

Opracowanie platformy referencyjnej dla modeli predykcyjnych opartych na AI/ML w zastosowaniach agrochemicznych dotyczących bioaktywności i toksyczności

Współczesne rolnictwo mierzy się z wieloma poważnymi wyzwaniami. Szkodniki i chwasty coraz częściej uodparniają się na dostępne środki chemiczne, a jednocześnie rosną oczekiwania społeczne i wymogi prawne, aby nowe substancje były bezpieczne dla ludzi, zwierząt i środowiska. Dodatkowo zmiany klimatyczne powodują, że problemy związane z ochroną roślin pojawiają się w nowych miejscach i przybierają niespotykaną dotąd skalę. Tymczasem opracowywanie nowych pestycydów pozostaje procesem kosztownym, długotrwałym i w dużej mierze opartym na metodzie prób i błędów.

Dlatego potrzebne są nowoczesne narzędzia, które umożliwią szybszy i bardziej precyzyjny wybór substancji nie tylko skutecznych, ale także bezpiecznych dla ludzi i środowiska. Celem naszego projektu jest stworzenie ogólnodostępnej platformy referencyjnej, która wesprze naukowców i firmy w projektowaniu bezpiecznych i efektywnych środków ochrony roślin, takich jak herbicydy i inne pestycydy. W tym celu wykorzystamy nowoczesne technologie analizy danych molekularnych, sztuczną inteligencję (AI) oraz uczenie maszynowe (ML), które pozwalają komputerom uczyć się na podstawie dużych zbiorów danych. Na podstawie zgromadzonych informacji oraz wyników własnych eksperymentów stworzymy tzw. benchmark, czyli uporządkowany zbiór danych, umożliwiający porównywanie i ocenę skuteczności różnych modeli predykcyjnych w jednolity, transparentny sposób. Wytrenujemy też własne modele dostępne dla każdego zainteresowanego, pozwalające przewidywać właściwości nowych związków chemicznych, w tym ich wpływ na różne organizmy, ich trwałość w środowisku czy możliwość gromadzenia się w tkankach.

Projekt stanowi odpowiedź na realne potrzeby rolnictwa i ochrony środowiska. Dzięki otwartej platformie do testowania modeli AI w agrochemii, naukowcy z całego świata będą mogli współpracować i dzielić się wynikami, a partnerzy biznesowi szybciej wdrażać lepsze rozwiązania na rynek.