

Sessionsanlass PG BFI – GP FRI

Donnerstag, 26. September 2024

Künstliche Intelligenz (KI) in Forschung und Industrie

Die Ziele

Das **Verständnis** für die Bedeutung von Bildung, Forschung und Innovation im Parlament steigern.

Relevante Sachfragen zu **diskussionsfähiger Reife** aufbauen.

Den Anliegen des Wissens- und Innovationsstandortes Schweiz Nachdruck und Gewicht verleihen.

Grusswort

Dominique Gruhl-Bégin, Direktorin Innosuisse

INNOSUISSE

MIT SCHWEIZER INNOVATIONEN DIE WELT BEWEGEN

DOMINIQUE GRUHL-BÉGIN

DIREKTORIN

Sessionsanlass der Parlamentarischen Gruppe Bildung Forschung Innovation vom 26.9.2024



Schweizerische Eidgenossenschaft
Confédération suisse
Confederazione Svizzera
Confederaziun svizra

**Innosuisse – Agence suisse pour
l'encouragement de l'innovation**

INNOSUISSE FÖRDERT WISSENSCHAFTSBASIERTE INNOVATIONEN

Wir sorgen dafür, dass wissenschaftliche Erkenntnisse in der schweizerischen Wirtschaft und Gesellschaft nutzen stiften:



Wissenschaft



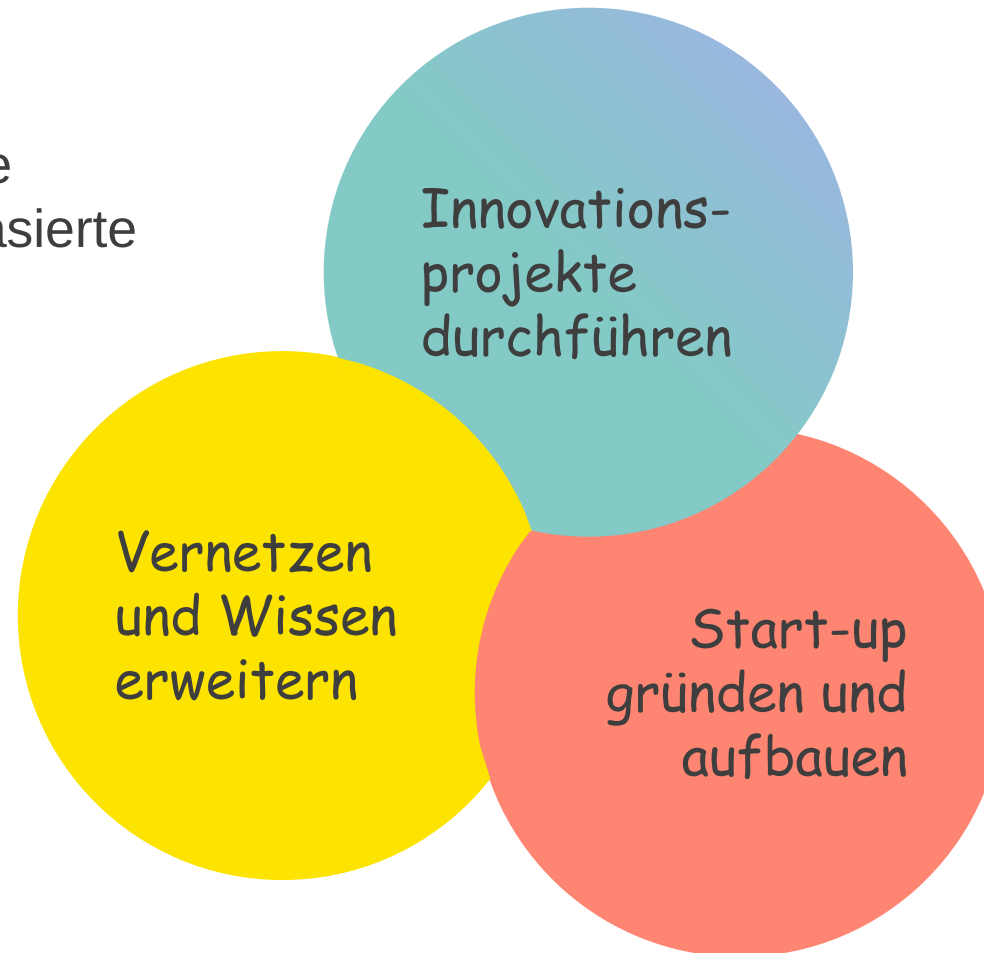
Praxis

INNOSUISSE -
DIE SCHWEIZERISCHE
AGENTUR FÜR
INNOVATIONSFÖRDERUNG

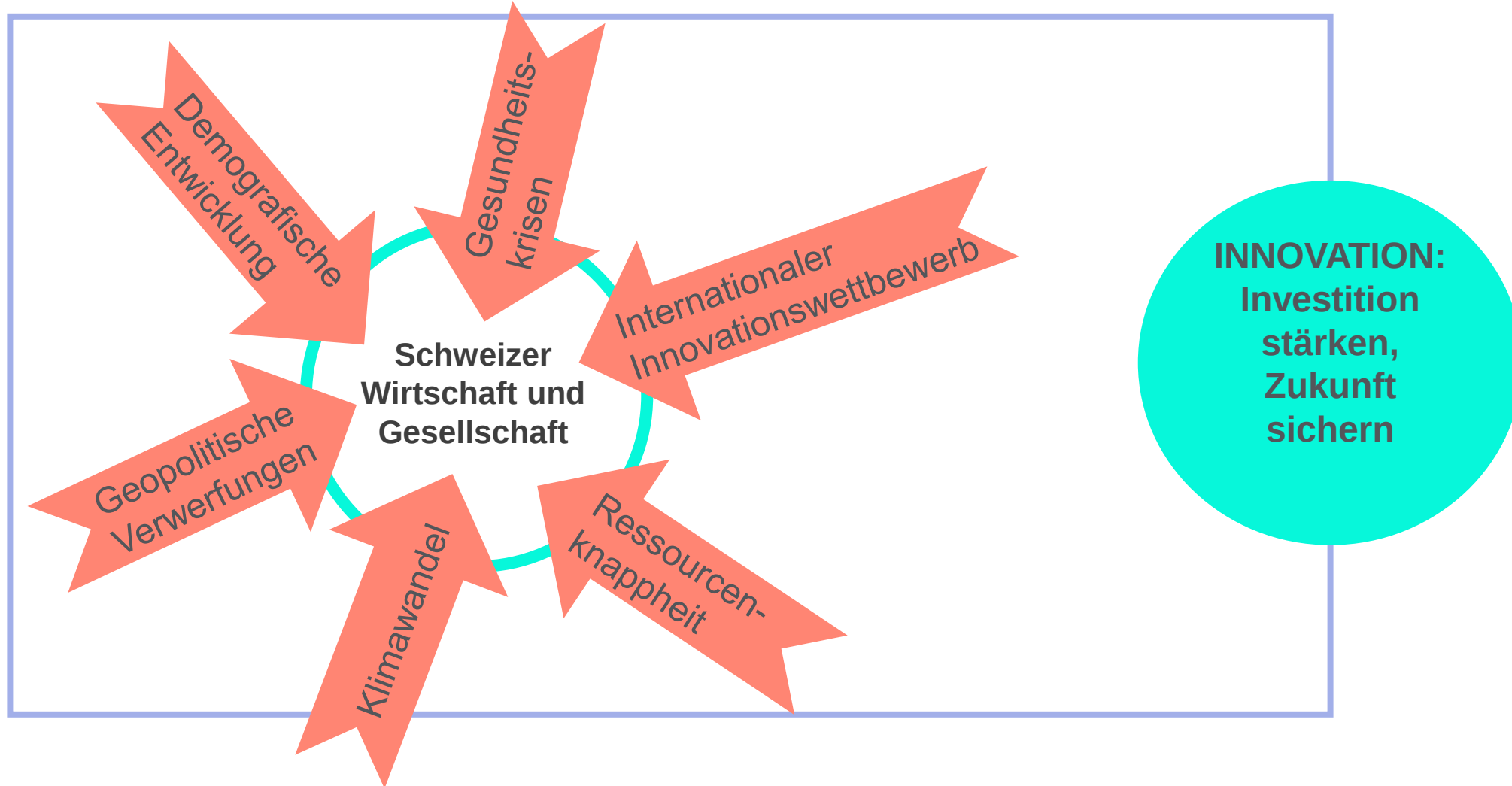
ist die Förderagentur
des Bundes für Innovation.

INNOSUISSE – IHRE PARTNERIN FÜR INNOVATION

So fördert Innosuisse
Ihre wissenschaftsbasierte
Innovationen:



MIT INNOVATION HERAUSFORDERUNGEN ANPACKEN

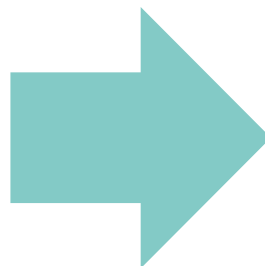


KI IN DER INNOVATIONSFÖRDERUNG

Schweiz braucht **moderne, innovative Technologien**:

→ KI als **Motor für Produktivität und Wirtschaftswachstum**

→ KI kann dazu beitragen, **globale Herausforderungen zu bewältigen.**



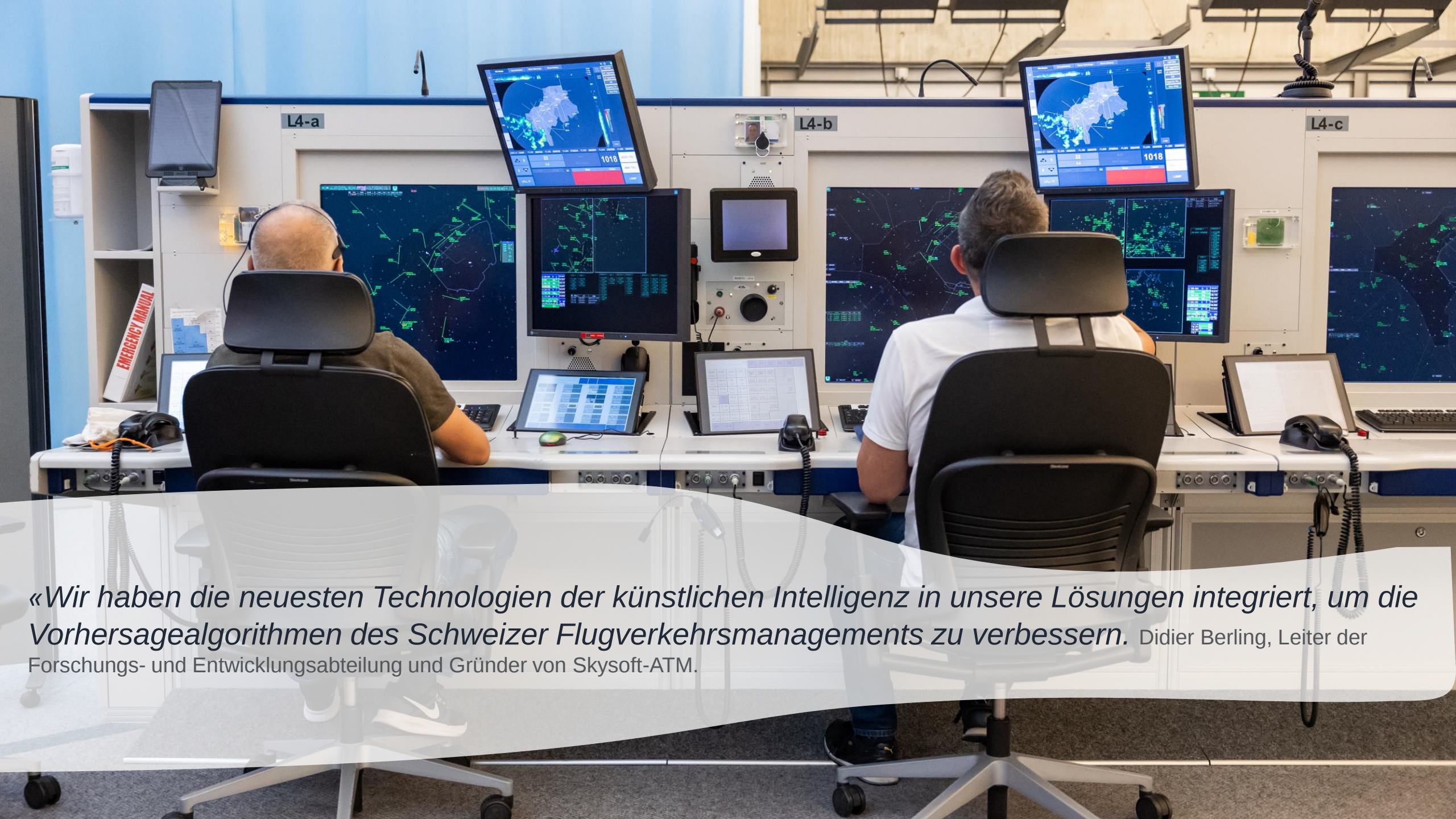
Die Innovationsförderung im Bereich AI ist für die Schweiz von **grösster Bedeutung**:

→ **Wirtschaftswachstum** ankurbeln

→ **Wettbewerbsvorteil** und führende Position auf dem Weltmarkt **behaupten**



Thomas Münzer, Chefarzt der Geriatriischen Klinik St. Gallen: «KI hat das Potenzial, Pflegende zu entlasten und die Autonomie älterer Menschen zu erhalten.» Thomas Münzer, Chefarzt der Geriatriischen Klinik St. Gallen



«Wir haben die neuesten Technologien der künstlichen Intelligenz in unsere Lösungen integriert, um die Vorhersagealgorithmen des Schweizer Flugverkehrsmanagements zu verbessern. Didier Berling, Leiter der Forschungs- und Entwicklungsabteilung und Gründer von Skysoft-ATM.

DIE FLAGSHIP INITIATIVE SYSTEMISCHE INNOVATION FÖRDERN



Ausschreibung 2024:

**Künstliche Intelligenz in Life Sciences mit
Schwerpunkt auf die menschliche Gesundheit**



Ziel: Die Schweiz soll bei der Entwicklung innovativer Lösungen mit KI eine führende Position einnehmen, um Herausforderungen zu lösen und einen Mehrwert für die menschliche Gesundheit zu schaffen.

SO WIRKT DIE FÖRDERUNG VON INNOSUISSE



POSITIVE WIRKUNGSMONITORING-RESULTATE ZU DEN INNOVATIONSPROJEKTEN

49%

der Innovationen sind
drei Jahre nach
Abschluss auf dem Markt
oder in der Organisation
eingeführt

1080

Arbeitsplätze sind bei
Unternehmen aus den 364
im Jahr 2018 abge-
schlossenen Projekten
entstanden

30%

der Befragten
bezeichnen ihre
Innovation als
Weltmarkt-
neuheit.

MIT INNOSUISSE DIE WELT BEWEGEN

VIELEN DANK

www.innosuisse.ch
info@innosuisse.ch

Mit Schweizer Innovationen
die Welt bewegen



twitter.com/innosuisse



linkedin.com/company/Innosuisse

«KI der Zukunft: Gewinn für Forschung, Industrie und Gesellschaft»

Dr. Marcel Salathé
Co-Leiter EPFL AI Center

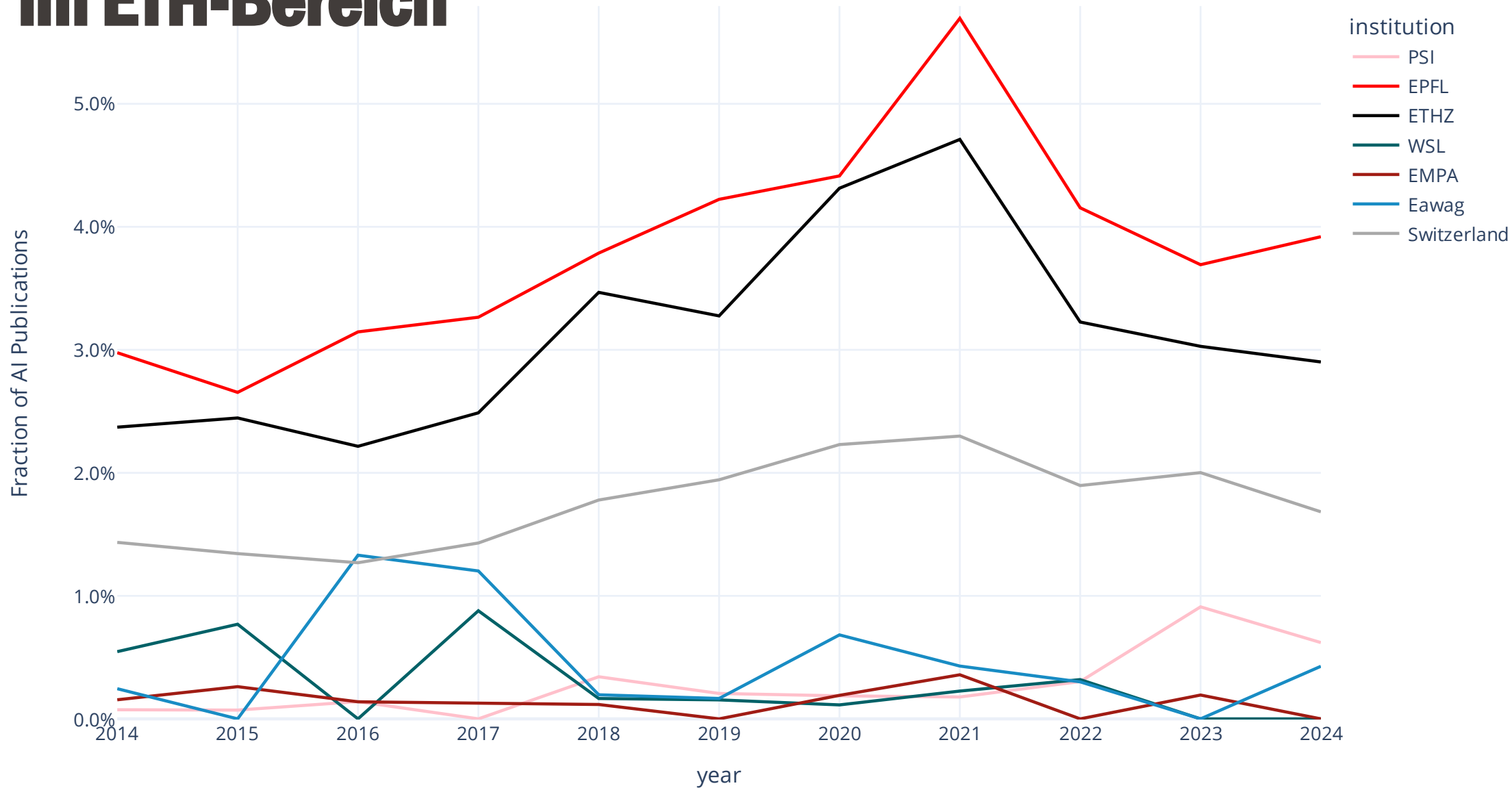
IP-FRI

L'IA du futur : un atout pour la recherche de pointe, l'industrie et la société

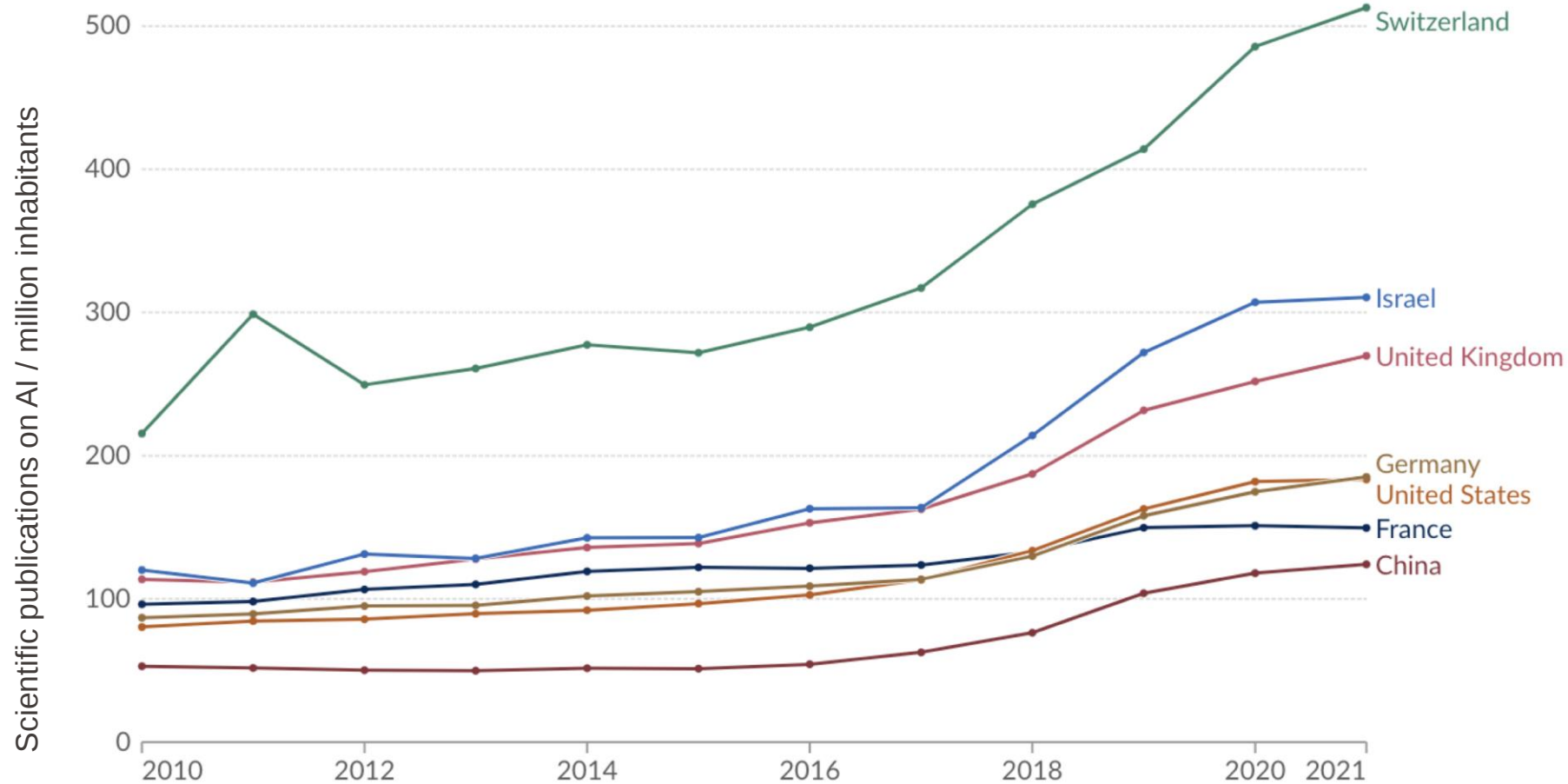
Marcel Salathé
Co-directeur du
Centre IA de l'EPFL

Berne
26 septembre 2024

KI Publikationen im ETH-Bereich



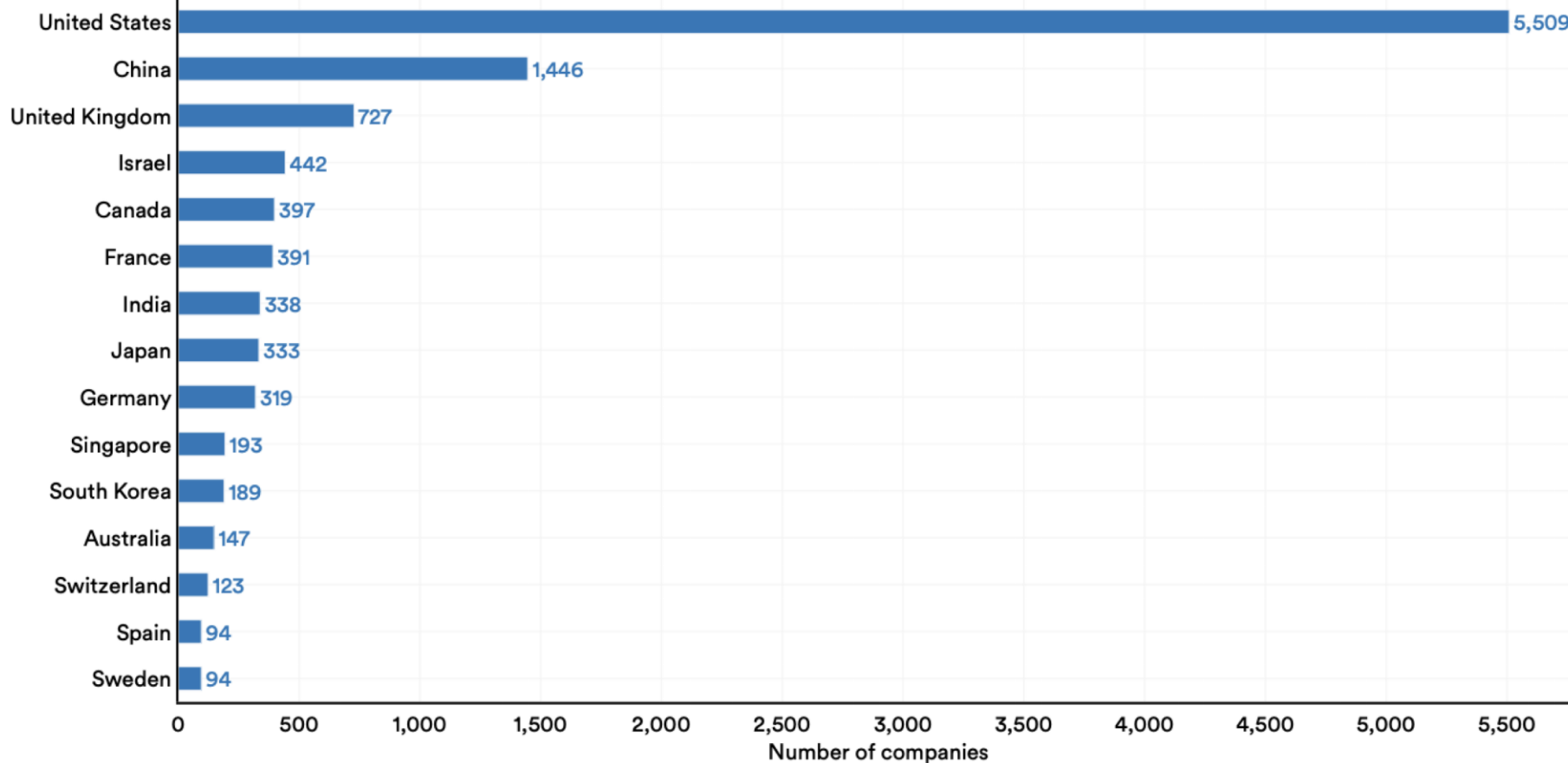
Die Schweiz ist stark in KI



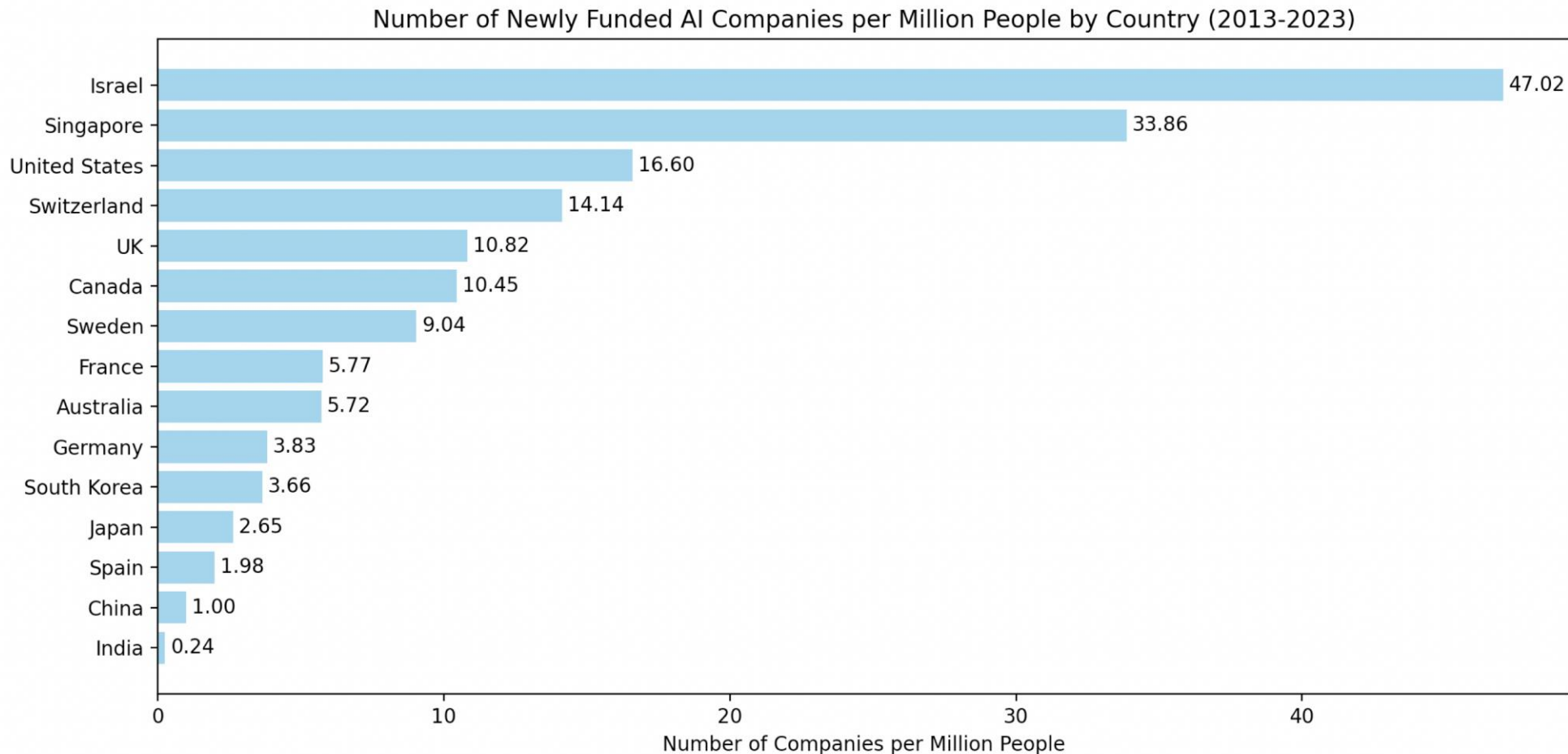
Transfer in den Privatsektor funktioniert sehr gut

Number of newly funded AI companies by geographic area, 2013–23 (sum)

Source: Quid, 2023 | Chart: 2024 AI Index report



Transfer in den Privatsektor funktioniert sehr gut



- Offizieller Start Januar 2024
- Hub für KI
- Alle EPFL Fakultäten sind involviert
- Integriert in ein breites nationales und internationales Netzwerk

80+

EPFL ProfessorInnen

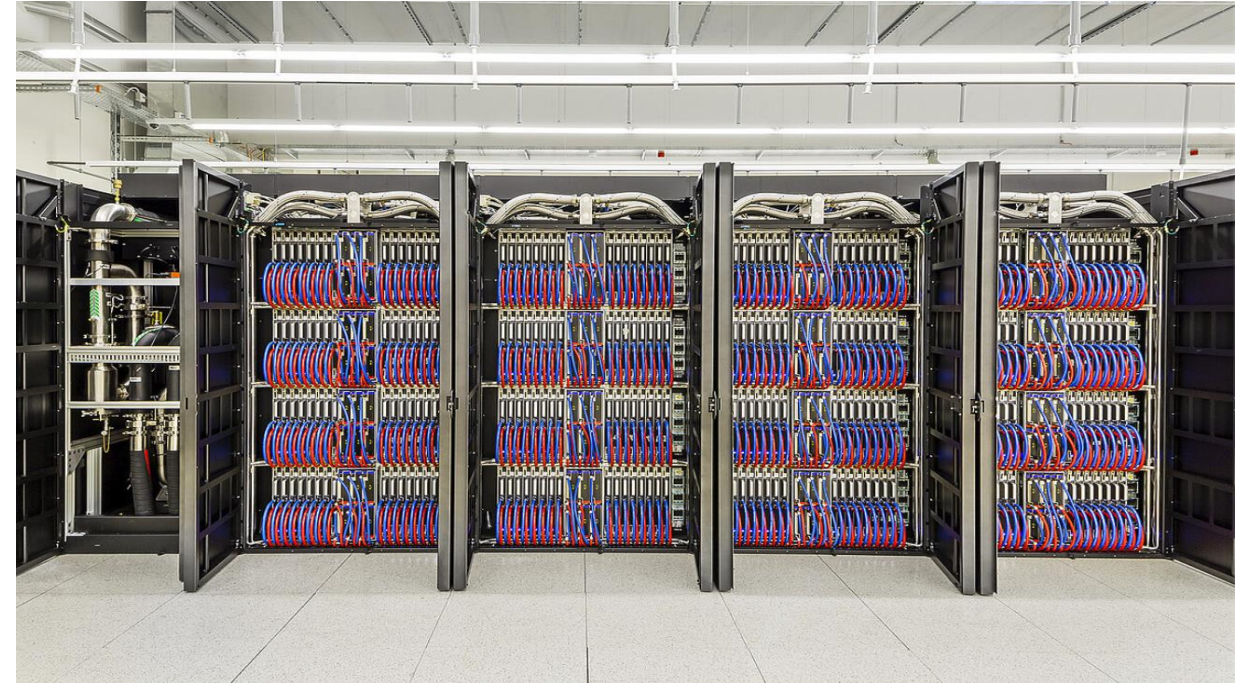
1000+EPFL Forschungs-
Ökosystem**175+**

AI-related courses

250+

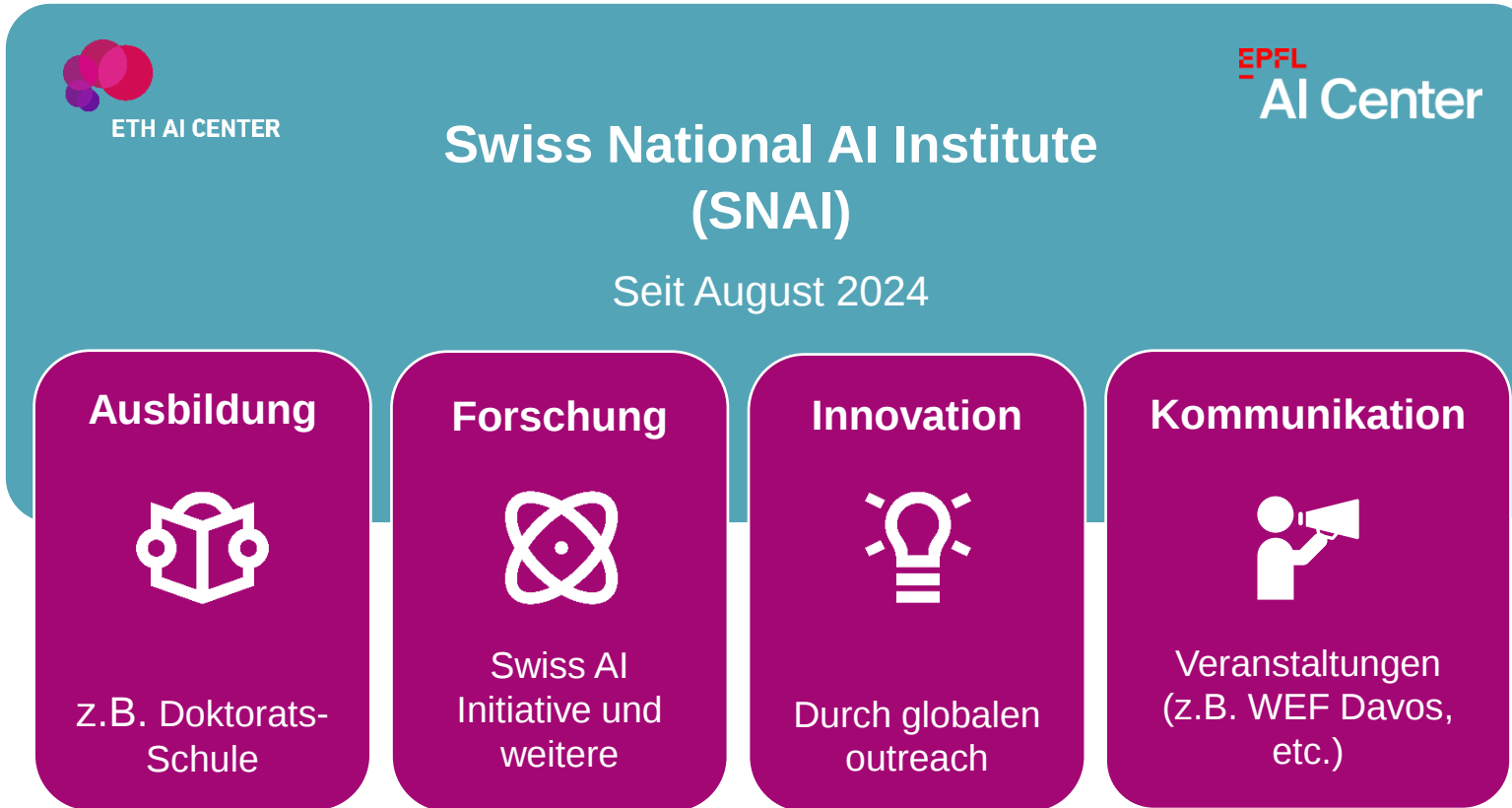
ML-related courses



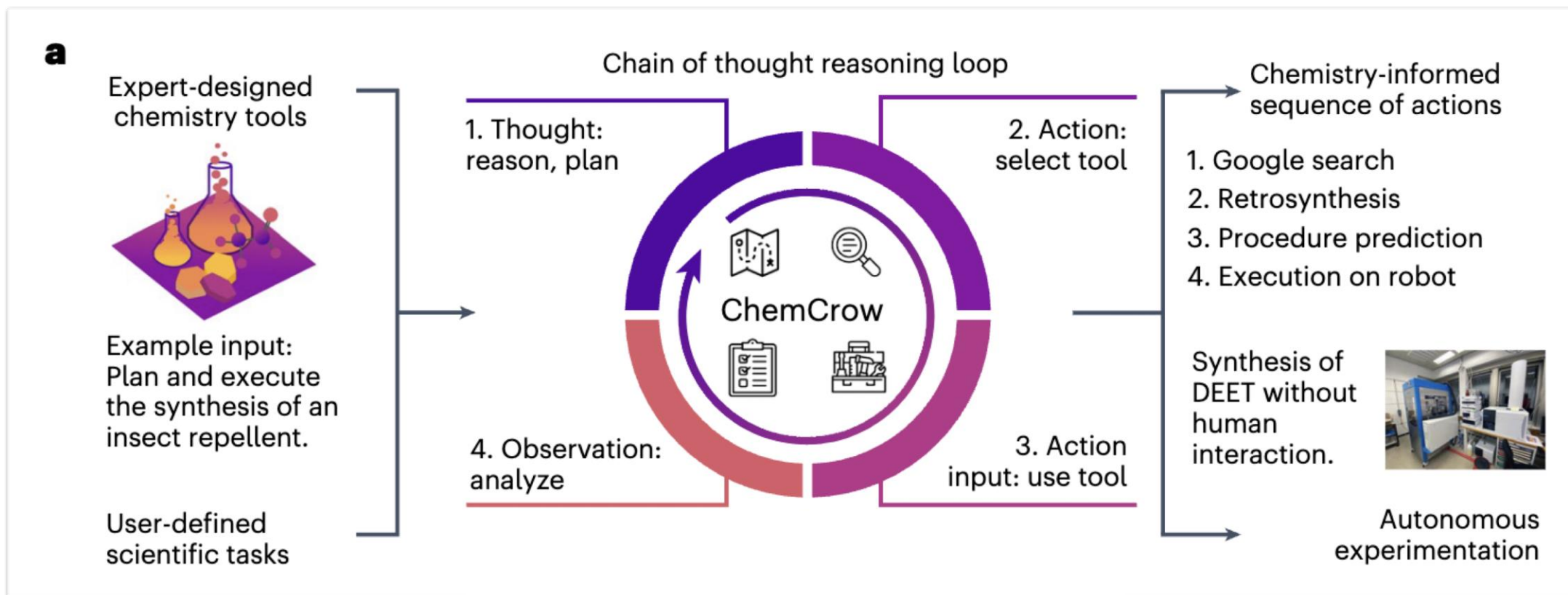


- 6. grösster Computer-Cluster der Welt
- Grösster KI-Cluster einer öffentlichen Institution weltweit

Swiss National AI Institute (SNAI)



- Gegründet von den beiden KI-Zentren der ETH Zürich und der EPFL
- SNAI wird zum nationalen Schwerpunkt für die wissenschaftlichen Möglichkeiten und Herausforderungen der KI
- Ziel ist es, die Wirkung durch Synergien und Koordination zu erhöhen



a

```
from chemcrow.agents import ChemCrow
```

```
# Initialize ChemCrow
chem_model = ChemCrow(
    model="gpt-4-0613",
    temp=0.1,
    verbose=True
)
```

```
# Define task
task = (
    "Find and synthesize a thiourea organocatalyst "
    "which accelerates a Diels-Alder reaction."
)
```

```
# Execute ChemCrow
chem_model.run(task)
```

b Task: Find and synthesize a thiourea organocatalyst which accelerates a Diels-Alder reaction.

First, I need to find a thiourea organocatalyst that can accelerate the Diels-Alder reaction. I will perform a web search to find a suitable catalyst.

Web Search tool: Schreiner's thiourea catalyst

Now, I will obtain the SMILES. **Name2Smiles tool:**

FC(F)(F)c1cc(NC(=S)Nc2cc(C(F)(F)F)cc(C(F)(F)F)c2)cc(C(F)(F)F)c1

I will plan a synthesis for Schreiner's thiourea catalyst.

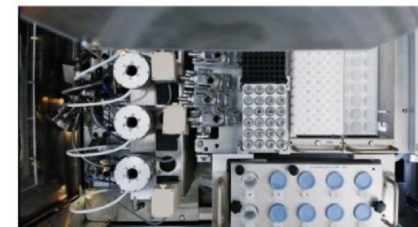
SynthesisPlanner tool: detailed synthesis plan

I will execute the synthesis.

SynthesisExecuter tool: successful synthesis.

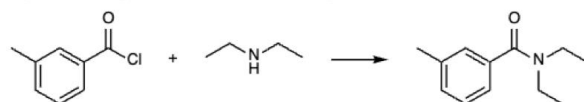
Connection with
physical world

c RoboRXN synthesis platform



d ChemCrow workflows with experimental validation

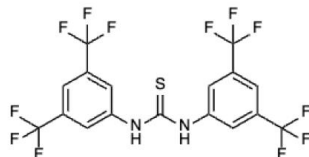
Insect repellent (plan and execute)



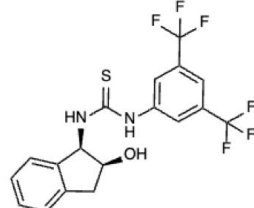
DEET

Thiourea organocatalysts (plan and execute)

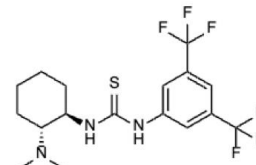
Schreiner's catalyst



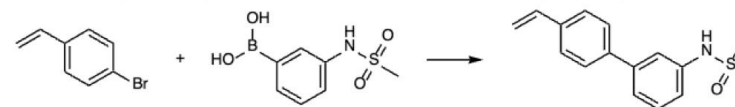
Ricci's catalyst



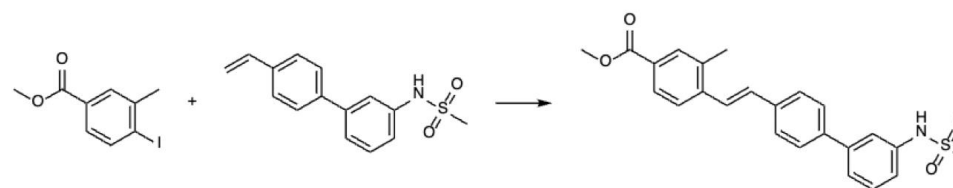
Takemoto's catalyst



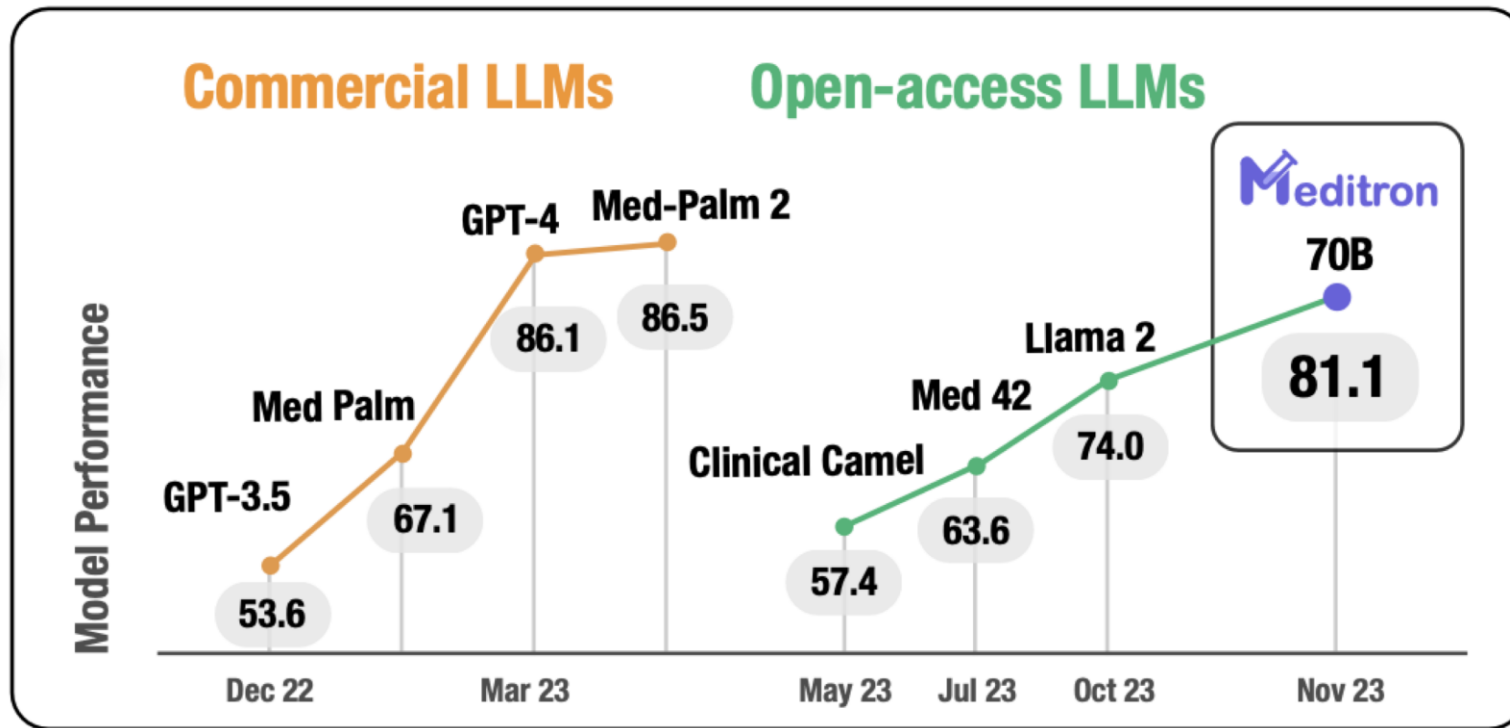
Novel chromophore (clean data, train model and predict)



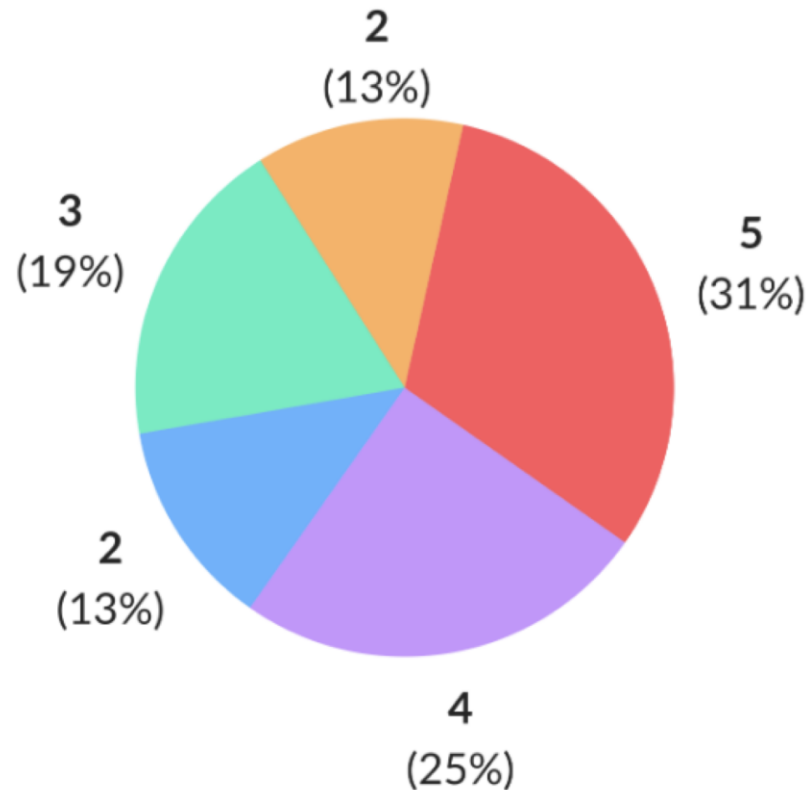
Synthesis step 1: Bromo Suzuki coupling



Synthesis step 2: Iodo Heck reaction



Meditron
Bestes Open-Source-
LLM für Medizin



If Meditron was a person, what level of expertise would you guess this person to have?

- **Medical oracle**
- **Head of service** (more than 10 years of experience)
- **Chief resident** (more than 5 years of experience)
- **Resident** (between 1 and 5 years of experience)
- **New doctor** (less than 1 year of experience)
- **Medical student**
- **Layman**

IP-FRI

Merci

Marcel Salathé
Co-directeur du
Centre IA de l'EPFL

Berne
26 septembre 2024



«Effizienzsteigerung und Optimierung in der Pharmaforschung dank KI»

Dr. Fabian Birzele

Principal Leader – Predictive Modeling and Data Analysis Roche



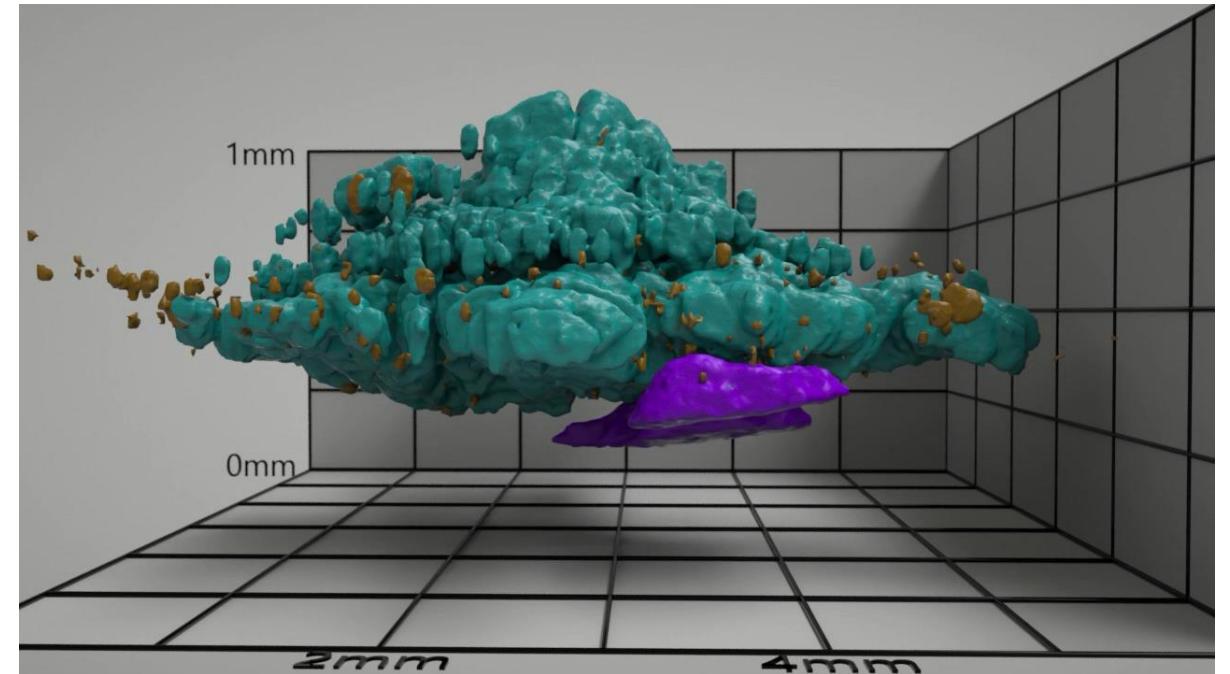
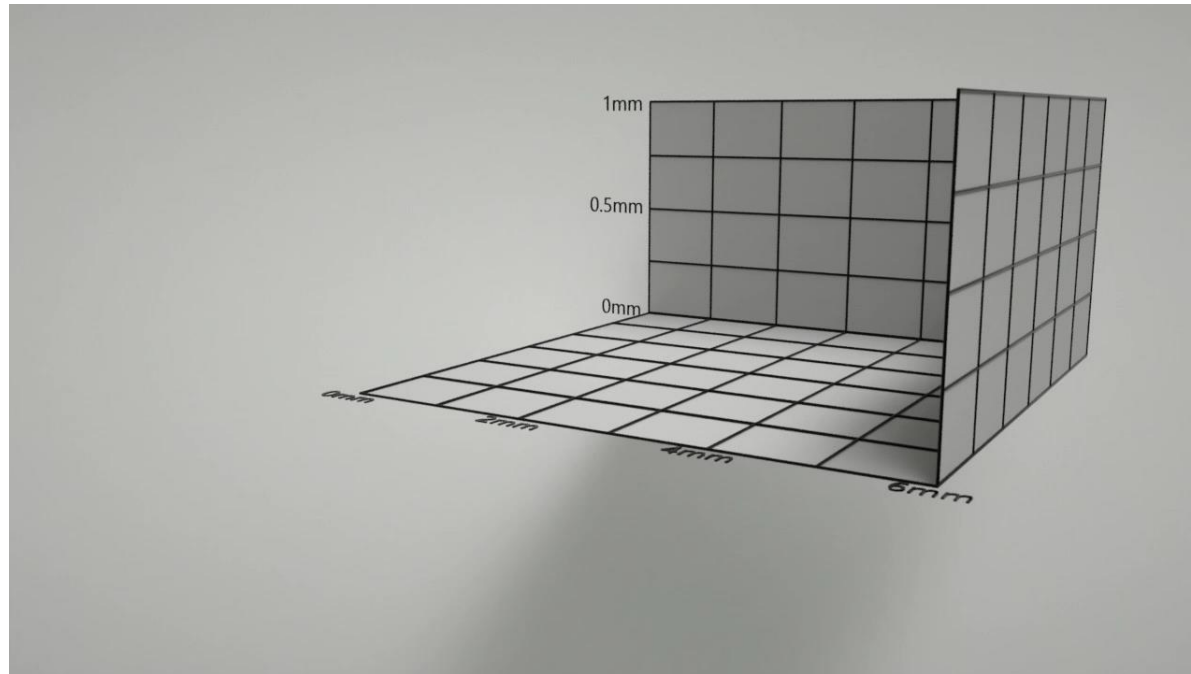
Künstliche Intelligenz in der Pharmaforschung

Fokus auf klinische Anwendungen

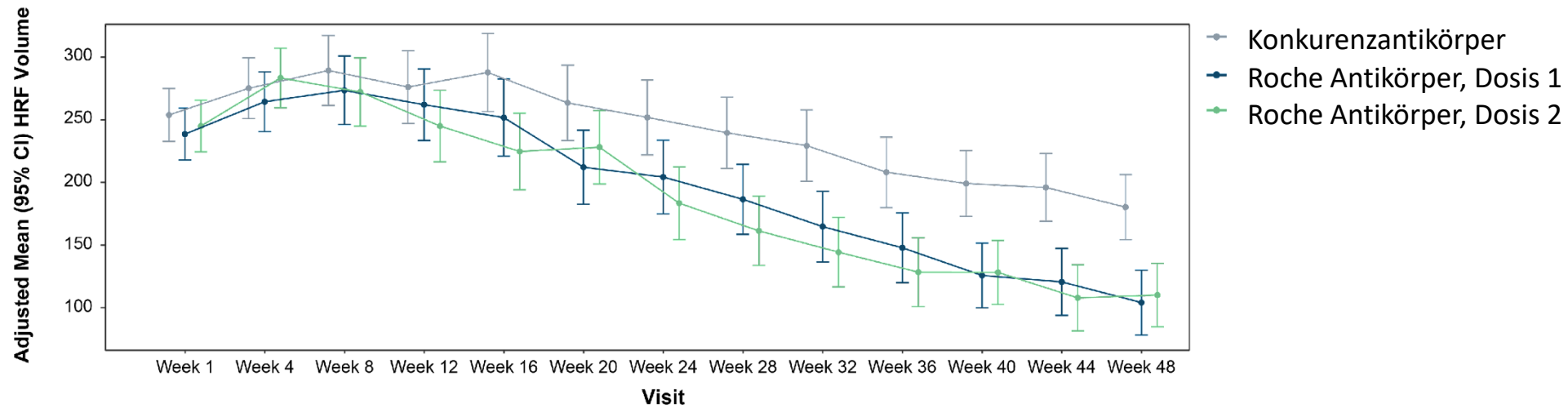
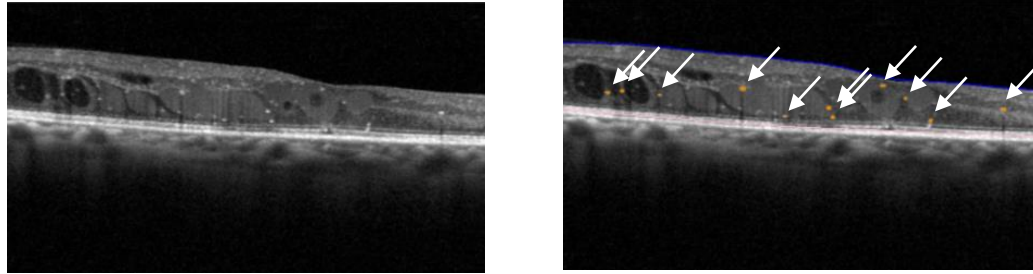
Dr. Fabian Birzele, PhD
Principal Leader – Predictive Modeling and Data Analytics
Roche, Pharma Research & Early Development

Ophthalmologie – Charakterisierung von DME mittels AI

Gewinn an Geschwindigkeit, Kosten, Qualität

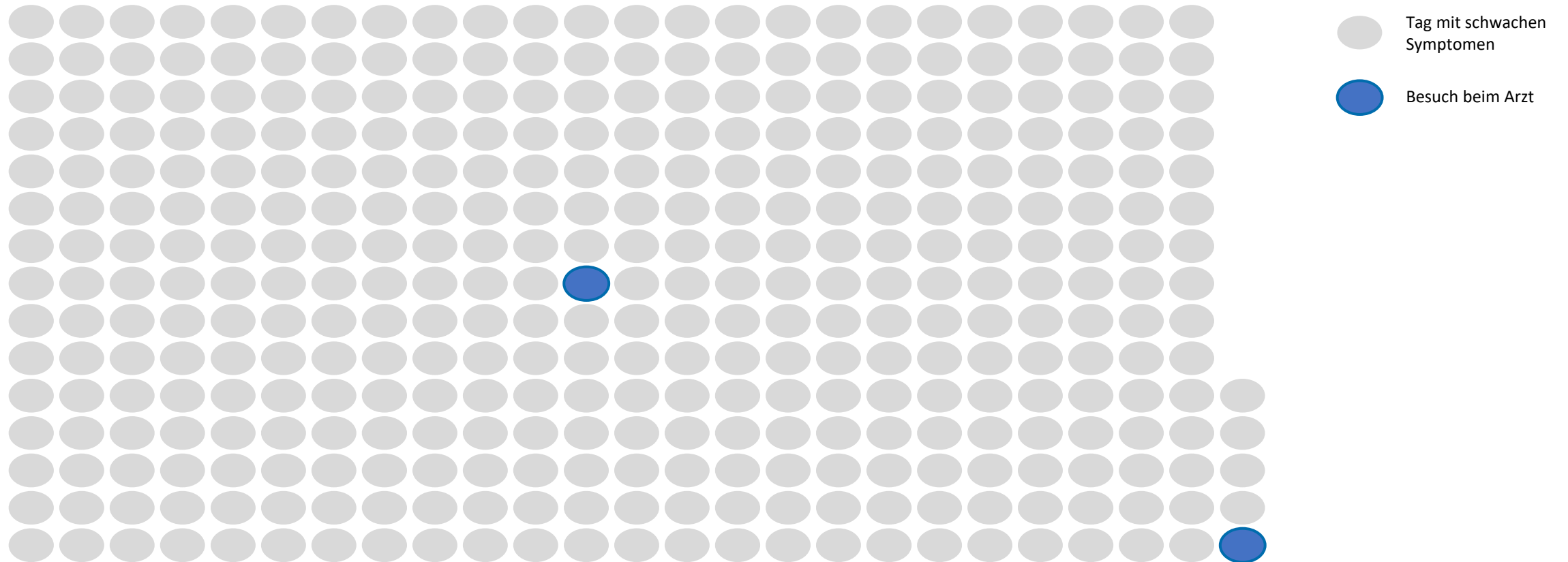


HRF in DME – Reduktion unter Behandlung im Vergleich AI/ML zur **quantitativen** Bestimmung von Unterschieden.



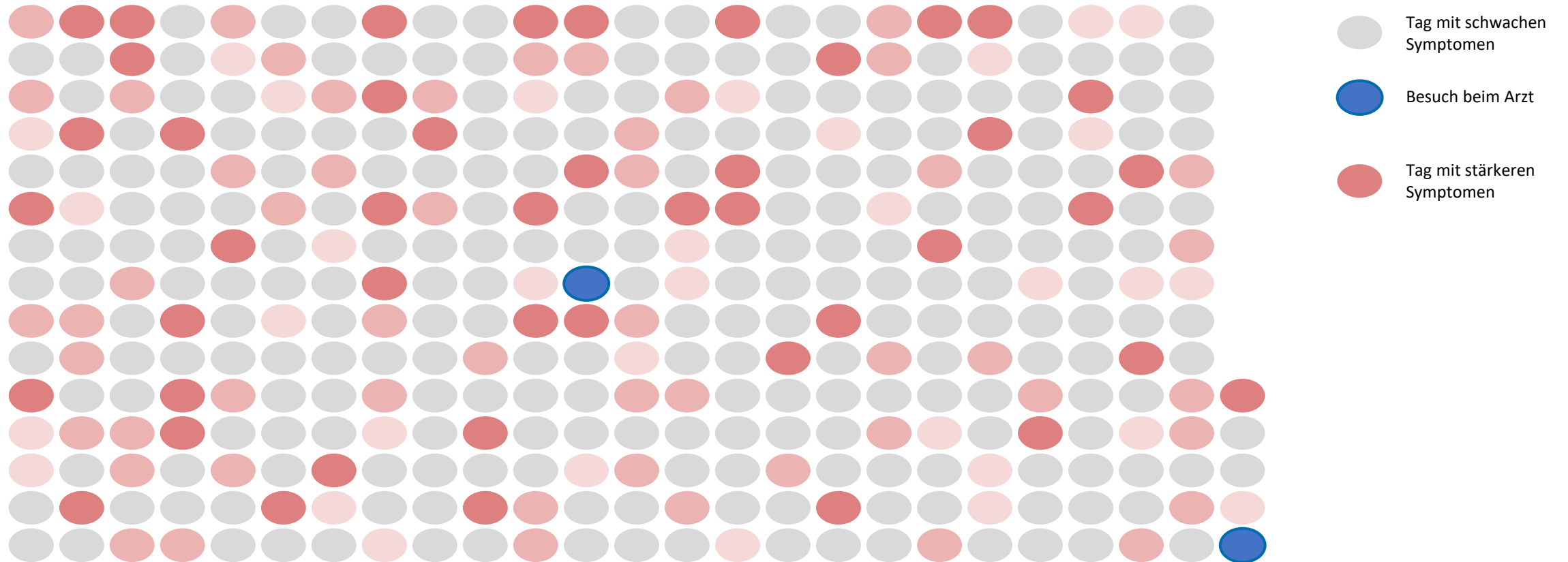
Digitale Biomarker

Parkinson – Verständnis von Schwere und Fortschritt der Erkrankung



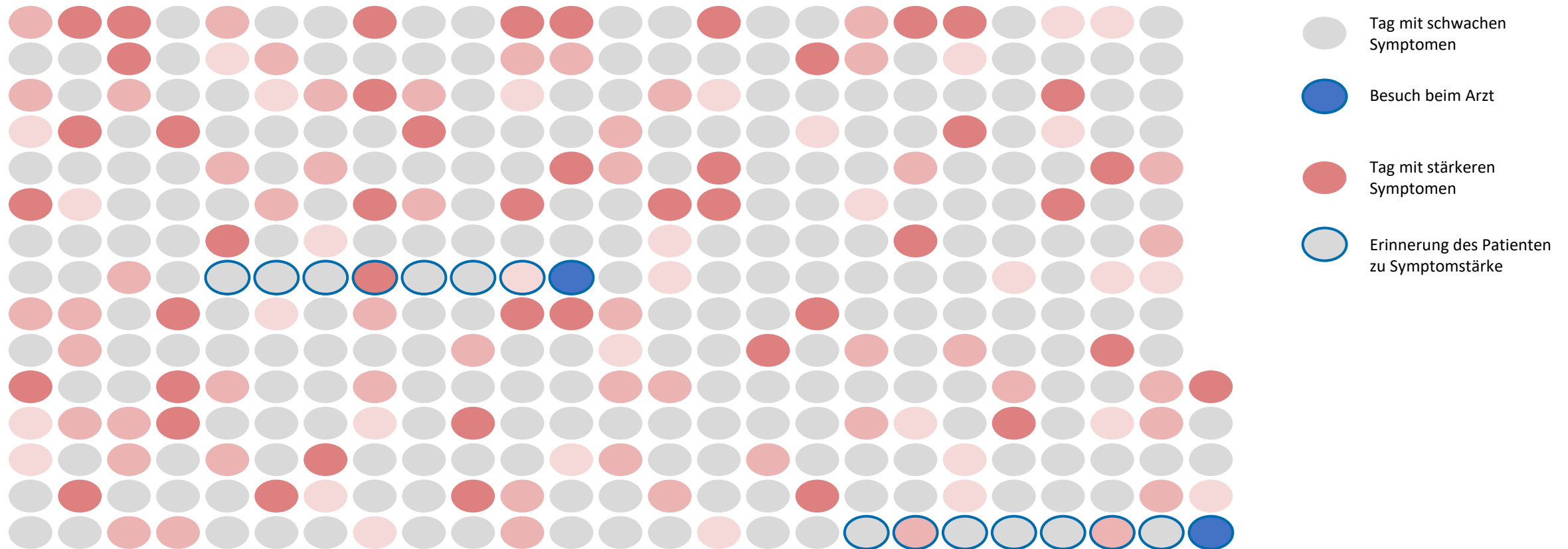
Digitale Biomarker

Parkinson – Verständnis von Schwere und Fortschritt der Erkrankung



Digitale Biomarker

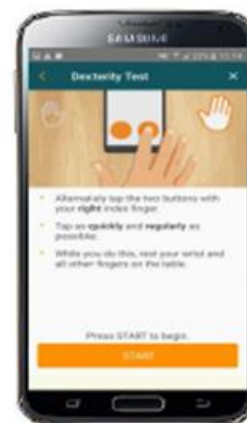
Parkinson – Verständnis von Schwere und Fortschritt der Erkrankung



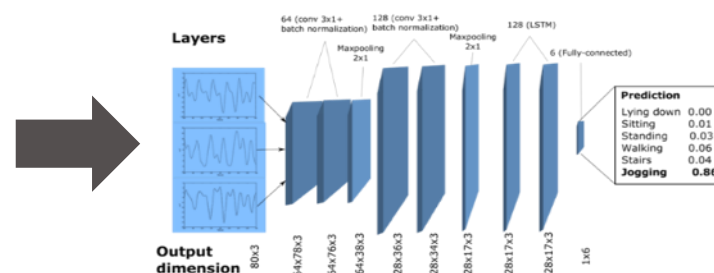
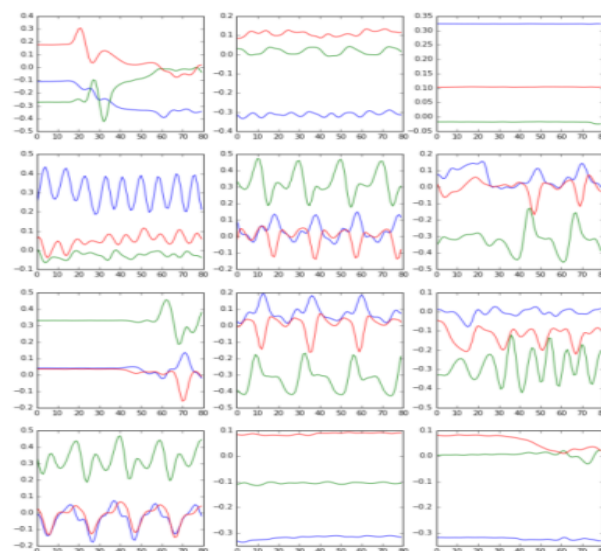
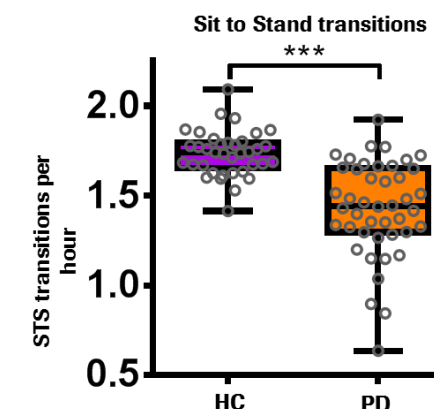


Passives Patientenmonitoring – mit Hilfe von AI

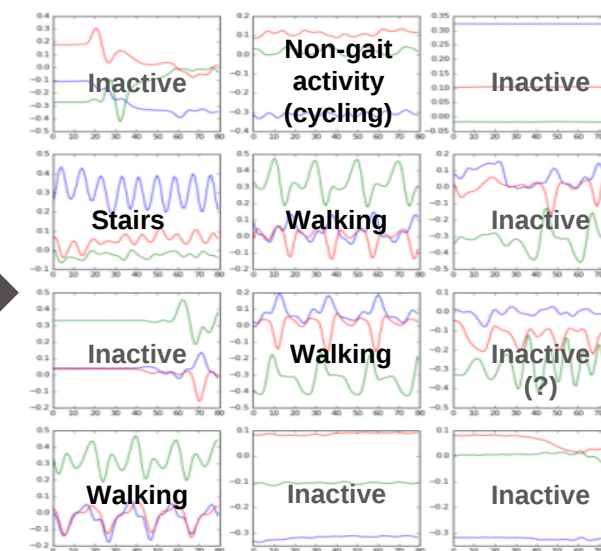
Klassifikation von täglichen Symptomen



Parkinson's disease



Human Activity Recognition (HAR)



Doing now what patients need next

Wie machen wir AI in der Pharmaforschung erfolgreich?

Paradigmenwechsel sind nötig



Datenqualität und -verfügbarkeit

- Datenstandards und Qualität sind notwendige Voraussetzungen
- Voraussetzungen für die “Nutzbarkeit” der Daten müssen gegeben sein (Zustimmung der Patienten für “secondary use”, Ganzheit, Konsistenz)



Generierung von Modellen und Anwendung

- Infrastruktur für kontinuierliche Anwendung und Verbesserung (ML Ops)
- Rigurose Beurteilung von Modelqualität
- Regulatorische Voraussetzungen (SaMD)



Interpretierbarkeit und Transparenz

- ‘Black box’ Modelle – schwierige Akzeptanz
- Explainable AI (xAI) Konzepte können helfen Vertrauen zu schaffen

«KI-Methodologien in der medizinischen Wirkstoffforschung»

Dr. Martin Missbach

Site Head Global Discovery Chemistry, Novartis



KI-Methodologien in der medizinischen Wirkstoffforschung

Dr. Martin Missbach
Biomedical Research
Novartis Pharma AG

Künstliche Intelligenz – Allgegenwärtig in unserem Alltag



[This Photo](#) by Unknown Author is licensed under [CC BY-ND](#)



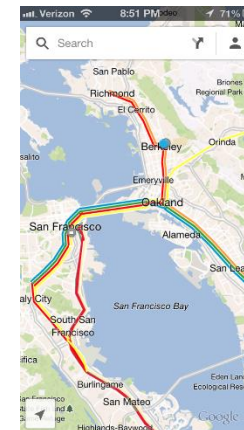
[This Photo](#) by Unknown Author is licensed under [CC BY-SA](#)



[This Photo](#) by Unknown Author is licensed under [CC BY-NC-ND](#)



[This Photo](#) by Unknown Author is licensed under [CC BY-SA-NC](#)



[This Photo](#) by Unknown Author is licensed under [CC BY-NC-ND](#)

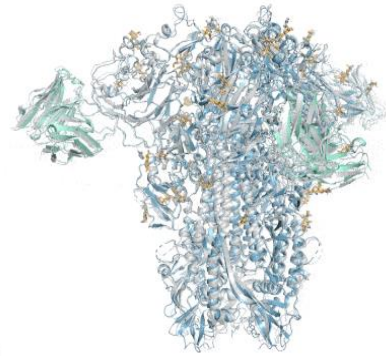
Wie können wir KI in der
medizinischen
Wirkstoffforschung sinnvoll
einsetzen?



[This Photo](#)

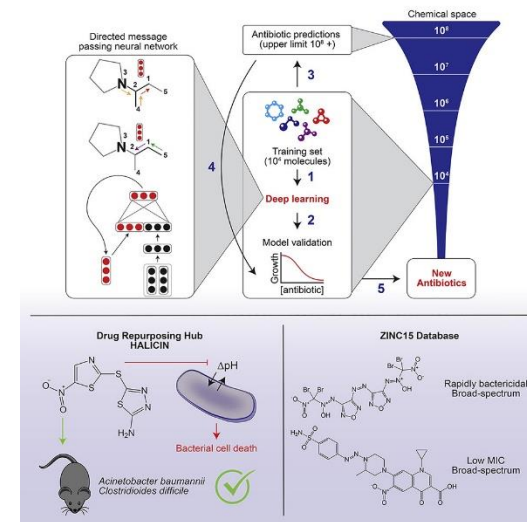
[CC BY-NC-ND](#)

AlphaFold-Modell von Google DeepMind: Transformation der Strukturbiologie und der Biowissenschaften



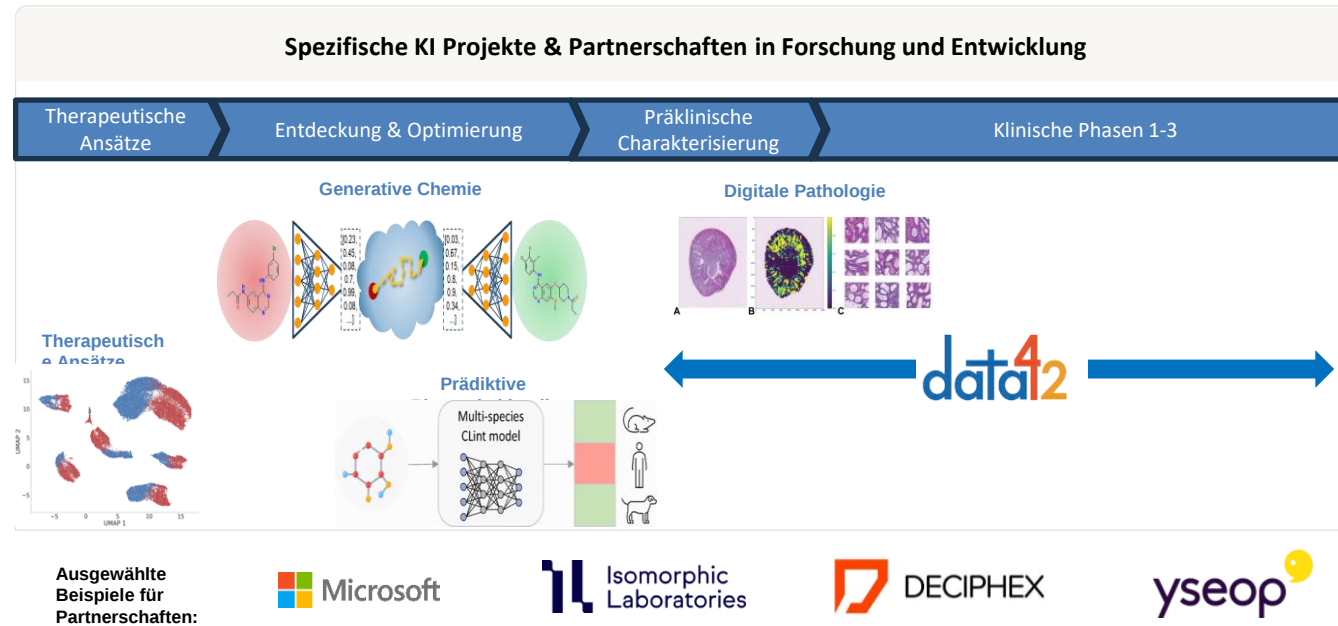
Credit: Google DeepMind

MIT ChemProp Modell:
Identifizierung neuer Antibiotika



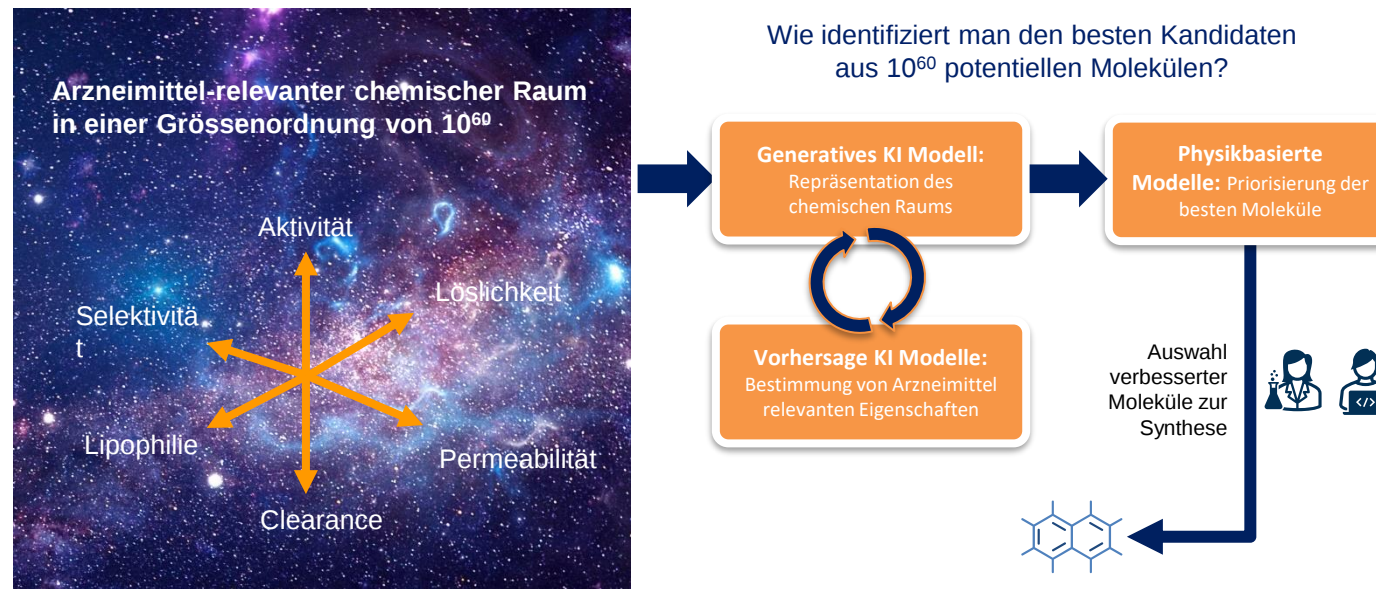
NOVARTIS | Reimagining Medicine

KI @ Novartis – Ausgewählte Beispiele entlang der Pipeline



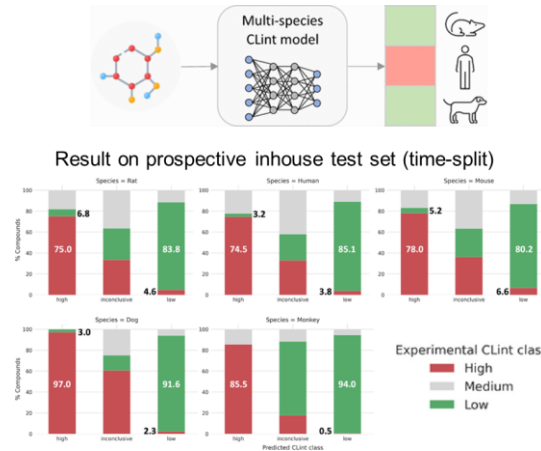
Images taken from:
Rodríguez-Pérez, R., Trunzer, M., Schneider, N., et al. *Molecular Pharmaceutics*, 2022; 20(1), 383-394
Freyre CAC, Spiegel S, Gubser Keller C, et al., *Toxicologic Pathology*, 2021;49(4):798-814

Generative Chemie zur schnellen Identifikation und Evaluierung potentieller Wirkstoffkandidaten



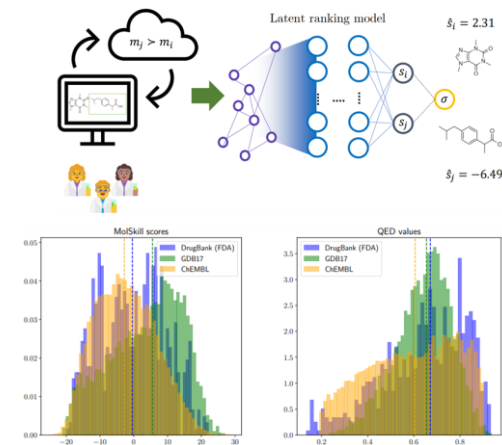
KI-Vorhersagemodelle: Bestimmung von Arzneimittel-relevanten Eigenschaften vor Synthese und Testverfahren

- Beispiel: intrinsische Clearance (CL_{int}) -> Geschwindigkeit, mit der Substanzen in den Leberzellen abgebaut werden [1]



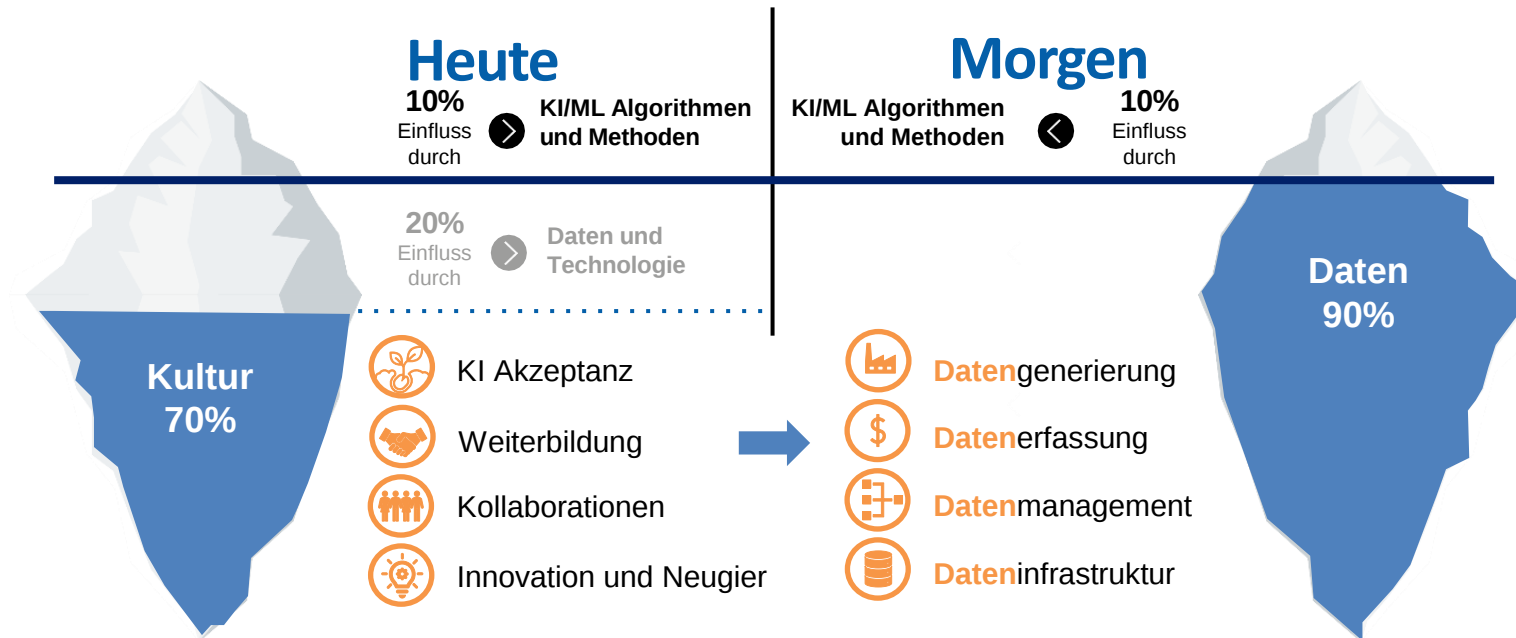
[1] Rodríguez-Pérez, R., Trunzer, M., Schneider, N., Faller, B., & Gerebtzoff, G. (2022). Multispecies Machine Learning Predictions of In Vitro Intrinsic Clearance with Uncertainty Quantification Analyses. *Molecular Pharmaceutics*, 20(1), 383-394.

- Beispiel: “Human in the loop model” -> Lernen von chemischer Intuition [2]



[2] Choung, OH., Vianello, R., Segler, M. et al. Extracting medicinal chemistry intuition via preference machine learning. *Nat Commun* 14, 6651 (2023).

KI Erfolgsfaktoren



KI in der Arzneimittelentwicklung – Fazit

Strategische Massnahmen

Kultureller Wandel & Weiterbildung
Investition in Daten & Technologie

Langfristige Zielsetzung

Revolutionierung wissenschaftlicher
Entdeckungen
Verkürzung von Entwicklungszeiten

Grundlegende Erfolgsfaktoren

Nachhaltige Datenstrategie

Zuverlässige und skalierbare Recheninfrastruktur
Konstante "Lernkultur"

Strategische Partnerschaften & Kollaborationen

Verantwortungsvoller und regulierter Umgang mit KI

[Our commitment to ethical and responsible use of AI | Novartis](#)

Acknowledgements

- **Nadine Schneider**
- Andy Collard
- Anna Vulpetti
- Astrid Stroobants
- Bulent Kiziltan
- Caroline Gubser-Keller
- Cihan Soylyu
- Cristina Nieto-Oberhuber
- Cynthia Hong
- David Cotter
- Finton Sirockin
- Fiona Marshall
- Florian Nigsch
- Gianluca Santarossa
- Halil Koch
- Henrik Moebitz
- Holger Hoefling
- Hubert Misztela
- Ismael Galer
- Jean Quancard
- Jean-Remy Marchand
- Jeremy Jenkins
- Jessica Lanini
- John Manchester
- José Duca
- Julian Rametta
- Julien Lorber
- Jullien Rey
- Jürgen Wagner
- Kaila Margrey
- Ken Yamada
- Kian Tan
- Klemens Hoegenauer
- Konstanze Hurth
- Lara Czabaniuk
- Margaret Ma
- Martin Missbach
- Matthias Bauer
- Michal Pikusa
- Mike Fortunato
- Muneto Mogi
- Nikita Popov
- Nikolas Fechner
- Ohhyeon Choung
- Paolo Tosco
- Pascal Furet
- Philipp Khuc Trong
- Pier Luca D'Alessandro
- Ralf Glatthar
- Randy Roy
- Raquel Rodriguez Perez
- Richard Lewis
- Rishi Gupta
- Robin Fairhurst
- Ross Strang
- Simona Cotesta
- Solène Miasiewicz
- Stefanie Flohr
- Steffen Renner
- Tara Conforto
- Veronika Ehmke
- Vicki Feher
- William Godínez
- Yves Ruff

GDC CADD team

BR data science community

BR computational science counsel

Collaborators



Everyone else who contributed to the projects and ideas presented here!

Thank you!

Nächster Anlass PG BFI

PG BFI BILDUNG FORSCHUNG INNOVATION
GP FRI FORMATION RECHERCHE INNOVATION
FORMAZIONE RICERCA INNOVAZIONE

Frühlingssession: Donnerstag, 20. März 2025

Ausklang

Herzlichen Dank!