# Schneller und präziser durch maschinelles Lernen

**KIMMDY-Software visualisiert biologische Prozesse in Bewegung. Moleküle in biologischen Zellen sind ständig in Bewegung. Sie zu untersuchen ist jedoch nach wie vor schwierig, da die Prozesse auf sehr kleinen Längen- und Zeitskalen ablaufen. Forscher des Heidelberger Instituts für Theoretische Studien (HITS) und des Max-Planck-Instituts für Polymerforschung (MPI-P) haben nun eine Simulationsmethode entwickelt, die schnell arbeitet und chemische Prozesse in Zellen mit hoher Präzision vorhersagen kann. Die Ergebnisse wurden in Nature Communications veröffentlicht.**

## Jenseits der Grenzen herkömmlicher Computersimulationen

Seit vielen Jahren nutzen Forscher Computersimulationen, um das Verhalten von Molekülen zu untersuchen. Diese Simulationen können jedoch ein wesentliches Merkmal des Lebens nicht abbilden: die Reaktivität. Diese muss zugunsten der Effizienz geopfert werden. So können herkömmliche Methoden zwar große Systeme auf ausreichenden Zeitskalen verarbeiten, in diesen Modellen können Bindungen jedoch nicht brechen oder sich neu bilden. Dabei ist jedoch genau diese Beobachtung des Zusammenspiels von molekularer Bewegung und chemischen Ereignissen entscheidend für das Verständnis und die Gestaltung komplexer molekularer Systeme.

Forscher des HITS und des MPI-P haben nun eine Methode entwickelt, um diese Einschränkung zu überwinden. Die neue Software KIMMDY (Abkürzung für: Kinetic Monte Carlo Molecular Dynamics) kombiniert verschiedene Rechenansätze und nutzt maschinelle Lernverfahren, um zu berechnen, wann und wo chemische Reaktionen stattfinden können.

„Damit können wir nicht nur verfolgen, wie sich Moleküle bewegen, sondern auch, wie sie miteinander reagieren“, sagt Frauke Gräter, Direktorin der Abteilung „Biomolekulare Mechanik“ am MPI-P und ehemalige Gruppenleiterin am HITS. „Das wiederum eröffnet völlig neue Möglichkeiten, komplexe biologische Prozesse im Computer zu untersuchen.“

Die neu entwickelte Methode ermöglicht die Simulation sehr großer molekularer Systeme – etwa Proteine oder DNA in ihrer natürlichen Umgebung – und beobachtet gleichzeitig Reaktionsketten, bei denen ein chemischer Schritt den nächsten auslöst. Solche Prozesse spielen in vielen biologischen Kontexten eine Rolle, beispielsweise bei Kollagen, einem Protein, das für die Stabilität unserer Haut, Knochen und des Bindegewebes entscheidend ist. Das Forschungsteam konnte nachverfolgen, wie reaktive Molekülfragmente sich durch das Protein bewegen und sich an bestimmten Stellen ansammeln. Auch DNA-Schäden, wie sie beispielsweise durch UV-Strahlung verursacht werden, können nun untersucht werden.

Die neue Methode zeichnet sich dadurch aus, dass die Berechnung von Systemen mit Millionen von Atomen effizienter abläuft als bei konkurrierenden Ansätzen. Dadurch könnte KIMMDY in Zukunft dabei helfen, biologische und chemische Prozesse besser zu verstehen. Gleichzeitig eröffnet KIMMDY neue Möglichkeiten zur Interpretation experimenteller Ergebnisse und zur Planung neuer Experimente. Das Projekt wurde von der Klaus-Tschira-Stiftung unterstützt.

**Publikation:**
*Hartmann, E.; Buhr, J.; Riedmiller, K.; Ulanov, E.; Schüpp, B.; Kiesewetter, D.; Sucerquia, D.; Aponte-Santamaría, C.; Gräter, F. KIMMDY: a biomolecular reaction emulator. Nat Commun 17, 3500 (2026)*

DOI: 10.1038/s41467-026-71955-2

Weitere Informationen auf der Simplaix-Website: https://www.h-its.org/research/simplaix/

**Pressemitteilung**

23.04.2026
Quelle: Heidelberger Institut für Theoretische Studien (HITS)

## Weitere Informationen

Wissenschaftlicher Kontakt:
Prof. Dr. Frauke Gräter
Director
Max Planck Institute for Polymer Research
E-Mail: graeter(at)mpip-mainz.mpg.de

Medienkontakt:
Angela Michel
Head of Communications
Heidelberg Institute for Theoretical Studies (HITS)
E-Mail: angela.michel(at)h-its.org

- Heidelberger Institut für Theoretische Studien (HITS)