



Pressemitteilung

Künstliche Intelligenz hilft bei Gefahrenbeurteilung von Chemikalien

Forschungsteam unter Leitung der Universität Tübingen entdeckt systematische Schwachstelle bei Tests zur Substanzanreicherung in Fischen – Neu entwickeltes KI-Tool soll Verfahren verbessern

Christfried Dornis
Leitung

Janna Eberhardt
Forschungsredakteurin

Telefon +49 7071 29-77853
janna.eberhardt[at]uni-tuebingen.de

presse[at]uni-tuebingen.de
www.uni-tuebingen.de/aktuell

Tübingen, den 13.01.2026

Zur Einschätzung, wie sich Chemikalien in der Umwelt anreichern, wird standardmäßig der sogenannte Biokonzentrationsfaktor herangezogen, der die Substanzkonzentration in Fischen gegenüber dem umgebenden Wasser wiedergibt. Bisher hatte man angenommen, dass dieser Faktor, abgekürzt als BCF, für jede Substanz konstant sei. Nun entdeckte ein interdisziplinäres Forschungsteam unter der Leitung von Professor Heinz Köhler vom Institut für Evolution und Ökologie der Universität Tübingen, dass dies nicht der Fall ist und der BCF je nach der im Test eingesetzten Substanzkonzentration variiert. Die Konzentrationsabhängigkeit des BCF stellt für mehr als die Hälfte der potenziell in Fischen akkumulierenden Chemikalien die für Zulassungsverfahren der EU verwendeten Anreicherungsdaten in Frage. Daher hat das Forschungsteam ein Instrument der künstlichen Intelligenz (KI) entwickelt, mit dem sich die bioakkumulierenden Eigenschaften von Substanzen mit sehr hoher Sicherheit einschätzen lassen. Es wird frei zur kostenlosen Nutzung zur Verfügung gestellt. Seine Ergebnisse veröffentlichte das Team in der Fachzeitschrift *Journal of Hazardous Materials*.

Die Anreicherung von Substanzen in Nahrungsketten wird als problematisch erachtet, zumal sie auch den Menschen betrifft. „Im menschlichen Körper kann sich die Anreicherung vervielfachen. Ob ein Stoff schädlich wirkt, erweist sich oftmals erst nach längeren Zeiträumen“, sagt Heinz Köhler.

Der Biokonzentrationsfaktor in Fischen wird weltweit als wichtiger Indikator zur Gefahreneinstufung von Chemikalien eingesetzt, um normierte Angaben zu deren Anreicherung in Lebewesen zu machen. „Anders als bisher gedacht – und praktiziert – handelt es sich bei dem Faktor nicht um ein jeweils für die Chemikalie spezifisches Kriterium“, berichtet Köhler. „Setzt man im Umgebungswasser der Fische eine hohe Stoffkonzentration ein, ergibt sich in fast allen Fällen ein niedriger BCF, umgekehrt ist es

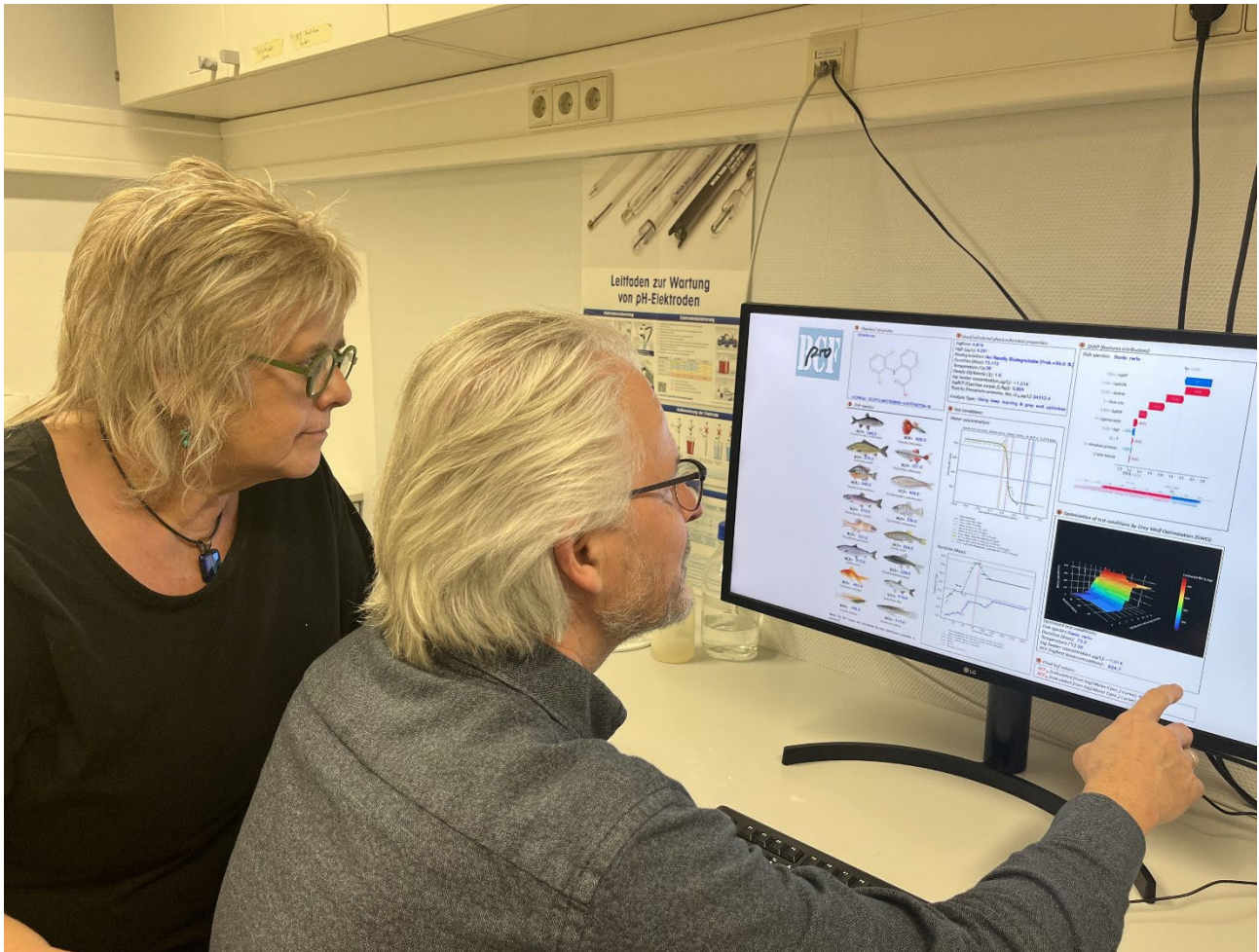
bei einer niedrigen Stoffkonzentration. Das konnten wir in unserem Team mathematisch belegen und physiologisch erklären.“ Dieser Effekt sei bisher nicht aufgefallen – zumindest sei er bisher weltweit in Regelwerken zur Gefahreinstufung von Chemikalien nicht berücksichtigt worden, so der Forscher. Zu den Erkenntnissen gelangte das Team der Universität Tübingen um Heinz Köhler und Professorin Rita Triebkorn, ebenfalls Co-Autorin der Studie, gemeinsam mit ihren Kooperationspartnern vom Umweltbundesamt und den Universitäten Yale und Athen bei der Evaluierung Tausender von Studien zu Chemikaliendaten, in denen der Biokonzentrationsfaktor erhoben wurde.

Komplexe Informationen effizient verarbeiten

Im nächsten Schritt entwickelte das Team mithilfe von Deep Learning, einer KI-Methode des maschinellen Lernens, ein Programm, das experimentelle Daten zum Biokonzentrationsfaktor mit 90-prozentiger Sicherheit vorhersagen kann. Beim Deep Learning werden künstliche Netze – ähnlich den vernetzten Neuronen in einem Gehirn – verwendet, um komplexe Datenbestände zu verarbeiten und die interessierenden Muster und Merkmale aus den Daten herauszuziehen. Die Methode wird eingesetzt, um komplexe Informationen effizient zu verarbeiten. „Mit unserem Tool können wir auch besonders kritische Werte der Chemikalien mit Worst-Case-Szenarien beschreiben, also das Eintreten des schlimmsten anzunehmenden Falls, in denen die Chemikalien sich besonders stark anreichern würden“, sagt Köhler.

Bei Stoffen, die in der EU bereits als bioakkumulierend eingestuft sind, sei das Team mit seinem Tool in ca. 90 Prozent der Fälle zum selben Ergebnis gekommen wie mit der alten Methodik. „Als wir unser Tool jedoch zur Überprüfung von Chemikalien einsetzten, die sich nach bisheriger Einstufung nicht auf gefährliche Weise in Lebewesen anreichern, kamen wir zu einem alarmierenden Ergebnis: Mehr als 60 Prozent der Substanzen, die als bioakkumulierend hätten erkannt werden müssen, wurden mit der etablierten Methodik nicht als bioakkumulierend eingeordnet.“ Dort seien die Testbedingungen so gewählt worden, dass das Ergebnis einen für Worst-Case-Bedingungen zu niedrigen Biokonzentrationsfaktor widerspiegeln. „Unsere Metastudie hat gezeigt, wie wichtig es ist, die Chemikaliendaten zum Biokonzentrationsfaktor in Fischen unter für die Umwelt relevanten Bedingungen durchzuführen. Nur so können wir realistische Werte zur Gefahrenbeurteilung erhalten“, sagt der Forscher. Um zu einer einheitlichen und verlässlichen Chemikalieneinstufung zu gelangen, stellt das Forscherteam das neue KI-Tool, genannt BCFpro, der Allgemeinheit kostenfrei zur Verfügung.

Da BCFpro auch die Anreicherung künftig neu entwickelter Chemikalien sehr verlässlich voraussagen kann, besitzt diese computergestützte Methode ein großes Potenzial zur Einsparung von Tierversuchen. „Die Forschung muss sich auch an der Praxis orientieren, diese hinterfragen und überprüfen. Das wird in dieser Studie getan. So helfen die Forscherinnen und Forscher der Universität Tübingen, ökotoxikologische Verfahren zu verbessern und hiermit sowohl den Umweltschutz als auch den Tierschutz voranzubringen“, sagt die Rektorin der Universität Tübingen, Professorin Dr. Dr. h.c. (Dōshisha) Karla Pollmann.



Rita Tribskorn und Heinz Köhler bei der Arbeit mit dem KI-gestützten BCFpro-Programm, mit dem der Bio-konzentrationsfaktor (BCF) zur Anreicherung von Chemikalien in Fischen theoretisch erhoben wird. Foto: Institut für Evolution und Ökologie/Universität Tübingen

Nähere Informationen:

KI-Tool „BCFpro“ zur einheitlichen und verlässlichen Einstufung von Chemikalien:

<https://www.parcopedia.eu/>

Publikation:

Heinz-R. Köhler, Reza Aalizadeh, Gabriele Treu, Thomas Gräff, Katharina Peschke, Ines Prutz, Nikolaos S. Thomaidis, Rita Tribskorn, Peter C. von der Ohe: By integrating previously overlooked drivers AI boosts bioaccumulation assessment in fish. *Journal of Hazardous Materials*,

<https://doi.org/10.1016/j.jhazmat.2025.140648>

Kontakt:

Prof. Dr. Heinz R. Köhler

Universität Tübingen

Institut für Evolution und Ökologie – Physiologische Ökologie der Tiere

Telefon +49 7071 29-78890

heinz-r.koehler[at]uni-tuebingen.de