

## PhytoPred

KI -unterstützte Digitalisierung der pflanzlichen Wirkstoffsuche

|                                 |                                                                                                                                        |                        |               |
|---------------------------------|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|------------------------|---------------|
| <b>Programm / Ausschreibung</b> | FinVn 22/23, Life Sciences, Life Science Ausschreibung 2022                                                                            | <b>Status</b>          | abgeschlossen |
| <b>Projektstart</b>             | 01.03.2023                                                                                                                             | <b>Projektende</b>     | 30.11.2024    |
| <b>Zeitraum</b>                 | 2023 - 2024                                                                                                                            | <b>Projektlaufzeit</b> | 21 Monate     |
| <b>Keywords</b>                 | LC-MS, Virtual Screening, Machine Learning, Pharmacophore Modelling, Phytopharmaka, Scoringmethoden, Vorhersagemodell, Digitalisierung |                        |               |

### Projektbeschreibung

Die antragstellende Firma Bionorica research GmbH wurde 2005 in Innsbruck gegründet. Die Firma ist ein 100% Tochterunternehmen der in Deutschland lokalisierten Bionorica SE, dem Weltmarktführer in der Herstellung von Phytopharmaka. In der pflanzlichen Arzneimittelentwicklung müssen ganze Extrakte gescreent werden, um einen Hitextrakt mit gewünschter Wirkung zu erhalten. Da das Budget in der pflanzlichen Arzneimittelforschung generell geringer ist als in der synthetisch-chemischen Arzneimittelforschung und das Screening sehr kosten- und zeitintensiv ist, werden ca. 100-200 Extrakte für ein Vorscreening eingesetzt was im Schnitt ca. 5 Jahre beansprucht, um einen Hitextrakt zu erhalten. Ziel des vorliegenden FFG Projektes ist daher die Entwicklung einer Technologie-Plattform, die es ermöglicht diese Screening-Phase wesentlich zu verkürzen, und von der Analytik pflanzlicher Extrakte direkt sowie mit deutlich reduzierter Anzahl von in-vitro Versuchen auf deren Wirkungsmuster schließen zu können. Zentrale Forschungsinhalte sind dabei: Entwicklung von LC-MS Methoden; Entwicklung von Virtual Screening Modellen (2D/3D-Machine Learning, Pharmacophore Modelling, Docking); Erforschung von Wirkunterschieden von Struktur-Isomeren (in-silico und in vitro); Erforschung von Substanzklassenwirkunterschieden; Entwicklung von Scoringmethoden um Gesamtextraktwirkung abzubilden inklusive der Erstellung einer Ensemble Machine Learning Methode sowie Automatisierung des gesamten Workflows von der Analytik zur Wirkung.

### Projektpartner

- Bionorica research GmbH