

OptimAlze: KI soll die Entwicklung neuer Antibiotika gegen resistente Keime beschleunigen

Multiresistente Bakterien gehören zu den größten medizinischen Herausforderungen unserer Zeit. Um die Entwicklung neuer Antibiotika deutlich effizienter zu gestalten, haben das Deutsche Forschungszentrum für Künstliche Intelligenz (DFKI), die Universität des Saarlandes, das Helmholtz-Institut für Pharmazeutische Forschung Saarland (HIPS) und das Biotechnologieunternehmen smartbax GmbH das Verbundprojekt OptimAlze initiiert. Das Vorhaben kombiniert modernste Methoden der Künstlichen Intelligenz mit innovativen biologischen Testverfahren, um vielversprechende Antibiotikakandidaten schneller zu identifizieren und gezielt zu optimieren.

Jährlich stehen weltweit Millionen Todesfälle in Zusammenhang mit Antibiotikaresistenzen. Gleichzeitig ist die Entwicklung neuer Antibiotika besonders risikoreich, da viele Wirkstoffkandidaten aufgrund unerwünschter Nebenwirkungen oder mangelnder Wirksamkeit bereits in frühen Entwicklungsphasen ausscheiden.

OptimAlze adressiert die dringende medizinische Notwendigkeit neuer Antibiotika und die besonderen Entwicklungs Herausforderungen angesichts antimikrobieller Resistenzen und hoher präklinischer Ausfallraten, häufig bedingt durch ein ungünstiges Verhältnis von Wirksamkeit und Toxizität. Ziel ist die Entwicklung und Anwendung generativer KI-Methoden zur gezielten Modifikation von Wirkstoffkandidaten, um deren Wirksamkeit zu steigern und die Zytotoxizität – also die potenzielle Schädigung menschlicher Zellen – zu verringern. Innovativ ist besonders die Integration mechanistischen Wissens in die KI.

„Künstliche Intelligenz eröffnet enorme Chancen für die Wirkstoffforschung. Gleichzeitig stoßen rein datengetriebene Modelle an Grenzen, insbesondere wenn nur wenige oder unausgewogene Daten zur Verfügung stehen. Deshalb setzen wir in OptimAlze auf die Kombination von KI und mechanistischem Fachwissen. So können wir nicht nur präzisere Vorhersagen treffen, sondern auch besser nachvollziehen, warum bestimmte Moleküle wirksam oder toxisch sind“, erklärt Prof. Dr. Verena Wolf, Projektkoordinatorin am DFKI.

Im Mittelpunkt des Projekts steht ein neuartiger, geschlossener Lernkreislauf aus Künstlicher Intelligenz und experimenteller Validierung. Hochauflösende Daten zur Zytotoxizität werden mit modernen KI-Verfahren ausgewertet. Die Modelle lernen dabei nicht nur, die Wirksamkeit und Verträglichkeit von Molekülen vorherzusagen, sondern können auch gezielt neue Wirkstoffvarianten vorschlagen, die anschließend experimentell getestet werden. Die Ergebnisse fließen wiederum zurück in die KI-Modelle und verbessern deren Vorhersagekraft kontinuierlich.

Der Mehrwert von OptimAlze liegt in der integrierten KI-Optimierung, die vielseitige KI- und Chemieinformatik-Expertise vereint, um effizient Moleküle mit besserer Antibiotikawirkung und geringerer Toxizität vorzuschlagen, die unmittelbar synthetisiert und getestet werden. Das Konsortium bringt hierfür komplementäre Kompetenzen zusammen: Das DFKI entwickelt Verfahren der erklärbaren und generativen KI, die Universität des Saarlandes steuert Expertise in Wirkstoffdesign, Sprachmodellen und Einzelzellanalysen bei, das HIPS übernimmt die chemische Synthese und Optimierung der Kandidaten, während die smartbax GmbH exklusive Daten und Wirkstoffprogramme aus der industriellen Antibiotikaforschung einbringt.

Neben der Entwicklung konkreter Antibiotikakandidaten verfolgt OptimAIze auch das Ziel, innovative KI-Methoden und Softwarewerkzeuge für die wissenschaftliche Gemeinschaft verfügbar zu machen. Die entwickelten Algorithmen sollen – soweit möglich – als Open Source veröffentlicht werden und damit langfristig weitere Forschungsprojekte im Kampf gegen Antibiotikaresistenzen unterstützen.

Mit einer Laufzeit von drei Jahren soll OptimAIze neue Maßstäbe für die KI-gestützte Wirkstoffforschung setzen und einen wichtigen Beitrag zur Bekämpfung antimikrobieller Resistenzen leisten. Gefördert wird das Projekt vom Bundesministerium für Forschung, Technologie und Raumfahrt im Rahmen der Förderrichtlinie “Anwendung von Künstlicher Intelligenz in der Wirkstoffforschung”.