



Mit Screening-Verfahren beschleunigt idalab die **Entwicklung neuer Medikamente**.

Intelligente Datenanalyse in der Medikamentenentwicklung

Frühzeitige Erkennung von Wirkstoffpotenzialen durch computergestützte Simulation und mathematische Vorhersagemodelle

Hohe Investitionen in neue Technologien, Fusionen, Ausgliederungen sowie verschärfte Zulassungsbedingungen haben die Entwicklungs- und Zulassungszeit neuer Medikamente beständig verlängert. Laut Bundesministeriums für Bildung und Forschung dauert es zehn bis zwölf Jahre, bevor ein Medikament marktfähig ist.¹ Parallel dazu sind die Forschungs- und Entwicklungskosten für neue Medikamente fortlaufend gestiegen. Ein Teil der Kosten könnte vermieden werden, wenn unzureichende Wirkung oder Unverträglichkeiten bereits in der vorklinischen Phase prognostiziert werden könnten. Hierin liegt eine entscheidende Herausforderung für die Pharmaindustrie.

Es gibt zahlreiche Versuche, die Entwicklungsphase von Medikamenten abzukürzen. Um langwierige und teure Testreihen zu vermeiden, setzt die Entwicklung neuer Wirkstoffe primär in der vorklinischen Phase an. Diese umfasst die rein computergestützte Phase (in silico) und die Laborphase, welche sich in die Beobachtung von Teilprozessen im Reagenzglas (in vitro) und anschließend in die Beobachtung von Wirkungen im vollständigen lebensfähigen Organismus (in vivo) einteilen lässt.

Insbesondere in der rein computergestützten Phase wird versucht, die Aufklärung biochemischer Prozesse zu optimieren. Durch computerbasierte Simulation der zugehörigen biochemischen Prozesse werden nur Erfolg versprechende Experimente weiterverfolgt. Gelingt es, die Verträglichkeit von Wirkstoffen per Computeranalyse zu beurteilen, können Kosten- und Zeitaufwand deutlich minimiert werden. Durch automatisierte Screening-Prozesse (Hochdurchsatz- und Ultra-Hochdurchsatz-Screening) wird die Suche nach viel versprechenden Wirkstoffen deutlich beschleunigt.

Ziel

Identifizierung Erfolg versprechender chemischer Substanzen

Lösung

Entwicklung mathematischer Vorhersagemodelle zur Bewertung von potenziellen Wirkstoffen

Anwendung

Erstellung neuer Wirkstoffbibliotheken, Bewertung der molekularen Struktur im interaktiven Szenario, Vorhersage chemischer Eigenschaften

Branche

Pharma

Um Kosten- und Zeitaufwendungen in der Medikamentenentwicklung zu reduzieren, werden Erfolg versprechende chemische Substanzen bereits in der vorklinischen Phase identifiziert.

Die Verträglichkeit von Wirkstoffen wird durch Computeranalyse der zugehörigen biochemischen Prozesse beurteilt. Auch automatisierte Screening-Prozesse beschleunigen die Suche nach viel versprechenden Wirkstoffen.

¹ http://www.bmbf.de/futur/Panorama-der-Zukunftsfragen/html/pdz_4_86.html

Drug Discovery bei idalab und Fraunhofer First

idalab als Spezialist für moderne Datenanalyse hat gemeinsam mit Fraunhofer FIRST den Auftrag, für einen Pharmakonzern die Entwicklung neuer Wirkstoffe für Medikamente durch den Einsatz der Techniken des Maschinellen Lernens zu optimieren und zu beschleunigen (drug discovery). Hauptziel ist es, bereits im frühen Stadium der Wirkstoffentwicklung bestimmte Eigenschaften chemischer Verbindungen vorherzusagen, um frühzeitig eine Entscheidung über die Fortsetzung oder den Abbruch der Entwicklung zu unterstützen.

Zu den typischen Fragen, die für die Medikamentenentwicklung frühzeitig und möglichst sicher beantwortet werden sollen, gehören die Wasserlöslichkeit einer Substanz, diverse Neben- oder Wechselwirkungen sowie die Feststellung, ob eine Substanz giftig ist.

Neben der Untersuchung dieser wissenschaftlichen Fragestellungen entwickelt idalab ein Softwarepaket, das im Rahmen der in-silico Analyse eingesetzt wird. Die Software ermöglicht zum einen die Erstellung von Wirkstoffbibliotheken und zum anderen die Optimierung viel versprechender Substanzen.

Die hier zum Einsatz kommenden Methoden sind nicht nur zur Optimierung der Medikamentenentwicklung einsetzbar, sondern auch auf andere Fragestellungen innerhalb und außerhalb der pharmazeutischen Industrie übertragbar. So lassen sich mit den entwickelten Methoden grundsätzliche Eigenschaften von chemischen Substanzen vorhersagen. Naheliegend sind zum Beispiel Anwendungen in der chemischen Industrie, um dort relevante Eigenschaften bestimmter Stoffe frühzeitig zu kennen.

idalab und Fraunhofer FIRST setzen Methoden des Maschinellen Lernens ein, um die Entwicklung neuer Wirkstoffe für Medikamente zu verbessern und zu beschleunigen.

idalab entwickelt ein Softwarepaket für die Optimierung viel versprechender Substanzen und zur Erstellung von Wirkstoffbibliotheken.

Wer ist idalab?

idalab ist eine Unternehmensberatung für Statistik. Wir beraten in datenbezogenen Fragestellungen, analysieren Daten mit modernsten Forschungsmethoden und entwickeln spezifische Statistik-Software.

Ansprechpartner

Dr. Sebastian Mika

idalab GmbH
Sophienstr. 24
10178 Berlin
Germany



T +49.30.81 45 13-0 · F +49.30.81 45 13-10
www.idalab.de · info@idalab.de

Geschäftsführer
Dr. Sebastian Mika
Dipl.-Psych. Malte Friedrich-Freksa