

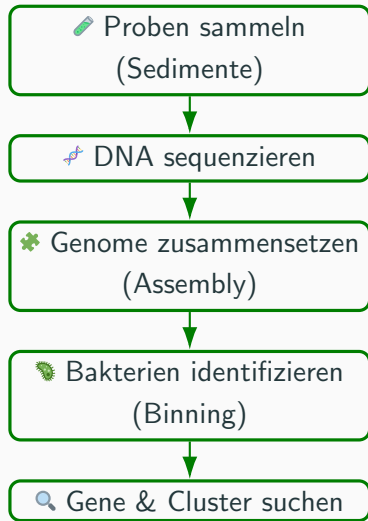
Wie Informatiker*innen die Antibiotikakrise lösen könnten

- Eine Einführung in die Bioinformatik -

Marie Kaiser

Jug Saxony Day 2025

Meine Bachelorarbeit (kurz)



Ziel: Rekonstruktion von
Bakteriengenomen → Analyse
potenzieller
Antibiotika-Gencluster



- Verantwortlich für 1,27 Mio. Todesfälle global in 2019
- Beigetragen zu 4,95 Mio. Todesfällen

Alle Länder weltweit sind betroffen!



Übernutzung von Antibiotika

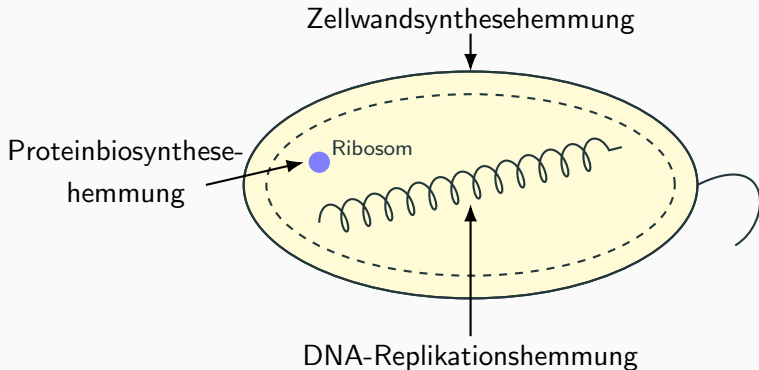
- Häufiger Einsatz bei Mensch und Tier
- Falsche Verschreibung oder Dosierung

→ Führt zu multiresistenten Keimen



Fehlende Forschung

- Wenig Anreiz für Pharmaindustrie
- Hohe Kosten, geringe Rendite
- Reserveantibiotika werden kaum entwickelt



Was ist Bioinformatik?

$$\text{Biologie} + \text{Informatik} = \text{Bioinformatik}$$



Biologie

DNA, Proteine, Zellen,
Evolution



Informatik

Algorithmen,
Datenstrukturen, KI



Bioinformatik

Analyse großer
Datenmengen, neue
Erkenntnisse,
Entwicklung neuer
Methoden

Biologische Probleme werden mit Methoden der Informatik gelöst.

Klassische Aufgaben der Bioinformatik



Sequenzanalyse

Systembiologie



Strukturaufklärung



Sequenzanalyse – Was und warum?

DNA als String:

A C G T A C T G A

A C G - A C T G A

(- = Gap für bestes Alignment)

Zentrale Fragen:

- **Similarity:** Wie ähnlich sind zwei Sequenzen?
- **Distanz:** Wie viele Änderungen braucht man, um A in B umzuwandeln?
- **Lokal vs. global:** Finde das beste Matching in ganzen Sequenzen oder in Teilbereichen.

Anwendungen:

- Genannotation
- Resistenzgene finden
- Evolution nachvollziehen

Warum ist Sequenzanalyse teuer?

Globale Alignments:

- Klassisch per **dynamischer Programmierung**
- Laufzeit: $O(n \cdot m)$ für zwei Sequenzen
- Speicher: $O(n \cdot m)$

Problem bei vielen Sequenzen:

- Komplexität wächst exponentiell: $O(n^k)$
- Beispiel: 10 Sequenzen à 4,6 Mio. Basenpaare

$4,6 \times 10^{6 \cdot 10}$ Vergleiche
praktisch unmöglich

→ Deshalb nutzen wir Heuristiken und Approximationen
(z. B. BLAST).

KI verändert die Bioinformatik



Proteinstruktur Wirkstoffsuche Beispiel Halicin

AlphaFold revolutioniert
die
3D-Strukturvorhersage

ML-Modelle
durchsuchen Millionen
Moleküle

Neues Antibiotikum,
entdeckt 2020 durch KI

Die Suche nach neuen Medikamenten wird vereinfacht.

Von Daten zu neuen Medikamenten



Neue Wirkstoffe entdecken

Deep Learning auf chemischen
Bibliotheken

KI-gestützte Suche nach Molekülen



Antibiotika identifizieren

Sequenzanalyse findet
Biosynthese-Gencluster (BGCs)



Resistenz verstehen

Analyse von Resistenzgenen und
-mechanismen
Tracking im Mikrobiom



Wirkstoffdesign

Strukturbasiertes Design und
Optimierung bestehender Wirkstoffe

Warum Bioinformatik spannend für Entwickler ist



Algorithmen
entwickeln



Datenplattformen
bauen



KI trainieren

**Die Antibiotikakrise ist real –
aber wir haben die Werkzeuge, sie zu
bekämpfen.**



Globale

Herausforderung

Multiresistente Keime bedrohen
Medizin weltweit



Bioinformatik als

Schlüssel

Datengetriebene Methoden helfen,
neue Lösungen zu finden

→ Informatiker*innen können auch entscheidend
dazu beitragen!

Vielen Dank für Ihre
Aufmerksamkeit!



- <https://www.who.int/news-room/fact-sheets/detail/antimicrobial-resistance>
- Brüssow H. The antibiotic resistance crisis and the development of new antibiotics (Microb Biotechnol. 2024)
- Dance A. Five ways science is tackling the antibiotic resistance crisis. (Nature. 2024)
- Gauthier J. *et. al* A brief history of bioinformatics (Briefings in Bioinformatics 2019)
- Tahmasebi H. *et. al* From Cure to Crisis: Understanding the Evolution of Antibiotic-Resistant Bacteria in Human Microbiota. (Biomolecules. 2025)

Bilder:

- https://encrypted-tbn0.gstatic.com/images?q=tbn:ANd9GcTqAnYY1758uj0ivF_wGoGCCRkdhN4snoj9Eg&s
- https://encrypted-tbn0.gstatic.com/images?q=tbn:ANd9GcTvQQ1UJ_Vd21Y6x_9VyxDaecySr4K0ojg4Ng&s
- <https://freesvg.org/img/GearsType4Teeth10.png>
- <https://encrypted-tbn0.gstatic.com/images?q=tbn:ANd9GcTTuvSrSj4FCQ-phKAwFQXJ60JIu4VNrxfPalg&s>

Definition:

$$D(0, i) = D(i, 0) = i$$

$$\delta(s_i, t_j) = \begin{cases} 0, & s_i = t_j \\ 1, & s_i \neq t_j \end{cases}$$

$$D(i, j) = \min \begin{cases} D(i-1, j) + 1 \\ D(i, j-1) + 1 \\ D(i-1, j-1) + \delta(s_i, t_j) \end{cases}$$

Berechnet die minimale Anzahl von Edit-Operationen (Insertion, Deletion, Substitution).