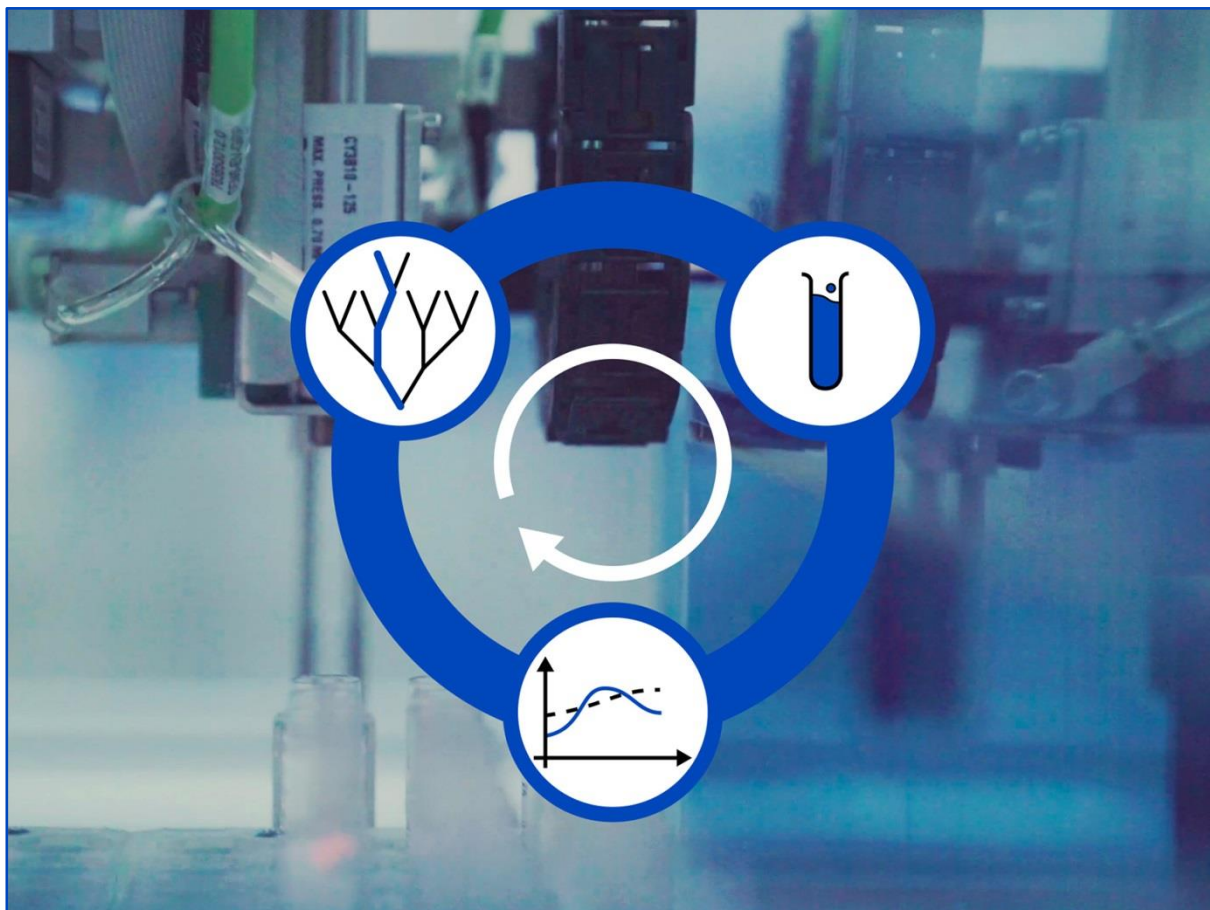


SELF-DRIVING LABS



© unsplash.com/Testalize.me; Fabian Fischer

ZUSAMMENFASSUNG

Self-Driving Labs (SDL) sind Labore, die vollautomatisiert Versuchsreihen durchführen können. Grob gibt es dabei drei Schritte: Mittels Künstlicher Intelligenz (KI) wird eine Versuchsanordnung entworfen. Im nächsten Schritt wird das Experiment mittels Roboter ohne menschliches Zutun durchgeführt. Das Ergebnis des Versuchs wird wiederum automatisiert evaluiert und bietet die Grundlage für die nächsten Versuche. Auf diese Weise lässt sich eine enorme Beschleunigung erzielen: Einerseits, weil durch die Abwesenheit von Laborant:innen Versuche rund um die Uhr durchgeführt werden können; andererseits, weil durch intelligente Steuerung der Versuchsreihen gezielter nach neuen Stoffen, Molekülen und Proteinen gesucht werden kann. Weiters erlauben SDLs überregionalen Zugang, damit einher geht allerdings auch das Risiko von Cyberattacken. Weitere Hürden stehen der Realisierung der Potentiale von SDLs im Weg, u. a. die schlechte Datenlage, fehlende Interoperabilität von Instrumenten, mangelhafte Verfügbarkeit von passender Software und hohe Investitionskosten.

Vollautomatisierte Labore zur Effizienzsteigerung und Beschleunigung wissenschaftlicher Entdeckungen

ÜBERBLICK ZUM THEMA

Fortschritte der Automatisierung und KI führen auch in den Wissenschaften zu neuen Praktiken des Forschens. Durch das Zusammenspiel von mechanischer Automatisierung, Datenerhebung und -analyse sowie steigender Rechenleistung ist der Betrieb von Labors in einigen Anwendungsbereichen im Umbruch begriffen. Anders als der Begriff vermuten lassen könnte, handelt es sich bei „Self-Driving Labs“ nicht um Labors in selbstfahrenden Autos, sondern um vollautomatisierte Laboratorien zur beschleunigten und gezielteren Durchführung von Experimentreihen (Callaway, 2024b). Sie sind besonders für Chemie, Biotechnologie und Materialwissenschaften relevant (Abolhasani & Kumacheva, 2023; Martin et al., 2023). Primäres Ziel ist dabei in der Regel, Kombinationen von Grundelementen zu finden, die bestimmte gewünschte Eigenschaften aufweisen, also z. B. Moleküle, Materialien und Proteine. SDLs stellen dabei einen vollständig automatisierten geschlossenen Kreislauf bestehend aus grob drei Schritten dar: Erstens wird mittels KI ein vielversprechendes Experiment entworfen. Dieses Experiment wird, zweitens, dank Robotern vollautomatisch durchgeführt. Schließlich werden über das Experiment umfangreiche Daten gesammelt und analysiert. Darauf basierend entscheidet die KI, wie das nächste Experiment durchgeführt wird – der Kreislauf ist somit geschlossen.

SDLs können daher Experimentreihen ohne menschliche Intervention durchführen. In weiterer Folge können sie auch 24 Stunden, sieben Tage die Woche durchgehend arbeiten und schon alleine dadurch eine Beschleunigung erreichen (Martin et al., 2023). Darüber hinaus verspricht aber auch die automatische Auswahl vielversprechender Versuchsanordnungen eine bessere Steuerung der Experimente und das Vermeiden von wenig aussichtsreichen Versuchen (Abolhasani & Kumacheva, 2023). Zur Identifizierung erfolgversprechender Versuchsanordnungen können einerseits bereits durchgeführte Experimente herangezogen werden, andererseits kann auch auf (maschinenlesbar aufbereitete) wissenschaftliche Literatur sowie KI-gestützte Modellberechnungen zurückgegriffen werden, wie etwa die Vorhersage von Proteinstrukturen durch Google DeepMinds AlphaFold (Callaway, 2024a).

Unterm Strich soll dadurch die Anzahl der notwendigen Experimente reduziert werden, was auch zu geringerem Ressourcenverbrauch führen würde (Abolhasani & Kumacheva, 2023). Denn SDLs sind besonders in jenen Bereichen attraktiv, wo das Zusammenspiel verschiedener Faktoren untersucht wird. Dabei geht es unter anderem um die einzelnen Bausteine (z. B. Moleküle und Aminosäuren), deren Anordnung bzw. Struktur und um die Umgebungsbedingungen, unter denen die Experimente durchgeführt werden. Je mehr Faktoren variiert werden, desto größer wird die Anzahl der möglichen Versuchsanordnungen – und zwar exponentiell (Abolhasani & Kumacheva, 2023).

Neben der Beschleunigung und Ressourcenschonung ist eine bessere Dokumentation der Experimente ein positiver Nebeneffekt von SDLs: Die Formalisierung und Digitalisierung aller Aspekte der Experimente sind eine notwendige Voraussetzung, um sie vollautomatisiert durchführen zu können. Die systematische Erfassung umfangreicher Daten kann einerseits der wissenschaftlichen Community

Vollautomatisierte Steuerung von Labor-Experimenten mittels Automatisierung und KI

Effizientere Suche nach neuen Molekülen, Materialien und Proteinen

Höhere Auslastung durch Vollautomatisierung

Reduzierung des Ressourcenverbrauchs durch Reduktion der Versuche dank KI

Systematische Sammlung von Daten

helfen sowie zu besserer KI führen, andererseits können die Datenmengen auch bei der Modellierung sogenannter Digital Twins der untersuchten Materialien oder biologischen Systeme behilflich sein, da durch die Experimente Daten über Funktion und Kausalität gesammelt werden können (Martin et al., 2023) (siehe auch *Digitale Patient:innen-Zwillinge*).

Grundsätzlich gibt es verschiedene Ansätze, vollautomatisierte Experimente durchzuführen (Abolhasani & Kumacheva, 2023). Eine Möglichkeit ist, gänzlich neue, automatisierbare Laborinstrumente zu entwickeln und einzusetzen. Ein pragmatischer Ansatz besteht darin, einen mobilen Roboterarm so zu programmieren, dass er in einem für Menschen gestalteten Labor sämtliche Arbeitsschritte durchführen kann (d. h. Maschinen bedienen und mit Material hantieren). Für manche Versuchsanordnungen ist es auch möglich, Flüssigkeiten mit Pumpen und Schläuchen automatisiert zu transportieren. Essentiell ist für das Gelingen eine erfolgreiche Datenweitergabe zwischen den einzelnen Schritten eines Zyklus.

*Verschiedene Ansätze
zur mechanischen
Automatisierung*

Bisher gibt es allerdings erst wenige vollständig automatisierte Labore. Während es in der synthetischen Chemie und den Materialwissenschaften bereits einige funktionierende SDLs gibt, sind die Herausforderungen im Bereich der synthetischen Biologie größer (Martin et al., 2023). Hier werden SDLs auch unter dem Begriff „Biofoundries“ diskutiert und entwickelt. Ein Beispiel in diesem Feld ist etwa „Eve“, ein SDL, das bekannte Medikamente auf ihre Eignung zur Malaria-Behandlung untersuchte (Martin et al., 2023). Ein jüngeres Beispiel ist AutoBio-Tech des Forschungszentrums Jülich zum automatisierten Gene-Editing von E.coli (Rosch et al., 2024). In Materialwissenschaften und Chemie werden SDLs bereits erfolgreich zur Beschleunigung der Entwicklung von Carbon-Nanoröhren und anderer Nanomaterialien, organischer Stoffe und Dünnschichtmaterialien eingesetzt (Abolhasani & Kumacheva, 2023).

*Bisher wenige
funktionierende
Self-Driving Labs*

Es gibt eine Reihe von Herausforderungen, welche die Umsetzung von SDLs schwierig gestalten. Die erste Hürde stellt passendes Labor-Equipment dar. Neben den hohen Kosten ist die fehlende Standardisierung von Labor-Instrumenten ein kritischer Punkt (Abolhasani & Kumacheva, 2023). Besonders Experimente der synthetischen Biologie setzen sich oft aus vielen Einzelschritten zusammen, die teilweise deutlich schwieriger automatisierbar und zu verketteten sind als in anderen Bereichen (Martin et al., 2023). Damit können je nach Experiment andere Schritte notwendig sein, sodass das Labor gegebenenfalls anders aufgebaut werden müsste. Das ist besonders für die Biologie gravierend, da hier (s. o.) oft mehr Schritte involviert sind (Martin et al., 2023).

*Hohe Investitionen
notwendig*

Eine zweite Hürde stellt die Verfügbarkeit von Daten dar. Um der KI eine gute Entscheidungsgrundlage zu bieten, benötigt es eine ausreichende Datenbasis mit hoher Qualität. Manche Autor:innen attestieren allerdings, dass das Datenmanagement vergangener Experimente oft nicht in hinreichender Qualität durchgeführt wurde (Martin et al., 2023). Außerdem haben unterschiedliche Labors teilweise maßgeschneiderte Software entwickelt, die oft nicht mit anderen Systemen interoperabel ist, was die Integration in SDLs erschwert (National Academies of Sciences, 2024). Doch auch Software zur Entscheidungsfindung, Steuerung des Labors und Auswertung der Daten ist für viele Anwendungsfälle noch nicht vorhanden (Abolhasani & Kumacheva, 2023).

*Schlechte Datenlage
als Hindernis*

Drittens benötigen SDLs stark interdisziplinäre Expertise: Expert:innen aus den Bereichen KI, Robotik, Prozessautomatisierung, Chemie, Molekularbiologie oder Materialwissenschaft müssen kollaborieren (Hysmith et al., 2024; Martin et al., 2023). Dabei sind aber die Kulturen dieser Disziplinen teils sehr verschieden, betrachten u.U. andere Probleme als lösenswert an und sehen einander möglicherweise als Konkurrenz bzw. „Eindringlinge“ im eigenen spezialisierten Feld (Martin et al., 2023).

*Interdisziplinäre
Zusammenarbeit
essentiell*

Was schließlich zur letzten Hürde führt, nämlich dass die Möglichkeiten von SDLs und der relevanten Kompetenzen in Curricula der relevanten Studiengänge derzeit nicht präsent sind (Martin et al., 2023). Weiters wird oft eine Kultur des Probierens und eher intuitiven Tüftelns in herkömmlichen Labors praktiziert (National Academies of Sciences, 2024). Die stark formalisierte, durchgeplante und regelförmige Art, wie SDLs betrieben werden müssen, steht dieser Praxis diametral entgegen. Diese beiden Arbeitsweisen gilt es, möglichst sinnvoll zu kombinieren, um die jeweiligen Vorteile nutzen zu können.

*Studienpläne bilden
notwendige Expertise
noch nicht
ausreichend ab*

Aus den genannten Herausforderungen erwachsen auch Chancen. Eine besteht darin, dass SDLs Forscher:innen auch remote über die Cloud zur Verfügung gestellt werden können. Es gibt bereits jetzt sogenannte Cloud-Labs, die bei Bedarf gemietet werden können und über Software gesteuert werden (National Academies of Sciences, 2024). Dadurch können auch Forscher:innen Zugang zu Labor-Infrastruktur bekommen, die den Aufbau eines eigenen Labors nicht finanzieren könnten. Außerdem ist dadurch der Kreis der potentiellen Nutzer:innen global. Entscheidend ist bei diesen Cloud-Labs allerdings, dass sowohl die durchzuführenden Experimente, als auch die durchführenden Personen bzw. Institutionen vorab sorgfältig überprüft werden, um verantwortungsvolle Forschung sicherzustellen.

*Cloud-Labs:
globale Zugänglichkeit
über Internet*

Die Frage des verantwortungsvollen Zugangs stellt sich auch bei der Entwicklung von Open-Source-Labor-Hardware. Mit der Forcierung von Open-Source-Hardware könnten die Kosten von SDLs gesenkt werden (Abolhasani & Kumacheva, 2023), was auch dem Problem fehlender Interoperabilität (s. o.) entgegenwirken würde. Wären die Baupläne allerdings frei zugänglich, würden auch Akteur:innen mit böswilligen Absichten leichteren Zugang zu wichtiger Laborausrüstung erhalten.

*Open-Source
Instrumente als
Chance*

Sowohl bei Cloud-Labs als auch bei SDLs stellen Cyberattacken eine große Gefahr dar: Durch die Steuerung mittels Software, die oft auch ans Internet angebunden ist, besteht folglich die Möglichkeit, dass Laborequipment für böswillige Zwecke verwendet wird (Martin et al., 2023; National Academies of Sciences, 2024). Entsprechend sind robuste Vorkehrungen gegen derartige Angriffe notwendig. Das schließt auch die Integrität der den Experiment-Designs zugrundeliegenden Daten ein: Sind diese fehlerhaft oder bewusst manipuliert, können Experimente fehlgeleitet werden. Daran anschließend kann von SDLs große Gefahr ausgehen, wenn sie vollständig unter der Kontrolle von böswilligen Akteur:innen stehen. In diesem Fall können die Effizienzgewinne von SDLs auch von diesen kapitalisiert werden, etwa zur Synthese neuartiger Viren, Giften, Drogen oder anderweitig gefährlicher Materialien (Maffettone et al., 2023; Martin et al., 2023).

*Cyberattacken
als Risiko*

*Beschleunigung
der Erfindung neuer
Schadstoffe*

Auch gut intendierte selbstgesteuerte Experimentreihen können im Laufe der Zeit entgleisen, d. h. vom anfänglich vorgegebenen Ziel abweichen. Das unbeabsichtigte Resultat könnten Materialien oder Proteine sein, die ungewollte und gefährliche Eigenschaften besitzen (Martin et al., 2023). Wie dieses Risiko eingedämmt werden kann, ist noch unklar. Deshalb, aber auch um von den besonderen Fähigkeiten sowohl von KI als auch menschlicher Intelligenz und Intuition zu profitieren, ist es wichtig, auszuloten, welche Rolle Menschen im Kontext von SDLs zukommt (Hysmith et al., 2024).

Gefahr von entgleisenden Experimenten

RELEVANZ DES THEMAS FÜR DAS PARLAMENT UND FÜR ÖSTERREICH

SDLs können große Fortschritte und eine Beschleunigung bei der Entdeckung neuartiger Materialien, Moleküle und Proteine bringen. Die Entwicklung von SDLs wiederum ist noch relativ jung mit vielen offenen Fragen und Herausforderungen. Dadurch entstehen neue Chancen, aber es gilt auch, damit einhergehende Risiken zu kontrollieren. Für das österreichische Parlament gilt es daher sicherzustellen, dass bestehende Regulierungen diesen neuen Möglichkeiten Rechnung tragen oder entsprechend aktualisiert werden. Dazu gehören einerseits Regelwerke mit Bezug auf chemische und biologische Gefahrenstoffe (z. B. Seveso-III-Richtlinie¹, Systemverordnung²). Weiters stellt sich die Frage, inwiefern Gesetze, die über den Arbeitnehmer:innenschutz die Prozesssicherheit regulieren³ bei Self-Driving Labs anwendbar sind oder die Abwesenheit von Personal hier zu einer Gesetzeslücke führen kann.

Regulative Rahmenbedingungen für Self-Driving Labs

Für Österreich besonders relevant ist die Möglichkeit, auf SDLs auch über das Internet zugreifen zu können. Damit könnte sich einerseits Österreich als Standort entsprechender SDLs profilieren und einer internationalen Forschungsgemeinschaft zugänglich machen, andererseits können österreichische Forscher:innen auf SDLs zugreifen, ohne diese selbst betreiben zu müssen. Gerade Österreichs starke Position in den für SDLs relevanten Bereichen könnte eine gute Ausgangsbasis bieten. Schließlich ist mit AITHYRA auch ein neues Institut der Akademie der Wissenschaften an der Schnittstelle KI und Lebenswissenschaften im Aufbau begriffen,⁴ das für SDLs anschlussfähig ist und große internationale Sichtbarkeit schaffen könnte.

Österreich als Standort mit viel relevanter Expertise

¹ bmk.gv.at/themen/klima_umwelt/betrieblich_umweltschutz/anlagenbezogen_uws/seveso3.html.

² ris.bka.gv.at/GeltendeFassung.wxe?Abfrage=Bundesnormen&Gesetzesnummer=20002297.

³ Z. B. die große Vielfalt an Rechtsnormen, die auf die Sicherheit im Umgang mit Arbeitsstoffen abstellen: arbeitsinspektion.gv.at/Arbeitsstoffe/Allgemeines/Allgemeines.html.

⁴ oeaw.ac.at/aithyra/.

VORSCHLAG WEITERES VORGEHEN

Über den aktuellen Stand von SDLs in der österreichischen Forschungs- und Entwicklungslandschaft gibt es noch keinen umfassenden Überblick. Entsprechend wäre es wichtig, den Status quo unter Einbeziehung der relevanten Stakeholder:innen zu erheben. Außerdem wäre es wichtig, die aktuell gültigen Regulierungen zu untersuchen. Weiters sollte die Entwicklung von KI-Tools, die den Aufbau von SDLs ermöglichen, im Blick behalten werden, da diese möglicherweise die Zugangsschwelle für böswillige Akteur:innen herabsetzen (National Academies of Sciences, 2024).

*Besserer Überblick
über Status Quo in
Österreich notwendig*

ZITIERTE LITERATUR

- Abolhasani, M., & Kumacheva, E. (2023). The rise of self-driving labs in chemical and materials sciences. *Nature Synthesis*, 2(6), 483-492.
- Callaway, E. (2024a). Developers of AlphaFold win Chemistry Nobel. *Nature*, 634, 525-526.
- Callaway, E. (2024b). 'Self Driving' Lab Uses AI And Robotics To Improve Proteins. *Nature*, 625, 436.
- Hysmith, H., et al. (2024). The future of self-driving laboratories: from human in the loop interactive AI to gamification. *Digital Discovery*, 3(4), 621-636.
- Maffettone, P. M., et al. (2023). What is missing in autonomous discovery: open challenges for the community. *Digital Discovery*, 2(6), 1644-1659.
- Martin, H. G., et al. (2023). Perspectives for self-driving labs in synthetic biology. *Curr Opin Biotechnol*, 79, 102881, [ncbi.nlm.nih.gov/pubmed/36603501](https://pubmed.ncbi.nlm.nih.gov/36603501).
- National Academies of Sciences, Engineering, and Medicine. (2024). *Artificial Intelligence and Automated Laboratories for Biotechnology: Leveraging Opportunities and Mitigating Risks: Proceedings of a Workshop—in Brief*.
- Rosch, T. M., et al. (2024). AutoBioTech – A Versatile Biofoundry for Automated Strain Engineering. *ACS Synth Biol*, 13(7), 2227-2237, [ncbi.nlm.nih.gov/pubmed/38975718](https://pubmed.ncbi.nlm.nih.gov/38975718).