

ПРОГНОЗИРОВАНИЕ АНТИФИТОПАТОГЕННОЙ АКТИВНОСТИ НАНОЧАСТИЦ МЕТОДАМИ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ

Арбуханова Г. А.¹, Сайфулина П. Р.¹, Курбанов Д. А.¹, Креславская Т. Д.¹

Научный руководитель – канд. хим. наук, доцент Васильев Н. А.¹

¹Университет ИТМО
a-gulzhana@mail.ru

Введение

Разработка новых средств защиты растений от болезнетворных бактерий и грибов является актуальной задачей сельского хозяйства. Наночастицы (НЧ) демонстрируют высокую перспективность в качестве антифитопатогенных агентов благодаря своим уникальным физико-химическим свойствам. [1] Однако существующий подход к их созданию основан на методе «проб и ошибок», что делает процесс длительным и дорогостоящим. [2] Целью данной работы является создание подхода к формированию структурированной базы данных и разработка архитектуры интеллектуальной платформы на основе машинного обучения (МО) для предсказания эффективности и селективности наночастиц.

Основная часть

Суть предлагаемого решения заключается в отказе от эмпирического поиска в пользу прогнозного моделирования. На текущем этапе ведется масштабная работа по сбору и структурированию данных из научных публикаций, что является ключевым и нетривиальным этапом ввиду отсутствия агрегированных баз по данной тематике.

Сформирован первичный датасет, включающий более 10000 строк данных. Его структура отражает комплексный подход к прогнозированию: помимо целевого показателя - процента ингибирования роста фитопатогена, - в базе данных аккумулируется информация о трех группах ключевых параметров. Первая группа - это физико-химические дескрипторы наночастиц (тип металла, размер, форма, дзета-потенциал, характеристики покрытия), определяющие их биодоступность и механизм действия. Вторая - строго контролируемые условия эксперимента (концентрация, время экспозиции), задающие контекст взаимодействия. Третья группа - фенотипические и физиологические признаки самого патогена (вид, состав мембраны, тип спороношения), позволяющие впоследствии прогнозировать селективность воздействия. Такая многомерная структура данных закладывает основу для обучения точных и надежных моделей машинного обучения.

На основе собранных данных предложена архитектура интеллектуальной платформы, включающая три уровня. Основная модель прогнозирования эффективности нацелена на предсказание процента ингибирования целевого фитопатогена с использованием методов регрессионного анализа. Второй уровень — модель селективности, предназначенная для классификации воздействия НЧ на полезные бактерии (например, ризобии) с целью оценки безопасности препарата. Опциональная модель ориентирована на анализ общего влияния НЧ на рост и развитие растений. Ключевым отличием предлагаемого подхода является интеграция оценки эффективности и экологической безопасности в единой системе.

Выводы

В ходе работы сформирована структура и наполнение первичного датасета, а также предложена архитектура моделей машинного обучения для прогнозирования свойств наночастиц. Практическое использование результатов позволит целенаправленно разрабатывать безопасные и высокоэффективные антифитопатогенные препараты, минимизируя количество трудоемких экспериментов. Дальнейшие исследования будут направлены на расширение датасета, валидацию предложенных моделей и их тестирование для прогнозирования селективности воздействия на различные штаммы микроорганизмов.

Литература

1. Канакари Э., Дендрину-Самара К. Fighting Phytopathogens with Engineered Inorganic-Based Nanoparticles // Materials. — 2023. — Vol. 16, no. 6. — P. 2388. — DOI: 10.3390/ma16062388.
2. Smith J., Jones A. Machine Learning for ЕсДжяхво С., Серов Н., Дмитренко А., Виноградов В. В. Machine Learning Reinforced Genetic Algorithm for Massive Targeted Discovery of Selectively Cytotoxic Inorganic Nanoparticles // Small. 2023. Vol. 19, No. 52. Article ID 2305375. DOI: 10.1002/smll.202305375.