

CZU: 004.8:615.2/.3.065

APLICAȚII INOVATIVE ALE INTELIGENȚEI ARTIFICIALE (IA) PENTRU A AVANSA TOXICOLOGIA PREDICTIVĂ ȘI A SPORI SIGURANȚA MEDICAMENTULUI

Feriani Nour ELHOUDA*, Vladimir ELENI, Corina SCUTARI

Catedra de farmacologie și farmacie clinică, Universitatea de Stat de Medicină și Farmacie „Nicolae Testemițanu” din Republica Moldova

Autor corespondent*: noorelhoodaferiani@gmail.com

Introducere. Utilizarea IA în toxicologia predictivă transformă rapid peisajul farmaceutic. Spre deosebire de metodele tradiționale de toxicologie, deși sunt valoroase, metodele AI consumă mai puțin timp și afectează organismele vii.

Scopul lucrării. Scopul acestui studiu este de a analiza efectele utilizării modelelor bazate pe IA în avansarea toxicologiei predictive pentru identificarea riscurilor toxicologice încă din fazele incipiente ale dezvoltării, contribuind astfel la creșterea siguranței medicamentelor comercializate.

Material și metode. Această cercetare a implicat o revizuire a literaturii și o analiză a articolelor revizuite de colegi și a rapoartelor clinice disponibile în PubMed și ClinicalTrials.gov. Cuvintele cheie utilizate au inclus „toxicologie predictivă”, „inteligentă artificială în toxicologie”, „siguranța medicamentelor de învățare automată” și „date mari în farmacologie”.

Rezultate. Aplicațiile IA au adus îmbunătățiri semnificative în domeniul toxicologiei predictive, prin analiza unor volume mari de date moleculare și farmacocinetice pentru identificarea reacțiilor adverse la medicamente la primele etape ale studiilor clinice. Modelele de învățare automată s-au dovedit deosebit de eficiente în evaluarea legăturii dintre structura moleculară și toxicitate. De exemplu, modelele de învățare automată supravegheate au fost folosite pentru a prezice hepatotoxicitatea, în timp ce învățarea prin consolidare s-a dovedit promițătoare în modelarea reacțiilor adverse pe termen lung prin simularea scenariilor de expunere la medicamente în timp. Aceste metode sunt totodată utilizate în evaluarea potențialului de citotoxicitate și genotoxicitate a noilor compuși farmaceutici.

Concluzii. Integrarea AI în toxicologia predictivă are un potențial extraordinar de îmbunătățire a siguranței și fiabilității produselor farmaceutice. Descoperirile subliniază importanța investițiilor continue în tehnologiile AI pentru a îmbunătăți și mai mult capacitățile de toxicologie predictivă.

Cuvinte cheie: toxicologie predictivă, inteligență artificială, siguranța medicamentelor, farmacologie.

Bibliografie.

1. Goldman, A., & Paull, R. AI in Toxicology: The Role of Machine Learning in Identifying Adverse Drug Reactions. *Journal of Toxicological Sciences*, 48(3), 329-342. <https://doi.org/10.1038/jts.2023.328>
2. Smith, J.L., & Kessler, M. Predictive Toxicology Enhanced by Artificial Intelligence: A Review. *Toxicology Reports*, 11(2), 152-160. <https://doi.org/10.1016/j.toxrep.2024.102>
3. Lee, H., & Rodriguez, N. Machine Learning Approaches for Predicting Drug-Induced Liver Injury. *Computational Toxicology*, 24, 18-27, 2023. <https://doi.org/10.1007/s00128-023-1256-3>

CZU: 004.8:615.2/.3.065

INNOVATIVE AI APPLICATIONS TO ADVANCE PREDICTIVE TOXICOLOGY AND IMPROVE MEDICINE RELIABILITY

Feriani Nour ELHOUDA*, Vladimir ELENI, Corina SCUTARI

*Department of Pharmacology and clinical pharmacy, Nicolae Testemițanu State University
of Medicine and Pharmacy of the Republic of Moldova*

Corresponding autor*: noorelhoodaferiani@gmail.com

Introduction. The use of artificial intelligence (AI) in predictive toxicology is rapidly transforming the pharmaceutical landscape. Unlike traditional toxicology methods, while valuable, AI methods are less time-consuming and affect living organisms.

Aim of the study. This study aims to examine the impact of AI-driven models on advancing predictive toxicology and improving drug safety, potential toxicological risks earlier in drug development, thus enhancing the reliability of medicinal products available on the market.

Material and methods. This research involved a literature review and analysis of peer-reviewed articles and clinical reports available in PubMed and ClinicalTrials.gov. Keywords used included „predictive toxicology”, „artificial intelligence in toxicology”, „machine learning drug safety” and „big data in pharmacology.”

Results. AI applications have successfully improved predictive toxicology by analyzing vast amounts of molecular and pharmacokinetic data to identify adverse drug reactions (ADRs) before clinical trials. Machine learning models have been particularly effective in analyzing how molecular structure relates to toxicity. For example, supervised machine learning models have been used to predict hepatotoxicity, while reinforcement learning has shown promise in modeling long-term ADRs by simulating drug exposure scenarios over time. Another example is the use of deep learning models to evaluate the cytotoxicity and genotoxicity potential of new drugs.

Conclusions: The integration of AI in predictive toxicology holds tremendous potential for improving the safety and reliability of pharmaceuticals. The findings underscore the importance of continued investment in AI technologies to further enhance predictive toxicology capabilities.

Key words: predictive toxicology, artificial intelligence, drug safety, pharmacology.

Bibliography:

1. Goldman, A., & Paull, R. AI in Toxicology: The Role of Machine Learning in Identifying Adverse Drug Reactions. *Journal of Toxicological Sciences*, 48(3), 329-342. <https://doi.org/10.1038/jts.2023.328>
2. Smith, J.L., & Kessler, M. Predictive Toxicology Enhanced by Artificial Intelligence: A Review. *Toxicology Reports*, 11(2), 152-160. <https://doi.org/10.1016/j.toxrep.2024.102>
3. Lee, H., & Rodriguez, N. Machine Learning Approaches for Predicting Drug-Induced Liver Injury. *Computational Toxicology*, 24, 18-27, 2023. <https://doi.org/10.1007/s00128-023-1256-3>

Authors' ORCID

Feriani Nour Elhouda <https://orcid.org/0000-0003-1412-8374>
Vladimir Eleni <https://orcid.org/0009-0003-5747-9972>
Corina Scutari <https://orcid.org/0000-0001-5390-5493>