Editorial.

9 Dies scheint in diesem Feld die Regel zu werden, endete doch auch durch eine andere Arbeitsgruppe eine ähnliche, am 15.6.2021 (dem gleichen Tag, an dem *AlphaFold2* in *Nature* publiziert wurde) im Fachblatt *Science* publizierte Arbeit mit „We make the method available to the scientific community to speed biological research“ [7].

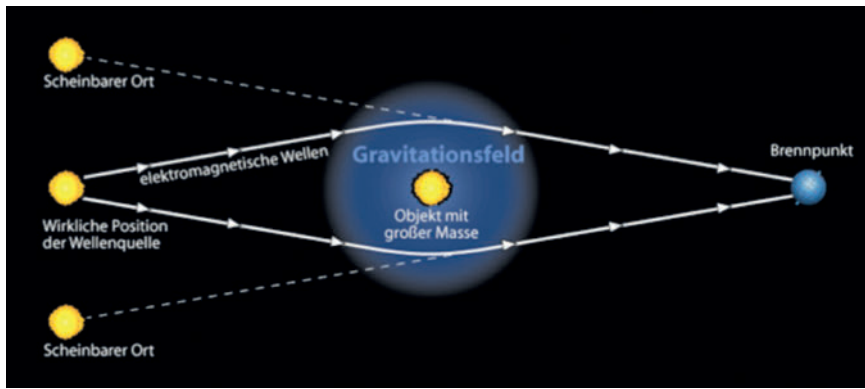
Astronomie

Auch in der Astronomie gibt es riesige Datenmengen, die aufgrund der zunehmenden Anzahl und Auflösung neuer Teleskope künftig noch größer werden. Um dieser Datenflut Herr zu werden, kann man zur Klassifikation von Galaxien (in haufenförmige, elliptische oder linsenförmige Nebel sowie Spiralnebel) KI verwenden. Hierzu werden neuronale Netzwerke zunächst mit Bildern von Galaxien und den Ergebnissen der Einteilung durch Astronomen trainiert. Sie können nach dem Training dann solche Bilder etwa so gut einteilen wie Astronomen. Dies bedeutet auch, dass sich die Netzwerke manchmal irren, weil dies für Astronomen auch gilt: Wenn die Netzwerke mit Fehlern trainiert werden, machen sie diese Fehler dann eben auch. Seit den 1990er-Jahren hatten Astronomen aufgrund der Aufnahmen des Weltraumteleskops „*Hubble*“ die Zahl der Galaxien im beobachtbaren Universum auf etwa 100 Milliarden abgeschätzt. Seither haben britische Forscher diese Beobachtungsdaten um mathematische Modelle des Universums erweitert und kamen zu dem Schluss, dass 90 % aller Galaxien mit den heutigen Teleskopen nicht beobachtet werden können, weswegen die tatsächliche Anzahl der Galaxien im Universum in der Größenordnung von einer Billion (10^{12}) liegen muss [13]. Wer soll sich die alle ansehen? Oder anders ausgedrückt: Wir können mittlerweile zwar Bilder von 10 % des Universums machen, bessere Teleskope werden diesen Anteil weiter steigern, aber alle Astronomen dieser Welt reichen bei weitem nicht aus, um diese Informationen auszuwerten.

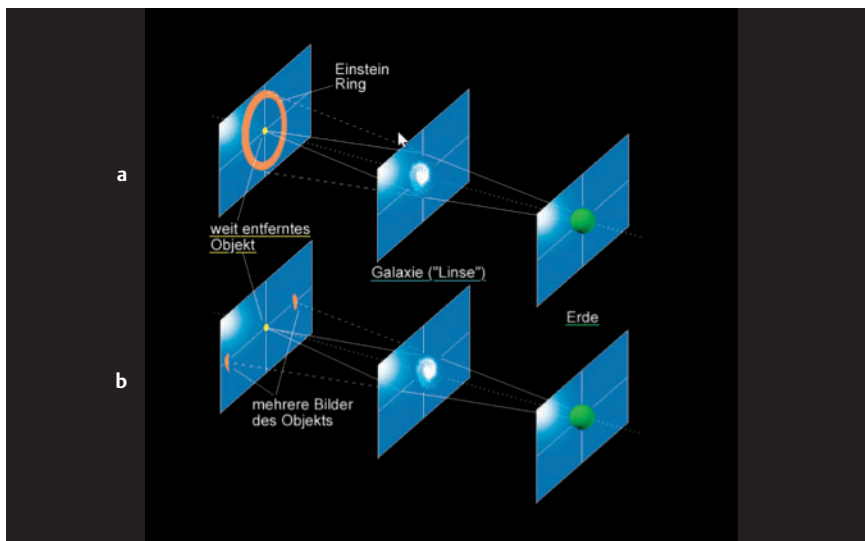
„Der große Vorteil der neuronalen Netze ist die Geschwindigkeit“, erläutert hierzu der australische Astronom Cavanagh den Grundgedanken des Einsatzes von KI in der Astronomie. „Galaxien auf astronomischen Aufnahmen, deren Klassifizierung durch Menschen sonst Monate gedauert hätte, können stattdessen in nur wenigen Minuten klassifiziert werden. Mit nur einer Standard-Grafikkarte können wir 14 000 Galaxien in weniger als 3 Sekunden klassifizieren. [...] Diese neuronalen Netze sind nicht unbedingt besser als Menschen, weil sie von Menschen trainiert werden, aber sie kommen mit einer Genauigkeit von mehr als 80 % und bis zu 97 % bei der Unterscheidung zwischen elliptischen und

spiralförmigen Galaxien [den Astronomen] schon recht nahe“ [3]. Mittels maschinellen Lernens konnten Astronomen bereits sehr viele Galaxien in verschiedenen Entfernungen (d. h. Rotverschiebungen) von der Erde klassifizieren und mit Hilfe dieser Daten dann beispielsweise untersuchen, wie sich Galaxien im Laufe der Geschichte des Universums verändert haben und warum sie nur in bestimmten Umgebungen entstanden sind [20]. Man hat durch solche KI-gestützten Einteilungen tatsächlich Entdeckungen gemacht, auf die man durch bloßes Betrachten der Bilder nicht gekommen wäre (ähnlich wie bei den vor 5 Jahren durch neuronale Netzwerke gefundenen neuen Go-Spielzügen, auf die 3000 Jahre Go-spielende Menschen nicht gekommen waren). „Dieses Ergebnis impliziert, dass neuronale Netze in der Lage waren, automatisch Spuren von Entwicklungsphasen von Galaxien in den Daten zu finden, die für Astronomen nicht erkennbar waren. Deep-Learning-Techniken sind also nicht nur ein schnellerer Weg, um das zu tun, was wir bereits wussten, sondern auch ein leistungsfähiges Werkzeug, um Astronomen bei der Analyse der Daten und der Suche nach versteckten Korrelationen zu unterstützen“ [20].

Ein weiteres Beispiel in der Astronomie hat Wurzeln, die gut 100 Jahre in die Geschichte dieser Wissenschaft zurückreichen und betrifft die Auswirkung der Schwerkraft auf die Ausbreitung des Lichts. Analog zur Ablenkung von Lichtstrahlen an optischen Linsen zwischen Objekt und Betrachter kann Licht gemäß der *allgemeinen Relativitätstheorie* Einsteins auch von den Gravitationsfeldern großer Massen (Sterne oder Sternhaufen) abgelenkt werden (► **Abb. 2**). Vor gut 100 Jahren wurde diese Vorhersage der Einsteinschen Theorie im Rahmen ihrer ersten, gezielten experimentellen Überprüfung durch den britischen Astrophysiker Arthur Eddington empirisch geprüft. Dieser nutzte die Sonnenfinsternis vom 29. Mai 1919 über Südamerika und dem Südatlantik bis nach Westafrika, organisierte eine Expedition auf die Vulkaninsel *Príncipe* vor der westafrikanischen Küste und eine weitere nach Brasilien und wies (mit einem Messfehler von 20 %) nach, dass das am Rand der Sonne vorbei strahlende Licht von einem Stern im Sternhaufen



► **Abb. 2** Ablenkung des Lichts durch ein starkes Gravitationsfeld. Quelle: ©Horst Frank, Wikipedia gemeinfrei



► **Abb. 4** Je nach Lage der Objekte zueinander können von der Erde aus entweder mehrere Objekte zu sehen sein (► **Abb. 4b**) oder – wenn man sich die ► **Abb. 2** als ein Schnittbild durch ein 3-dimensionales Phänomen vorstellt, ein ringförmiges Objekt, das als Einstein-Ring bezeichnet wird (► **Abb. 4a**). Diese sind deswegen so selten, weil sie nur als Bild entstehen, wenn das Objekt präzise hinter der Linse steht. Nur dann erscheinen die Bilder als Ringsegmente um die als Gravitationslinse wirkende Galaxie. Quelle: Wikipedia.com/ Mit freundlicher Genehmigung der NASA

der *Hyaden*¹⁰ tatsächlich, wie von Einstein vorhergesagt, durch die Gravitation um 1,75 Bogensekunden (also etwa den zweitausendsten Teil eines Winkelgrades!), verschoben war.¹¹

In einer kleinen im Fachblatt *Science* publizierten Diskussionsbemerkung (► **Abb. 3**) sagte Einstein zudem voraus, dass es aufgrund dieses Effekts ringförmige „Abbildungen“ von weit entfernten Sternen geben könne, denn je nach Lage von 2 Sternen und der Erde auf genau einer Linie könnte von der Erde aus anstatt des einen realen weit entfernten Sterns nicht nur mehrere Sterne zu sehen sein (► **Abb. 2**), sondern sogar ein Ring (aus dem Licht des weit entfernten Sterns) um das Licht des genau zwischen diesem und der Erde stehenden Sterns – der als *Gravitationslinse* fungiert – herum (► **Abb. 4b**). Wie aus dem in ► **Abb. 3** abgedruckten Text hervorgeht,

VOL. 84, No. 2188
SCIENCE DECEMBER 4, 1936

DISCUSSION

LENS-LIKE ACTION OF A STAR BY THE DEVIATION OF LIGHT IN THE GRAVITATIONAL FIELD

SOME time ago, R. W. Mandl paid me a visit and asked me to publish the results of a little calculation, which I had made at his request. This note complies with his wish.

Of course, there is no hope of observing this phenomenon directly. First, we shall scarcely ever approach closely enough to such a central line. Second, the angle β will defy the resolving power of our instruments.

ALBERT EINSTEIN
INSTITUTE FOR ADVANCED STUDY,
PRINCETON, N. J.

► **Abb. 3** Zusammengestellte Auszüge (Facsimile) aus der von Albert Einstein im Dezember 1936 publizierten Diskussionsbemerkung (Umfang: etwa eine drei Viertel Seite) zur möglichen Existenz von Gravitationslinsen [17]. Wie in der Überschrift zu lesen, diskutierte er den Effekt für „Sterne“, nicht für Galaxien. Er hielt die Wahrscheinlichkeit einer tatsächlichen Beobachtung des Effekts jedoch aus 2 Gründen für „hoffnungslos“, weil (1) die Anzahl der Sterne (in unserer Galaxie; verglichen mit der Anzahl von Galaxien im gesamten Universum) und die Wahrscheinlichkeit der benötigten Konstellation von Stern-Stern-Erde auf genau einer Linie verschwindend gering ist und (2) die Fernrohre damals das zur Abbildung theoretisch notwendige Auflösungsvermögen nicht hergaben. Quelle: Mit freundlicher Genehmigung von Science, The American Association for the Advancement of Science, Washington

hielt Einstein diesen Effekt für nicht beobachtbar. Er hatte in der Erdumlaufbahn operierende Teleskope¹² mit dem Auflösungsvermögen von *Hubble* nicht vorhergesehen. Daher sah er auch nicht die Möglichkeit der Beobachtung des Effekts an Galaxien (statt an Sternen) voraus. Da es von diesen im gesamten Universum mehr gibt als Sterne in

12 Ich verwende hier den Plural, weil es nicht nur *Hubble* gibt, sondern eine größere Anzahl (mehr als 250) von Spionagesatelliten, die auf die Erde gerichtet sind und zunächst vor allem Russland und China im Blick hatten. Sie wurden vor *Hubble* (gestartet im Jahr 1990) in den Jahren 1976 bis 1986 mit verschiedenen Trägerraketen und schließlich (wie auch *Hubble*) mit dem Space Shuttle in die Umlaufbahn gebracht. Bei *Hubble* griff man also auf eine erprobte Technik (u. a. die gleiche Spiegelgröße von 2,4 m Durchmesser) zurück [15].

10 Die Hyaden befinden sich im Sternbild des Stiers.

11 Hierzu ließ man sich Teleskope vom englischen „königlichen“ Astronomen Frank Watson Dyson und schleppte sie auf die Insel westlich von Afrika und um die halbe Welt nach Brasilien – eine wissenschaftliche und logistische Meisterleistung!

der Milchstraße, ist zudem die Wahrscheinlichkeit größer, dass sich 2 Galaxien auf einer Linie mit der Erde befinden als die von 2 Sternen (innerhalb unserer Milchstraße).

Erstmals tatsächlich beobachtet wurde ein solcher Einstein-Ring jedoch erst im Jahr 1987, nicht an 2 Sternen, sondern an 2 Galaxien! Wenn man sich die ► **Abb. 2** als ein Schnittbild durch ein 3-dimensionales Phänomen vorstellt, welchen man sich durch Drehung der Abbildung um eine Achse, die von der wirklichen Position einer weit entfernten Galaxie links zum Brennpunkt des Betrachters auf der Erde rechts verläuft, aus der Bildebene heraus entsteht, so bilden die zu sehenden scheinbaren Orte der Galaxie einen Ring, der als *Einstein-Ring* bezeichnet wird (► **Abb. 4a**). Ein besonders schönes Exemplar ist die am 19.12.2011 vom Hubble-Space-Teleskop der NASA aufgenommene Fotografie einer hufeisenförmigen Galaxie (also ein fast geschlossener Ring) weit hinter einer rötlich schimmernden Galaxie, die sich ziemlich genau zwischen der Galaxie und der Erde befindet (► **Abb. 5**). Mittlerweile kennt man einige Einstein-Ringe, die mehr oder weniger vollständig sind.

Starke Gravitationslinsen wie LRG3-757 sind mehr als nur Kuriositäten am Nachthimmel. Durch ihre genaue Beobachtung und Vermessung ihre vielfältigen Eigenschaften können vielmehr grundlegende Fragen bzw. Probleme der Astronomie mit neuer Methodik angegangen werden. Mit Gravitationslinsen und Einstein-Ringen konnte beispielsweise erstmals nachgewiesen werden, dass die Relativitätstheorie auch außerhalb unserer Milchstraße gilt [12]. Zudem konnte die Hubble-Konstante (ein Maß für die Rotverschiebung und damit die Ausbreitung des Universums) an ihnen mit bislang unerreichter Genauigkeit gemessen werden [21]. Weiterhin können Entfernungen im Universum genauer gemessen und unsichtbare Massenkonzentrationen („dunkle Materie“, „schwarze Löcher“) gefunden werden. Es ist daher wichtig, mehr Einstein-Ringe zu finden, was gar nicht so einfach ist. Sie sind zwar für einen Menschen leicht zu erkennen, für herkömmliche Computer jedoch nur schwer. Hier kamen erneut neuronale Netzwerke zum Tragen, die trainiert wurden, Gravitationslinsen und Einstein-Ringe in den Auf-



► **Abb. 5** Das unten zu sehende blaue Hufeisen um den rötlichen zentralen Sternhaufen LRG3-757 ist eines der besten Beispiele für einen Einstein-Ring. Die Gravitation der leuchtenden roten Galaxie (luminous red galaxy: LRG) verzerrt das Licht einer viel weiter entfernten blauen Galaxie direkt dahinter. Quelle: Wikipedia.com/ Mit freundlicher Genehmigung der NASA

nahmen des Hubble-Teleskops zu finden [45–47].

Corona in Griechenland

Nach den Anwendungsbeispielen für neuronale Netzwerke als KI auf Daten aus der Steinzeit, der Mathematik, dem kleinsten (Moleküle) und dem größten (Galaxien) sei zum Abschluss eine Anwendung bei (mittelgroßen) Menschen aus der Gegenwart diskutiert, die im November 2021 im Fachblatt *Nature* publiziert wurde [8]. „Stellen Sie sich einen Grenzkontrollbeamten auf einer griechischen Insel vor. Ein Flugzeug ist gerade gelandet, und der Beamte hat die Aufgabe, alle Personen mit COVID-19 zu identifizieren und in Quarantäne zu schicken. Der Beamte würde gerne alle ankommenden Passagiere testen, aber die Testkapazitäten auf der Insel sind sehr begrenzt, und generell ist es nie möglich, 100 % der Bevölkerung jederzeit zu testen“, beschreibt ein Kommentator im Fachblatt *Nature* das Problem an sehr vielen internationalen Grenzen, das sich seit der ersten Welle der Co-

rona-Pandemie täglich stellt [27].¹³ Die Lösung, alle Grenzen des Landes komplett zu schließen, möchte man in einer stark vom Tourismus abhängigen Gesellschaft nicht implementieren, denn sie würde den Verlust von Arbeitsplätzen und Einkommen für viele Menschen bedeuten. Der Grenzbeamte steht also vor einer schwierigen Entscheidung: Wer soll getestet werden? Hier ist es nützlich zu wissen, dass alle Passagiere des Flugzeugs die Passenger Locator Form 24 Stunden vor der Anreise digital ausgefüllt haben müssen, wo nicht nur Name und Adresse (und damit Herkunftsland), sondern auch Alter und Geschlecht, weitere Länder der Durchreise, die Anzahl der Mitreisenden (Familie oder Freunde/Bekannte), das Transportmittel und die Art der Unterbringung (Hotel/privat etc.) sowie medizinische Vorerkrankungen registriert sind.

Mit Hilfe dieser Informationen kann man nun versuchen, schon vor dem Testen

13 Die Autoren stellen fest, dass im Sommer während der Hochsaison weniger als 20 % der ankommenden Reisenden getestet werden können. Aus diesem Grund hat der griechische nationale COVID-19-Fachausschuss auch Gruppentests genehmigt, um deren Effizienz zu steigern [8].

Menschen zu identifizieren, bei denen der Test mit höherer Wahrscheinlichkeit positiv ausfällt. Dies ist deswegen von Bedeutung, weil nur ein positiver Test eine praktische Konsequenz hat. Die einfache Verwendung von entsprechenden Vorerfahrungen (z. B. „ältere Leute aus dem Land XY, die mit Bekannten einreisen, sind eher betroffen“) reicht inmitten einer sich dynamisch entwickelnden Pandemie jedoch nicht aus, um dieses Ziel zu erreichen, weil die Datenlage komplex ist und sich ständig ändert. Und genau hier kommen neuronale Netzwerke ins Spiel. Diese müssen 2 Ziele zugleich verfolgen, nämlich erstens solche ankommenden Passagiere testen, bei denen ein positiver Test vergleichsweise wahrscheinlicher ist. Sie tun dies, indem sie nach Mustern in den Daten aus den Einreiseformularen suchen, die mit positiven Tests einhergehen. Das zweite Ziel besteht darin, das Wissen über Passagiere, über deren Risiko man bislang wenig weiß, ständig zu vergrößern, um auf diese Weise längerfristig Personen mit wahrscheinlicheren positiven Tests immer besser zu finden. Um beide Ziele zu verfolgen, muss man zum einen die Menschen testen, bei denen das neuronale Netz zum gegebenen Zeitpunkt ein erhöhtes Risiko vorhersagt und zum zweiten einen bestimmten Anteil von Menschen mit hoher Ungewissheit auswählen und ebenfalls testen, um weiter lernen zu können. Das Ganze musste dann mit der europäischen Datenschutzgrundverordnung (DSGVO) kompatibel sein – ebenfalls keine leichte Aufgabe. Das Ergebnis der Studie kann sich sehen lassen, denn das System verdoppelte die Effizienz der Tests, d. h. die Anzahl der pro Test entdeckten positiven Fälle und damit die Zahl der asymptomatischen Passagiere, die sich in Quarantäne begeben mussten.

Wie gut die Strategie funktionierte, kann man daran ermesen, dass Bastani und Mitarbeiter Änderungen der Prävalenz von COVID-19 von Menschen aus bestimmten Ländern bis zu 9 Tage früher entdeckten als dies mit epidemiologischen Daten aus dem betreffenden Land möglich gewesen wäre. Die abschließende Beurteilung der Studie im begleitenden Kommentar sei dem Leser nicht vorenthalten: „Die Arbeit von Bastani und Mitarbeitern wird als eines der besten Beispiele für die Nutzung von Daten im Kampf gegen COVID-19 in Erinnerung bleiben. Sie stellt eine fesselnde Geschichte

darüber dar, wie eine Gruppe von Wissenschaftlern in Zusammenarbeit mit aufgeklärten politischen Entscheidungsträgern ein Instrument mit hohem gesellschaftlichem Wert entwickelt hat. Sie verdeutlicht die besten Seiten sowohl der akademischen Forschung als auch des öffentlichen Dienstes und zeigt, wie vielversprechend der Einsatz von KI ist, wenn es darum geht, gute Entscheidungen zu treffen – die in vielen Fällen den Unterschied zwischen Leben und Tod ausmachen können“ [27].¹⁴ Man könnte sogar so weit gehen und behaupten, dass der Erfolg der von Bastani und Mitarbeitern entwickelten KI die Unzulänglichkeiten der Grenzkontrollen zur Verhinderung der Ausbreitung von COVID-19 in fast allen anderen Ländern verdeutlicht.

Diskussion

Neuronale Netzwerke können die geistigen Leistungen der Mustererkennung in großen komplexen Daten mitunter besser vollbringen als Menschen, wie im Jahr 2016 anhand des Brettspiels Go erstmals klar wurde. Mittlerweile liegen sehr viele Anwendungen dieses Verfahrens in den unterschiedlichsten Bereichen, auch außerhalb der Wissenschaft vor, die nahelegen, dass Entscheidungen in unserer heutigen Gesellschaft mitunter besser ausfallen, wenn man sie auf den „aggregierten Erfahrungen einer künstlichen Intelligenz“ basiert. Da weltweit immer mehr und immer komplexere Strukturen in den verschiedensten Datenbanken archiviert werden, wird die automatisierte Informationsverarbeitung durch neuronale Netzwerke weiter voranschreiten.

Wie gezeigt wurde, kann KI in der Archäologie noch den Überblick behalten, während ein einzelner Mensch durch die große Anzahl von Funden längst überfordert ist.

14 „Bastani and colleagues' work will be remembered as one of the best examples of using data in the fight against COVID-19. It is a compelling story of how a group of researchers partnered with enlightened policymakers to produce a tool that has enormous social value. It highlights the best parts of both academic research and the civil service, and shows the great promise of artificial intelligence for making good decisions – which in many settings can be the difference between life and death.“

Sogar im Bereich der Mathematik können neuronale Netzwerke Strukturen in Strukturen finden, die Mathematikern (wiederrum aufgrund ihrer Anzahl und Komplexität) verborgen bleiben, die jedoch – nachdem sie von KI gefunden wurden – von (menschlichen) Mathematikern systematisiert werden können. „Unsere Fallstudien zeigen, wie ein grundlegender Zusammenhang in einem gut untersuchten und mathematisch interessanten Bereich unbemerkt bleiben kann und wie der Rahmen es Mathematikern ermöglicht, das Verhalten von Objekten besser zu verstehen, die zu groß sind, als dass sie auf andere Weise Muster darin beobachten könnten. Die Nützlichkeit dieses Rahmens ist begrenzt – er erfordert die Fähigkeit, große Datensätze von Objektdarstellungen zu generieren, und die Muster müssen in berechenbaren Beispielen erkennbar sein. Darüber hinaus können in einigen Bereichen die interessierenden Funktionen in diesem Paradigma schwer zu erlernen sein. Wir glauben jedoch, dass es viele Bereiche gibt, die von unserer Methodik profitieren könnten. Ganz allgemein hoffen wir, dass dieser Rahmen ein effektiver Mechanismus ist, der die Einführung des maschinellen Lernens in die Arbeit von Mathematikern ermöglicht und die weitere Zusammenarbeit zwischen den beiden Bereichen fördert“¹⁵ schreiben Davies und Mitarbeiter am Ende ihres auf der „Intuition“ von KI basierenden Beweises [14].

15 „Our case studies demonstrate how a foundational connection in a well-studied and mathematically interesting area can go unnoticed, and how the framework allows mathematicians to better understand the behaviour of objects that are too large for them to otherwise observe patterns in. There are limitations to where this framework will be useful—it requires the ability to generate large datasets of the representations of objects and for the patterns to be detectable in examples that are calculable. Further, in some domains the functions of interest may be difficult to learn in this paradigm. However, we believe there are many areas that could benefit from our methodology. More broadly, it is our hope that this framework is an effective mechanism to allow for the introduction of machine learning into mathematicians' work, and encourage further collaboration between the two fields.“

In der Molekularbiologie kann KI Probleme lösen, die rein rechnerisch – ebenso wie die richtigen Züge beim Brettspiel Go – gar nicht zu lösen sind. Experimentelle Lösungen der Faltung von Proteinen werden zwar seit Jahrzehnten hervorgebracht, wenn es jedoch um die Struktur *aller* etwa 300 Millionen (3×10^8) bekannten Proteine geht, müssen Menschen scheitern. Man schätzt, dass die KI namens *AlphaFold2* im ersten halben Jahr ihrer Existenz, d. h. bis zum Ende des Jahres 2021, knapp die Hälfte dieser Arbeit erledigt haben wird, sagt Sameer Velankar, Struktur-Bioinformatiker am Europäischen Institut für Bioinformatik (European Bioinformatics Institute, EBI) voraus [9]. Dann wäre die Kapazität der KI zur Proteinfaltung innerhalb von 1,5 Jahren von 25 Lösungen (aus 43 im Jahr 2020 [28]) über 350 000 im Sommer 2021 [30] und auf über 100 Millionen Lösungen Ende 2021 angestiegen – mit zugleich stattgehabten Anstieg der Genauigkeit auf einen Atomdurchmesser!

Diese Leistung im Kleinsten wird möglicherweise nur noch getoppt vom Größten, was es in der Wissenschaft bzw. im bekannten Universum gibt: eine Billion (10^{12}) Galaxien. Sie alle überhaupt nur anzusehen, ihre Koordinaten festzuhalten und sie im Hinblick auf ihre Form zu klassifizieren ist eine Aufgabe, welche die gesamte Menschheit nicht leisten könnte, auch wenn sie sich von jetzt an mit nichts anderem mehr beschäftigen würde. Gerade weil in der Astronomie sehr große Datenmengen anfallen, wird KI in diesem Fachgebiet eine immer größere Rolle spielen, um diese Daten zu sichten und auszuwerten [11, 20, 29]. Das Beispiel der COVID-19-Grenzkontrollen in Griechenland zeigt – last but not least – wie KI im ganz normalen Alltag helfen kann, einen wichtigen Job doppelt so gut zu machen wie es ohne KI mit gleichem Aufwand möglich wäre.

KI kann weit mehr als nur Rechnen und das, was sie macht, lässt sich unter anderem mit dem Wort „Intuition“ beschreiben, denn wenn uns etwas „intuitiv“ einfällt, dann wissen wir ja auch nicht, wie wir darauf gekommen sind. Bei den Netzwerken wissen nicht nur sie es nicht, sondern wir auch nicht, und genau darin steckt natürlich ein Problem: In einem rationalen Diskurs kann die Antwort auf die Frage nach der Recht-

fertigung einer Behauptung niemals lauten: „Ich weiß auch nicht, aber meine Intuition sagt mir das.“ Genau dies scheint jedoch nun im Hinblick auf die Intuition von Maschinen tatsächlich immer häufiger von uns verlangt zu werden. Schon im Jahr 2016 war im Fachblatt *Nature* in einem Kommentar zum Gewinn beim Go-Spiel durch eine KI zu lesen, dass wir daran glauben müssen, was die lernenden Maschinen uns sagen, etwa so wie man in der Antike an ein Orakel geglaubt hat [48]. Wie die hier angeführten Beispiele zeigen, ist diese Gefahr kleiner als zunächst gedacht, denn in den genannten Fällen kam das Netzwerk zwar „intuitiv“ auf einen Zusammenhang. Dessen rationaler Nachvollzug bzw. rationale Rekonstruktion war jedoch Sache der Menschen: Ob im Falle steinzeitlicher Werkzeugkästen, mathematischer Beweise, gefalteten Proteinen, Galaxien, Corona-Infizierten – immer überprüften Menschen die Hinweise der KI.

Schließlich kann man noch fragen, warum die KI beim Proteinfalten nicht auf den Dreieckssatz gekommen ist, wo sie doch viel kompliziertere Zusammenhänge tatsächlich gefunden hat. Die Antwort ist einfach: Sie hat eben nicht mit 3 Atomen angefangen zu lernen und dann mit ein paar mehr weitergemacht usw., sondern nur komplizierteste Strukturen aus Tausenden von Atomen als zu lernender Input erhalten. Hätte sie erst Einfaches und dann Komplexes gelernt oder (was auf das gleiche hinausläuft) erst (aufgrund ihrer eigenen Einfachheit und Beschränktheit) nur Einfaches verarbeiten können und erst später zunehmend Komplexes, dann hätte sie – recht früh in ihrer Lerngeschichte – allgemeine Eigenschaften von Dreiecken auch gelernt [49].

Interessenkonflikt

Es liegt kein Interessenkonflikt vor.

Korrespondenzadresse

Prof. Dr. Dr. Manfred Spitzer
Universität Ulm
Abteilung für Psychiatrie
Leimgrubenweg 12–14
89075 Ulm, Deutschland

Literatur

- [1] Albers D. Polite applause for a proof of one of the great conjectures of mathematics: What is a proof today? *Two-Year Coll. Math J* 1981; 12(2): 82
- [2] Appel K, Haken W. The solution of the four-color-map problem. *Scientific American* 1977; 237(4): 108–121
- [3] Aron J. Our number's up: Machines will do maths we'll never understand. *New Scientist* 3036, 29.8.2015 www.newscientist.com/article/dn28065-our-numbers-up-machines-will-do-maths-well-never-understand/; abgerufen am 5.12.2021
- [4] AlQuraishi M. Structure prediction gets real. *Nature* 2020; 577: 627–628
- [5] AlQuraishi M. Protein-structure prediction revolutionized. *Nature* 2021; 596: 487–488
- [6] Anonymus. Machine-learning algorithm revolutionises the classification of galaxies. *Information News Network* 8. Juli 2021 www.innovationnewsnetwork.com/machine-learning-algorithm-revolutionises-the-classification-of-galaxies/13104/; abgerufen am 21.11.2021
- [7] Baek M, DiMaio F, Anishchenko I, et al. Accurate prediction of protein structures and interactions using a three-track neural network. *Science* 2021; 373: 871–876
- [8] Bastani H, Drakopoulos K, Gupta V, et al. Efficient and targeted COVID-19 border testing via reinforcement learning. *Nature* 2021; 599: 108–113
- [9] Callaway E. DeepMind's AI for protein structure is coming to the masses. *Nature* 2021. doi.org/10.1038/d41586-021-01968-y
- [10] Callaway E. DeepMind's AI predicts structures for a vast trove of proteins. *Nature* 2021; 595: 635
- [11] Cavanagh MK, Bekki K, Groves BA. Morphological classification of galaxies with deep learning: comparing 3-way and 4-way CNNs. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society* 2021; 506: 659–676
- [12] Collett TE, Oldham LJ, Smith RJ, et al. A precise extragalactic test of General Relativity. *Science* 2018; 360: 1342–1346
- [13] Conselice CJ, Wilkinson A, Duncan K, et al. The Evolution of Galaxy Number Density at $z < 8$ and its Implications. *Astrophysical Journal* 2016; 1607.03909
- [14] Davies A, Veličkovi P, Buesing L, et al. Advancing mathematics by guiding human intuition with AI. *Nature* 2021; 600: 70–74
- [15] Dunar AJ, Waring SP. Power to Explore: A History of Marshall Space Flight Center, 1960–1990. *The NASA History Series*. National Aeronautics and Space Administration History Office; Office of Policy and Plans, Washington DC 1999
- [16] Dyson FW, Eddington AS, Davidson C. A determination of the deflection of light by

- the Sun's gravitational field, from observations made at the total eclipse of 29 May 1919. *Philos Trans Royal Soc London* 220A: 291–333
- [17] Einstein A. Lens-like action of a star by the deviation of light in the gravitational field. *Science* 1936; 84: 506–507
- [18] Grove M, Blinkhorn J. Neural networks differentiate between Middle and Later Stone Age lithic assemblages in eastern Africa. *PLoS ONE* 2020; 15(8): e0237528
- [19] Hales TC. A proof of the Kepler conjecture. *Annals of mathematics* 2005; 162: 1065–1185
- [20] Huertas-Company M. Deep Learning and Galaxy Classification. *American Scientist* 2020; 106: 317
- [21] Jee I, Suyu SH, Komatsu E, et al. A measurement of the Hubble constant from angular diameter distances to two gravitational lenses. *Science* 2019; 365: 1334–1338
- [22] Jumper J, Evans R, Pritzel A, et al. Highly accurate protein structure prediction with AlphaFold. *Nature* 2021; 596: 583–589
- [23] Keller A, Gerkin RC, Guan Y, et al. Predicting human olfactory perception from chemical features of odor molecules. *Science* 2021; 355: 820–826
- [24] Klucznik T, Mikulak-Klucznik B, McCormack MP, et al. Efficient Syntheses of Diverse, Medicinally Relevant Targets Planned by Computer and Executed in the Laboratory. *Chem* 2018; 4: 522–532
- [25] López-García PA, Agrote DL, Thrun MC. Projection-based classification of chemical groups for provenance analysis of archaeological materials. *IEEEAccess* 2020; 8: 152440
- [26] Molga K, Dittwald P, Grzybowski BA. Navigating around Patented Routes by Preserving Specific Motifs along Computer-Planned Retrosynthetic Pathways. *Chem* 2019; 5: 460–473
- [27] Obermeyer Z. An algorithm to target COVID testing of travellers. *Nature* 2021; 599: 34–36
- [28] Senior AW, Evans R, Jumper J, et al. Improved protein structure prediction using potentials from deep learning. *Nature* 2020; 577: 706–710
- [29] Sokol J. AI in Action: Machines that make sense of the sky. *Science* 2017; 357: 26
- [30] Sparkes M. An AI has disproved five mathematical conjectures with no human help. *New Scientist* 2017; 3336
- [31] Sparkes M. DeepMind's AI uncovers structure of 98.5 per cent of human proteins. *New Scientist* 2021; 3345
- [32] Sparkes M. DeepMind AI collaborates with humans on two mathematical breakthroughs. *New Scientist* 2021; www.newscientist.com/article/2299564-deepmind-ai-collaborates-with-humans-on-two-mathematical-breakthroughs/; abgerufen am 6.12.2021
- [33] Spitzer M. Go und die Moral in Südkorea. *Nervenheilkunde* 2016; 35: 287–291
- [34] Spitzer M. *www (WeltWeite Werbung) und die Folgen: Radikalisierung, Spionage, Vertrauens- und Wahrheitsverlust. Nervenheilkunde* 2018; 37: 303–311
- [35] Spitzer M. *Psychiatrie im dritten Jahrzehnt des 21. Jahrhunderts. Nervenheilkunde* 2021; 40: 6–12
- [36] Spitzer M. *Digital, automatisch – unbegreiflich, gefährlich. Nervenheilkunde* 2021; 40: 588–597
- [37] Stump C. AI aids intuition in mathematical discovery. *Nature* 2021; 600: 44–45
- [38] Sunny S, Jayaraj PB. Protein-Protein Docking: Past, Present, and Future. *Protein J* 2021. doi: 10.1007/s10930-021-10031-8
- [39] Tunyasuvunakool K, Adler J, Wu Z, et al. Highly accurate protein structure prediction for the human proteome. *Nature* 2021; 596: 590–596
- [40] Wagner AZ. Constructions in combinatorics via neural networks. *arXiv* 2104.14516 29.4.2021 www.newscientist.com/article/2299564-deepmind-ai-collaborates-with-humans-on-two-mathematical-breakthroughs/; abgerufen am 5.12.2021
- [41] Wilson R. Wolfgang Haken and the four-color problem. *Illinois Journal of Mathematics* 2016; 60: 149–178
- [42] Wilson R. *Four Colors Suffice: How the Map Problem Was Solved – Revised Color Edition*. Princeton: University Press, 2013
- [43] Service RF. Protein structures for all. *Science* 2021; 374: 1426–1427
- [44] Thorp HH. Proteins, proteins everywhere. *Science* 2021; 374: 1415
- [45] Gentile F, Tortora C, Covone G, et al. Lenses In Voice (LIVE): Searching for strong gravitational lenses in the VOICE@VST survey using Convolutional Neural Networks. *arXiv:2105.05602 [astro-ph.GA] version 1, 12.5.2021*
- [46] Hezaveh YD, Levasseur LP, Marshall PJ. Fast automated analysis of strong gravitational lenses with convolutional neural networks. *Nature* 2017; 548: 555–557
- [47] Ramanah DK, Arendse N, Wojtak R. AI-driven spatio-temporal engine for finding gravitationally lensed supernovae. *arXiv:2107.12399 [astro-ph.IM] version 1, 26.7.2021*
- [48] Anonymus. Digital intuition. A computer program that can outplay humans in the abstract game of Go will redefine our relationship with machines. *Nature* 2016; 529: 437
- [49] Elman JL. Learning and development in neural networks: the importance of starting small. *Cognition* 1993; 48: 71–99

Bibliografie

Nervenheilkunde 2022; 41: 63–72
 DOI 10.1055/a-1650-2220
 ISSN 0722-1541
 © 2022, Thieme. All rights reserved.
 Georg Thieme Verlag KG, Rüdigerstraße 14,
 70469 Stuttgart, Germany