

Linz, 14. November 2023

PRESSEMITTEILUNG

JKU Forscher*innen entwickeln „Google der Zellbiologie“: Zellen und Wirkstoffe „sprechen“ gemeinsame Sprache

Mit einer bahnbrechenden wissenschaftlichen Errungenschaft haben Forscher*innen der Johannes Kepler Universität Linz ein neuronales Netz namens "CLOOME" entwickelt, das es Zellen und Chemikalien ermöglicht, quasi eine gemeinsame Sprache zu sprechen. Die neue KI-Methode lernt, ohne auf menschliche Hinweise angewiesen zu sein.

Die herkömmliche Art, biomedizinische Bilddatenbanken zu durchsuchen, funktioniert mittels textbasierter Suchanfragen. Daher konnten bisher nur Bilder gefunden werden, die von Expert*innen zuvor mit Vermerken versehen worden sind. CLOOME ist im Grunde genommen das "Google" für biologische Bilddatenbanken und Zellbiologie. Forscher*innen können damit einfach ein Bild von Zellen oder sogar eine chemische Struktur eingeben und erhalten eine Liste von relevanten Mikroskopie-Bildern als Suchergebnis. Diese Methode eröffnet völlig neue Erkenntnisse über zellbiologische Prozesse und ihre Beeinflussung durch chemische Wirkstoffe.

Selbstüberwachtes Lernen

Das Herzstück von CLOOME ist ein spezielles KI-System, ein tiefes neuronales Netzwerk, das aus Mikroskopie-Bildern von Zellkulturen und den dazugehörigen chemischen Strukturen von Wirkstoffen lernt. Wenn Wirkstoffe auf Zellen angewendet werden, können sich die Zellen verändern – diese Veränderungen sind auf den Mikroskopie-Bildern sichtbar. CLOOME kann den Zusammenhang zwischen chemischen Strukturen und dem Aussehen der Zellen erkennen. „Dieses KI-System lernt ohne menschliche Hinweise durch **„selbstüberwachtes Lernen“**, also einfach nur auf den gegebenen Mikroskopie-Bildern und chemischen Strukturen von Wirkstoffen“, erklärt **Ana Sanchez**, die gemeinsam mit **Elisabeth Rumetshofer** am JKU Institut für Machine Learning das Paper in „*Nature Communications*“ publiziert hat.

KI kann Wirkungen vorhersagen

In der Praxis kann man somit riesige Datenmengen nach Ähnlichkeiten zu einem gegebenen Bild oder sogar nach einem bestimmten Wirkstoff durchsuchen. *„Das erleichtert die Identifikation von Medikamenten mit ähnlicher Wirkung, die Entdeckung neuer Anwendungsbereiche für bestehende Medikamente und die Vorhersage biochemischer Effekte und Eigenschaften von neuen Medikamenten. Damit hat Gloome das Potenzial, die Medikamentenentwicklung erheblich zu beschleunigen“*, sind die beiden Forscherinnen überzeugt.

Basismodell für Zellbiologie

Das ambitionierte Fernziel: *„Mit dem Zugang zu umfangreichen Datensätzen könnte unsere Methode zukünftig ein neuronales Netzwerk hervorbringen, das Aufgaben auch außerhalb der Medikamentenentwicklung in ähnlicher Weise wie ChatGPT lösen kann“*, so Rumetshofer. Während ChatGPT aktuell das Basismodell für Text darstellt, könnte CLOOME somit ein Basismodell für Zellbiologie werden. Die neue Methode ist ein wichtiger Schritt in eine beschleunigte KI-unterstützte Medikamentenforschung.

Zum Paper: <https://www.nature.com/articles/s41467-023-42328-w>

Rückfragen:

Elisabeth Rumetshofer, MSc
Institut für Machine Learning
E-Mail: elisabeth.rumetshofer@jku.at