

BioPathNet: Neue KI spürt verborgene Muster in biomedizinischen Datennetzen auf

AI, New Research Findings, Computational Health, ICB

Ein neues KI-Verfahren namens BioPathNet hilft Forschenden, große biologische Datennetze gezielt nach versteckten Zusammenhängen zu durchsuchen - von Genfunktionen über Krankheitsmechanismen bis hin zu möglichen Therapieansätzen. Entwickelt haben BioPathNet Teams bei Helmholtz Munich und dem KI-Institut Mila - Quebec Artificial Intelligence Institute in Montréal, Kanada. Heute veröffentlichen die Forschenden ihre neue Methode in der Fachzeitschrift Nature Biomedical Engineering.

Muster erkennen in Gen-, Krankheits- und Wirkstoffdaten

Biomedizinische „Wissensgraphen“ sind Datennetze, die Gene, Proteine, Krankheiten, Medikamente und biologische Prozesse miteinander verknüpfen und ihre Beziehungen erfassen. Sie helfen sowohl Menschen als auch KI-Systemen, biologische und medizinische Zusammenhänge systematisch zu verstehen. Diese Netze sind jedoch lückenhaft - viele Verbindungen, von denen Forschende ausgehen, dass es sie geben müsste, sind noch nicht eingetragen.

BioPathNet ist ein KI-Verfahren zur Analyse solcher Wissensgraphen. Anders als viele bisherige Methoden betrachtet es nicht nur einzelne Datenpunkte, sondern ganze Ketten von Verbindungen - etwa vom Gen über einen Signalweg zu einer Krankheit und weiter zu einem möglichen Wirkstoff. „Aus tausenden dieser Muster lernt das Modell, welche neuen, biologisch plausiblen Verbindungen wahrscheinlich sind“, sagt Emy Yue Hu, Erstautorin der Studie und Doktorandin am Institute of Computational Biology (ICB) bei Helmholtz Munich: „BioPathNet liefert auf dieser Basis Vorschläge, die wir im nächsten Schritt im Labor oder in Studien überprüfen können.“ Der Vorteil von BioPathNet: Die Vorhersagen sind nachvollziehbar, weil sich für jede Empfehlung zeigen lässt, über welche „Wege“ im Datennetz sie zustande kam.

Von Datenpunkten zu testbaren Hypothesen

In umfangreichen Tests nutzte das Team um Annalisa Marsico, Forschungsgruppenleiterin am ICB und Projektleiterin, BioPathNet für ganz unterschiedliche Aufgaben: für Vorhersagen zu Genfunktionen, zu Beziehungen zwischen Krankheiten und zu möglichen Ansatzpunkten für die Krebstherapie bis hin zu neuen Einsatzgebieten etablierter Medikamente. Bei komplexen Erkrankungen wie Leukämien, Magenkrebs und Alzheimer entdeckte BioPathNet nicht nur bekannte Therapien wieder, sondern schlug auch Substanzen vor, die bereits in klinischen Studien geprüft werden. „Uns war wichtig, kein weiteres Blackbox-Modell zu entwickeln“, betont Marsico. „Zu jeder Vorhersage können wir die wichtigsten Pfade im Graphen ansehen und gemeinsam mit Expertinnen und Experten prüfen, ob sie biologisch Sinn ergeben.“

BioPathNet ist also kein Automat für Therapieempfehlungen, sondern ein Werkzeug für Hypothesen: Die Qualität hängt von den zugrunde liegenden Daten ab, jede vorgeschlagene Verbindung muss experimentell oder klinisch überprüft werden. Langfristig sehen die Forschenden das Verfahren als Baustein für umfassende „Grundmodelle“ biomedizinischer Wissensgraphen, die sich für viele

Aufgaben feinjustieren lassen – von der Wirkstoffsuche über die Entschlüsselung von Krankheitsmechanismen bis hin zu neuen Anwendungen jenseits der Medizin. „Unser Ziel ist kein Wundermittel aus der KI“, sagt Marsico. „Wir wollen ein Werkzeug, das dabei hilft, vorhandene biomedizinische Datennetze besser zu nutzen und gute neue Ideen für Experimente und Therapien zu entwickeln.“

Interdisziplinäre Forschung für BioPathNet

Die Idee zu BioPathNet entstand während eines Forschungsaufenthalts von Emy Yue Hu am Mila-Institut. Eigentlich wollte sie dort ein Projekt zu Luftverschmutzung bearbeiten, doch die dafür vorgesehenen Daten erwiesen sich als unbrauchbar. Gemeinsam mit ihrem Betreuersteam suchte sie nach einer neuen, datengetriebenen Fragestellung – und landete bei den riesigen biomedizinischen Wissensgraphen, in denen bereits heute viel verstreutes Wissen über Gene, Krankheiten und Therapien steckt. Die Expertise des Teams im Bereich Machine Learning am Mila war entscheidend für die Entwicklung der Algorithmen, die BioPathNet zugrunde liegen. BioPathNet basiert auf dem Graph-Neural-Network-Framework NBFNet und gewährleistet sowohl hohe Vorhersagekraft als auch Interpretierbarkeit. „Möglich wurde BioPathNet nur durch die Interdisziplinarität des Teams“, sagt Hu. „Dafür haben Fachleute aus Computational Biology, Mathematik, Biophysik und Informatik über die Standorte Montréal und München hinweg intensiv zusammengearbeitet.“ Als Open-Source-Lösung steht BioPathNet nun Forschenden weltweit zur Verfügung, um biomedizinische Zusammenhänge zu erforschen.

Original-Publikation

Hu et al., 2026: Enhancing link prediction in biomedical knowledge graphs with BioPathNet. Nature Biomedical Engineering. DOI: [10.1038/s41551-025-01598-z](https://doi.org/10.1038/s41551-025-01598-z)