



A APLICAÇÃO DE INTELIGÊNCIA ARTIFICIAL EM INVESTIGAÇÕES TOXICOLÓGICAS

Nuro Ali^{1,2*}, Alexandre de Fátima Cobre^{3,4}, Jaime Conceição^{2,5,6}

¹ Faculdade de Medicina e Ciências Biomédicas, Universidade do Algarve, Faro, Portugal

² *Algarve Biomedical Centre Research Institute (ABC-Ri)*, Universidade do Algarve, Faro, Portugal

³ Divisão de Farmácia e Optometria, Universidade de Manchester, Manchester, Reino Unido

⁴ Faculdade de Ciências da Saúde, Universidade Lúrio, Nampula, Moçambique

⁵ Faculdade de Ciências e Tecnologia, Universidade do Algarve, Faro, Portugal

⁶ Centro de Estudos Interdisciplinares (CEIS20), Universidade de Coimbra, Coimbra, Portugal

* a90099@ualg.pt

Resumo

A introdução da inteligência artificial (IA), particularmente da aprendizagem automática (ML), está a transformar a toxicologia forense, considerando o crescente volume e a complexidade dos dados analíticos, como os obtidos pela cromatografia líquida acoplada à espectrometria de massa de alta resolução (LC-MS) e pela análise de busca não dirigida. Por outro lado, devido à sua capacidade fácil de manusear, rapidez e custo reduzido, a espectroscopia no infravermelho médio (MIR), infravermelho próximo (NIR), fluorescência e espectroscopia Raman, são muito usados.

O objetivo desta comunicação é efetuar uma revisão histórica da utilização da IA em investigações toxicológicas através da apresentação de diversos exemplos práticos.

A IA baseia-se em algoritmos que podem ser definidos como um conjunto de instruções para completar uma tarefa específica. Estes modelos são utilizados em análises toxicológicas, permitindo a predição, classificação e deteção de padrões em grandes conjuntos de dados, revelando-se essenciais para identificar substâncias e biomarcadores emergentes, incluindo em contextos complexos, como a sonolência induzida por fármacos. A análise toxicológica é o processo de utilização de uma metodologia analítica apropriada para detetar e identificar o maior número possível de substâncias toxicologicamente relevantes em amostras biológicas. Alguns exemplos incluem as benzodiazepinas (i.e., alprazolam, diazepam, lorazepam e midazolam) e o zolpidem. Os algoritmos de IA podem identificar substâncias e os seus efeitos de forma mais eficaz, analisando relatórios toxicológicos, examinando manchas corporais ou alterações de cor devido a agressões. Adicionalmente, também podem ser utilizados para identificar padrões de sangue ou impressões digitais com rapidez e precisão.

Palavras-chave: *Inteligência artificial; Análises toxicológicas; Toxicologia forense; Benzodiazepinas; Zolpidem.*
