



TITULO

Aplicaciones de la Inteligencia Artificial en la Toxicología

Autor(es):

Est. Yazmín Elena Hernández Díaz¹

Dra. Yaneisy Valdés Gutierrez²

DrC. Miladys Ramos Lage³

Dra. Nidia Elena Díaz Rodríguez⁴

DrC. Egduina Rondón Madrigal⁵

¹Universidad de Ciencias Médicas Sancti Spíritus, Sancti Spíritus, Cuba, correo electrónico yazminelenahernandezdiaz@gmail.com, Orcid <https://orcid.org/0009-0001-9057-7182>

²Departamento de Ciencias Clínicas, Hospital General Provincial Camilo Cienfuegos, Universidad de Ciencias Médicas Sancti Spíritus, Sancti Spíritus, Cuba, Correo electrónico yaneisyvaldes029@gmail.com, Orcid <https://orcid.org/0000-0001-7100-1885>

³Departamento de Anatomía Patológica, Hospital General Provincial Camilo Cienfuegos, Universidad de Ciencias Médicas Sancti Spíritus, Sancti Spíritus, Cuba, Correo electrónico miladysr.ssp@infomed.sld.cu, Orcid <https://orcid.org/0000-0003-4852-3946>

⁴Departamento Medios Diagnósticos, Universidad de Ciencias Médicas Sancti Spíritus, Sancti Spíritus, Cuba, Correo electrónico nidiaelenadiaz70@gmail.com, Orcid <https://orcid.org/0000-0002-6859-2562>

⁵Departamento de Anatomía Patológica, Hospital General Provincial Camilo Cienfuegos, Universidad de Ciencias Médicas Sancti Spíritus, Sancti Spíritus, Cuba, Correo electrónico eaisara8@gmail.com, Orcid <https://orcid.org/0000-0001-9436-0493>

INTRODUCCION (OBJETIVOS)

La toxicología, una disciplina biomédica fundamental, enfrenta desafíos crecientes en la evaluación de la seguridad de sustancias químicas y fármacos. Los métodos tradicionales, a menudo costosos y lentos, presentan limitaciones éticas y de extrapolación. La emergencia de la inteligencia artificial (IA) y el aprendizaje automático ofrece nuevas oportunidades para transformar la toxicología. **OBJETIVO:** Describir las principales aplicaciones de la inteligencia artificial en la toxicología y su impacto en la investigación biomédica.

METODOLOGÍA

Se realizó una revisión narrativa de la literatura científica, en bases de datos como PubMed/MEDLINE, Scopus, Web of Science, SciELO y con el motor de búsqueda Google Scholar. La búsqueda se centró en publicaciones entre 2022 y 2026, se utilizaron descriptores como "artificial intelligence", "machine learning", "toxicology", "computational toxicology", "predictive toxicology" y "risk assessment". Se incluyeron artículos originales, revisiones sistemáticas y narrativas.

RESULTADOS Y DISCUSION

La IA ha demostrado ser crucial en la predicción de toxicidad de fármacos y sustancias químicas mediante modelos QSAR avanzados, redes neuronales profundas y GANs. Ha llevado los QSAR a un nuevo nivel, permitiendo el desarrollo de modelos más sofisticados que pueden manejar datos complejos. Las redes neuronales profundas, por ejemplo, han demostrado una capacidad superior para aprender representaciones moleculares intrincadas y predecir una amplia gama de puntos finales toxicológicos, incluyendo la toxicidad aguda, la carcinogenicidad y la toxicidad órgano-específica. Modelos como los QKARs (Quantitative Knowledge-Activity Relationships) integran el conocimiento biológico previo para mejorar la precisión predictiva, superando las limitaciones de los QSAR tradicionales. Los QKARs han superado consistentemente a QSARs para lesión hepática inducida por medicamentos y cardiotoxicidad inducida por medicamentos. Los QKARs han demostrado una mejor capacidad que los QSAR en la diferenciación de fármacos con estructuras similares pero diferentes perfiles de toxicidad hepática. La IA puede analizar conjuntos de datos masivos que incluyen información genómica, proteómica, transcriptómica y de alto rendimiento, lo que permite la identificación de biomarcadores de toxicidad y la predicción de efectos adversos con mayor precisión. Se han desarrollado varios modelos de aprendizaje profundo para evaluar diferentes tipos de toxicidad compuesta, incluyendo toxicidad aguda, carcinogenicidad, cardiotoxicidad, hepatotoxicidad y mutagenicidad. Lo que resalta su potencial para reducir significativamente el costo y el riesgo asociado con el desarrollo de fármacos al acelerar la selección de compuestos con perfiles de baja toxicidad. Su aplicación en toxicogenómica y farmacovigilancia ha mejorado la detección de biomarcadores y reacciones adversas. Además, la IA contribuye a la reducción del uso de animales en experimentación. Sin embargo, persisten desafíos en la validación, interpretabilidad y armonización regulatoria de los modelos.

CONCLUSIONES

La inteligencia artificial ha emergido como una fuerza transformadora en la toxicología contemporánea, al ofrecer soluciones innovadoras a desafíos de larga data. Su impacto se extiende desde la predicción de toxicidad de fármacos y sustancias químicas hasta la farmacovigilancia y la reducción de la experimentación animal. Proporciona herramientas poderosas para analizar datos complejos, identificar patrones y generar modelos predictivos con una precisión sin precedentes, lo que contribuye a una evaluación de riesgos más eficiente, ética y humanamente relevante.

