

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



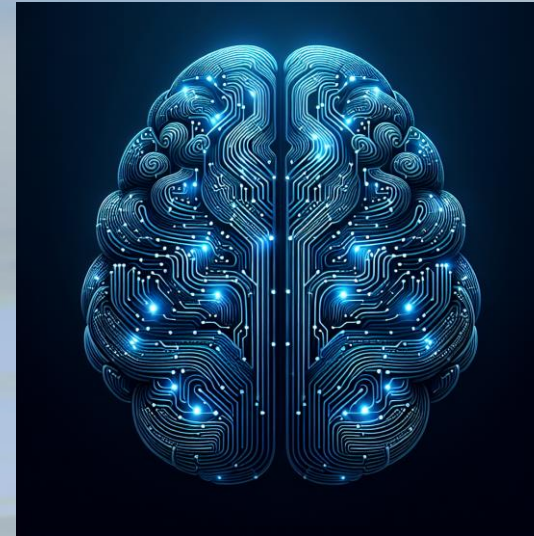
Changement
climatique



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

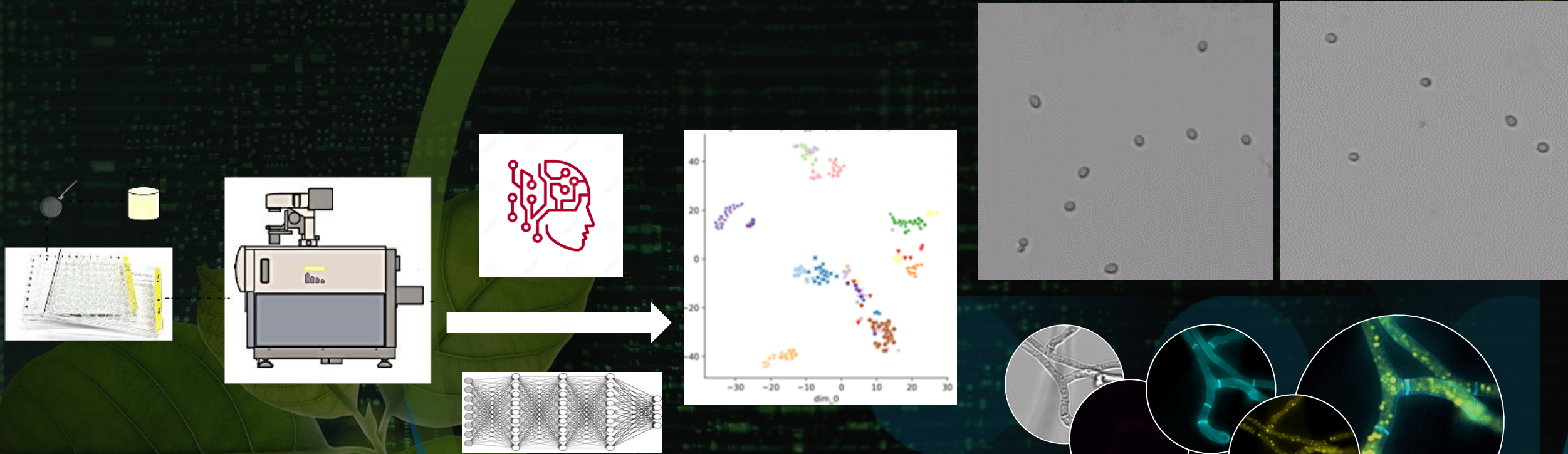
Digital Chemistry

Predictive Early Safety and Sustainability

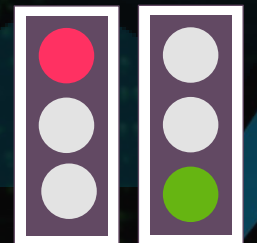


Déchiffrer la biologie et ses mécanismes

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



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

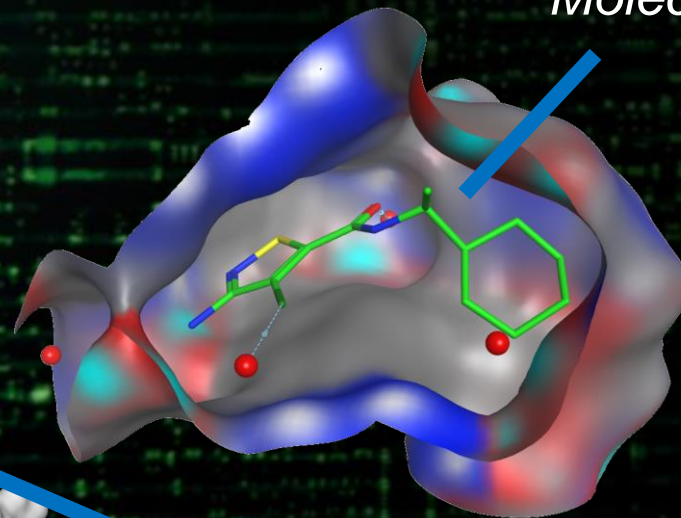


La fonction de la protéine (cible) est neutralisée

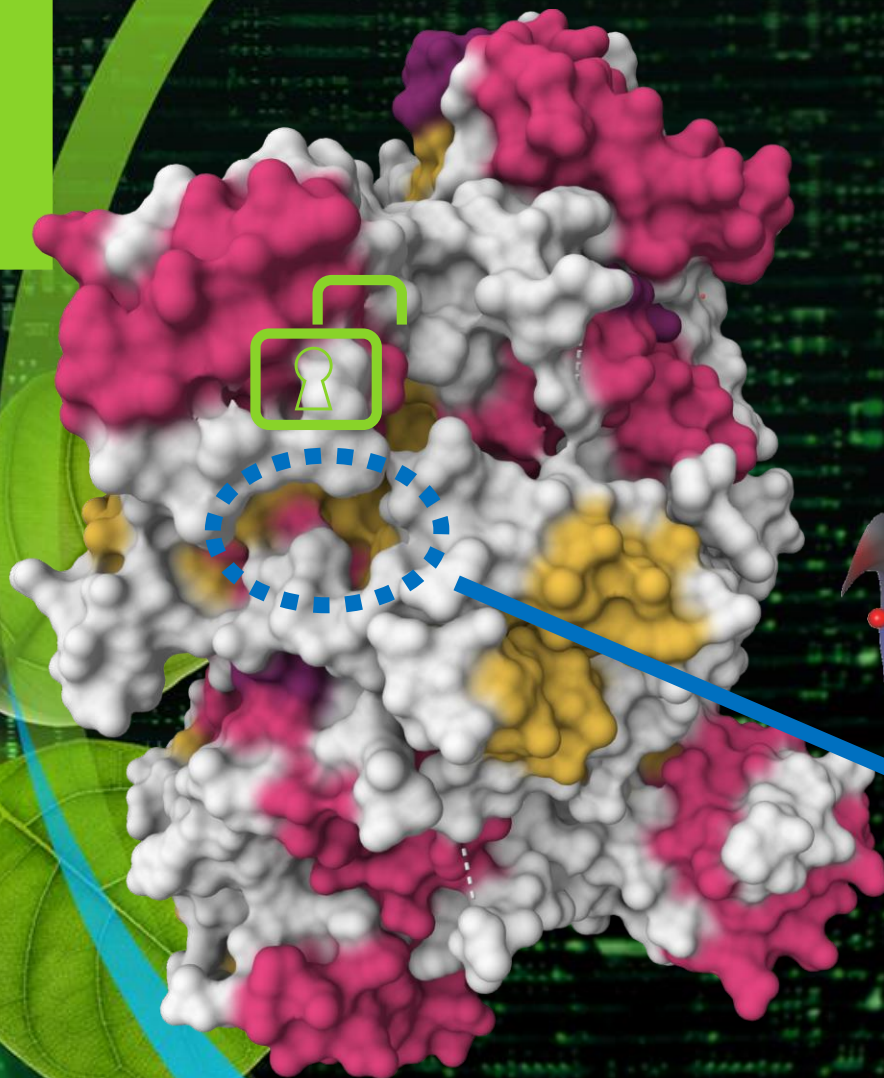
Target-Based
Discovery



Molécule



Site actif



L'IA pour identifier la bonne protéine (cible)

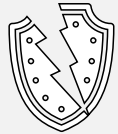


“Target-Based Discovery”

Identifier la bonne cible

Cible recherchée

Essentielle



Spécifique



„Druggable“



Interaction complexe dans systèmes biologiques

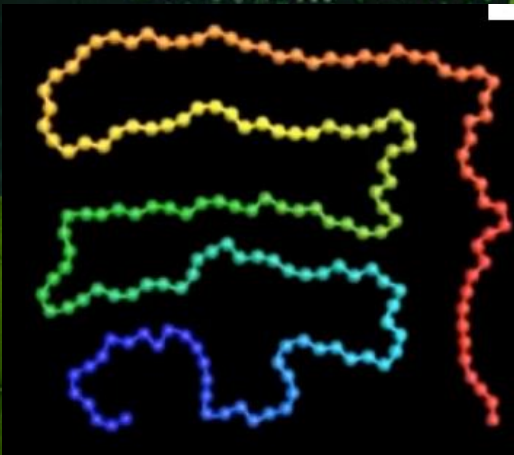


Septoria tritici
>13000 genes

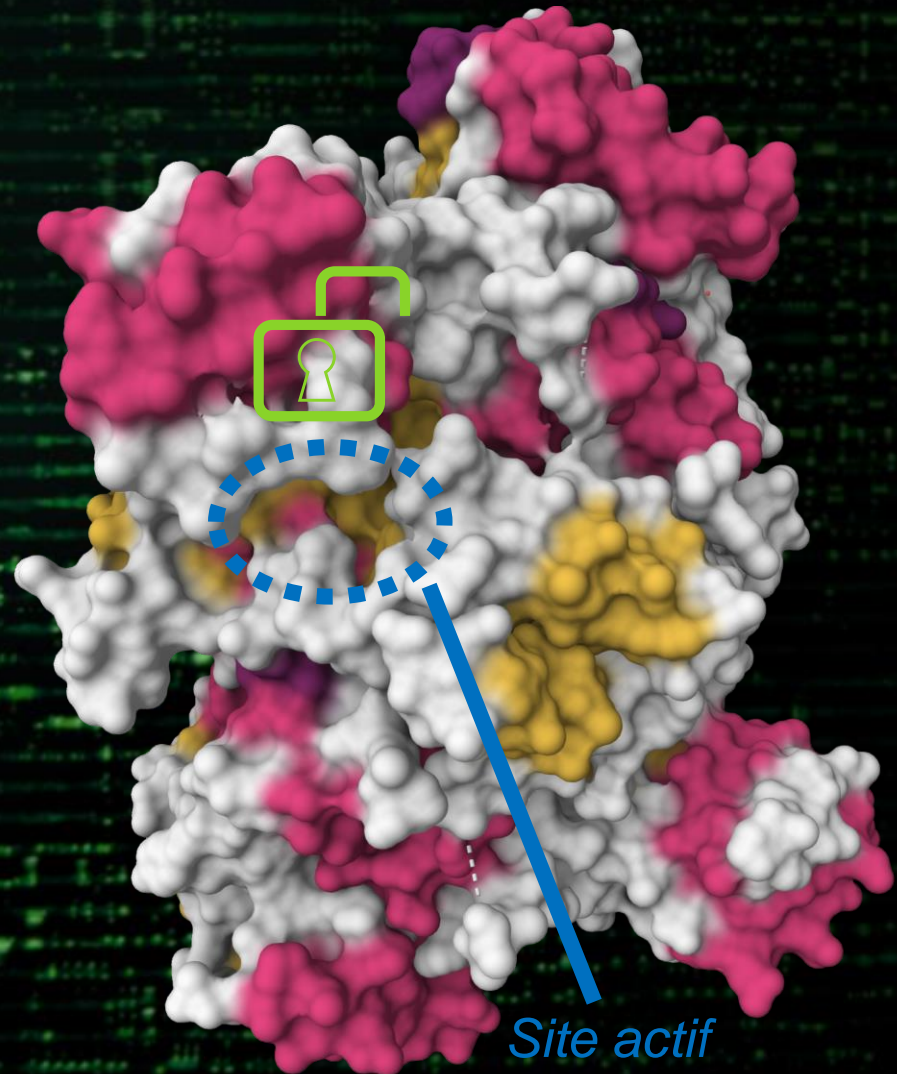
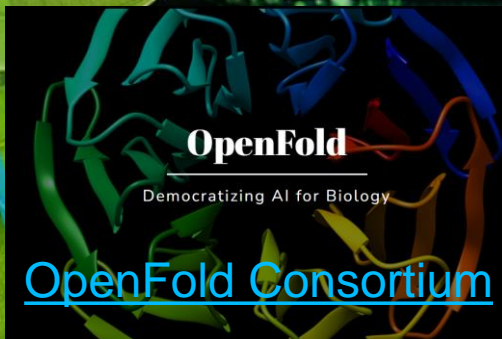
Une révolution dans la modélisation de protéines par l'IA



“Target-Based
Discovery”



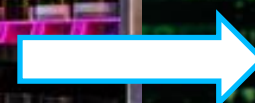
**DEEPMIND
ALPHAFOLD**



Site actif

Hier...

Chimiothèques
physiques
 10^7 molécules



Criblage aléatoire
sur tests *in vivo*

Aujourd'hui ...

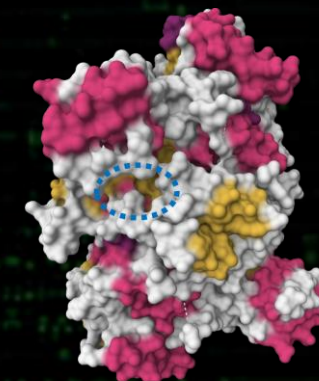
**Espaces
virtuels > 10^{15}
molécules**



***Facilement accessible
(semaines)***

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

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





File:Galaxy blue.jpg - Wikimedia Commons

Mais il y a plus encore...

**$>10^{68}$ atomes dans la
voie lactée...**

**$>10^{60}$ différentes
molécules théoriques**

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



Profile-Driven
Discovery
The Designed Molecule



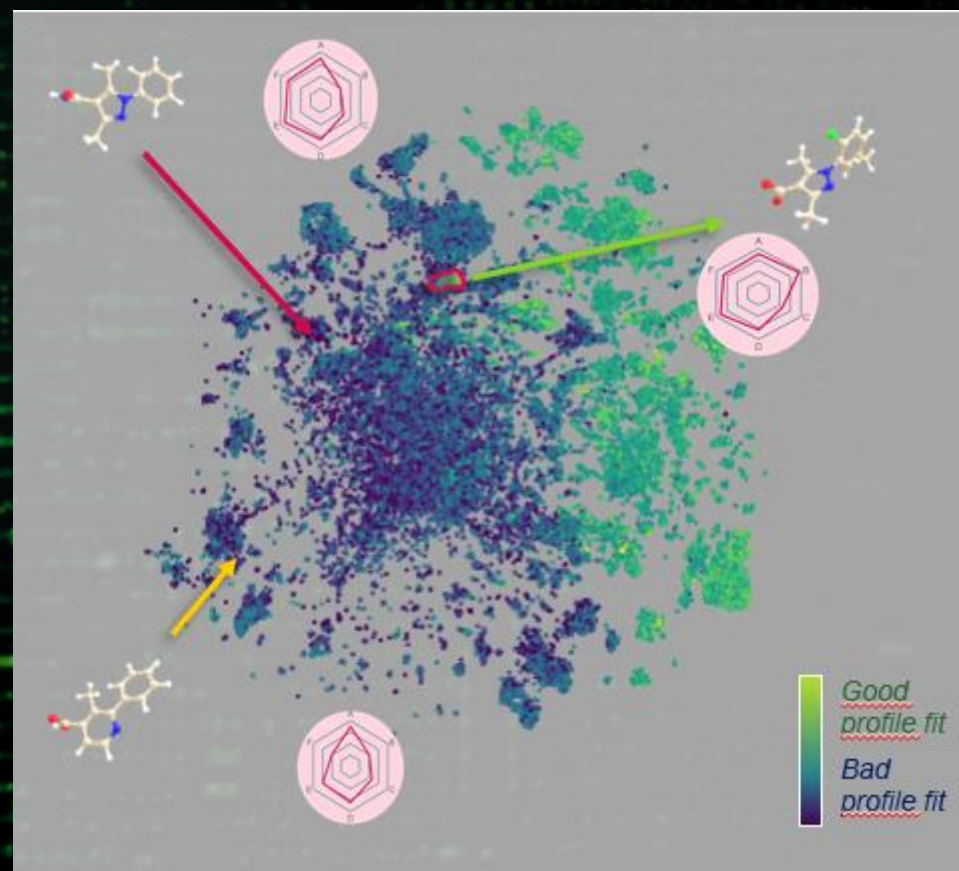
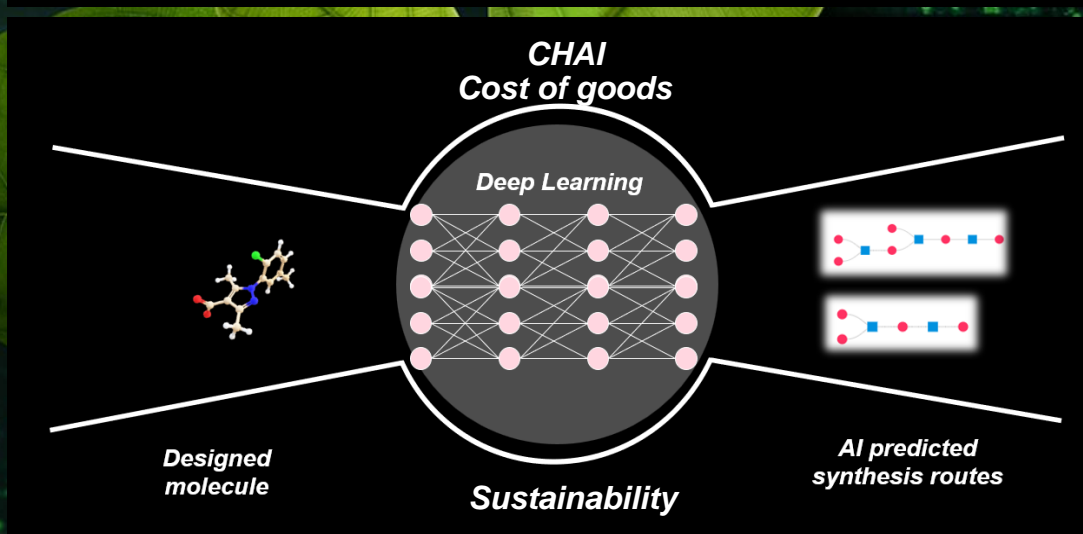
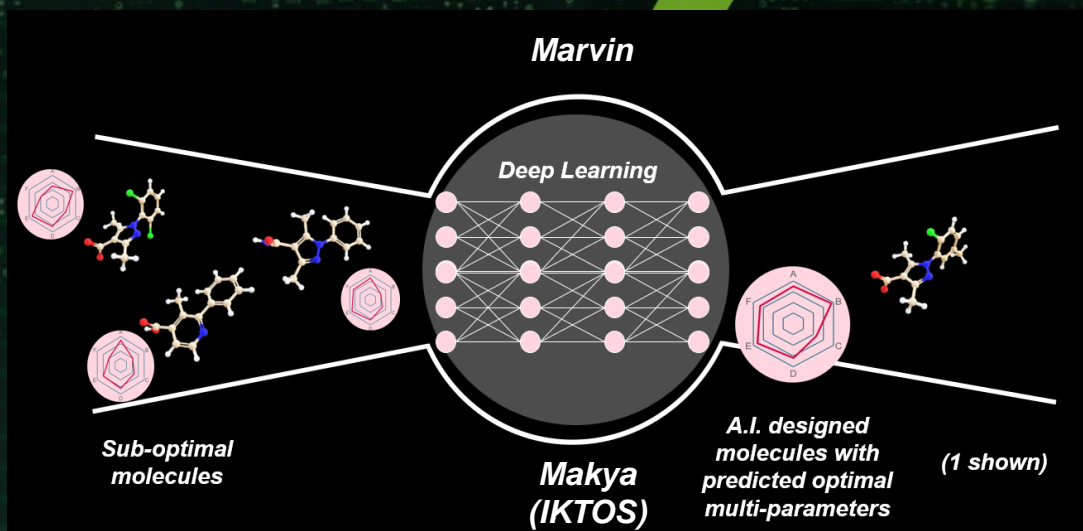
*Profils multi-paramétriques
complexes*

*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 ?



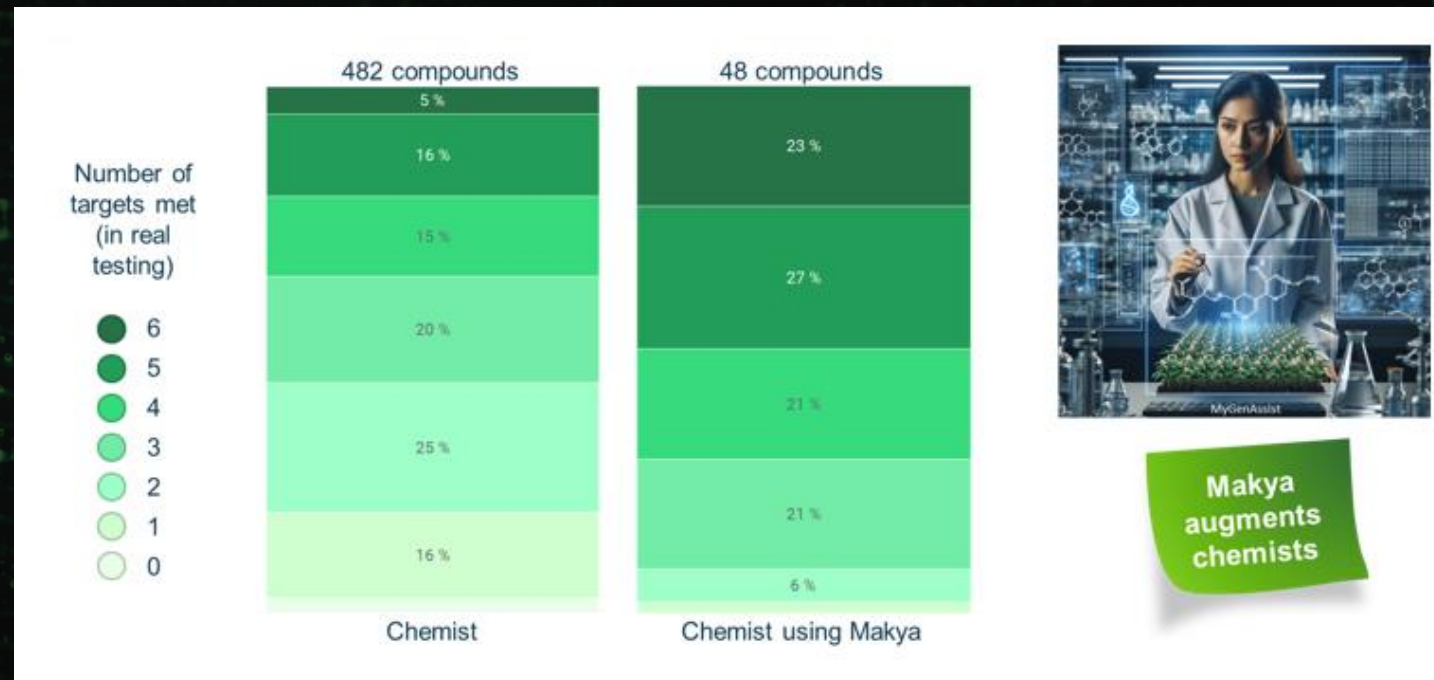
Génération de modèles

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