

ANÁLISE DE ALGORITMOS SUPERVISIONADOS PARA PREVER A TOXICIDADE DE PESTICIDAS EM ABELHAS

Joyce Moura Silva¹, James Rykelme Sales e Morais²

¹ *Universidade Federal do Piauí, Teresina - PI, Brasil, joyzinhw@gmail.com.*

² *Instituto Federal do Piauí, Picos - PI, Brasil, james.rmorais@gmail.com.*

Resumo: A polinização por abelhas desempenha um papel vital na agricultura e na manutenção da biodiversidade, porém a exposição a pesticidas representa uma ameaça significativa a esses polinizadores. Este estudo investiga a aplicação de algoritmos de aprendizado de máquina supervisionado na previsão da toxicidade de compostos químicos para abelhas, com o objetivo de contribuir para estratégias de mitigação de riscos. Foram avaliados classificadores amplamente utilizados na literatura, empregando técnicas de pré-processamento para tratamento de dados desbalanceados e representação de características moleculares. A análise incluiu métricas de desempenho padronizadas para comparação dos modelos, além da avaliação da importância de atributos individuais. Os resultados demonstram o potencial dessas abordagens para auxiliar na identificação de substâncias perigosas, oferecendo suporte a preservação de ecossistemas dependentes de polinizadores.

Palavras-chave: Aprendizado de Máquina. Aprendizado Supervisionados. Classificadores. Abelhas. Pesticidas.

ANALYSIS OF SUPERVISED ALGORITHMS TO PREDICT PESTICIDE TOXICITY IN BEES

Joyce Moura Silva¹, James Rykelme Sales e Morais²

¹ *Federal University of Piauí, Teresina - PI, Brazil, joyzinhw@gmail.com.*

² *Federal Institute of Piauí, Picos - PI, Brazil, james.rmorais@gmail.com.*

Summary: Pollination by bees plays a vital role in agriculture and biodiversity conservation; however, exposure to pesticides poses a significant threat to these pollinators. This study investigates the application of supervised machine learning algorithms to predict the toxicity of chemical compounds to bees, aiming to contribute to risk mitigation strategies. Widely used classifiers in the literature were evaluated, employing preprocessing techniques to address data imbalance and molecular feature representation. The analysis included standardized performance metrics for model comparison, as well as an assessment of the importance of individual attributes. The results demonstrate the potential of these approaches to assist in identifying hazardous substances, providing support for the preservation of ecosystems dependent on pollinators.

Key words: Machine Learning. Supervised Learning. Classifiers. Bees. Pesticides.

INTRODUÇÃO

Cerca de 75% das plantas conhecidas dependem de polinizadores, e as abelhas se destacam como uma das principais espécies responsáveis pela polinização. Elas são fundamentais para a reprodução cruzada de 73% das plantas cultivadas globalmente. Além de serem as principais responsáveis pela polinização, tanto nas áreas nativas remanescentes quanto nas principais culturas agrícolas, seus serviços se estendem a uma ampla variedade de flores. As abelhas também fornecem mel, outros produtos e alimentos para mais de 176 países (FREITAS ET AL. 2004; NICOLSON e WRIGHT, 2017; KEVAN, 1999).

Embora possuam um papel vital, tanto ecológico quanto econômico, a diversidade dessas espécies tem enfrentado ameaças nas últimas décadas. A redução dos polinizadores em regiões agrícolas está associada a diversos fatores. Um dos mais significativos é a aplicação excessiva de pesticidas (PIRES et al. 2016; PEREIRA, 2010).

De acordo com Malaspina et al. (2008), os inseticidas podem impactar as abelhas principalmente por três vias de envenenamento: a) por contato; b) por ingestão; e c) por inalação. Seus efeitos podem variar desde a morte por toxicidade aguda até impactos crônicos que comprometem o funcionamento da colônia e reduzem a expectativa de vida dos indivíduos. Em termos gerais, cerca de 90% dos inseticidas atuam como neurotoxinas, prejudicando o sistema nervoso central, particularmente na condução dos sinais nervosos entre as células nervosas (PEREIRA, 2010).

Ou seja, mesmo quando empregados de forma preventiva ou terapêutica para o controle de insetos em plantações agrícolas, especialmente em monoculturas, os praguicidas, uma vez dispersos no ambiente, podem provocar danos significativos. Esses impactos incluem, inclusive, a modificação da dinâmica natural da pressão de seleção sobre os seres vivos, acarretando, como consequência, alterações no ecossistema afetado (SPADOTTO, 2006).

Diante desse cenário, a categorização da toxicidade desse tipo de agroquímico, fundamentada em modelos preditivos, apresenta-se como uma estratégia promissora para a identificação de compostos potencialmente perigosos. Por meio de métodos de aprendizado de máquina, busca-se prever, de forma eficaz, a toxicidade de diversas substâncias. Essa abordagem não apenas contribui para a proteção das populações de polinizadores, como também oferece suporte ao desenvolvimento de práticas agrícolas mais sustentáveis e seguras.

TRABALHOS RELACIONADOS

Nos últimos anos, o uso de técnicas de aprendizado de máquina para prever a toxicidade de compostos químicos em organismos vivos tem se mostrado uma abordagem promissora, especialmente em contextos onde a experimentação direta é limitada por questões éticas, econômicas ou de tempo (MAYR et al. 2016; HUANG et al. 2016). A seguir, serão apresentados trabalhos relevantes que exemplificam essas abordagens e seus resultados.

O trabalho de Adamczyk et al. (2025b) avalia modelos de aprendizado de máquina para prever a toxicidade de pesticidas para abelhas da espécie *Apis mellifera*, utilizando o *dataset ApisTox* (ADAMCZYK et al. 2025a). Foram testados diferentes métodos, como *fingerprints* moleculares, *kernels* de grafos, GNNs (do inglês, *Graph Neural Networks*) e modelos pré-treinados. Os resultados mostram que os métodos mais simples, como *fingerprints* (*Avalon*, *MACCS*, *ECFP*) e *kernels* de grafos, especialmente o *WL-OA*, são os que apresentam melhor desempenho. O modelo *kernel* de grafo *WL-OA*, utilizando a divisão *MaxMin* do *dataset*, apresentou os seguintes resultados: uma *AUC-ROC* de 83,95%, um *MCC* de 0,49 que representa o melhor valor entre todos os modelos avaliados, uma precisão de 62,16% e um *recall* de 54,76%.

O trabalho de Shi et al. (2024) apresenta o *AquaticTox*¹, uma ferramenta web baseada em modelos de aprendizado de máquina em *ensemble* com o *dataset* ECOTOX (OLKER et al. 2022) para prever a toxicidade aguda de compostos orgânicos em organismos aquáticos. Os modelos são construídos a partir de seis algoritmos: *Random Forest*, *SVM* e *GACNNs* (do inglês, *Graph Attention Convolutional Neural Network*) e integrados a uma *ensemble stacking*. Os modelos *ensemble* superaram todos os modelos individuais, atingindo *AUC-ROC* entre 0,75 e 0,92 e aumentos de 12–22% em precisão média (AP). com acurácia de 78,18% dos compostos não tóxicos e 71,11% dos tóxicos.

A abordagem adotada neste estudo se diferencia da literatura revisada por empregar algoritmos supervisionados amplamente reconhecidos, e não usar técnicas de aprendizado em grafos. Outro diferencial relevante está na estratégia de avaliação: ao invés de utilizar as divisões de treino e teste previamente estabelecidas nos *dataset* original.

¹ <https://chenyang.ccnu.edu.cn/ccb/server/AquaticTox/>

REFERENCIAL TEÓRICO

Inteligência Artificial

A inteligência artificial (IA) refere-se à capacidade das máquinas de executarem tarefas que normalmente exigiam raciocínio humano. Isso inclui habilidades como aprender com experiências, tomar decisões, analisar situações e adaptar-se a diferentes contextos de forma autônoma. Através da IA, os sistemas se tornam mais eficientes ao utilizarem análises preditivas para identificar padrões inesperados nos dados, aprender com esses padrões e ajustar seus algoritmos para lidar com novas circunstâncias de maneira inteligente (FERNANDES, 2003)

Aprendizado de Máquina

O Aprendizado de Máquina (AM) é uma área da IA voltada para o desenvolvimento de algoritmos e sistemas computacionais capazes de aprender a executar tarefas específicas com base na experiência adquirida a partir da análise de dados. O AM está dividido em três categorias principais: aprendizado supervisionado, aprendizado não supervisionado e aprendizado por reforço (FACELI et al. 2011; HASTIE et al. 2009; MITCHELL, 2015).

Aprendizado Supervisionado

O Aprendizado Supervisionado é uma abordagem do AM na qual os modelos são treinados com base em dados rotulados, ou seja, as amostras já possuem classificações corretas previamente definidas. Durante o treinamento, o modelo aprende por meio da comparação entre as previsões geradas e os rótulos reais (SATHYA; ABRAHAM, 2013).

METODOLOGIA

Visando alcançar o objetivo geral do trabalho, organizou-se a metodologia nesta seção. Que aborda desde a aquisição e preparação dos dados até a aplicação e avaliação dos algoritmos. A Figura 1 ilustra como é feito o processo de classificação de dados.

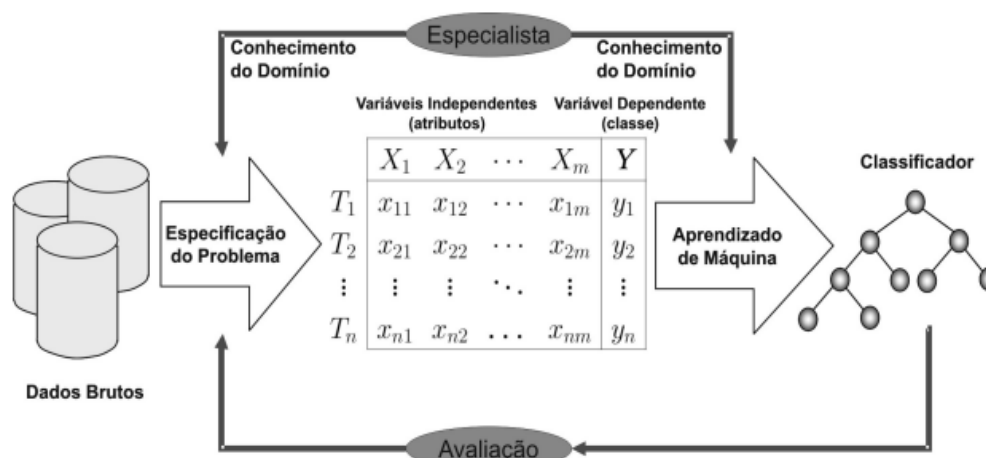


Figura 1. Fases da classificação de dados.

Fonte. (MONARD; BARANAUSKAS, 2003)

Conjunto de Dados

O conjunto de dados utilizado foi o *ApisTox* (ADAMCZYK et al. 2025a), um conjunto voltado para a classificação da toxicidade para abelhas, contendo cerca de 1.035 registros. Ele é composto por dados derivados do PPDB, BPDB (LEWIS et al. 2016) e ECOTOX (OLKER et al. 2022), com foco na toxicidade de pesticidas para abelhas da espécie *Apis mellifera*. O conjunto tem 13 colunas como mostra o Quadro 1, e está dividido em rótulos binários que indicam a toxicidade das moléculas, classificados como tóxicos e não tóxicos, conforme a distribuição apresentada na Tabela 1.

Quadro 1. Colunas do dataset.

['name', 'CID', 'CAS', 'SMILES', 'source', 'year', 'toxicity_type', 'herbicide', 'fungicide', 'insecticide', 'other_agrochemical', 'label', 'ppdb_level']

Tabela 1. Distribuição do dataset tóxicos e não tóxicos.

Rótulo	Quantidade
Não Tóxico (0)	739
Tóxico (1)	296

Pré-processamento de Dados

A base de dados contém descritores químicos no formato *Simplified Molecular Input Line Entry System* (SMILES). Para transformar os dados químicos em vetores numéricos, foi utilizada a biblioteca *RDKit*² para gerar *fingerprints* moleculares do tipo *Morgan fingerprint*, também conhecidos como circulares. Cada SMILES foi convertido em um vetor binário com *numpy* para 1.024 *bits*, em que cada *bit* representa a presença ou ausência de subestruturas químicas. Diante disso, a matriz de características *X* é o *fingerprint* e o vetor alvo *y* são os rótulos binários, o *label*. Também foi verificado se havia duplicatas e valores nulos na base de dados. A Figura 2 mostra a molécula desenhada com destaques em átomos que ativaram *bits* no *fingerprint*, e abaixo está o vetor binário resultante.

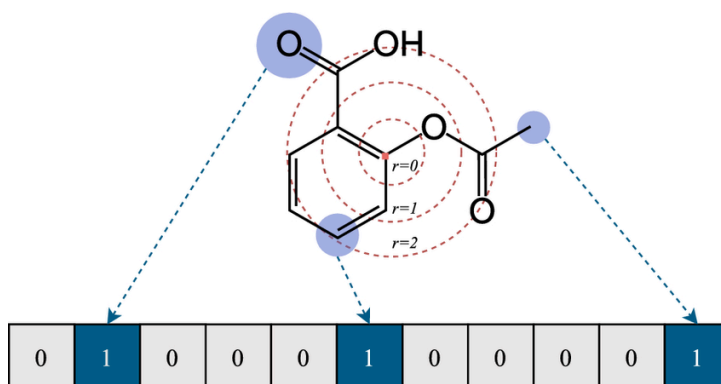


Figura 2. Representa o fingerprint de uma molécula .

Fonte. (NGUYEN-VO et al. 2024)

Divisão dos Dados e Balanceamento das Classes

Os dados foram separados em grupos de treinamento com 80% e de teste com 20%, utilizando uma amostragem para assegurar que a proporção das classes fosse a mesma em ambos os grupos. Após isso, foi utilizado o *StandardScaler*³ para normalizar os dados, de modo que cada característica apresentasse média igual a zero e desvio padrão igual a um. Isso é crucial, principalmente para algoritmos que são afetados pela escala, como *Support Vector Machines* (SVM) e *Multi-Layer Perceptron* (MLP).

² <https://www.rdkit.org/docs/GettingStartedInPython.html>

³ <https://scikit-learn.org/stable/modules/generated/sklearn.preprocessing.StandardScaler.html>

Como o *dataset* apresenta desbalanceamento entre as classes, foi considerada a técnica de *oversampling* para o conjunto de treinamento, visando equilibrar a distribuição das classes. Dentre as estratégias avaliadas, foi utilizado o *Synthetic Minority Over-sampling Technique* (SMOTE) (CHAWLA et al., 2002), que gera exemplos sintéticos da classe minoritária com base na vizinhança dos dados reais. A Tabela 2 apresenta a distribuição das classes no conjunto de treinamento, antes e depois da aplicação do SMOTE.

Tabela 2. Distribuição das classes no conjunto de treinamento antes e depois da aplicação do SMOTE.

Situação	Não Tóxico (0)	Tóxico (1)
Antes do SMOTE	591	236
Depois do SMOTE	591	591

Modelos de Classificação

Foram empregados seis algoritmos de aprendizado supervisionado, amplamente utilizados para tarefas de classificação, sendo eles: *Random Forest* (RF), *Support Vector Machine* (SVM), *Multilayer Perceptron* (MLP), *XGBoost* (XGB), *LightGBM* (LGBM) e *CatBoost* (CB) da biblioteca *Scikit-Learn* (PEDREGOSA et al. 2011).

Para a otimização dos modelos, foi utilizada a técnica de busca aleatória de hiperparâmetros *RandomizedSearchCV*⁴ combinada com validação cruzada estratificada de 3 *folds*, sendo o *F1-Score* a métrica alvo. Esta abordagem permite mitigar problemas decorrentes de sobreajuste, especialmente relevantes em cenários com classes desbalanceadas. Esse procedimento garante maior robustez e generalização do modelo.

Também foram implementadas métricas para calcular os resultados de cinco repetições de cada rodada de cada algoritmo, sem a otimização do *StandardScaler*. Ao final, foram computadas a média do desvio padrão para caracterizar a estabilidade dos resultados.

⁴ https://scikit-learn.org/stable/modules/generated/sklearn.model_selection.RandomizedSearchCV.html

RESULTADOS E ANÁLISES

A avaliação dos classificadores foi realizada com base em métricas de desempenho, como Acurácia, Precisão, *Recall*, *F1-Score*, *AUC-ROC* e *MCC*. As avaliações foram realizadas tanto considerando as métricas com desvio padrão quanto sem essa medida.

Tabela 3. Comparação dos Modelos de Classificação sem o desvio padrão.

Modelo	ACC	Precisão	Recall	F1-Score	AUC-ROC	MCC
SVM	87,92	88.64	66.10	75.73	84.21	0.69
XGBoost	85,99	82.61	64.41	72.38	84.33	0.64
LightGBM	85,51	80.85	64.41	71.70	84.65	0.62
CatBoost	85,99	85.71	61.02	71.29	85.87	0.63
Randon Forest	85,99	89.47	57.63	70.10	87.80	0.64
MLP	82,13	68.97	67.80	68.38	82.51	0.55

Na Tabela 3, observa-se que o modelo SVM apresentou o melhor desempenho geral, indicando boa capacidade discriminativa.

Na Figura 3 observa-se a matriz de confusão referente ao melhor classificador. Os Verdadeiros Negativos (VN) indicam que 143 instâncias foram corretamente classificadas como não tóxicas. Já os Falsos Positivos (FP) correspondem a 5 instâncias não tóxicas que foram incorretamente classificadas como tóxicas. Os Falsos Negativos (FN) representam 20 instâncias tóxicas que foram erroneamente classificadas como não tóxicas. Por fim, os Verdadeiros Positivos (VP) indicam que 39 instâncias tóxicas foram corretamente reconhecidas como tóxicas. Esses resultados mostram que o classificador SVM possui elevada precisão na identificação de instâncias não tóxicas, embora ainda apresente alguma limitação na detecção de instâncias tóxicas.

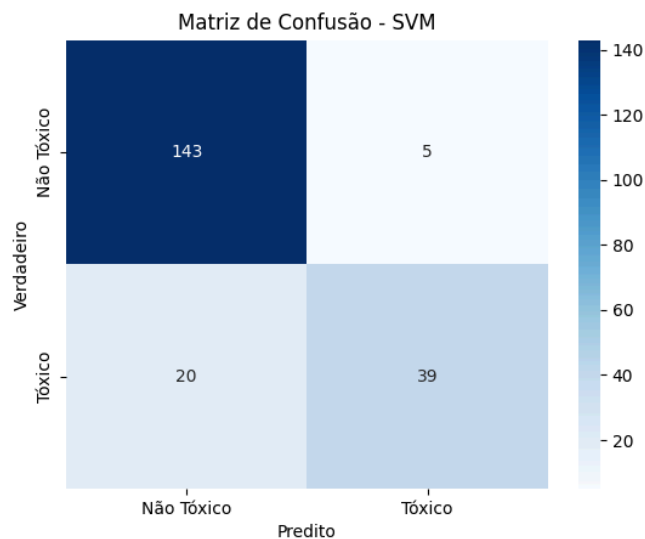


Figura 3. Matriz de Confusão do SVM.

Tabela 4. Comparação dos Modelos de Classificação com a média do desvio padrão.

Modelo	ACC	Precisão	Recall	F1-Score	AUC-ROC	MCC
SVM	0.838	81.83	55.59	66.16	82.81	0.57
XGBoost	0.837	78.98	58.64	67.20	83.62	0.57
LightGBM	0.849	80.32	62.37	70.20	84.09	0.61
CatBoost	0.838	78.90	60.00	67.99	83.65	0.58
Randon Forest	0.853	86.36	57.62	69.05	85.47	0.62
MLP	0.815	68.31	68.13	67.77	82.08	0.55

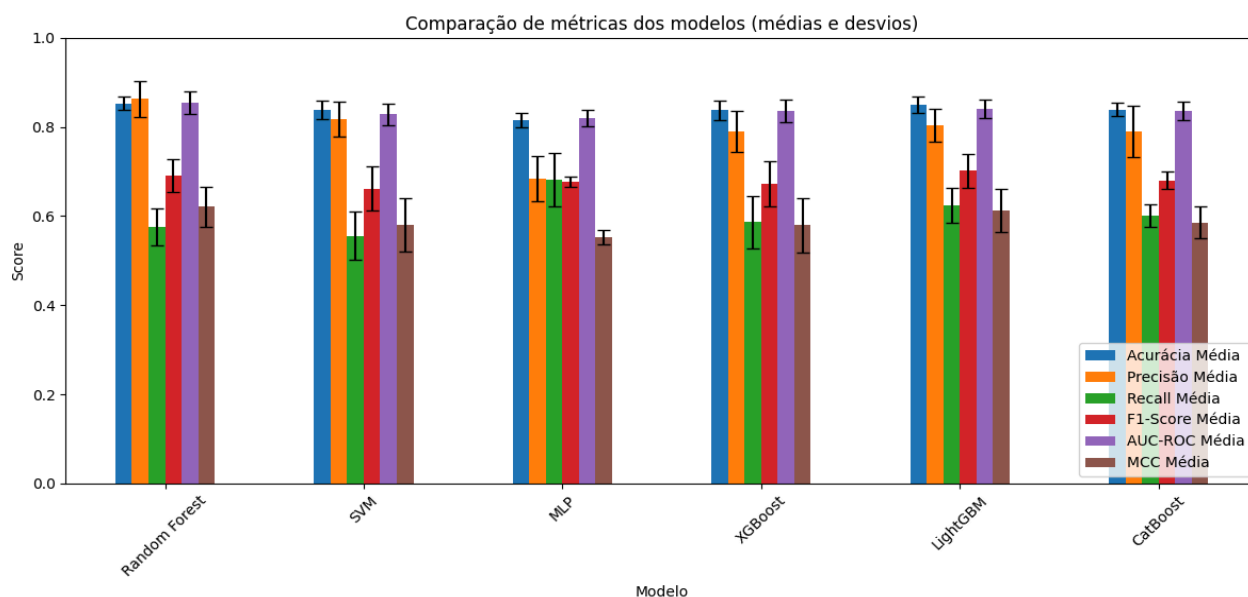


Figura 4. Comparação dos desvios e das médias.

A Tabelas 4 e a Figura 4 apresentam as métricas dos algoritmos e suas respectivas médias e desvios padrão, calculados a partir de cinco repetições com validação cruzada estratificada. Essa abordagem confere maior robustez à análise da estabilidade dos modelos. Dentre os algoritmos avaliados, o *Random Forest* obteve a maior média de acurácia. Por outro lado, modelos como SVM e MLP apresentaram desempenho inferior nas métricas consideradas. Essa diferença pode ser atribuída à alta sensibilidade desses algoritmos à escala dos dados, uma vez que suas funções de otimização dependem fortemente de cálculos de distância no espaço vetorial.

Como na classificação foi utilizada a variável SMILES para a predição, nesta etapa propôs-se uma nova análise focada exclusivamente nas demais variáveis do conjunto de dados. Com o intuito de avaliar o impacto individual dessas variáveis na predição da toxicidade de compostos em abelhas, agora sem a influência dos SMILES. O objetivo é investigar o poder preditivo de cada atributo de forma isolada, a fim de compreender sua contribuição específica no processo de classificação. O *Random Forest* foi escolhido por sua reconhecida robustez e eficiência no tratamento de dados complexos, sendo utilizado tanto para a tarefa de classificação quanto para a avaliação da importância das variáveis.

Tabela 5. Importância dos atributos segundo o Random Forest.

Atributos	Importância
ppdb_level	0,6833
insecticide	0,2080
herbicide	0,0690
fungicide	0,0258
other_agrochemical	0,0137

Na Tabela 5, observa-se que o algoritmo Random Forest identificou os atributos mais relevantes do conjunto de dados: *ppdb_level* (68,33%), que representa um nível de toxicidade ternário (não tóxico, moderadamente tóxico, altamente tóxico), e *insecticide* (20,80%), uma variável binária que indica se o composto é classificado como inseticida (1 = sim, 0 = não). Os demais atributos apresentaram uma contribuição significativamente menor. A priorização desses dois atributos indica que eles desempenham um papel fundamental na predição da toxicidade dos compostos para abelhas da espécie *Apis mellifera*.

Para validar essa hipótese, foi realizado um teste incremental utilizando exclusivamente esses atributos, com o objetivo de avaliar seu impacto individual e conjunto na classificação entre compostos tóxicos e não tóxicos. Essa abordagem permitiu compreender melhor a intuição sobre a utilidade desses preditores, oferecendo *insights* importantes para a otimização do modelo de classificação, que serão demonstrados a seguir, na Tabela 6 e Figura 4.

Tabela 6. Comparação dos atributos na classificação com o Random Forest.

Feature	Classe	ACC	Precisão	Recall	F1-Score	AUC-ROC	MCC
ppdb_level	Não Tóxico	0,8841	0,8600	1,0000	0,9300	0,8475	0,7145
	Tóxico	0,8841	1,0000	0,5932	0,7447	0,8475	0,7145
insecticide	Não Tóxico	0,7971	0,8300	0,9000	0,8600	0,7205	0,4752
	Tóxico	0,7971	0,6809	0,5424	0,6038	0,7205	0,4752

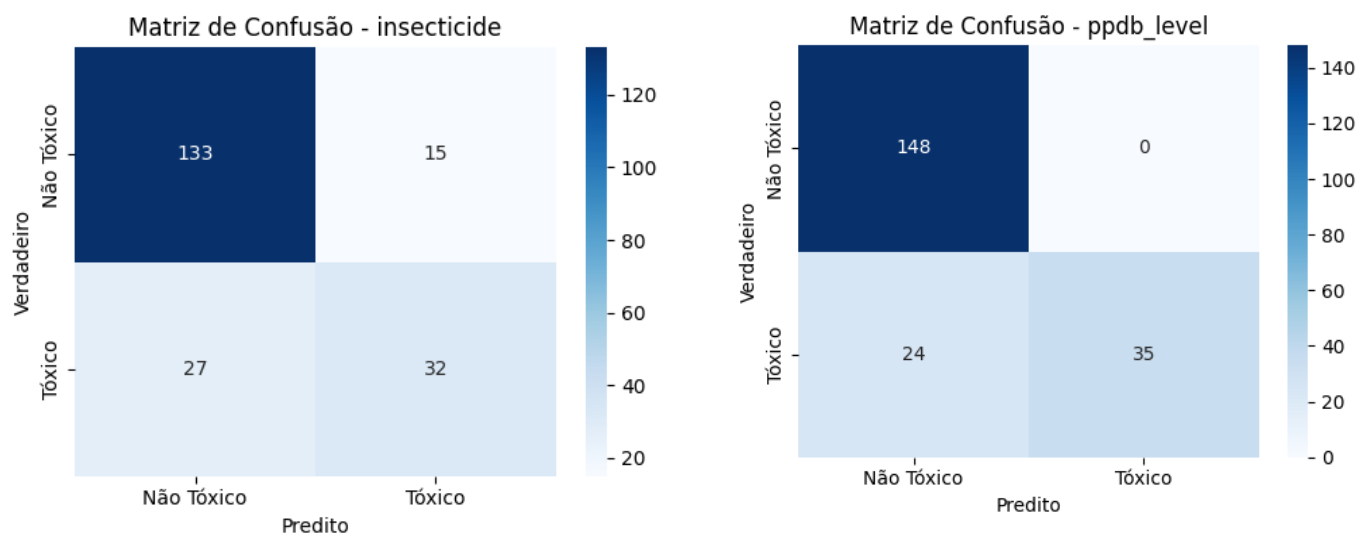


Figura 5. Matriz de confusão da classificação dos atributos com o *Random Forest*.

Como apresentado na Tabela 6, o atributo *ppdb_level* destacou-se como o preditor mais eficaz, alcançando uma acurácia de 88,41%, superando inclusive os resultados obtidos com a variável SMILES. Esse desempenho ressalta seu potencial como indicador isolado na tarefa de classificação da toxicidade, especialmente pela precisão de 100% na identificação de compostos tóxicos e 86% para os não tóxicos. Já o atributo *insecticide* obteve uma acurácia de 79,71%, ainda considerada relevante segundo a literatura, reforçando seu papel complementar na predição.

A análise da matriz de confusão, na Figura 5, revelou que, apesar de *insecticide* ser o segundo mais importante segundo o *Random Forest*, seu desempenho foi moderado. O número relativamente alto de falsos negativos compromete a capacidade do modelo em identificar corretamente os compostos tóxicos. Ainda assim, sua performance foi razoável, podendo servir de apoio a outras variáveis no modelo.

Por outro lado, *ppdb_level* apresentou o melhor desempenho geral entre os atributos analisados. A alta precisão na classe tóxica indica que quase todas as previsões para essa classe foram corretas. No entanto, o *recall* mais baixo evidencia que o modelo ainda falha em identificar todos os compostos realmente tóxicos. Apesar disso, o equilíbrio entre precisão e

recall resultou no maior *F1-Score* entre todos os atributos avaliados, confirmando sua eficácia como preditor isolado da toxicidade.

Tabela 7. Comparação de métodos usando a mesma base.

Autor	Método	ACC	MCC	AUC-ROC	Precisão	Recall
(ADAMCZYK et al. 2025b)	WL-OA	-	0.49	83.95%	62.16%	54.76%
(AUTOR, 2025)	SVM	87.9	0.69	84,20%	88.63%	66.10%
(AUTOR, 2025)	RF	85.3	0.62	85,40%	86,36%	57,62%

Como demonstrado na Tabela 7, os métodos SVM e *Random Forest* apresentados neste trabalho apresentaram desempenho superior em comparação ao WL-OA de (ADAMCZYK et al. 2025b), alcançando acurácia de 87,9% e 85,3%, respectivamente, além de valores mais altos de MCC e AUC-ROC. Esses resultados indicam maior eficácia dos modelos SVM e RF para a base utilizada para esse determinado problema.

Para mais informações sobre o trabalho, consulte o código disponível no github⁵.

⁵ <https://github.com/joyzinhw/classificacaodetoxicidade.git>

CONCLUSÃO

Este estudo evidenciou o potencial do aprendizado de máquina como uma ferramenta eficaz na predição da toxicidade de pesticidas para abelhas, oferecendo subsídios relevantes para a avaliação de riscos ambientais para os polinizadores. Entre os algoritmos avaliados, os modelos supervisionados SVM e *Random Forest* demonstraram desempenhos promissores. O SVM destacou-se por alcançar métricas elevadas, enquanto o Random Forest mostrou-se mais robusto na análise de importância dos atributos, com destaque para o atributo *ppdb_level*, cuja acurácia isolada foi maior do que a dos descritores químicos.

A utilização de técnicas de balanceamento, como o SMOTE, contribuiu para a redução dos efeitos do desbalanceamento de classes, embora a classe minoritária (pesticidas tóxicos) tenha apresentado menor *recall*, sugerindo a persistência de desafios na identificação de falsos negativos. Além disso, a representação molecular por *fingerprints* demonstrou limitações na captura de interações químicas mais complexas, o que pode impactar a acurácia dos modelos em contextos mais abrangentes.

Diante dessas limitações, propõem-se como direções futuras: (i) o aprimoramento das técnicas de balanceamento, incluindo a adoção de métodos como *Adaptive Synthetic Sampling* (ADASYN); e (ii) a investigação de abordagens baseadas em GNNs, visando uma modelagem mais precisa das relações estruturais entre compostos químicos.

Em síntese, os resultados obtidos reforçam o papel do aprendizado de máquina como aliada na proteção de polinizadores e na promoção de práticas agrícolas mais sustentáveis, demonstrando sua relevância científica e aplicabilidade em políticas públicas ambientais.

REFERÊNCIAS

- [1] Adamczyk, J.; Poziemski, J.; Siedlecki, P.; ApisTox: a new benchmark dataset for the classification of small molecules toxicity on honey bees. *Scientific Data*, 2025, 12(1), 5.
- [2] Adamczyk, J.; Poziemski, J.; Siedlecki, P.; Evaluating machine learning models for predicting pesticides toxicity to honey bees. *arXiv preprint*, 2025, arXiv:2503.24305. [<https://arxiv.org/abs/2503.24305>]
- [3] Chawla, N. V.; Bowyer, K. W.; Hall, L. O.; Kegelmeyer, W. P.; SMOTE: synthetic minority over-sampling technique. *Journal of Artificial Intelligence Research*, 2002, 16, 321–357.
- [4] Faceli, K.; Lorena, A. C.; Gama, J.; Carvalho, A. C. P. L. F.; *Inteligência Artificial: Uma Abordagem de Aprendizado de Máquina*, LTC: Rio de Janeiro, 2011.
- [5] Fernandes, A. M. da R.; *Inteligência artificial: noções gerais*. Florianópolis: Visual Books, 2003.
- [6] Freitas, B. M.; Pereira, J. O. P. et al.; *Solitary Bees: Conservation, Rearing and Management for Pollination*, Imprensa Universitária: Fortaleza, 2004.
- [7] Hastie, T.; Tibshirani, R.; Friedman, J.; *The Elements of Statistical Learning: Data Mining, Inference, and Prediction*, 2nd ed., Springer: Berlin, 2009.
- [8] Huang, R.; Xia, M.; Sakamuru, S.; Zhao, J.; Shahane, S. A.; Attene-Ramos, M.; Simeonov, A.; Modelling the Tox21 10 K chemical profiles for in vivo toxicity prediction and mechanism characterization. *Nature Communications*, 2016, 7(1), 10425.
- [9] Kevan, P. G.; In *Invertebrate Biodiversity as Bioindicators of Sustainable Landscapes*; New, T. R., ed.; Elsevier: Amsterdam, 1999, cap. 19, p. 373–393.
- [10] Lewis, K. A.; Tzilivakis, J.; Warner, D. J.; Green, A.; An international database for pesticide risk assessments and management. *Human and Ecological Risk Assessment: An International Journal*, 2016, 22(4), 1050–1064. [<https://doi.org/10.1080/10807039.2015.1133242>]

- [11] Malaspina, O.; Souza, T. F.; Zacarin, E. C. M. S.; Cruz, A. S.; Jesus, D.; *VIII Encontro Sobre Abelhas. Resumos...* Ribeirão Preto: FUNPEC, 2008, p. 41–48.
- [12] Mayr, A.; Klambauer, G.; Unterthiner, T.; Hochreiter, S.; DeepTox: toxicity prediction using deep learning. *Frontiers in Environmental Science*, 2016, 3, 80.
- [13] Mitchell, T. M.; Jordan, M. I.; Machine learning: Trends, perspectives, and prospects. *Science*, 2015, 349, 255–260. [<https://doi.org/10.1126/science.aaa8415>]
- [14] Monard, M. C.; Baranauskas, J. A.; Conceitos sobre Aprendizado de Máquina. In: Rezende, S. O. (org.). *Sistemas Inteligentes: Fundamentos e Aplicações*, [s.n.]: São Paulo, 2003, cap. 4.
- [15] Nicolson, S. W.; Wright, G. A.; Plant–pollinator interactions and threats to pollination. *Functional Ecology*, 2017, 31(1), 22–25. [<https://doi.org/10.1111/1365-2435.12735>]
- [16] Nguyen-Vo, T. H.; Teesdale-Spittle, P.; Harvey, J. E.; Nguyen, B. P.; Molecular representations in bio-cheminformatics. *Memetic Computing*, 2024, 16(3), 519–536.
- [17] Olker, J. H.; Allen, D. C.; Painter, M. M.; Logue, D. M.; Yonkos, L. T.; McKnight, D. M.; The ECOTOXicology knowledgebase: A curated database of ecologically relevant toxicity tests to support environmental research and risk assessment. *Environmental Toxicology and Chemistry*, 2022, 41(6), 1520–1539. [<https://doi.org/10.1002/etc.5317>]
- [18] Pedregosa, F. et al.; Scikit-learn: Machine learning in Python. *Journal of Machine Learning Research*, 2011, 12, 2825–2830. [<https://www.jmlr.org/papers/volume12/pedregosa11a/pedregosa11a.pdf>]
- [19] Pereira, A. M.; *Efeitos de Inseticidas na Sobrevivência e no Comportamento de Abelhas*. Universidade Estadual Paulista (UNESP), 2010.
- [20] Pires, C. S. S.; Pereira, F. D. M.; Lopes, M. T. D. R.; Nocelli, R. C. F.; Malaspina, O.; Pettis, J. S.; Teixeira, É. W.; Enfraquecimento e perda de colônias de abelhas no Brasil: há casos de CCD? *Pesquisa Agropecuária Brasileira*, 2016, 51, 422–442. [<https://doi.org/10.1590/S0100-204X2016000500002>]

- [21] Sathya, R.; Abraham, A.; Comparison of Supervised and Unsupervised Learning Algorithms for Pattern Classification. *International Journal of Advanced Research in Artificial Intelligence (IJARAI)*, 2013, 2(2). [<https://doi.org/10.14569/IJARAI.2013.020206>]
- [22] Shi, X. X.; Wang, Z. Z.; Wang, Y. L.; Wang, F.; Yang, G. F.; AquaticTox: a web-based tool for aquatic toxicity evaluation based on ensemble learning to facilitate the screening of green chemicals. *Environment & Health*, 2024, 2(4), 202–211.
- [23] Spadotto, C. A.; Abordagem interdisciplinar na avaliação ambiental de agrotóxicos. In: *Jornada Jurídica da Faculdade Marechal Rondon*, 4., 2006, São Manuel, SP. Artigos publicados... São Manuel, SP: FMR, p. 1–9. *Revista do Núcleo de Pesquisa Interdisciplinar*, 2006.