

Sekundenschnell, analysestark und sicher

Quantencomputer in der Medizin

Autor: M. Kindler

Entwicklungsschritte

Im Herbst 1983 startete an der CalTech der geniale Physiker und spätere Nobelpreisträger *Richard Feynman* seine Vorlesungsreihe über das maschinelle Rechnen. In seinem Buch „Feynman Lectures On Computation“ beschrieb er in Kapitel 6 „Quantum Mechanical Computers“ ein Quantensystem zur Durchführung von Berechnungen. 1994 löste *Peter W. Shor* das jahrtausendealte Faktorisierungsproblem mit einem Quantenalgorithmus, allerdings nur theoretisch. Denn für eine Entschlüsselung eines Textes mit einem 2048-Bit-Schlüssel benötigt heute ein Supercomputer 10^{34} Schritte und 317 Billionen Jahre. Ein Quantencomputer mit 4.000 Qubits wäre nach zehn Millionen Schritten in zehn Sekunden fertig.

Die Verwendung von Quantenunsicherheit erlaubt es Quantencomputern, eine unknackbare Verschlüsselung für sensible Informationen bereitzustellen, insbesondere für die sensiblen Daten, die das Gesundheitssystem über unseren Körper generiert, wie elektronische Gesundheitsakten, genetische und genomische Daten. Im Januar 2018 zeigte ein gemeinsames China-Österreich-Team, dass auch eine Kommunikation zwischen Kontinenten mit Quantenverschlüsselung möglich ist. Die Kombination der Quantenkommunikation von Satelliten mit dem Glasfasernetz in Peking war der erste praktische Beweis für die Technologie, die es Netzwerken ermöglicht, die Quantenverschlüsselung zu verwenden.

Seit 2017 gewährt IBM Q Experience der interessierten Öffentlichkeit den Zugriff auf ein Cloud-basiertes Quantencomputing und erweiterte im Mai 2018 das System auf zwei 5-Qubit-Prozessoren und einen 16-Qubit-Prozessor. Mittlerweile haben über 160.000 Benutzer (Stand Nov. 2019), vornehmlich aus den Ländern USA, Russland und Kanada, mit der Open Source Software Qiskit über fünf Millionen Experimente durchgeführt und darüber 80 wissenschaftliche Arbeiten veröffentlicht. Wer es mal selbst ausprobieren möchte: <https://quantum-computing.ibm.com/> Und im Oktober 2019 verkündete Google die Sensation: die quantum supremacy. Der Quantencomputer mit 53 Qubits löste eine spezielle

>> Für eilige Leser

Die Quantenmechanik steht für Hochleistung in der Analyse und mithin ungeahnte technologische Möglichkeiten auch im Bereich medizinischer Anwendungen und Forschung. Was genau vermag der Quantencomputer hier zu leisten? – Der Beitrag skizziert einige Einsatzmöglichkeiten: von pharmazeutischen Entwicklungen über den Digital Twin und Big-Data-Analysen bis hin zu molekularbiologischen Innovationen.

Rechenaufgabe in 200 Sekunden, für die der welt schnellste Supercomputer angeblich 10.000 Jahre benötigt hätte. IBM konterte mit der Gendarstellung, dass die Rechenoperationen auch mit einem klassischen Computer in 2,5 Tagen gelöst werden könnten, und stellte damit den strengen Nachweis der Quantenüberlegenheit generell in Frage. Auch wenn Googles Sycamore Computer mit seiner Inzellösung von praktischen Anwendungen noch weit entfernt ist, so wird doch deutlich, dass der Hype für Quantum computing nun durchstartet.

Im Rahmen der eine Milliarde Euro schweren Flaggschiff-Initiative der EU soll bis Ende 2021 am Forschungszentrum Jülich der 100-Qubit-Computer OpenSuperQ gebaut werden. Nebenbei bemerkt: China investierte zehn Milliarden Dollar in ein nationales Quantenlabor, welches 2020 die Arbeit aufnehmen soll. Google arbeitete seit 2011 an seinem eigenen Quantencomputer und gründete 2013 in Zusammenarbeit mit der NASA das Quantum Artificial Intelligence Laboratory.

Ein französischer Ingenieur zeigte aktuell, dass es auch preisgünstiger möglich ist, einen einfachen Quantencomputer zu bauen. Auf dem 36. Jahreskongress des Chaos Computer Clubs (36C3) Ende Dezember 2019 in Leipzig berichtete der

Gründer von Opale Security *Yann Allain*, wie er mit einem Budget von 15.000 Euro einen Quantencomputer „in seiner Garage“ zusammenbaut. [1] Die künftigen Einsatzgebiete der Quantenrechner sind nicht nur in der Materialforschung, dem Supply Chain Management, der Logistik und dem Finanzwesen zu sehen. In den vergangenen drei Jahren sind die öffentlichen Fördermittel weltweit beispiellos gestiegen. Weitere Schwerpunkte sind die künstliche Intelligenz und die pharmazeutische Forschung.

Design von Medikamenten

Gerade in der Quantenchemie werden besondere Durchbrüche erwartet, denn durch quantenmechanische Berechnungen ist es im Prinzip möglich, alle chemischen Phänomene quantitativ vorherzusagen. Allerdings können selbst die größten Supercomputer nur einfache Chemiereaktionen modellieren. Quantencomputer erschließen völlig neue Sichtweisen zum Verständnis der komplizierten Bindungen und Reaktionen von Molekülen. Der Einsatz ermöglicht nicht nur die Entwicklung neuer Katalysatoren, organischer Solarzellen und leistungsstärkerer Batterien, sondern durch die Untersuchung der Substanzen mit ihren Wechselwirkungen bis in die Quantenebene hinein auch maßgeschneiderte Medikamente für die personalisierte Medizin. Zurzeit arbeitet man an der quantenmechanischen Simulation des Krebstherapeutikums Calicheamicin. Das neuronale Netzwerk AtomNet von Atomwise untersucht täglich mehr als 100 Millionen Verbindungen aus einer Datenbank molekularer Strukturen. In weniger als einem Tag fand der Supercomputer zwei Kandidaten zur Behandlung des Ebola-Virus.

Am Institut für Quantenoptik und Quanteninformatik in Innsbruck verwendeten die Wissenschaftler einen Ionenfallen-Quantencomputer mit 20 Quantenbits und simulierten auf bis zu vier Quantenbits die Energiezustände der Bindungen von molekularem Wasserstoff und Lithiumhydrid. Ein Team von der ETH Zürich und Microsoft Research präsentierte erstmals die Berechnung einer komplexen chemischen Reaktion mithilfe eines Quantencomputers „von moderater Größe“. Am Beispiel des Enzyms Ni-

trogenase zeigten die Forscher einen Weg auf, wie mit nur 100 bis 200 Qubits der hochkomplexe Reaktionsmechanismus innerhalb von einigen Tagen aufgeklärt werden kann. Im Juni 2019 startete der Pharma-Multi Merck eine Kooperation mit dem Karlsruher Start-up HQS Quantum Simulations zur Entwicklung von Software für die Quantenchemie.

Virtuelle Menschen

Ein besonders vielversprechendes Arbeitsgebiet in der Medizin ist die Schaffung von virtuellen Menschen durch individualisierte Computersimulationen – die Digital Twins. In den 1970er-Jahren entwickelten *Guyton* und Kollegen ein mathematisches Modell für die Simulation physiologischer Vorgänge bei der Regulierung des Blutdrucks. Dreißeig Jahre später wurde auf diesen Grundlagen HumMod, etwas hochtrabend als „das vollständigste mathematische Modell der menschlichen Physiologie, das jemals erstellt wurde“ vorgestellt. Mehr als 1.500 Gleichungen beschreiben 8.000 Variablen wie Körperflüssigkeiten, Kreislauf, Elektrolyte, Hormone, Stoffwechsel und Hauttemperatur. Im Oktober 2018 wies allerdings ein Team um *Theodore W. Kurz* durch einen Validierungstest ein Versagen der Computersimulationen bei klinisch realistischen Salzaufnahmen nach.

Die Entwicklung von digitalen Zwillingen nimmt dennoch rasante Formen an. An der Stanford University wurde mit The Living Heart auf der Basis eines 2-D-Ultraschall-Scans eines Menschen ein personalisiertes 3-D-Modell eines Herzens erstellt, um damit Medikamente während der Entwicklung auf schädliche Nebenwirkungen zu testen. Siemens Healthineers stellte eine Datenbank mit mehr als 250 Millionen kardiologischen Bildern, Berichten und Betriebsdaten zusammen. Ein KI-System beobachtete daraufhin in einer sechsjährigen Studie einhundert digitale Herz-Zwillinge von Patienten mit Herzinsuffizienz, prognostizierte den Therapieverlauf und verglich ihn mit den tatsächlichen Ergebnissen. Hewlett Packard Enterprise arbeitet im Blue Brain Project an der digitalen Simulation des Säugetiergehirns, aber auch IBM, Microsoft, General Electric, Philips, MIT und viele andere forschen mit Hochdruck am virtuellen Menschen.

In digitalen Zwillingen kann man somit individuell Krankheitszustände und -anfälligkeiten sowie Einflussfaktoren wie Alter, Lebensstil und genetischer Hintergrund abbilden. In Verbindung mit menschlichen Organen auf einem Chip (Lab-on-a-chip, Organ-on-a-chip, Patient-on-a-chip) lassen sich langwierige und kostspielige klinische Studien vermeiden und Wirkstoffe schneller entdecken.

Wie arbeitet ein Quantencomputer?

Das physikalische System eines Computers ist ein Chip, in dem Informationen im Binärsystem mit 1 oder 0 codiert sind. Ein Quantencomputer nutzt den Quantenzustand einzelner Atome (Qubits), der durch Überlagerungen alle möglichen Wahrscheinlichkeiten zwischen 1 und 0 enthält. Daher können mehrere Probleme gleichzeitig simuliert und gelöst werden. Die Programmierung durch Verschaltung in Quantenregister erfolgt mit dem Quantenphänomen der Verschränkung. Dabei bildet ein Quantenobjekt mit einem anderen eine Einheit, die eine Änderung eines Partners sofort mit dem anderen kommuniziert, egal wie weit die beiden voneinander entfernt sind (Spukhafte Fernwirkung). Das Quantenregister enthält nun alle möglichen Lösungen der programmierten Aufgabe zugleich. Beim Auslesen des Registers bricht der Quantenzustand durch den Störkontakt mit der Umgebung zusammen (Dekohärenz). Für die nächste Rechnung muss das Quantenregister erneut verschränkt werden.

Big-Data-Analysen

Die wachsende Verfügbarkeit der Daten von Wearables, Insideables und E-Health-Apps ermöglicht nicht nur die Erstellung personalisierter Modelle für Patienten, die durch die übermittelten Gesundheits- und Lebensstilparameter kontinuierlich angepasst werden können. Big-Data-Analysen erlauben auch den Vergleich der individuellen Daten mit der gesamten Bevölkerung für eine schärfere statistische Definition des normalen oder gesunden Zustands, um maßgeschneiderte Aktionen für die Gesundheitsvorsorge zu entwickeln.

Persönliche Gesundheitssensoren sendeten 2013 bereits 4,4 Zettabyte (gleich 4,4 Milliarden Terabytes) an medizinischen Daten. 2020 wird mit einer Verzehnfachung gerechnet. Nur noch Quantencomputer werden in der Lage sein, diese enormen Datenmengen zu verarbeiten und zu verstehen. Hinzu kommen über 2.000 Gentests, die den Patienten ihre genetischen Risiken für Krankheiten mitteilen und die Mediziner bei der Diagnose von Krankheiten unterstützen. Die Sequenzierung des gesamten Genoms ist für weniger als tausend Dollar erhältlich.

Quantencomputer ermöglichen eine schnellere Sequenzierung und eine umfassendere Analyse des gesamten Genoms. Die Vorhersagen (prädiktive Gesundheit) sind zuverlässiger, da Quantencomputer mehr Informationen als herkömmliche Computer berücksichtigen und sogar jedes Ge-

nom in Gesundheitsakten integrieren können. Die Überwachung von Patienten durch sensorische Systeme könnte viele Krankenhausbesuche überflüssig machen.

Auf PubMed gibt es 31 Millionen medizinische Artikel. Ein einzelner Arzt kann diese Informationen in seinem Leben nicht lesen, zudem würden zwischenzeitlich Millionen neuer Studien herauskommen. Die künstliche Intelligenz IBM Watson wurde dazu entwickelt, um Millionen von Studien in einer Sekunde durchzuarbeiten. Dadurch kann sie alle Studien zu einer Fragestellung auf einmal durchgehen, Zusammenhänge und Ursachen finden, und dabei Diagnosen oder Behandlungsmöglichkeiten entdecken, die der menschliche Arzt selbst niemals hätte herausfinden können. Quantencomputer könnten eine erweiterte Version von PubMed erstellen, in der sie die Informationen gleich in Form von Qubits darstellen, da niemand außer dem Computer die Studien „lesen“ würde.

Quanteneffekte in lebenden Zellen

Allerdings müssen sich die Fehlerraten der Qubits für eine praktische Anwendung noch wesentlich verringern, denn Quantenchips sind sehr instabil und anfällig für Störungen durch Wärme und Strom. Sie benötigen zur Abschirmung des molekularen Rauschens eine Temperatur nahe dem absoluten Nullpunkt und eine totale Isolation von der Umwelt durch ein Hochvakuum. Daher wurden die Quanteneffekte bislang nur in Molekülen, Atomen und sub-atomaren Teilchen beobachtet. Jeglicher Kontakt der Quanten mit der Außenwelt führt zu einem Kollaps der Wellenfunktion (Dekohärenz) und das System funktioniert nur noch nach den klassischen Prinzipien der Thermodynamik.

Allerdings beruht fast unsere gesamte moderne Technologie auf Quantenmechanik: Halbleiterchips, Laser, Smartphones, MRT-Scanner, GPS-Navigation, Elektronenmikroskopie könnten ohne Quanteneffekte nicht funktionieren. Selbst die Kernfusion der Sonne findet nur über den Tunneleffekt statt. In den letzten Jahren beobachteten Physiker auch Quantenphänomene in Salzkristallen und suchten nach Prozessen, Mechanismen oder Phänomenen in lebenden Organismen, die nur durch Quantenmechanik erklärbar sind.

In den Zellen fanden Quantenbiologen plötzlich das ganze Sortiment der Quantenwelt. Der Tunneleffekt befähigt die Mitochondrien in den Zellen, Oxidationsenergie aus ATP zu gewinnen. Vermutlich ermöglichen getunnelte Elektronen unseren Geruchssinn, indem nicht nur die Form, sondern auch die Schwingungsfrequenz eines Moleküls analysiert wird. Dagegen spielen ge-

tunnelte Protonen in den Enzymreaktionen unseres Stoffwechsels eine wichtige Rolle, so auch beim Abbau von Alkohol, indem sie chemische Reaktionen um viele Größenordnungen beschleunigen. Untersucht wird noch deren Rolle bei der Teilung des Erbguts und dabei entstehenden Mutationen.

In der Netzhaut eines Rotkehlchens fand man 2004 ein lichtsensibles Protein namens Cryptochrom mit einem quantenmechanisch verschränkten Elektronenpaar, welches auf das extrem schwache Erdmagnetfeld reagiert und so die Kompassnavigation ermöglicht.

Bei der pflanzlichen Fotosynthese werden Lichtphotonen von Chloroplasten eingefangen, die mithilfe des Chlorophylls eine fast 100-prozentige Effizienz der Energienutzung und Produktion von organischen Molekülen aufweisen. Das eingefangene Photon sucht sich als Welle den effizientesten Weg zu einem Reaktionszentrum, wo es fast verlustfrei in chemische Energie um-

gewandelt wird. Dieser Vorgang nutzt den Welle-Teilchen-Dualismus in einem abgeschirmten Lichtsammelkomplex mit etwa 50 Atomdurchmessern. Das molekulare Rauschen der Zellen unterstützt die Quantendynamik durch exakt aufeinander abgestimmte Schwingungen.

Mit dem Einfluss der Quantenwelt auf das Leben befasste sich schon vor 75 Jahren der Vater der Quantentheorie, *Erwin Schrödinger*. Zehn Jahre nach der Verleihung des Nobelpreises für Physik zog *Schrödinger* auf der Flucht vor Hitler nach Dublin und hielt 1943 vor 400 Zuhörern, dem irischen Premierminister inklusive, drei Vorlesungen zum Thema „Was ist Leben?“. 1944 veröffentlichte er das gleichnamige Buch, welches den Grundstein für die Molekulargenetik legte und den Lebensweg von vielen Forschern wie *Francis Crick* und *James Watson*, den Entdeckern der DNS-Helix, bestimmte.

In seinem Buch schreibt er: „Auf molekularer Ebene haben lebende Organismen eine be-

stimmte Struktur, die ganz anders ist als das thermodynamische Gerangel von Atomen und Molekülen in unbelebter Materie von gleicher Komplexität.“

Quantum Brain

„Können wir selbst Quantencomputer sein und nicht nur clevere Roboter, die Quantencomputer entwerfen und bauen?“, fragte sich *Matthew Fisher* von der University of California Santa Barbara und stellte ein internationales Team von Forschern der Quantenphysik, Molekularbiologie, Biochemie, Kolloidwissenschaft und Verhaltensneurowissenschaften zusammen. In seinem Quantum Brain Project sucht er experimentelle Beweise für die alte Idee von *Roger Penrose*, dass das Gehirn in seinen noch ungeklärten Funktionen wie ein Quantencomputer arbeitet. Ein Schwerpunkt konzentriert sich auf die Überwachung der Quantenverschränkung zwischen zwei

Anzeige

Anzeige VDI

Phosphor-Kernspins in Mitochondrien, wenn diese für Stoffwechselprozesse in einem Molekül miteinander verbunden sind – ein biochemisches Qubit sozusagen.

Ausblick

Wie schafft es aber das Leben, die Quantenkohärenz im warmen und feuchten Umfeld der Biomoleküle in den Zellen aufrechtzuerhalten? Nun, die Quanteneffekte laufen zeitlich begrenzt in einem einzelnen Molekül ab, welches mit seiner geordneten Struktur die Überlagerung gegenüber ungeordneter Energie von außen abschirmt. Wäre es möglich, die technischen Quantencomputer durch Nutzung der jahrmillionenalten Lösungen in der Natur auch bei Zimmertemperatur zu betreiben, würde dies die Entwicklung schlagartig revolutionieren.

Der Quantenbiologe *Jim Al-Khalili* hinterfragt sogar den Sterbeprozess insgesamt: „Kann diese Abschirmung nicht mehr aufrechterhalten werden und der Zusammenbruch der Wellenfunktion, die Dekohärenz tritt ein, dann kommen lebenswichtige Prozesse zum Stillstand und die Zelle stirbt ab. Das Aufrechterhalten dieser Quanteneffekte wäre damit sozusagen ein Grundmerkmal von Leben.“ [2]

Literatur

- [1] https://media.ccc.de/v/36c3-10808-build_you_own_quantum_computer_home_-_99_of_discount_-_hacker_style
 [2] Zitat aus: Al-Khalili J, McFadden J (2014) *Life on the edge*. Bantam, London

Dokumentation: M. Kindler. Quantencomputer in der Medizin. *mt|medizintechnik* 140 (2020), Nr. 1, S. 25

Schlagwörter: Quantenmechanik, Quantencomputer, Digital Twin, Big Data, Tunneleffekt, Verschränkung, Quantenbiologie

Autor

Manfred Kindler

IHK-vereidigter Sachverständiger für Medizintechnik
 E-Mail: manfred_kindler@yahoo.de

Intelligente Kniebandage

Die intelligente Kniebandage „Anthrokinemat“ soll Arthrose-Patientinnen und -Patienten künftig bei der richtigen Dosierung ihrer alltäglichen Bewegungen unterstützen. Dabei werden sämtliche relevanten Daten zur Belastung der Gelenke gesammelt und aufs Handy der Betroffenen übertragen. Die Grundlagen für die Entwicklung der Bandage haben in den vergangenen drei Jahren Sportwissenschaftler des Karlsruher Instituts für Technologie (KIT) mit Fördermitteln des Bundesministeriums für Wirtschaft und Energie (BMWi) geschaffen. Partner sind die Universität Bremen sowie der Bandagen-Hersteller Bauerfeind und das Sensortechnikunternehmen ITP. In einem zweiten Forschungsprojekt soll nun ein Prototyp entwickelt werden.

„Bei der Prävention und der Behandlung einer Arthrose-Erkrankung spielt außer Gewicht und Ernährung vor allem das richtige Maß an Bewegung eine wichtige Rolle“, sagt Sportorthopäde *Professor Stefan Sell* vom Institut für Sport und Sportwissenschaft (IfSS) des KIT. Dieses richtige Maß zu finden, sei allerdings keine einfache

Aufgabe und nur wenige Menschen und gut austrainierte Sportlerinnen und Sportler könnten die Signale ihres Körpers ohne fachliche Unterstützung richtig deuten. Der mit zahlreichen Sensoren ausgestattete Anthrokinemat soll Arthrose-Patientinnen und -Patienten deshalb vor dem Überschreiten der Belastungsgrenze per Warnsignal aufs Handy für mögliche Folgeschäden sensibilisieren. „Wer an Arthrose leidet, sollte sich am besten jeden Tag eine gewisse Zeit lang intensiv bewegen“, rät *Sell*. Eine übermäßige Belastung wie etwa eine mehrstündige Wanderung könne dagegen für Stress in den geschädigten Gelenken sorgen. Die Folge solcher Überbelastung seien oft wochenlange Schmerzen.

Als größte Herausforderung bei der bisherigen Entwicklung der Bandage bezeichnet *Professor Thorsten Stein*, Leiter des BioMotion Centers am IfSS, die Suche nach einem passenden Algorithmus zum Quantifizieren der Kniebelastung. „Die Sensoren können lediglich Bewegung messen, nicht die Belastung an sich. Bei der Arthrose dürfen die Gelenke aber nicht allzu stark belastet

werden – und deshalb müssen wir die Kräfte im Innern des Knies möglichst genau einschätzen können“, betont *Stein*. Zur Lösung dieses Problems sind Algorithmen des Maschinellen Lernens – künstliche neuronale Netze – im Einsatz. Dabei wird ein Algorithmus mit Bewegungsdaten trainiert: Der Algorithmus lernt im Laufe des Trainingsprozesses automatisch die mit einer Bewegung einhergehenden Kräfte im Knie zu schätzen. Teile dieser Forschungsergebnisse haben die Arbeitsgruppen von *Sell* und *Stein* bereits in der Fachzeitschrift *Sensors* publiziert. „Die Arthrose ist eine echte Volkskrankung“, sagt *Stefan Sell*. Laut den offiziellen Statistiken haben in Deutschland rund 35 Millionen Menschen radiologische Zeichen einer Arthrose und rund zehn Millionen davon sind manifest erkrankt. Weil der Gelenkverschleiß mit steigendem Alter zunimmt, leiden jeder vierte Bundesbürger über 50 Jahre und etwa 80 Prozent der über 75-Jährigen an einer Arthrose. Am häufigsten betroffen ist die Wirbelsäule, ebenfalls weit verbreitet sind Arthrosen an Knie- und Hüftgelenk. (*Presse KIT*)