

Quantenchemische Berechnungen in großem Maßstab

Categories : [Messtechnik & Analytik](#)

Date : 24. Januar 2023

Die frühe Wirkstoffforschung beschleunigen, das ist das Ziel der Zusammenarbeit von Bayer und Google Cloud. Dabei kommen die Tensor Processing Units (TPUs) von Google Cloud zum Einsatz, maßgeschneiderte Beschleuniger, die für die Ausführung modernster Machine-Learning-Modelle und rechenintensiver Aufgaben entwickelt wurden.

Die auf die computergestützte Arzneimittelforschung angewandte Theorie der Quantenmechanik ermöglicht die In-silico-Modellierung biologischer und chemischer Systeme mit hoher Genauigkeit und hat daher das Potenzial, bei der Identifizierung neuer Arzneimittelkandidaten zu helfen. Die Zusammenarbeit zielt darauf ab, quantenchemische Berechnungen mit den TPUs der Google Cloud zu beschleunigen und zu skalieren, um die vollständige quantenmechanische Modellierung von Protein-Ligand-Interaktionen zu demonstrieren. Die Ergebnisse werden die wissenschaftliche und wirtschaftliche Realisierbarkeit von groß angelegten Berechnungen der Dichtefunktionaltheorie für praktische Anwendungen zeigen.

"Bayers Anspruch, zu den führenden Innovatoren zu gehören, treibt uns an, weiterhin in neuartige und innovative Technologien zu investieren, um komplexe Probleme zu lösen", sagte Bijoy Sagar, Chief Information and Digital Transformation Officer bei Bayer. "Die Partnerschaft mit Google Cloud bei der TPU-gestützten Quantenchemie ergänzt unser Bestreben, mit Branchenführern und Experten zusammenzuarbeiten, um die digitale Transformation schnell voranzutreiben."

"Die Beschleunigung der Arzneimittelforschung ist eine der wichtigsten Aufgaben für Künstliche Intelligenz und High-Performance-Computing in der Gesundheitsbranche", sagte Thomas Kurian, CEO von Google Cloud. "Wenn wir die Forschungs- und Entwicklungskompetenzen von Bayer mit unserer Infrastruktur zusammenbringen, können wir neue Entdeckungen mit größerer Genauigkeit und Geschwindigkeit erzielen und so dazu beitragen, dass Medikamente schneller zu Patienten gelangen."

Die Steigerung der F&E-Effizienz, um die Entwicklung wirksamer Medikamente für Patienten zu beschleunigen, ist ein zentrales Element der Innovationsstrategie von Bayer.

"Durch die Kombination der Rechenleistung von Google Cloud mit der Expertise von Bayer in der Arzneimittelforschung wollen wir das Potenzial der Quantenchemie im großen Maßstab erschließen", sagte Marianne De Backer, Leiterin Strategie, Business Development & Lizenzierung/Open Innovation und Mitglied des Executive Committee der Division Pharmaceuticals bei Bayer. "Mit führenden Unternehmen und Pionieren der Branche zusammenzuarbeiten, um wissenschaftliche Fortschritte mithilfe digitaler Innovationen zu erzielen, ist für die Gegenwart und Zukunft der Patientenversorgung von entscheidender Bedeutung."