Uuringu vorm

1. Uuringu pealkiri*

Masinõppe ja tehisintellekti prognoosmudelite rakenduspiiride meetodite analüüs kemikaalidest tulenevate terviseriskide hindamiseks

2. Uurimisprobleemi kirjeldus, peamised uurimisküsimused*

Taotlus on seotud osalemisega Euroopa Liidu riikide vahelises partnerluses - Partnership for the Assessment of Risk from Chemicals (PARC) - tegevustes. PARC-i eesmärk on arendada kemikaalide järgmise põlvkonna riskihindamist (NGRA – next generation risk assessment) inimeste tervise ja keskkonna kaitsmiseks. PARC Toetab Euroopa Liidu kestliku arengu kemikaalistrateegiat, Euroopa rohelise kokkuleppe nullreostuse eesmärki, teeb seda uute andmete, teadmiste, meetodite ja vahendite, oskusteabe ja võrgustike abil.
Kuna kemikaaliohutuse valdkonda juhivad otsekohalduvad EL määrused, on Eesti aktiivne osalus ELi tasandi kemikaaliohutuse poliitika koostööalgatustes oluline. Kasu PARCi tegevusest on laiapõhjaline, kuid põhieesmärk on anda kemikaalide riski hindajatele parimad tööriistad ja oskusteave igapäevase töö tegemiseks. PARCis osalemine toetab Eesti rahvatervise arengukava 2020-2030 eesmärkide osana koostöö suurendamist teadusuuringute ja biomonitooringu vahel, suurendab tõenduspõhisust, kemikaalide tervisemõju hindamise ja vältimist tõhustavate tööriistade loomist, võimaluste loomist tootearenduse ja innovatsiooni jaoks, järelevalve tõhustamist. Töös osaleb Tartu Ülikooli (TÜ) Loodus- ja täppisteaduste valdkonna, keemia instituudi, molekulaartehnoloogia kaasprofessori Uko Marani juhitav töörühm. Käesolev taotlus on osalemiseks PARC-i tööpakki nr 5 (WP5), mis tegeleb ohuhindamise uuenduslike meetodite väljatöötamise (sh. arvutusmeetodid, nagu masinõpe ja tehisintellekt), millega täita andmelünkasid ja kuidas neid integreerida inimese haiguse mudelitega (NGRA) ja erinevatesse süsteemidesse.

Masinõppe ja tehisintellekti (ML ja AI) meetodite abil loodud prognoosmudelite abil on võimalik tuvastada kemikaalide võimalike kahjulike mõjusid inimese tervisele ja keskkonnale. Nende mudelite rakendamisel kemikaalide riskihindamisel on oluline hinnata, et uuritav kemikaal oleks mudeli rakenduspiirides (nt OECD (Q)SAR Assessment Framework raames). Antud projekti keskseks uurimisprobleemiks ongi juhtumiuuring, mille eesmärgiks on testida erinevaid meetodeid ning välja pakkuda paremaid lahendusi ML ja AI prognoos mudelite rakenduspiiride hindamiseks.

3. Uuringu tulemuste rakendamine*

Uuringu tulemused aitavad rakendada ML ja AI meetodite abil loodud mudeleid kemikaalide riskihindamise, hõlbustades otsusutusprotsesse ja seejuures vähendades loomkatseid. Uuringu tulemused aitavad täita ka erinevate regulatiivsetele raamistikele vajadusi, mida Euroopa keskselt haldavad ECHA (nt REACH, BPR, CLP) ja EFSA (nt pestitsiidide reguleeriv raamistik; kosmeetikadirektiiv, farmaatsia lisaainete raamistik) ning mis on vajalikud kõikidele liikmesriikidele, sh. Eesti. Kuna rakenduspiiride hindamine endiselt avatud väljakutse, siis TÜ juhtumiuuring uue 2026 aastal algava tegevuse raames annab praktilisi juhiseid keerukate ML ja AI mudelite rakenduspiiride käsitlemiseks, mis ka on eelduseks mehhanistlikuks seletamiseks. Kuna regulatiivsed riskide identifitseerimise ja hindamise rakendused arenevad ML ja AI mudelite kasutamise suunas, siis on siseriiklikult oluline omandada sellist oskusteavet ja suurendada koostööd Euroopa Liidus ja ka mujal.

4. Esialgne nägemus uurimismeetoditest*

Kuigi ML ja AI mudelid on universaalselt rakendatavad, siis juhtumiuuringus keskendutakse eeskätt mudelitele, mille abil on võimalik prognoosida kemikaalide aktiivsust sihtmärkidel, mis on olulised inimese tervise seisukohalt ning samuti lähtuvad OECD QSAR mudelite valideerimise printsiipidest. Analüüsitakse erinevaid meetodeid rakenduspiiride hindamiseks, lähtudes nii sisendkemikaalide struktuurist ja seda kirjeldavatest molekulaar-tunnustest ning ka mudeli väljundparameetrite kaudu. Analüüsi loob ka eeldused täiendada olemasolevaid meetodeid ja anda välja paremad juhiseid rakenduspiiride hindamiseks erinevate tehisintellekti ja masinõppe mudelite rakendamisel.

5. Projekti kogumaksumus (KM-ta)*

150000

6. Projekti eelarve jagunemine aastate lõikes (KM-ta)*				
	2026	**2027**	**2028**	**2029**
PROJEKTI EELARVE JAGUNEMINE AASTATE LÕIKES (km-ta):	100000	50000		

7. Projekti rahastamisallikas*

SOM RE TA lisaeelarve

7.1 Täpsustus rahastusallika kohta

Kuna antud taotlus on kaasrahastus PARC-i vastavas tööpaki/tegevuse uuringu täitmiseks, siis sellele lisandub veel EL rahastus summas ca 45000 eur/aastas ja TÜ omafinantseerinu summas ca 5000 eur/aasta, kokku kolmel aastal ca 150000 eurot.

8. Uuringu projektijuht*

Joel Valge

9. Uuringu analüütik*

Aive Telling

10. Uuringu teadusnõunik*

Ebe Nõmm (terviseala teadusnõunik)

11. Lepingu soovitav sõlmimise kuupäev töö teostajaga*

31.03.2026

12. Lepingu soovitav lõppemise, tööde üleandmise-vastuvõtmise kuupäev *

31.12.2028

13. Uuringu seotus läbivate teemadega*

Kulutõhusus/efektiivsus

Jah

Kas kasutatakse tehnoloogiate (sh AI) võimalusi ja/või selgitatakse välja nende kasutuse mõjusid

Jah

Kas elavdatakse ettevõtlust SoMi valdkondades ja/või selgitatakse välja võimalusi selle elavdamiseks?

Mitmekesisus

Kliimasõbralikkus

Jah

Puudub seos

Palun selgitada ükshaaval kuidas on uuring seotud ülal nimetatud läbivate teemadega.
Uuringu teema haakub otsesent efektiivsuse ja kulutõhususe parandamisega, sest EL kestlikkust toetava kemikaalistrateegia järgi on seatud eesmärgiks suurendada uue lähenemisviisi meetodite (new approach methods; NAM) rakendamist keemiliste riskide hindamiseks, sealhulgas ka loomkatsete vähendamine. Arvutuslikud NAM-sid on oluline võimalik tee selleks. Projekt tegeleb otseselt ML ja AI vahendite rakendamise ja nende tulemuste usaldusväärsuse hindamisega. Tänu sellele, et nende meetodite tähtsus ja rakendusvõimalused kasvavad, siis on oluline ka Eestis arendada kemikaalide riski hindamise kompetentsi, mis on vajalik kemikaalidest tulenevate tervise- ja keskkonnariskide hindamisel. Projekt on seotud ka kliimasõbralikkusega, sest ML ja AI mudelite rakendatavuse hõlbustamine aitab säästa keskkonda, kuna võimaldab ennetavalt identifitseerida kemikaalide tervise ja keskkonnariske. Efektiivsemad arvutipõhised lähenemised võimaldavad vähendada kulukaid loomkatseid ja optimeerida olemasolevaid protsesse, nt tehes ainult olulisi laborikatseid (sh heitmete ja kulude vähendamine).

Hange

1. Hanke nimetus

2. Hanke tüüp

3. Asutus

4. Osakond

5. Vastutaja

6. Vastutaja e-post

7. Hanke objekti lühikirjeldus

8. Hanke lähteülesande valmimise tähtaeg

9. Hanke väljakuulutamise tähtaeg

10. Lepingu soovitud kestus (kuudes)

11. Lepingu soovitatav sõlmimise kuupäev

12. Lepingu eeldatav maksumus km-ta

13. Rahastuse liik

Riigieelarve

EL vahendid

RE teadusrahad

14. Hankelepingu nimetus

15. Riigihanke viitenr (

16. Märkused