

**Introduction et Stratégie Cropkey**

**Phénotypage**

**L'approche "target"**

**Espace virtuels chimiques**

**Conception de molécules avec profils complexes**

**MyGenAssist: Plateforme d'IA générative**

**Lyon Life Hub**

**Conclusions**

# **L'IA peut-elle transformer la recherche pour la protection des cultures ?**

**Laurent Bialy**

**Bayer Crop Science**



# Crop Protection

helps to Sustainably Feed the World

30%

> average net yield benefit

by using CP on food crops...

550

Million tons of additionally produced food crops

(Wheat, Potato, Rice)



In caloric value, this amount could feed

>2bn people

## Net Yield Benefit of Crop Protection



Source: Based on 2019 study conducted by European Parliamentary Research Service (Farming without plant protection products (Europa.eu). Excluding Corn and Soy numbers. Note: losses are calculated at the global scale and are caused by pathogens, pests, viruses and weeds. Crop protection without PPS include crop rotation, biological control, soil management, resistant varieties...

# Les défis pour la protection des cultures



Changement  
climatique



Attentes de  
durabilité et  
de sécurité



Pertes  
d'efficacité  
(résistances)



*Défis inédits pour assurer la  
durabilité de l'agriculture*

*Est-ce que l'IA et les nouvelles  
technologies peuvent  
révolutionner notre approche ?*



# *Aller au-delà des standards établis*

Pour concevoir la nouvelle génération de solutions durables pour la protection des cultures

Selecting  
the best



Designing  
the best





# CropKey approach to Innovation

Unlocking a new way in Discovery



[CropKey on YouTube](#)

**From** incremental innovation  
of traditional chemistry ...

Screening “random”  
chemistries

Focus on traditional  
modes of action

Efficacy-driven  
discovery

Testing for safety  
& sustainability

Portfolio  
of products



... **to** breakthrough innovation  
to design entirely new crop protection  
chemistry

Profile driven  
discovery

Entirely new  
modes of action

Future ready  
properties

Designed to safety  
& sustainability criteria

Powering integrated  
& data-driven systems



# CropKey

Unlocking the Future of Sustainable Protection



**Target-Based Discovery**  
The Right Target Protein

**Profile-Driven Discovery**  
The Designed Molecule

## Breakthrough Technologies

Computational Target Discovery

New Paradigm in Screening

Systems Biology

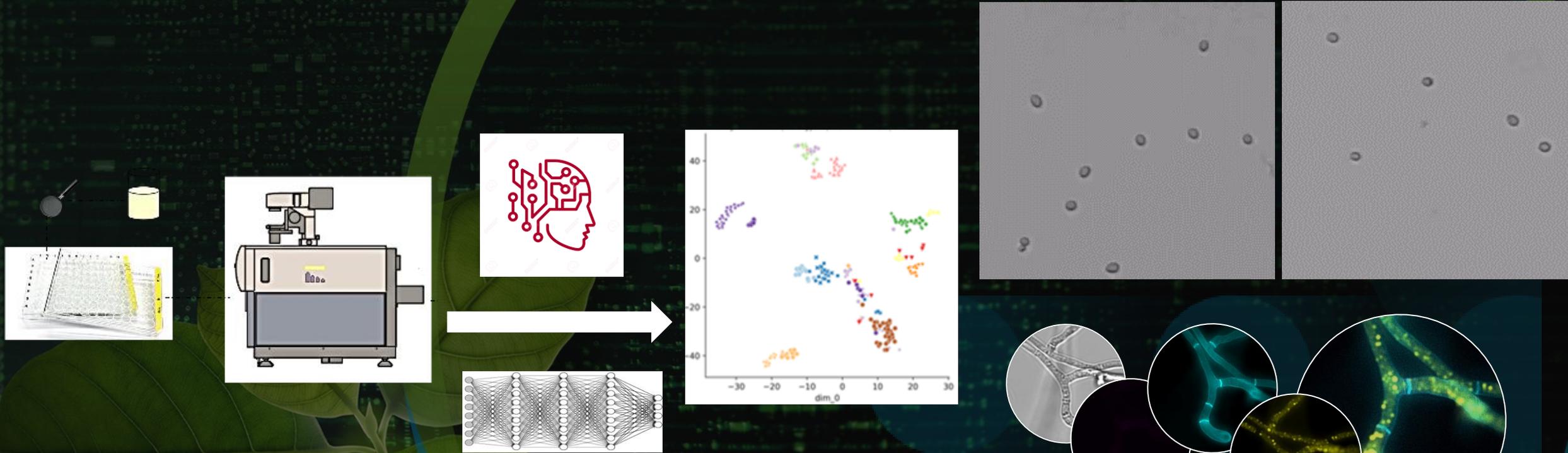
Digital Chemistry

Predictive Early Safety and Sustainability

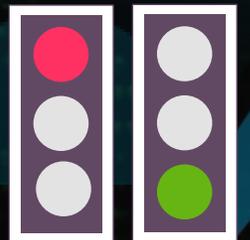


# Déchiffrer la biologie et ses mécanismes

L'I.A. pour poser un diagnostic du mode d'action



➤ Hypothèses de modes d'actions et détections des effets indésirables dès le criblage

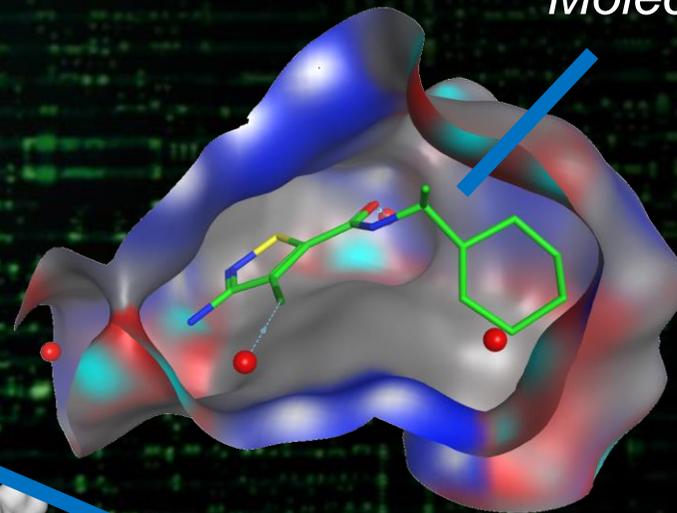


*La fonction de la protéine (cible) est neutralisée*

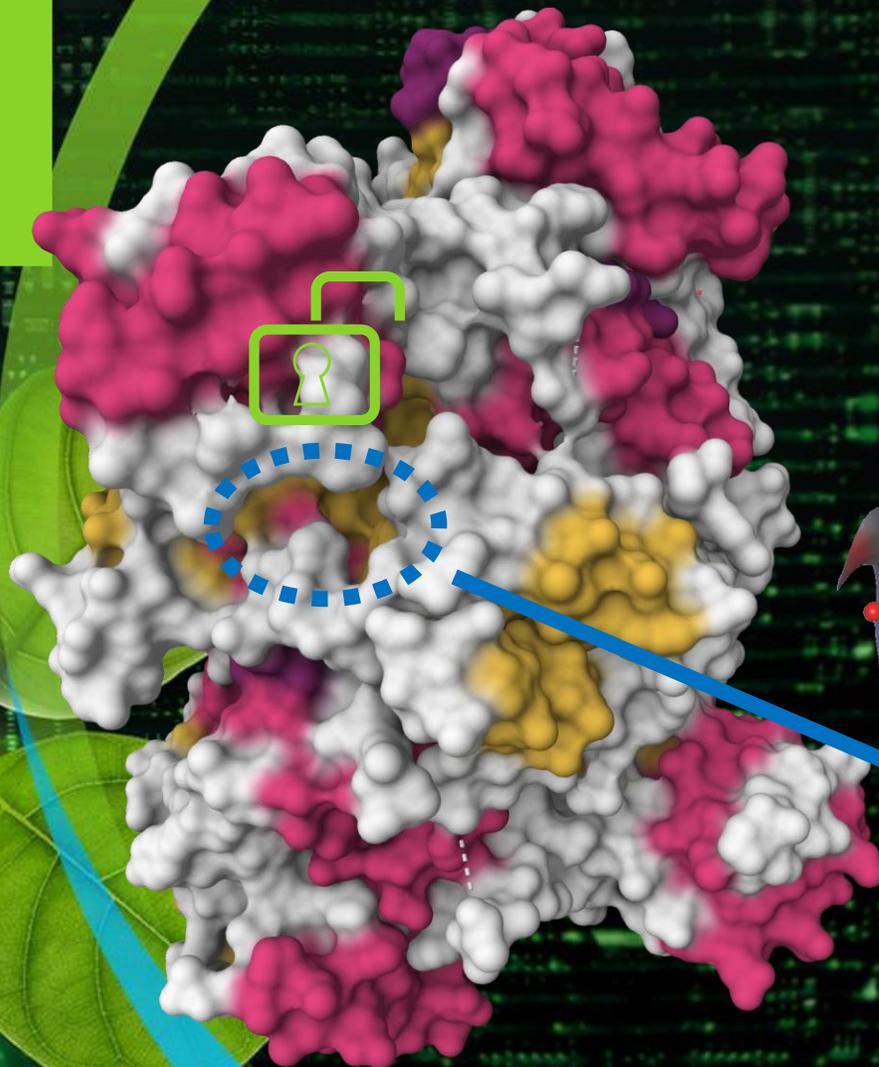
Target-Based  
Discovery



Molécule



Site actif



# L'IA pour identifier la bonne protéine (cible)



“Target-Based Discovery”

Identifier la bonne cible

Cible recherchée

**Essentielle**



**Spécifique**



**„Druggable“**



Interaction complexe dans systèmes biologiques

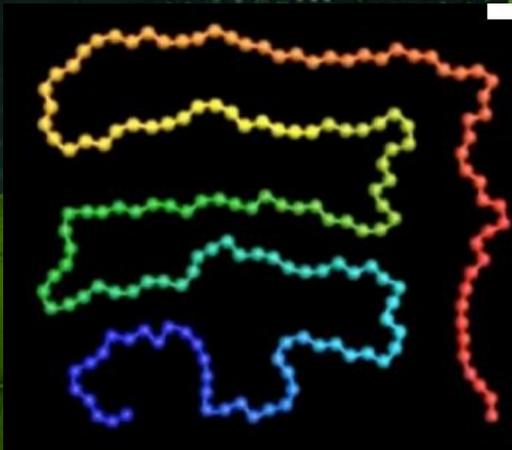


*Septoria tritici*  
>13000 genes

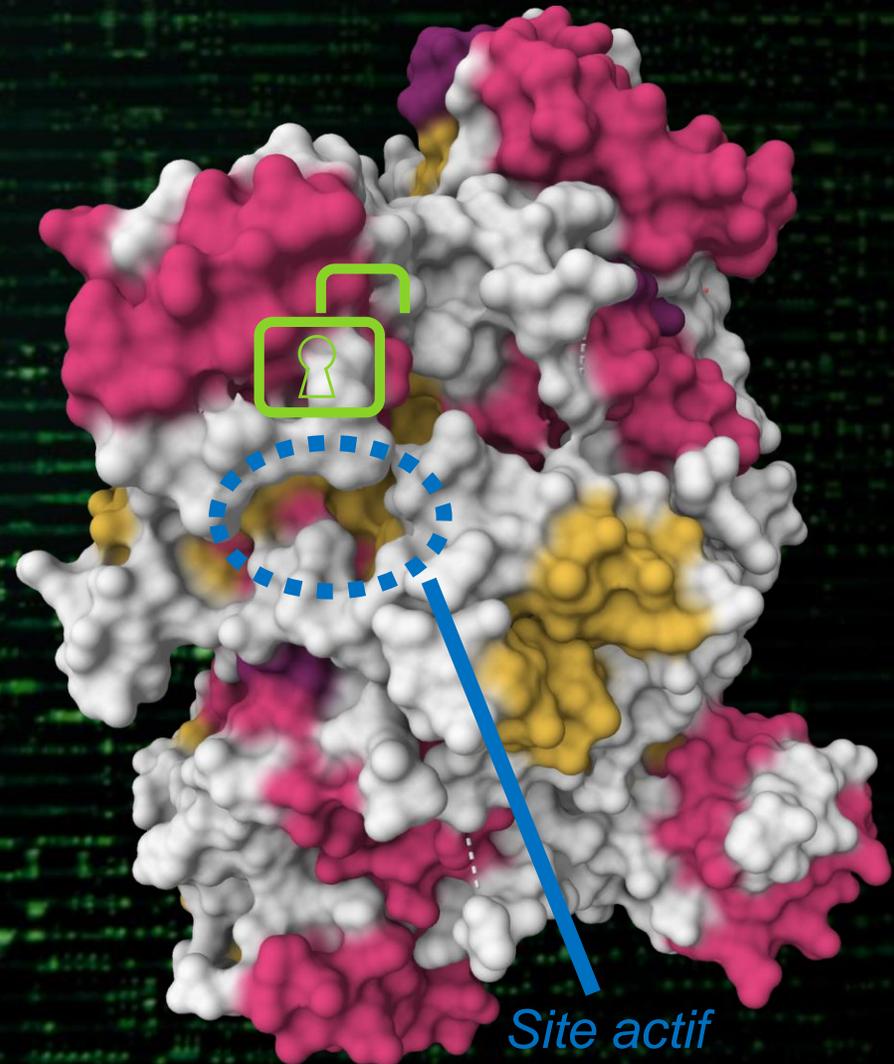
# Une révolution dans la modélisation de protéines par l'IA



“Target-Based  
Discovery”



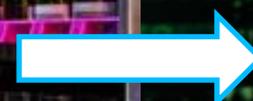
**DEEPMIND  
ALPHAFOLD**



*Site actif*

Hier...

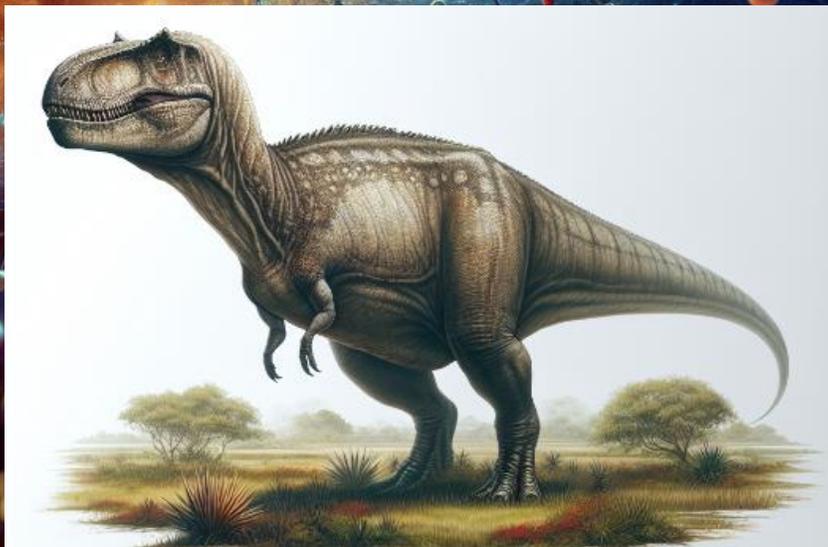
Chimiothèques  
physiques  
 $10^7$  molécules



Criblage aléatoire  
sur tests *in vivo*

**Aujourd'hui ...**

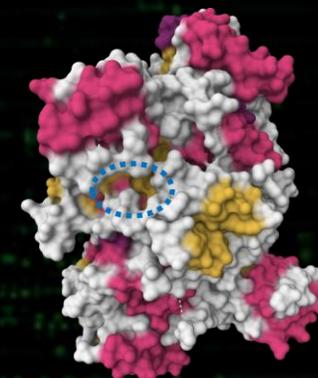
**Espaces  
virtuels > 10<sup>15</sup>  
molécules**



***Facilement accessible  
(semaines)***

***Partenaires externes et espace  
Bayer interne***

***Modèles permettent de  
rechercher les molécules (hits)***



*Mais il y a plus encore...*



File:Galaxy blue.jpg - Wikimedia Commons

***>10<sup>68</sup> atomes dans la  
voie lactée...***

***>10<sup>60</sup> différentes  
molécules théoriques***

***Comment naviguer dans un espace  
quasiment infini ?***



Profile-Driven  
Discovery  
The Designed Molecule



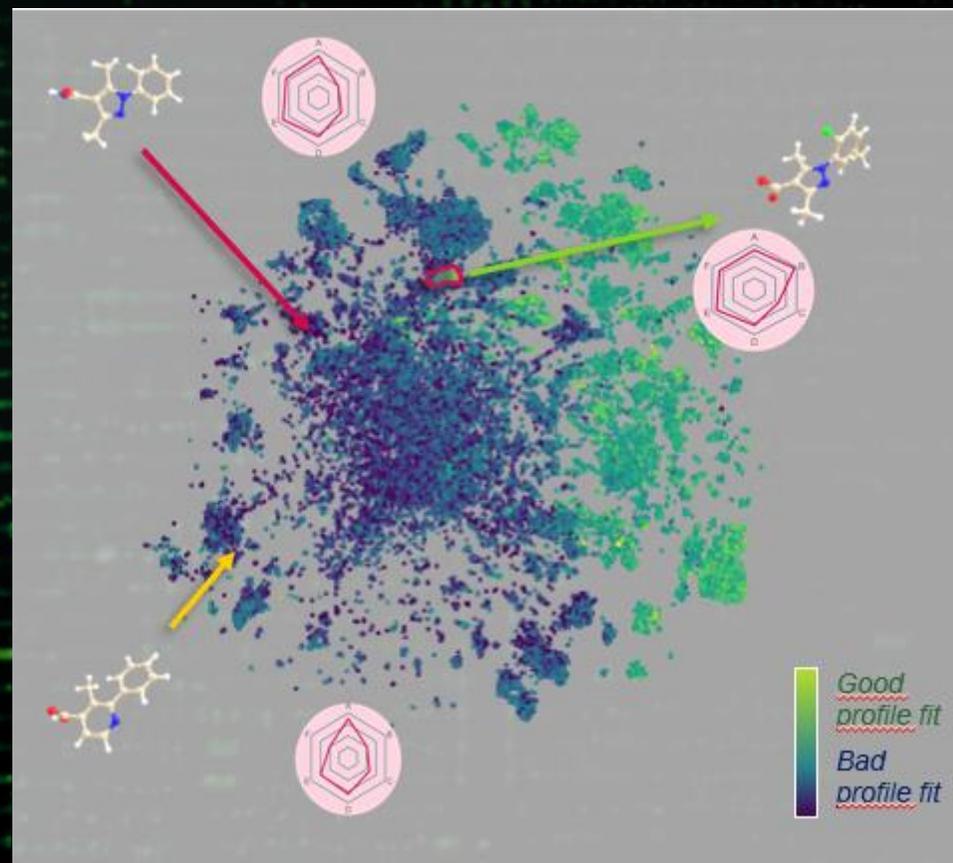
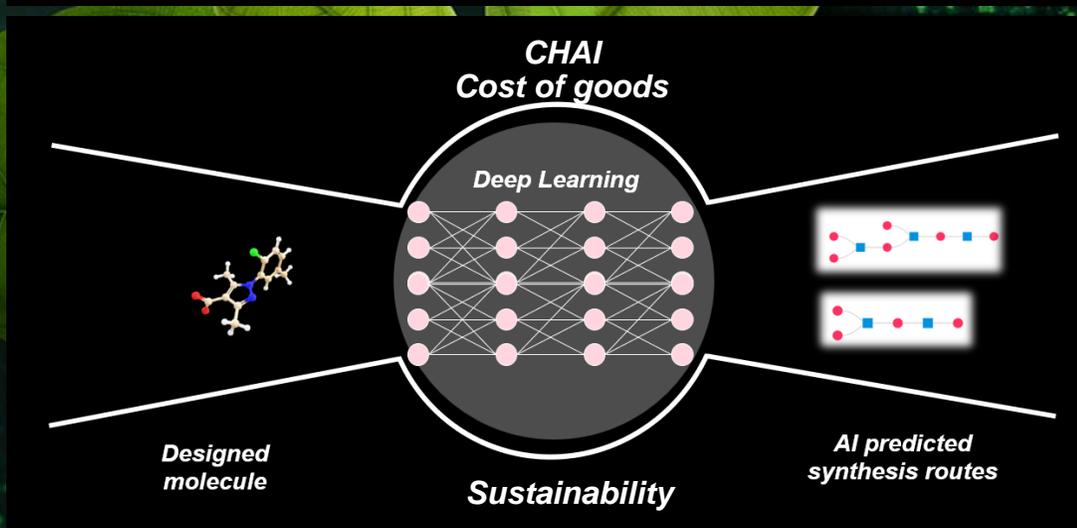
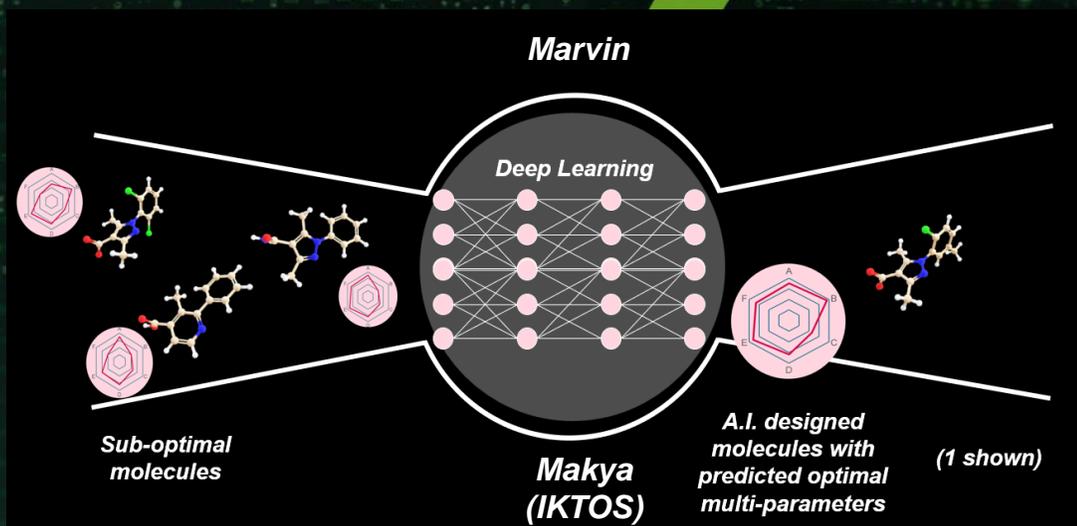
*Profils multi-paramétriques  
complexes*

*Sécurité et durabilité pris en  
compte dès le départ*

*L'IA augmente la  
conception de molécules*



# Conception de novo de molécules par l'IA





# Est-ce que l'IA peut "augmenter" nos chimistes ?



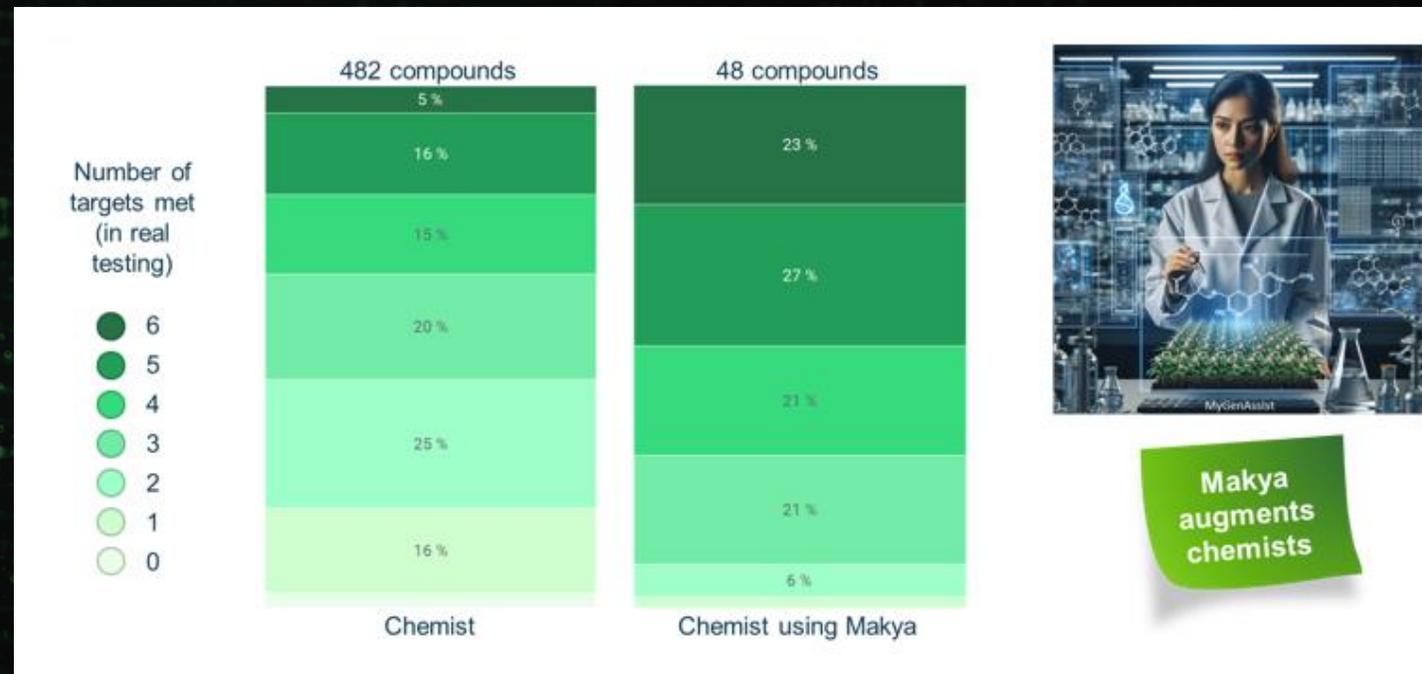
## Génération de modèles

**Dataset:**  
Current series 220415  
1303 molecules - 12 targets

**AutoMLs generated on all targets:**

EnzX	Biochemical assays	✓
EnzX	Cell Tests	✓
	Plant tests primary screening	✓
	Plant tests profiling	✗
	Toxicology assay	✓

## Conception de molécules



# Démocratisation de l'IA générative – My Gen Assist



- // Plateforme interne d'IA générative sécurisée
- // Connectée à des données externes et internes
- // Accessible à plus de 40000 employés
- // Formations accessibles à tous



# Life Hub Lyon – un lieu de rencontres connecté aux start-ups innovantes dans l'IA



## Bayer hosts ChemIntelligence at the LifeHub Lyon

17 October 2022



## **UNE NOUVELLE ENTREPRISE** au LifeHub Lyon



Meddenovo : quand la biochimie computationnelle permet d'accélérer les activités de R&D pharmaceutiques

## **Constellab Connect 2024**



Interopérabilité des données de vie réelle en sciences de la vie et santé

9 et 10 septembre 2024 - LifeHub Lyon

*Philippe Meresse, Simon Maechling, Catherine Sirven*

# La collaboration pluri-disciplinaire est essentielle



**Réunir les expertises différentes**



**Technologies de pointes**



**Solutions IT modernes et adaptées**



**Méthodes de travail agiles**



**Collaboration et travail en équipe au sein d'un environnement dynamique**

# Conclusion

*L'IA accélère la transformation de nos modes de travail dans quasiment tous les domaines, certaines applications sont plus avancées que d'autres*

*Pour pouvoir réussir la transformation digitale, l'humain est clé*

*Nous sommes au début de cette transformation, le meilleur est à venir*



# Remerciements



A tous les collègues de la  
Chimie  
Biologie  
Biochimie  
CLS  
IT  
Life Hub Lyon  
R&D Pharma

Rachel Rama et toute l'équipe de direction  
de la R&D Bayer Crop Science