

Kurznachrichten

Artificial Intelligence

Prädiktion des biologischen Abbaus chemischer Stoffe in der Umwelt mittels selbstlernender Rechnermodelle

Das BMBF finanziert im Rahmen eines Forschungsvorhabens zur Neustoffentwicklung von ökologisch fortschrittlichen Produkten ein computergestütztes System zur biologischen Abbaubarkeit chemischer Verbindungen, das fundierte Prognosen über die Abbaubarkeit von Stoffen ermöglicht. Das Projekt ist im März 1999 angelaufen und hat vorerst zwei Jahre Laufzeit.

Das Forschungsvorhaben ist ein Gemeinschaftsprojekt des Instituts für Medizinische Mikrobiologie und Hygiene, Fakultät für Klinische Medizin Mannheim der Universität Heidelberg (PD Dr. med. V. Mersch-Sundermann), der Abteilung Ökologie der BASF AG (Dr. D. Beimborn) und der Universität Konstanz (Prof. Dr. B. Schink, Prof. Dr. A. Cook).

Die neu entwickelten Rechnersysteme sollen einen breiten Einsatz finden:

1. Hauptsächlich sollen die Systeme die Entwicklung abbaubarer Stoffe unterstützen und den Aufwand für Abbauteils reduzieren. Mit der Übertragung von strukturspezifischen Erkenntnissen zur biologischen Abbaubarkeit bekannter Stoffe lassen sich fundierte Aussagen über neu synthetisierte Verbindungen treffen. Damit wird bereits frühzeitig eine umweltintegrierte Produktplanung ermöglicht.
2. Daneben sollen ältere Testergebnisse von bekannten Stoffen, wie sie z.B. im Rahmen der OECD-Guidelines durchgeführt wurden, überprüft werden, denn früher durchgeführte Tests entsprechen häufig nicht mehr den heutigen Standards.
3. In ähnlicher Weise können Testergebnisse und Bioassays miteinander verglichen und bewertet werden.

4. Die Systeme sollen generell die Abbaubarkeit von Stoffen beurteilen. Trotz umfangreicher Datenbestände kann derzeit von einer umfassenden Kenntnis und systematischen Aufarbeitung der biologischen Abbaubarkeit von Stoffen keine Rede sein.

5. Auch in der Nachsorge soll mit Hilfe der Rechnersysteme bei Produktionsstörungen und Störfällen eine schnelle Bewertung der Umweltauswirkungen auch im toxikologischen Sinne ermöglicht werden.

Das Projekt basiert auf der Entwicklung von Datenbanksystemen, wissensgestützten Expertensystemen ("knowledge based systems", KB-Systeme) sowie selbstlernenden Computermodellen ("machine learning", ML-Systeme) zur Ableitung von Strukturaktivitäten. Dabei soll nicht nur die prozentuale Wahrscheinlichkeit für die Abbaubarkeit chemischer Stoffe in der Umwelt errechnet werden, sondern durch die Erforschung der Zusammenhänge zwischen Molekülstruktur und Abbauverhalten eine Bewertung der mikrobiellen Abbaubarkeit für einzelne Stoffe und Stoffklassen möglich werden. Das Ziel ist eine möglichst umfassende Ermittlung der umweltrelevanten Daten, um Gesetzmäßigkeiten für gleichartige Stoffe oder chemische Strukturen abzuleiten. Als Ergebnis der Untersuchungen zu den Abbaumechanismen wird eine valide Übertragbarkeit von der biologischen Abbaubarkeit eines bekannten Stoffes auf einen unbekannten Stoff angestrebt.

Auf der Basis dieser Erkenntnisse werden an der Universität Heidelberg (Institut für Medizinische Mikrobiologie und Hygiene, Fakultät für Klinische Medizin Mannheim) ML- und KB-Systeme etabliert, auf deren

Grundlage Aussagen zur Bioabbaubarkeit bisher nicht untersuchter Substanzen getroffen werden können. Als Grundlage hierfür dienen die an der Case Western Reserve University, Cleveland (OH, USA) maßgeblich von Gilles Klopman und Herbert S. Rosenkranz entwickelten CASE- und META-Systeme. Neue Erkenntnisse können jederzeit von den Systemen aufgenommen werden, so daß auf der Basis des wachsenden Wissens ein ständiger "Lernprozess" des Rechnersystems stattfinden kann. Zu Abbauanalyse vergleicht das System beispielsweise die von ihm erkannten chemische Strukturen mit den Einträgen in Strukturdatenbanken. Finden sich gleiche oder ähnliche Molekülgruppen in den Datenbanken, werden die zugehörigen Strukturaktivitätsmodelle über mathematische Verfahren zu Abbauvorausagen verarbeitet und in einer Rangfolge tabellarisch zusammengestellt.

Ein weiterführendes Forschungsvorhaben ist für den 5. Forschungsrahmenplan bei der EU eingereicht, unter dem die Zusammenarbeit der zentralen europäischen Institute auf den Gebieten der KB- und ML-Systeme bei der Biodegradation chemischer Stoffe in der Umwelt geplant ist.

Weitere Informationen:

PD Dr. med. Volker Mersch-Sundermann
 Institut für Med. Mikrobiologie
 Fakultät für Klinische Medizin Mannheim der
 Universität Heidelberg
 Tel.: +49-621-3833-251
 Fax: +49-621-3833-816
 eMail: Volker.Mersch-
 Sundermann@IMH.MA.Uni-Heidelberg.de
 Internet: <http://webrum.uni-mannheim.de/klm/hygiene/www/index/html>

Ankündigung: Neue Zeitschrift

Journal of Soils and Sediments (JSS) – Protection, Risk Assessment and Remediation

JSS deals with intact, disturbed and contaminated soils and sediments.

Soil, within the scope of this Journal, is the upper layer of the earth's crust, including its liquid (soil solution) and gaseous components (soil air). Further soil includes soil substrates, e.g. treated soils, ashes, slags, sewage sludge, composts and urban soils.

Sediments, within the scope of this Journal, encompass freshwater (limnic), estuarine, coastal (e.g. the "Wattenmeer") and harbour sediments.

Topics

1. Research on Effects caused by disturbances and contamination
2. Research, strategies and technologies of prediction, prevention, and protection

3. Research, strategies and technologies of identification and characterisation
4. Research, strategies and technologies of treatment, remediation and reuse
5. Strategies of risk assessment and management
6. Research and strategies of quality standards
7. International regulation and legislation

Target groups

- Environmental scientists
- chemists, biologists
- hydrologists, limnologists
- geographers, geologists, mineralogists
- agriculturists, foresters
- landscape designers
- technologists