

ИИ — «змеиный жир»? Анализ рисков и преимуществ для токсикологии

Источник: Frontiers in AI — Medicine

Оригинал: <https://www.frontiersin.org/articles/10.3389/frai.2026.1779276>

безопасность лекарств

валидация

регулирование

токсикология

фармацевтика

Искусственный интеллект (ИИ) все чаще используется для поддержки прогностической, механистической и релевантной для человека токсикологии в больших масштабах. Однако его интеграция в регуляторную науку — особенно в разработку лекарственных средств — остается неравномерной, поскольку рост технических показателей эффективности еще не привел автоматически к формированию регуляторного доверия. Представительные исследования токсикологии с применением ИИ в настоящее время охватывают наборы данных от примерно 10^3 химических веществ до $>3 \times 10^4$ записей о пептидах или химических соединениях и демонстрируют эффективность, варьирующуюся от умеренной в условиях проспективного скрининга до высокой на более узких, тщательно отобранных конечных точках.

В данной рукописи представлен критический анализ двойственной природы ИИ в токсикологии. Мы рассматриваем передовые достижения в области приложений с поддержкой ИИ: от «зеленой токсикологии» (Green Toxicology) и экспосома человека (Human Exposome) до специфических проблем оценки безопасности биологических препаратов и синтетических пептидов. Особое внимание уделяется разрыву между быстрой разработкой моделей и их принятием регуляторными органами, что усугубляется проблемами

интерпретируемости моделей, предвзятости наборов данных, недостаточной внешней валидации и оценки сложных конечных точек, таких как иммуногенность.

Для преодоления этих сложностей мы обсуждаем концепцию «е-валидации» (e-validation) следующего поколения и подчеркиваем принцип **TREAT** — **Надежность** (Trustworthiness), **Воспроизводимость** (Reproducibility), **Объяснимость** (Explainability), **Применимость** (Applicability) и **Прозрачность** (Transparency) — как основу для формирования регуляторного доверия. Мы выдвигаем гипотезу, что методы на основе ИИ в токсикологии могут достичь признания со стороны регуляторов, если они будут соответствовать критериям **TREAT** и проходить непрерывную «е-валидацию» в четко определенном контексте использования.

Эта структура позволяет отличить заслуживающие доверия приложения ИИ от «чудодейственных средств» (snake oil), устанавливая измеримые критерии для построения доверия, включая происхождение наборов данных, внешнюю валидацию, характеристику неопределенности и мониторинг жизненного цикла. Мы утверждаем, что ИИ является не ни «чудодейственным лекарством», ни «технологической иллюзией», а мощным механизмом получения доказательств, который может способствовать развитию более прогностической и этичной токсикологической науки при условии его строгой валидации.

Перевод выполнен: 19.05.2026 | ai4med.ru

Машинный перевод. Рекомендуем сверять с оригиналом при клиническом использовании.