



Off-Target Identifikation mittels Discovery Engine Technologie

Der Einsatz künstlicher Intelligenz in der Gesundheitsbranche beweist sich durch die Verringerung der R&D-Lücke im Prozess der Arzneimittelherstellung sowie durch die Erleichterung der zielgerichteten Produktion von Arzneimitteln zunehmend als lukrative Technologie. In der Arzneimittelforschung unterstützt KI durch die maschinell simulierte menschliche Intelligenz dabei komplexe Herausforderungen und Problemstellungen im Entwicklungsprozess zu lösen.

Bei der Entwicklung von Medikamenten ist es nicht unüblich, dass die hergestellten Präparate nicht das tun, was von den Forschern erwartet wurde. Eine Vielzahl an neuen, sich in der Testphase befindlichen Arzneimittelkandidaten fallen in klinischen Studien aufgrund von unerwünschten und möglicherweise gesundheitsschädlichen Nebenwirkungen durch. Dies resultiert nicht nur in einem wissenschaftlichen, sondern auch einem erheblichen wirtschaftlichen Risiko.

Die DiscoveryEngine Technologie unterstützt Forscher bei der Arzneimittelherstellung, indem sie hunderttausende von Proteinen und bereits vorliegenden Arzneimitteln nach Assoziationen und Off-Targets durchsucht. Dies geschieht, indem eine zukunftsverändernde Kombination aus 3D-Proteinstrukturdaten und KI-Technologie verwendet wird. Dabei werden Informationen über die Beschaffenheit verschiedener Proteine im menschlichen Körper, sowie Informationen von Viren oder anderen Krankheitsregenern genutzt und das Wissen, wie die Eiweiße mit bereits bekannten Wirkstoffen und anderen niedermolekularen Verbindungen in Wechselwirkung stehen, extrahiert. Basierend auf KI und smarten Algorithmen sucht die Software unter den in der Datenbank zur Verfügung stehenden Kandidaten nach passenden Verbindungen zwischen den jeweiligen Proteinen und Wirkstoffen.

Die Technologie bietet eine bisher nicht-existierende Genauigkeit bei der Abbildung von Wirkstoff-Target-Komplexen. Um die Vorhersage von Bindungsstellenähnlichkeiten zu optimieren, nutzt die Technologie sowohl einen geometrischen Vergleich von Bindungsstellen, die auf lokalen Ausrichtungen basieren und bezieht nicht-kovalente Wechselwirkungen mit ein. Die Technologie, wurde in der Vergangenheit kontinuierlich verbessert und fand Anwendung darin bereits bekannte Arzneimittel für neue Angriffspunkte gegen beispielsweise Krebs oder Malaria neu zu positionieren.

Um Off-Targets zu finden, geht die Technologie in drei Schritten vor: (1) Analyse der Bindungsstellen, um deren Geometrie im atomaren Detail zu charakterisieren, (2) Durchführung einer Interaktionsanalyse, bei der nicht-kovalente Wechselwirkungen detektiert werden und zuletzt (3) eine Berechnung eindeutiger Fingerabdrücke. Die Einzigartigkeit der Technologie besteht darin, dass geometrische Bindungsstelleneigenschaften und nicht-kovalente Interaktionsmuster genutzt werden, wodurch es möglich ist, die Ligandenbindung zu verallgemeinern. Durch die Übersetzung von Protein-Ligand-Komplexen in individuelle Fingerabdrücke besteht die Möglichkeit schnell Ähnlichkeiten zwischen beliebigen chemischen Bibliotheken zu berechnen und somit letztendlich neue Verbindungen zu prognostizieren sowie für die Vorhersage potenzieller Off-Targets verwenden.

INNOVATIVE TECHNOLOGISCHE ANSÄTZE

- ◇ **Unternehmen:**
PharmaAI (Ausgründung der TU Dresden)
- ◇ **Technologische Basis:**
Künstliche Intelligenz & 3D-Proteinstrukturdaten
- ◇ **Anwendungsgebiet:**
Off-Target Identifikation bei der Arzneimittelforschung

Analyse von Proteinstrukturdaten
- ◇ **Vorteile:**
Detailgenauigkeit bei der Darstellung von Wirkstoff-Target-Komplexen

Bindungsstellenanalyse

Vorhersage neuer Wirkstoff-Target-Gerüste

Übersetzung von Protein-Ligand-Komplexe in einzigartige Fingerabdrücke
- ◇ **Website:**
<https://www.pharma.ai/>

Off-Targets = unerwünschte Wirkstoffziele, die zu Nebenwirkungen führen.

© arcoro GmbH · www.arcoro.de



Your Connection
to MedTech & Pharma
Expertise