

## Maschinelles Lernen für die Wirkstoff-Forschung

**Neue Medikamente kostengünstiger und schneller entwickeln mit Hilfe von bildbasierten Analysen - dafür vergibt der Europäische Forschungsrat ERC erstmals einen „Proof-of-Concept-Grant“ an Wissenschaftler vom Deutschen Krebsforschungszentrum und der Universität Heidelberg.**

Die Entwicklung neuer Medikamente ist ein langwieriger, teurer Prozess. Oft stellt sich erst nach langer Entwicklungszeit heraus, dass ein potentieller neuer Wirkstoff unerwünschte Nebenwirkungen verursacht und damit aufgegeben werden muss. Das treibt die Kosten zusätzlich in die Höhe. Bei der Suche nach neuen Wirkstoffen werden meist tausende von Substanzen parallel getestet, dabei wird jedoch nur ein sehr kleiner Ausschnitt ihrer biologischen Aktivität erfasst. Diese enge Charakterisierung neuer Wirkstoffe kann dazu führen, dass unerkannte Wirkmechanismen übersehen werden, die bei der Behandlung anderer Krankheiten helfen könnten.

„Es wäre wünschenswert und vor allem ökonomisch sinnvoll, neue Wirkstoffkandidaten gleich während der frühen präklinischen Entwicklung umfassend zu charakterisieren“, sagt Michael Boutros vom Deutschen Krebsforschungszentrum (DKFZ) und von der Medizinischen Fakultät Mannheim der Universität Heidelberg. Sein Projekt „REMATCH - Image-based Analysis for Drug Discovery and Repurposing“, das vom Europäischen Forschungsrat (ERC) als „Proof of Concept“ finanziell gefördert wird, setzt genau hier an. Mit diesem Förderinstrument unterstützt der Forschungsrat Wissenschaftler dabei, das wirtschaftliche Potenzial ihrer in einem laufenden ERC-Förderprojekt entwickelten Ergebnisse oder Technologien weiterzuentwickeln, um sie zum Beispiel in Ausgründungen umzusetzen.

Die Idee zu REMATCH ging aus Boutros' ERC-Projekt „SYNGENE“ hervor. Es basiert auf einer in seiner Abteilung entwickelten Software für bildbasierte Screenings, die es erlaubt, eine Vielzahl an Reaktionen von Zellen auf Wirkstoffe sehr breit und kostengünstig zu erfassen und mit Verfahren des maschinellen Lernens zu analysieren.

Dafür reicht es aus, die Veränderungen von nur einer Handvoll zellulärer Strukturen zu beobachten. „Jede Testsubstanz bewirkt subtile Veränderungen in der Struktur und Verteilung dieser Biomoleküle, die mit Fluoreszenzfärbungen sichtbar gemacht und durch automatisierte Mikroskopie dokumentiert werden. Zusammengekommen ergibt sich so ein umfassendes Bild vom Zustand der Zelle“, erklärt Boutros das Prinzip.

Um jedoch die biologische Aussage eines solchen Bildes interpretieren zu können, muss den Anwendern der Methode eine Referenz zur Verfügung stehen. Mit REMATCH wollen die Forscher um Boutros nun eine Referenzdatenbank für solche Wirkstoff-Muster erstellen. Dabei verwenden sie neue Ansätze der künstlichen Intelligenz und des maschinellen Lernens.

Die sehr großen Datensätze der Referenzdatenbank dienen dazu, den Effekt einer Testsubstanz mit dem von bereits zugelassenen oder gescheiterten Wirkstoffen (so genannten „fallen angels“) abzugleichen, um Nebenwirkungen frühzeitig auszuschließen und neue Wirkungsfelder zu erkunden. Die ERC-Förderung ermöglicht es Boutros nun, das wirtschaftliche Potential der von seiner Abteilung neu entwickelten analytischen Ansätze und Software-Lösungen sowie die Möglichkeit einer Ausgründung des Projekts zu prüfen und anzustoßen.

Ein Bild zu dieser Meldung steht zur Verfügung unter:

[www.dkfz.de/de/presse/pressemitteilungen/2018/bilder/PM-ERC-PoC.jpg](http://www.dkfz.de/de/presse/pressemitteilungen/2018/bilder/PM-ERC-PoC.jpg)

BU: Automatisierte Mikroskopie dokumentiert die Veränderungen der Zellen nach Behandlung mit einer Testsubstanz

Nutzungshinweis für Bildmaterial zu Pressemitteilungen

Die Nutzung ist kostenlos. Das Deutsche Krebsforschungszentrum (DKFZ) gestattet die einmalige Verwendung in Zusammenhang mit der Berichterstattung über das Thema der Pressemitteilung bzw. über das DKFZ allgemein. Als Bildnachweis ist folgendes anzugeben: „Quelle: M. Boutros/Deutsches Krebsforschungszentrum“.

Eine Weitergabe des Bildmaterials an Dritte ist nur nach vorheriger Rücksprache mit der DKFZ-Pressestelle (Tel. 06221 42 2854, E-Mail: [presse@dkfz.de](mailto:presse@dkfz.de)) gestattet. Eine Nutzung zu kommerziellen Zwecken ist untersagt.