

الجمهورية الجزائرية الديمقراطية الشعبية
وزارة التعليم العالي والبحث العلمي
People's Democratic Republic of Algeria
The Minister of Higher Education and Scientific Research
ⵜⴰⴳⴷⴰⵏⵜ ⵜⴰⵎⴳⴷⴰⵢⵜ ⵜⴰⵏⵓⵔⵉⵜ ⵜⴰⵎⴳⴷⴰⵢⵜ ⵜⴰⵏⵓⵔⵉⵜ ⵜⴰⵎⴳⴷⴰⵢⵜ

ABOU BEKR BELKAID UNIVERSITY TLEMCEM
FACULTY OF MEDICINE- Dr. B. BENZERDJEB
PHARMACY DEPARTMENT



جامعة أبو بكر بلقايد - تلمسان
كلية الطب - د. ب. بن زرجب
قسم الصيدلة

**MEMOIRE DE FIN D'ETUDES POUR
L'OBTENTION DU DIPLOME DE DOCTEUR EN PHARMACIE**

THÈME :
L'intelligence artificielle dans le domaine médicale

Présenté par :
**TAOULI MOHAMMED
DAMERDJI MOHAMMED IMED**

Soutenu le
01-07-2024

Jury

Présidente :

Pr SELKA Adil

Professeur en pharmacognosie

Membres :

Dr MAHI Ilhem

Maitre de conférences A en dermatologie

Dr BOUHMAMA Loubna

Maitre de conférences B en gynécologie

Encadrante :

Dr GUENDOOUZ Souheyla

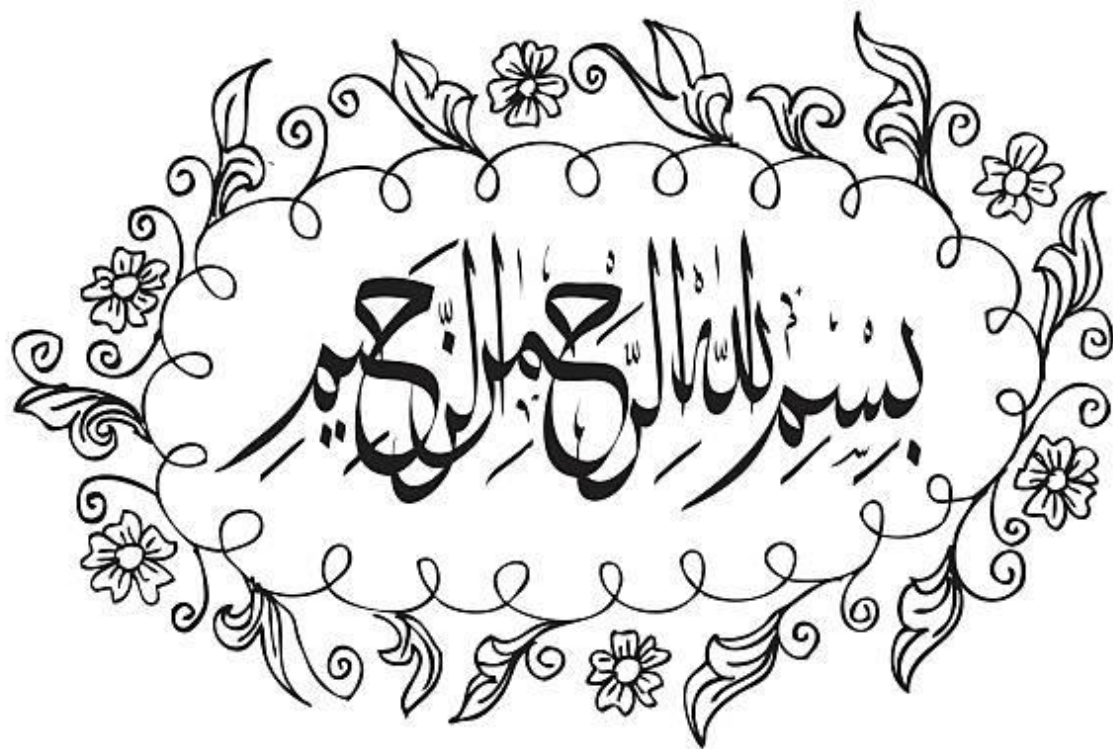
Maitre-assistante en pharmacie galénique

Membre invité :

Dr LABBAS Hocine

Résident en microbiologie

Année universitaire : 2023-2024



REMERCIEMENTS

En tout premier lieu, nous remercions ALLAH, le tout puissant, de nous avoir tracé le chemin de la réussite malgré toutes les épreuves que nous avons traversées durant le cursus en général et durant la conception de ce travail en particulier.

À notre encadrante,

Dr. S. Ghendouz

Nous souhaitons exprimer notre sincère reconnaissance pour votre encadrement exceptionnel tout au long de notre stage. Votre expertise, votre patience et votre volonté de partager vos connaissances ont grandement enrichi notre expérience professionnelle. Grâce à votre guidance éclairée, nous avons acquis des compétences précieuses et une perspective approfondie dans notre domaine d'étude. Votre mentorat attentif a été une source d'inspiration constante, et nous sommes reconnaissants d'avoir eu l'opportunité de bénéficier de votre encadrement bienveillant. Merci infiniment pour votre soutien inestimable.

À **Dr. H. Labbas**

C'est avec une profonde reconnaissance que nous tenons à vous remercier pour votre rôle exceptionnel en tant qu'assistant, contribuant, encourageant, serviable et surtout en tant qu'ami durant notre période de stage. Votre dévouement, vos compétences et votre approche collaborative ont grandement enrichi notre expérience. Votre capacité à encourager la créativité et à stimuler notre réflexion critique a été particulièrement appréciée. Grâce à vos conseils avisés et à votre soutien constant, nous avons non seulement acquis des compétences pratiques, mais nous avons également développé une compréhension approfondie des défis complexes de notre domaine. Merci sincèrement pour votre contribution précieuse à notre formation.

À notre présidente du jury,

Pr Ag I. MAHI

Nous tenons à vous exprimer notre profonde reconnaissance pour votre présidence bienveillante, votre implication dans notre évaluation et vos précieux commentaires lors de notre soutenance.

Aux membres du jury,

Dr L. BOUHMAMA

Nous vous sommes reconnaissants pour votre rôle essentiel en tant que membre du jury lors de notre soutenance.

Dr S. GUENDOUZ

Nous tenons à exprimer notre gratitude pour votre participation active à notre jury, et nous vous remercions sincèrement pour votre engagement.

Nous vous remercions chaleureusement pour votre précieuse contribution à notre soutenance, nous nous réjouissons de vous compter parmi les honorables membres de notre jury

Aux équipes médicales, paramédicales et administratives des services de Biochimie, de Médecine nucléaire et de Médecine interne,

Merci pour l'accueil chaleureux et la bienveillance exprimée envers notre travail.

À Dr Boukli, Dr Berrichi : Pharmacien spécialiste en Biochimie,

et **À Dr Malti** : Résidente en médecine interne,

Nous vous remercions d'avoir contribué grandement à notre année de stage. Notre travail n'aurait pas été possible sans votre participation.

À nos consœurs et confrères Internes en Pharmacie : Kamel, Mohammed, Nour-El-Houda, Hanaa,

Qui nous ont apporté leur aide et leur soutien durant cette année. Nous vous remercions chaleureusement.

À toute l'équipe pédagogique du département de Pharmacie,

Nous vous exprimons toute notre reconnaissance quant aux efforts consentis durant tout notre cursus. Nous vous remercions également du dévouement et de l'implication dans vos différentes fonctions.

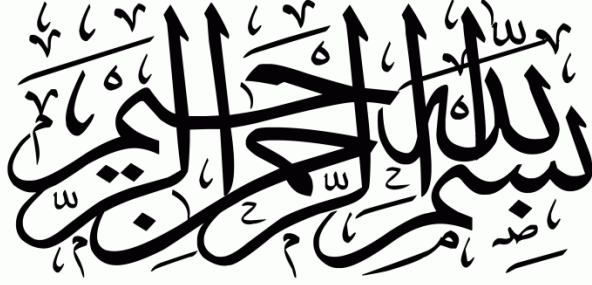
À toute l'équipe de la Librairie Adil : Djalal, Adil et Tonton Mohammed particulièrement,

Pour toute l'aide et la bienveillance que vous exprimez à notre égard. Vous nous avez facilité tellement de choses. Nous vous en sommes infiniment reconnaissants.

Un grand merci également à toute personne ayant contribué de près ou de loin à l'aboutissement de ce travail et que nous aurions oublié de citer.

**Taouli Mohammed
Damerdji Mohammed Imed**

DEDICACES



الحمد لله حمدا كثيرا كما أمر والصلاة والسلام على سيدنا محمد سيد البشر و على آله وصحبه
المصاييح الدرر ما اتصلت عين بنظر ووعت اذن بخبر.

أما بعد:

قال سبحانه و تعالى: ﴿ اقْرَأْ بِاسْمِ رَبِّكَ الَّذِي خَلَقَ * خَلَقَ الْإِنْسَانَ مِنْ عَلَقٍ * اقْرَأْ وَرَبُّكَ
الْأَكْرَمُ * الَّذِي عَلَّمَ بِالْقَلَمِ * عَلَّمَ الْإِنْسَانَ مَا لَمْ يَعْلَمْ ﴾ [العلق: 1 - 5]

وعن أبي هريرة -رضي الله عنه- قال، قال -صلى الله عليه وسلم-: "إذا مات الإنسان انقطع عنه
عمله إلا من ثلاثة: إلا من صدقة جارية، أو علم ينتفع به، أو ولد صالح يدعو له."

وقد قال الإمام علي رضي الله عنه:

" لو أن حملة العلم حملوه بحقه لأحبهم الله وملائكته وأهل طاعته من خلقه ولكنهم حملوه لطلب
الدنيا فمقتهم الله وهانوا على الناس."

قد كانت هاته الاقتباسات حافزنا الأساسي في إنجاز هذا العمل وإتمام ستة سنوات من الجد
وتحصيل العلم.

ختاماً، نسأل الله تعالى أن يجعل عملنا هذا خالصاً لوجهه الكريم.

طاولي محمد

دمرجي محمد اماد

DEDICACES T.M

“Je jure, en présence des maîtres de la Faculté et de mes condisciples :

D’honorer ceux qui m’ont instruit dans les préceptes de mon art et de leur témoigner ma reconnaissance en restant fidèle à leur enseignement.

D’exercer, dans l’intérêt de la santé publique, ma profession avec conscience et de respecter non seulement la législation en vigueur, mais aussi les règles de l’honneur, de la probité et du désintéressement.

De ne jamais oublier ma responsabilité et mes devoirs envers le malade et sa dignité humaine ; en aucun cas, je ne consentirai à utiliser mes connaissances et mon état pour corrompre les mœurs et favoriser des actes criminels.

Que les hommes m’accordent leur estime si je suis fidèle à mes promesses.

Que je sois couvert d’opprobre et Méprisé de mes confrères si j’y manque.”

Serment de Galien

Après 5 ans d’enseignement pédagogique, cette sixième année devait être une initiation à la recherche, un premier pas vers la contribution scientifique. Eh bien, elle a été bien plus que cela pour moi.

Durant les 3 derniers mois, j’ai eu la chance de travailler sur une thématique des plus intéressantes. Malgré la modestie de notre travail et les innombrables difficultés rencontrées, j’écris ces mots, habité, par un puissant sentiment de fierté.

Je ne suis pas fier de notre travail parce qu’il représente une contribution révolutionnaire, je suis fier de notre travail parce que j’ai pu à travers lui, vivre une problématique scientifique pharmaceutique dont la complexité est aussi étourdissante que stimulante.

Un chercheur en plus de ses compétences intellectuelles et techniques, se doit d’être passionné par la problématique qu’il traite. Cette expérience m’aura appris à me montrer patient, résilient mais surtout créatif. J’ai pris énormément de plaisir à réfléchir, à me questionner et à remettre en question mes connaissances. Par ces mots, je voudrai rappeler à toute personne sur le point de se lancer dans un travail de recherche qu’elle sera mise à rude épreuve scientifiquement et émotionnellement durant son travail, mais que cette souffrance est à la hauteur du bénéfice qu’elle va en tirer à la fin.

Les mots qui suivent se veulent être une reconnaissance bien timorée compte tenu de l’aide, de la compréhension et du soutien gargantuesques que j’ai reçu durant la réalisation de ce travail :

À mes parents, Je tiens à vous exprimer ma profonde gratitude pour tout l’amour, le soutien et les sacrifices que vous avez consacrés à mon égard. Votre dévouement inconditionnel a été la fondation solide sur laquelle repose ma vie. Merci d’avoir été mes guides, mes inspirations et

mes piliers. Votre amour m'a façonné et m'a donné la force d'entreprendre chaque étape de ma vie. Je suis infiniment reconnaissant(e) d'avoir des parents aussi exceptionnels.

À mon frère Amir, ma sœur Hanaa, mon gendre Moumen et ma nièce Aline je vous remercie pour votre présence et bien vaillance, la famille que nous formons ensemble est une source infinie de bonheur, et je suis reconnaissant de pouvoir partager ces liens forts avec vous.

À ma fiancée Nihel Je tiens à te témoigner ma profonde gratitude pour être la lumière de ma vie et la source constante de bonheur. Ton amour et ton soutien inconditionnels ont transformé chaque jour en une aventure pleine de joie et de complicité. Merci d'être mon inspiration, ma confidente et ma compagne de vie. Je suis reconnaissant de partager ce chemin avec toi et d'avoir une personne aussi extraordinaire à mes côtés.

À mes grands-parents. Pour votre amour, bienveillance et encouragement. Que ce modeste travail soit l'expression des vœux que vous n'avez cessés de formuler dans vos prières.

À Y-22 : Amine, Hocine, Lotfi, Nadir, Nassim, Réda, Yacine. Je tiens à vous exprimer ma sincère reconnaissance pour chaque moment partagé, chaque rire partagé et chaque épreuve surmontée ensemble. Votre amitié est une bénédiction qui illumine ma vie. Merci d'être les compagnons de mes joies, les soutiens dans les épreuves, et les artisans d'aventures inoubliables. Avec vous, chaque instant devient précieux. Je suis reconnaissant d'avoir des amis aussi exceptionnels à mes côtés.

À mes amis Walid, Aymen, Nadir, Ilyes. Je tiens à vous exprimer ma profonde gratitude pour la chaleur de votre amitié. Vos rires, votre soutien et les moments partagés ont ajouté une richesse inestimable à ma vie. Merci d'avoir été des amis véritables, présents dans les bons moments comme dans les plus difficiles. Votre amitié est un trésor précieux que je chéris.

À mon encadrante : Dr S. Guendouz, sans qui ce travail n'aurait pas été aussi enrichissant. Vous nous avez marqué par votre simplicité, votre modestie et votre bonne humeur. Vous avez été impliquée, engagée et à l'écoute durant tout le travail. Vous nous avez toujours encouragés à nous exprimer, vous avez toujours pris nos remarques et nos doléances avec le sourire. Merci pour tout.

À tous ceux et celles qui me sont chers et que j'ai omis involontairement de citer.

T.M

LISTE DES ABREVIATIONS

A.B : Acinetobacter Baumannii

AVC : Accident Vasculaire Cérébral

BGC : Biosynthetic Gene Clusters

CNN : Convolutional Neural Network (Réseau de Neurones Convolutif)

DL : Deep Learning (ou apprentissage profond en français)

DNN : Deep Neural Network (Réseau de Neurones Profond)

EMA : European Medicines Agency

FA : Fibrillation Atriale

FDA : Food and Drug Administration

GAN : Generative Adversarial Network

GNN : Graph Neural Networks (Réseau de Neurones Graphique)

GRU : Gated Recurrent Unit (Unité Récurrente avec Portes)

IA : Intelligence Artificielle

IM : Imagerie Médicale

IRM : Images par Résonance Magnétique

LSTM : Long Short-Term Memory (Mémoire à Long Terme - Court Terme)

ML : Machine Learning (ou apprentissage automatique en français)

NRPS : Non-Ribosomal Peptide Synthetase (synthétases peptidiques non ribosomales bactériennes)

RGPD : Règlement Général sur la Protection des Données

RNN : Recurrent Neural Network (Réseau de Neurones Récurrent)

SFR : Société Française de Radiologie

SVM : Support Vector Machine (Machine à vecteurs de support)

LISTE DES FIGURES

Figure 1: machine learning et deep learning (3).....	1
Figure 2 : Frise chronologique de l'IA (4).....	2
Figure 3 : logiciel d'intelligence artificielle VX1 de Volta médical pour la détection précoce de l'arythmie cardiaque (10)	6
Figure 4 : IA capable de diagnostiquer 134 troubles cutanés (11).....	7
Figure 5 : I.A. en dermatologie (12).....	8
Figure 6: A gauche, une image sans amélioration de la qualité par intelligence artificielle, à droite, une image améliorée. Les cercles rouges entourent des lésions (taches blanches) dans le cadre du diagnostic d'une sclérose-en-plaque (14).....	10
Figure 7 : Détection de nodules pulmonaires cancéreux par l'IA au scanner (19)	12
Figure 8 : Classification du cancer à l'aide de l'Immunoscore (21)	13
Figure 9 : interface de BenevolentAI (une société leader dans le développement de médicaments en se basant sur l'Intelligence Artificielle au stade clinique.) (23)	16
Figure 10 : interface du progiciel de conception moléculaire, OpenEye (24)	17
Figure 11 : interface d'AQEMIA (25)	18

TABLE DES MATIERES

REMERCIEMENTS	I
DEDICACES	III
LISTE DES ABREVIATIONS	VI
LISTE DES FIGURES	VII
TABLE DES MATIERES	VIII
INTRODUCTION	1
Chapitre I : Intelligence artificielle dans le domaine médical	1
I.1. Définition de l'intelligence artificielle	1
I.1.1. Le machine learning et le deep learning.....	1
I.1.2. Histoire de l'intelligence artificielle	1
I.2. L'intérêt de l'intelligence artificielle (IA) dans le domaine de la médecine	3
I.2.1. Diagnostic précoce et précis.....	3
I.2.2. Traitement personnalisé	3
I.2.3. Recherche médicale.....	3
I.2.4. Imagerie médicale	4
I.2.5. Prévention des maladies	4
I.2.6. Optimisation des opérations hospitalières.....	4
I.3. Applications de l'IA dans quelques spécialités médicales	5
I.3.1. L'IA en cardiologie	5
I.3.2. L'IA en dermatologie	6
I.3.3. L'IA en psychiatrie.....	8
I.3.4. L'IA en radiologie.....	9
I.3.5. L'application de l'IA en immunologie.....	12
Chapitre II : Intelligence artificielle dans le domaine pharmaceutique	14
II.1. Applications de l'IA dans la découverte de médicaments	15
II.1.1. Conception moléculaire assistée par l'IA	15
II.1.1.1. Exploration de l'espace chimique	15
II.1.1.2. Prédiction de propriétés moléculaires	16
II.1.1.3. Optimisation de la synthèse chimique.....	17
II.1.1.4. Modélisation moléculaire avancée :	17
II.1.1.5. Découverte de combinaisons synergiques.....	18
II.1.2. Criblage virtuel et identification de cibles thérapeutiques.....	19

II.1.2.1. Prédiction de la bioactivité	20
II.1.2.2. Identification des composés/cibles	20
II.2. Personnalisation des Traitements Pharmaceutiques à l'aide de L'IA	21
II.2.1. Segmentation des patients	21
II.2.2. Analyse Pharmacogénomique.....	22
II.2.3. L'IA pour Atténuer les effets secondaires et les interactions médicamenteuses.....	22
II.3. Défis associés à l'utilisation de l'IA dans le domaine pharmaceutique	23
II.3.1. Fiabilité et interprétabilité des modèles d'IA	23
II.3.2. Intégration des données hétérogènes et protection de la confidentialité.....	24
II.3.3. Validation réglementaire.....	25
II.3.4. Perspectives de l'IA dans le domaine pharmaceutique.....	26
Chapitre III : configurer une structure générale pour la création d'une intelligence artificielle dans le domaine pharmaceutique à l'aide d'une IA	27
III.1. Compétences et connaissances nécessaires pour la création d'une IA pharmaceutique	28
III.1.1. Maîtrise des fondements de l'intelligence artificielle et de l'apprentissage automatique.....	28
III.1.2. Connaissances en chimie et pharmacologie	28
III.1.3. Compétences en programmation :	28
III.1.5. Modélisation moléculaire et simulation	29
III.1.6. Compréhension des méthodes de validation et d'évaluation :	29
III.1.7. Connaissance des réglementations pharmaceutiques et des bonnes pratiques	29
III.1.8. Compétences en communication et en collaboration.....	29
III.2. Etapes générales pour développer une intelligence artificielle dans le domaine pharmaceutique	29
III.2.1. Définir les objectifs et la portée	29
III.2.2. Collecte et prétraitement des données :	30
III.2.3. Choix de l'algorithme et de l'architecture	31
III.2.4. Entraînement du modèle	32
III.2.5. Validation et évaluation.....	32
III.2.6. Déploiement et intégration	32
III.2.7. Maintenance et amélioration	33
Chapitre IV : partie pratique	34
IV.1. Contexte et justification de l'étude	35
IV.1.1. Contexte.....	35
IV.1.2. Justification	35

IV.2. L'utilisation d'une intelligence artificielle en médecine	36
IV.2.1. Objectifs	36
IV.2.2. Matériel et méthodes	36
IV.2.3. Critères d'inclusion et d'exclusion	37
IV.2.3.1. Critères d'inclusion	37
IV.2.3.2. Critères d'exclusion.....	37
IV.2.4. Matériel	37
IV.2.5. Méthode.....	39
IV.2.5. Résultats	42
IV.2.6. Discussion	47
IV.3. L'utilisation d'une intelligence artificielle en pharmacie.....	50
Bibliographie.....	57
Récapitulatif de Mémoire : L'intelligence artificielle dans le domaine médical.....	62
Résumé	63

INTRODUCTION

L'évolution rapide de l'intelligence artificielle (IA) a révolutionné de nombreux secteurs, et le domaine pharmaceutique n'échappe pas à cette transformation majeure. L'intégration de l'IA dans le secteur pharmaceutique a suscité un intérêt croissant en raison de ses implications profondes sur les paradigmes traditionnels de recherche, développement et prestation de soins pharmaceutiques. Cette transformation émergente soulève des questions cruciales quant à son impact sur l'efficacité des traitements, la personnalisation des soins, la découverte et le développement de nouveaux médicaments.

Dans ce contexte, cette étude vise à explorer comment l'intégration croissante de l'IA transforme profondément le domaine pharmaceutique. En examinant de près les implications de cette révolution technologique, nous chercherons à comprendre comment l'IA améliore l'efficacité des traitements et la prédiction des réponses individuelles aux médicaments, ouvrant ainsi la voie à une approche plus personnalisée de la médecine. Parallèlement, nous analyserons l'impact sur la découverte et le développement de nouveaux médicaments novateurs, mettant en lumière les avancées majeures facilitées par l'IA, telles que le criblage moléculaire accéléré et la conception de médicaments plus ciblés.

Cependant, cette évolution technologique rapide soulève des préoccupations éthiques et réglementaires importantes. Nous nous attarderons sur les défis éthiques inhérents à l'utilisation de l'IA dans le domaine pharmaceutique, mettant en évidence la nécessité de garantir la transparence, la confidentialité des données et la responsabilité dans ce nouvel écosystème.

La problématique centrale de ce mémoire repose sur la manière dont l'intelligence artificielle redéfinit ces paradigmes, façonnant ainsi un paysage pharmaceutique en constante mutation, offrant une vision holistique des changements fondamentaux qui redéfinissent l'avenir de l'industrie pharmaceutique. Nous nous pencherons sur les différentes facettes de cette intégration, en examinant comment l'IA influence la recherche pharmaceutique, optimise le processus de développement des médicaments et contribue à la personnalisation des soins pharmaceutiques tout en abordant de front les défis éthiques et réglementaires qui exigent une attention particulière dans cette ère de transformation technologique accélérée.

Chapitre I : Intelligence artificielle dans le domaine médical

L'intelligence artificielle a une longue histoire dans le domaine de la médecine. Depuis les colosses de bronze de l'Antiquité jusqu'aux horloges sophistiquées de Su Song et Al-Jazari, l'humanité a toujours été fascinée par la création de machines imitant la vie. L'IA a investi le domaine de la santé depuis plus de cinquante ans, avec des prédictions visionnaires sur son potentiel à remplacer certaines fonctions intellectuelles traditionnelles des médecins. Aujourd'hui, l'IA est au cœur de la médecine du futur, avec des applications telles que les opérations assistées, le suivi des patients à distance, les prothèses intelligentes, l'analyse de prescription, l'éducation thérapeutique du patient et la délivrance de médicaments. Ces avancées ouvrent la voie à une médecine augmentée, offrant des perspectives prometteuses pour améliorer la qualité des soins de santé et faciliter le développement de nouvelles stratégies thérapeutiques (1).

I.1. Définition de l'intelligence artificielle

L'intelligence artificielle (IA) représente la capacité des machines informatiques à imiter, dans certaines situations, les processus cognitifs humains. Cette imitation s'inspire parfois de la décomposition des compétences du cerveau humain en éléments programmables, exploitant ainsi les capacités avancées de mémoire et de calcul des ordinateurs.

L'objectif de l'intelligence artificielle est de créer des systèmes capables de traiter des informations de manière autonome, d'apprendre à partir de ces informations, et de prendre des décisions ou d'effectuer des actions de manière similaire à la manière dont le ferait un être humain. Ces systèmes peuvent être programmés pour effectuer des tâches spécifiques ou peuvent apprendre et s'adapter à partir de l'expérience.

L'IA est utilisée dans divers domaines, y compris la santé, où elle peut aider à la prise de décision médicale, au diagnostic, à la recherche et le développement de nouveaux médicaments, à la chirurgie assistée par ordinateur et à la médecine prédictive (1).

I.1.1. Le machine learning et le deep learning

Le *machine learning* (ML) et le *deep learning* (DL) sont deux sous-domaines de l'intelligence artificielle qui ont des différences significatives.

Le "*Machine Learning*" offre aux ordinateurs la capacité d'analyser des données et d'utiliser des méthodes d'optimisation et de statistique pour apprendre à accomplir des tâches prédictives. D'autre part, le "*Deep Learning*" est une approche spécifique du *machine learning* qui repose sur l'utilisation de vastes réseaux neuronaux artificiels qui imitent le fonctionnement du cerveau humain, permettant la création de modèles capables de s'ajuster automatiquement aux données. Il est capable de traiter des données non structurées et de réaliser des tâches complexes telles que la reconnaissance d'images et de la parole. En résumé, le DL constitue une branche du ML, qui à son tour représente un moyen d'exploiter l'IA (2).

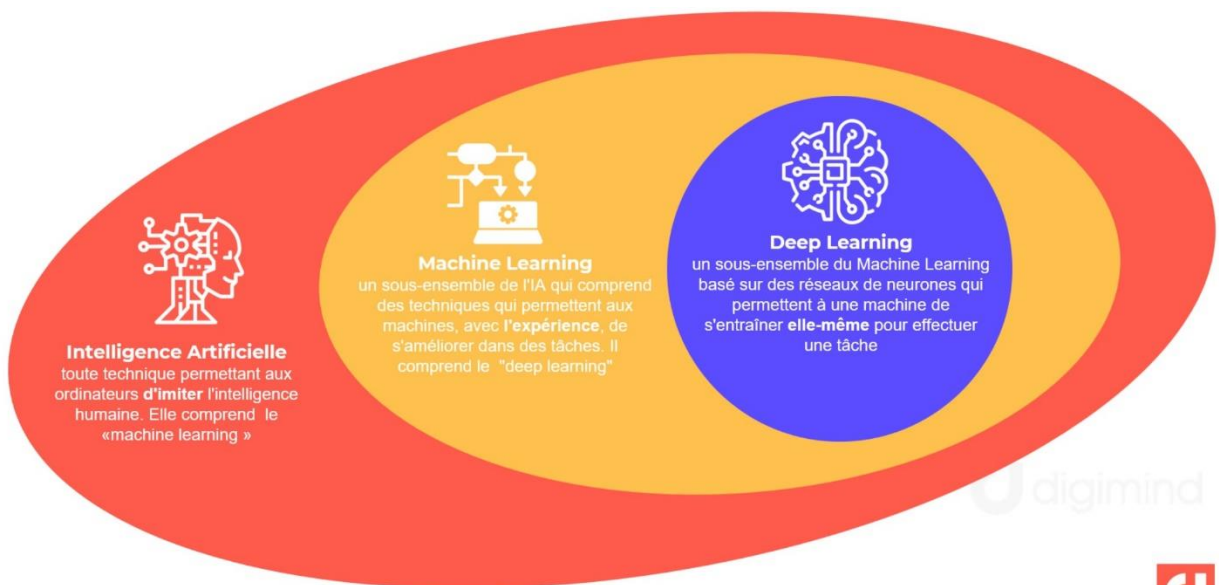


Figure 1: machine learning et deep learning (3)

I.1.2. Histoire de l'intelligence artificielle

L'histoire de l'IA remonte au 19e siècle, avec des précurseurs tels que Charles Babbage, qui a conçu l'Analytical Engine, considéré comme le premier ordinateur à usage général. Cependant, le véritable essor de l'IA a eu lieu au 20e siècle, avec des avancées significatives dans les années

Chapitre I : Intelligence artificielle dans le domaine médical

1950 et 1960. Cette période a été suivie d'une phase de stagnation dans les années 1970 et 1980, connue sous le nom "hiver de l'IA", en raison d'attentes déraisonnablement élevées et d'une progression limitée. Ce n'est qu'à partir des années 1990 que l'IA a connu un renouveau, avec des progrès remarquables dans des domaines tels que la santé, la finance, les transports, l'industrie, l'apprentissage profond, le traitement du langage naturel, et la robotique. L'histoire de l'IA est caractérisée par des cycles d'enthousiasme et de déception, mais les progrès constants et les applications pratiques croissantes montrent que l'IA continue d'évoluer et de façonner notre société de manière significative (4).

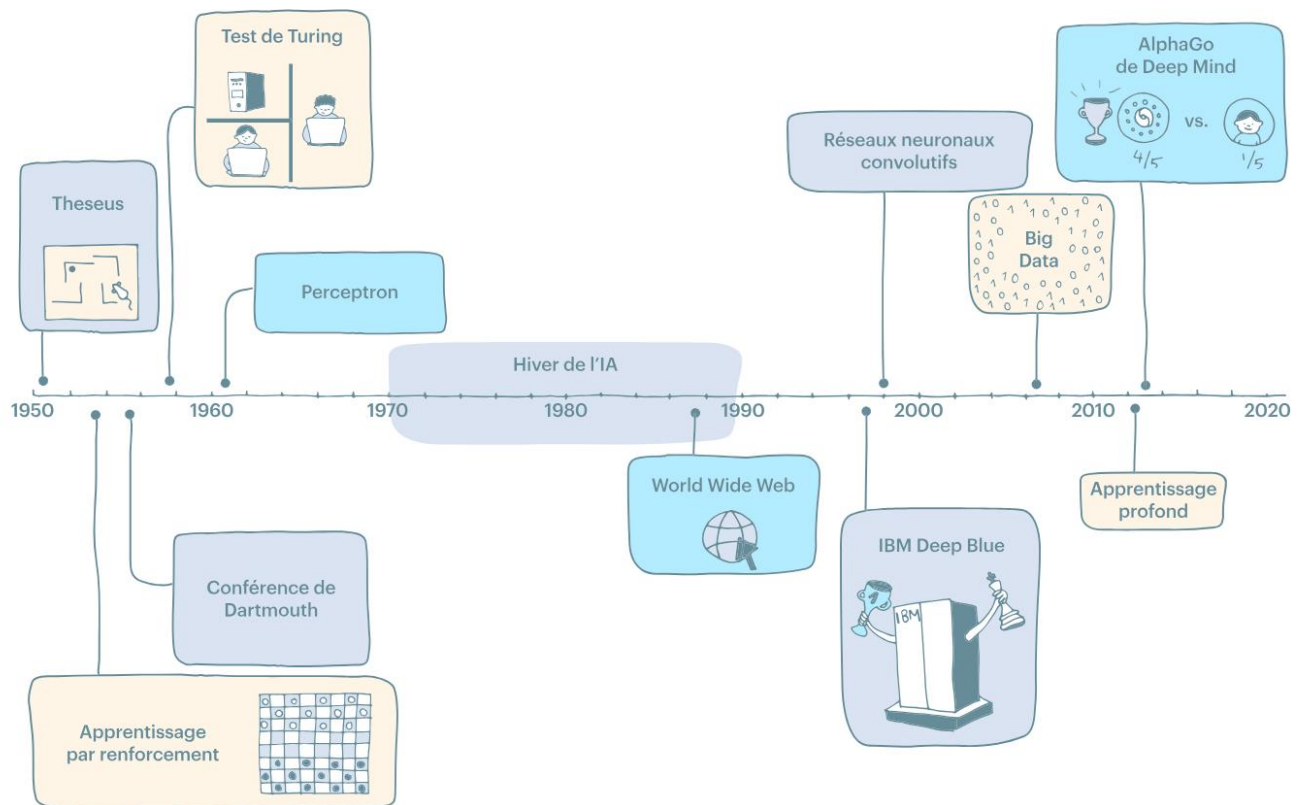


Figure 2 : Frise chronologique de l'IA (4)

Aujourd'hui, l'IA joue un rôle de plus en plus important dans le domaine de la santé, offrant des applications variées et prometteuses pour améliorer les soins aux patients et les processus médicaux.

I.2. L'intérêt de l'intelligence artificielle (IA) dans le domaine de la médecine

IA présente un intérêt majeur dans le domaine médical en raison de ses capacités à traiter de grandes quantités de données et à fournir un soutien à la prise de décision médicale.

I.2.1. Diagnostic précoce et précis

Les systèmes d'IA peuvent analyser de grandes quantités de données médicales, y compris des images médicales et des antécédents médicaux des patients, pour détecter des signes précoces de maladies avant qu'elles ne deviennent visibles à l'œil nu et proposer des traitements plus tôt. Par exemple, l'IA est utilisée pour détecter la maladie d'Alzheimer en analysant des images cérébrales et en identifiant des anomalies ou des signes avant-coureurs de la maladie. L'IA peut également aider à diagnostiquer d'autres maladies plus rapidement et plus précisément que les médecins, ce qui peut améliorer les soins aux patients et réduire les coûts des tests médicaux. Cependant, l'IA ne remplace pas les médecins, mais plutôt les aide à prendre des décisions plus éclairées en fournissant des informations supplémentaires (5, 6).

I.2.2. Traitement personnalisé

En utilisant des algorithmes d'apprentissage automatique ML, l'IA peut analyser les caractéristiques individuelles des patients comme leur génétique et leur historique médical, pour recommander des traitements personnalisés. Cela permet d'optimiser l'efficacité des thérapies et de minimiser les effets secondaires.

Les IA peuvent également prédire la réponse thérapeutique d'un patient à un traitement spécifique, ce qui peut aider les médecins à choisir le meilleur traitement adapté pour chaque patient (1, 7).

I.2.3. Recherche médicale

Les techniques d'IA peuvent accélérer la recherche médicale en analysant rapidement d'énormes ensembles de données, en identifiant des motifs et en repérant des relations

Chapitre I : Intelligence artificielle dans le domaine médical

complexes. Cela peut conduire à la découverte de nouveaux médicaments, à une compréhension approfondie des maladies et à des avancées significatives dans la recherche biomédicale (7).

I.2.4. Imagerie médicale

L'IA est largement utilisée dans l'analyse d'images médicales (IM), permettant une détection plus précise des anomalies, une segmentation des organes, et une interprétation rapide des résultats de radiologie, de tomодensitométrie (TDM) et d'imagerie par résonance magnétique (IRM).

I.2.5. Prévention des maladies

En analysant les données de santé et en identifiant les facteurs de risque, l'IA peut contribuer à la prévention des maladies en fournissant des recommandations de mode de vie personnalisées, en identifiant les populations à risque et en permettant une intervention précoce. Par exemple, en psychiatrie, l'IA est utilisée pour la détection précoce de troubles mentaux tels que la schizophrénie et la psychose. De plus, l'IA permet d'analyser de grandes quantités de données médicales pour identifier des modèles et des tendances, ce qui peut contribuer à la mise en place de stratégies de prévention plus efficaces. En résumé, l'IA offre des perspectives prometteuses dans la prévention des maladies en permettant une approche plus proactive et personnalisée de la santé (1, 8).

I.2.6. Optimisation des opérations hospitalières

L'IA est de plus en plus utilisée pour optimiser les opérations hospitalières. Elle permet de prédire et de gérer les flux de patients, d'améliorer la planification des interventions chirurgicales, de prioriser les interventions urgentes, et de limiter les perturbations tout en fluidifiant les flux de travail dans les blocs opératoires. De plus, l'IA peut être utilisée pour améliorer la gestion des ressources hospitalières, à la prévision des besoins en soins intensifs et à la prédiction de la durée des interventions chirurgicales, ce qui permet une meilleure utilisation des ressources et une optimisation des opérations hospitalières (8, 9).

L'intégration de l'IA dans le domaine médical présente ainsi un potentiel considérable pour améliorer la qualité des soins, accroître l'efficacité opérationnelle et contribuer à des avancées

significatives dans la recherche médicale. Cependant, des défis tels que la confidentialité des données et la validation clinique doivent être abordés pour assurer une adoption responsable de ces technologies.

I.3. Applications de l'IA dans quelques spécialités médicales

L'IA est devenue un outil indispensable en raison de l'augmentation constante des informations à traiter dans le domaine de la santé, offrant ainsi un potentiel prometteur pour améliorer les soins aux patients et les processus médicaux.

I.3.1. L'IA en cardiologie

L'intelligence artificielle est aujourd'hui appliquée dans le domaine de la cardiologie, en particulier dans le traitement du signal, la stratification du risque clinique et le traitement d'images. De plus, l'IA est utilisée pour l'analyse des électrocardiogrammes (ECG) afin de repérer les anomalies de rythme et de prédire les troubles du rythme cardiaque.

En ce qui concerne le traitement du signal, l'accent est mis sur la détection de la fibrillation atriale (FA), une pathologie associée à un risque élevé d'accident vasculaire cérébral, mais qui est souvent asymptomatique, rendant sa détection complexe.

D'autre part, des études récemment publiées ont démontré comment un modèle de DL, construit à partir de données provenant de plus de 14 000 échocardiographies, surpasse l'œil humain dans la détection de certaines cardiomyopathies. Actuellement, nous assistons à un développement rapide des algorithmes de ML et de DL dans le domaine des technologies appliquées en cardiologie, un développement qui devrait certainement prendre encore plus d'importance à l'avenir (2).



Figure 3 : logiciel d'intelligence artificielle VX1 de Volta médical pour la détection précoce de l'arythmie cardiaque (10)

I.3.2. L'IA en dermatologie

L'intelligence artificielle a démontré une précision supérieure à celle des observations de dermatologues dans la distinction entre les lésions malignes et bénignes. Elle peut être exploitée pour effectuer un dépistage en temps réel en utilisant un classificateur SVM (*Support Vector Machine*) sur des images numériques, englobant ainsi diverses maladies cutanées.



Figure 4 : IA capable de diagnostiquer 134 troubles cutanés (11)

Plusieurs algorithmes ont été créés pour automatiser la détection des mélanomes dans les biopsies dermiques. Ces algorithmes évaluent les images issues des biopsies, utilisant une série de classificateurs pour discriminer les mélanomes des carcinomes et nævus, tout en procédant à la classification des caractéristiques dermato-pathologiques telles que l'épaisseur et la couleur, fournissant des informations précieuses pour les professionnels de la santé.

L'utilisation de l'intelligence artificielle permet une identification rapide des lésions pigmentées suspectes, facilitant ainsi le diagnostic précoce du mélanome (12).

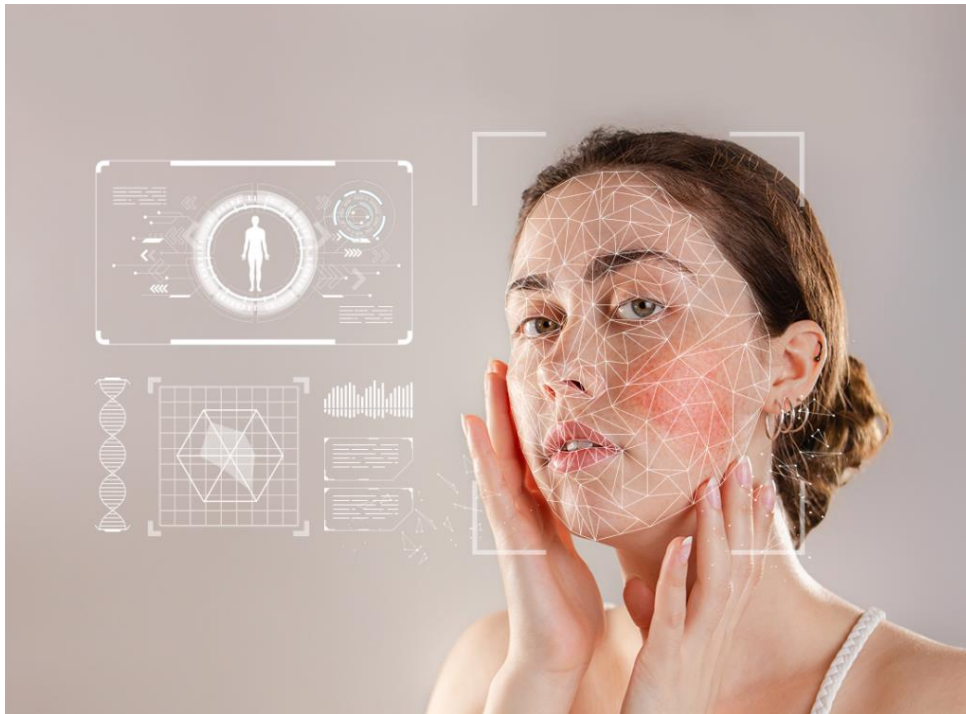


Figure 5 : I.A. en dermatologie (12)

I.3.3. L'IA en psychiatrie

Les modèles d'intelligence artificielle se révèlent être des outils précieux pour le diagnostic en santé mentale à divers niveaux. Les questionnaires de psychométrie, utilisés pour mesurer et évaluer différents aspects de l'état mental d'un patient, représentent une méthode courante. Cependant, l'analyse de ces questionnaires demande un investissement en temps considérable de la part des psychiatres. L'IA, quant à elle, peut traiter d'énormes volumes de données en un laps de temps réduit, permettant ainsi une identification précise des motifs associés à divers troubles psychologiques. En mettant en lumière des modèles comportementaux récurrents liés à un trouble donné, les algorithmes d'IA fournissent une quantification et une modélisation précieuses, offrant une nouvelle objectivité à la compréhension de ces troubles.

Il existe également des programmes de recherche particulièrement axés sur la prévention. Le projet PsyCARE, dirigé par Marie-Odile Krebs, clinicienne et chercheuse à l'Université de Paris, se concentre sur le développement d'une IA permettant la détection précoce de la schizophrénie ou d'une psychose chronique. Cette IA utilisera la modélisation des connaissances sur la schizophrénie et l'identification de biomarqueurs via un algorithme d'apprentissage. Ces avancées illustrent l'importance croissante de l'IA dans le domaine de la

santé mentale, offrant des perspectives prometteuses pour une prise en charge préventive et personnalisée.

Loin de chercher à remplacer les psychiatres en raison de sa nature artificielle, L'IA se profile plutôt comme un atout précieux. En identifiant des modèles comportementaux, des tendances et des corrélations, tout en fournissant des outils d'analyse avancés, elle vient assister l'intelligence naturelle des cliniciens (8, 13).

I.3.4. L'IA en radiologie

L'intelligence artificielle est devenue un outil indispensable en radiologie, offrant des avancées significatives dans l'analyse d'IM. Elle permet d'améliorer le diagnostic en identifiant des anomalies et en prédisant le risque de certaines pathologies. Par exemple, l'IA est utilisée pour la détection précoce de maladies potentiellement mortelles, telles que les tumeurs, en analysant des images issues de scanners et d'IRM.

À Strasbourg, au sein du service d'imagerie dédié à la femme de l'hôpital universitaire, l'équipe médicale fait un usage quotidien, depuis septembre 2022, d'une intelligence artificielle en tant que seconde opinion pour l'interprétation des mammographies. Ce dispositif a déjà permis, à trois reprises, de détecter des micro-calcifications, des signes potentiels de pré-cancer, qui n'avaient pas été initialement identifiées par le praticien. Après une biopsie, l'une de ces détections s'est avérée être une formation cancéreuse.

De plus, l'IA contribue à l'amélioration de la qualité des images (Figure 6) en réduisant les interférences, ce qui facilite le travail des radiologues.

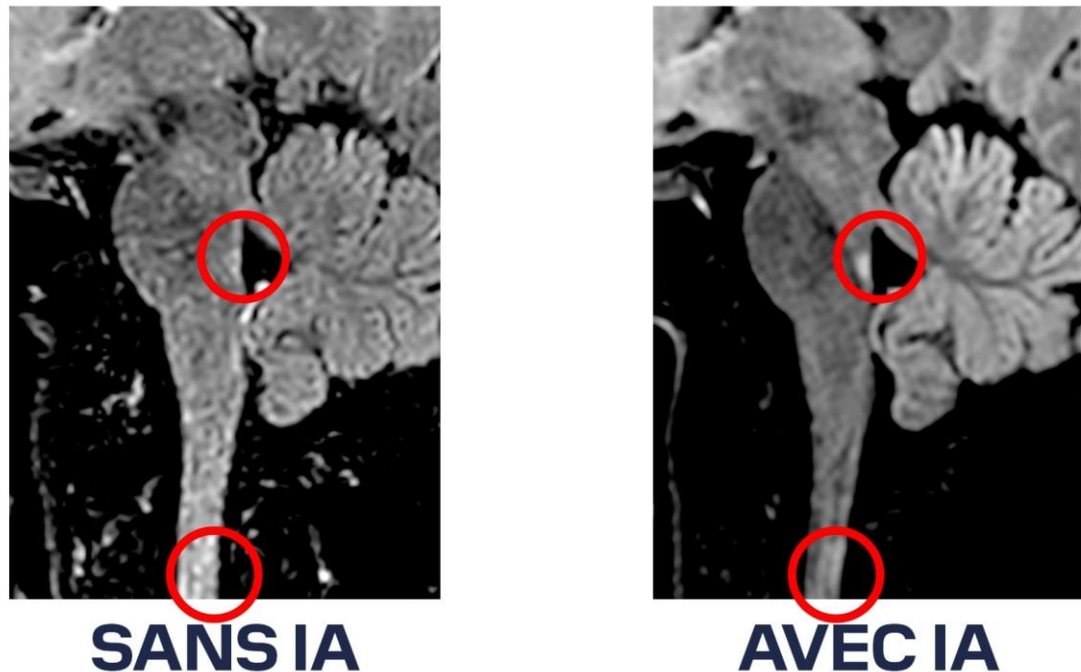


Figure 6: A gauche, une image sans amélioration de la qualité par intelligence artificielle, à droite, une image améliorée. Les cercles rouges entourent des lésions (taches blanches) dans le cadre du diagnostic d'une sclérose-en-plaque (14)

La Société française de radiologie (SFR) reconnaît l'impact positif de l'intelligence artificielle et sa capacité à fournir des réponses rapides et pertinentes à des questions spécifiques dans le domaine de la radiologie.

Suite à un accident vasculaire cérébral (AVC) ischémique, l'intelligence artificielle offre la possibilité d'évaluer le volume du cerveau potentiellement récupérable grâce à des images par résonance magnétique (IRM). Au Royaume-Uni, l'application d'une approche algorithmique similaire à 111 000 patients a conduit à une augmentation significative (48 % contre 16 %) du nombre de personnes présentant une "récupération sans handicap ou avec un handicap minime" après un AVC. Cette avancée pourrait contribuer à réduire les disparités dans la prestation de soins sur le territoire.

Les cas d'usage de l'IA en radiologie :

L'IA propose des algorithmes de priorisation du traitement et d'optimisation du flux de travail pour les suspicions de fractures périphériques. Ces outils de triage permettent à l'IA d'accélérer

Chapitre I : Intelligence artificielle dans le domaine médical

la prise en charge des patients aux urgences, libérant ainsi le radiologue pour se concentrer sur les examens présentant une suspicion de fracture, où son expertise est particulièrement nécessaire. L'IA permet aussi une analyse plus rapide des images, renforçant la confiance dans les diagnostics. Elle réduit le stress lié aux erreurs humaines et améliore la pertinence des décisions cliniques. En outre, l'IA est également utilisée pour la structuration automatique des comptes rendus d'examens radiologiques, ce qui peut améliorer la cohérence des descriptions de maladies. Ces avancées offrent un potentiel significatif pour améliorer les soins de santé en radiologie.

Les IA d'aujourd'hui permettent aussi :

- D'optimiser le diagnostic du cancer du sein en repérant les zones les plus suspectes et en attribuant des scores pour classifier les résultats selon le risque potentiel de présence d'une tumeur.
- De promouvoir le dépistage précoce du cancer du poumon en automatisant la détection et la mesure des nodules pulmonaires (Figure 7), tout en évaluant leur vitesse de croissance et leur composition.
- D'anticiper l'évolution des maladies neurodégénératives en surveillant et mesurant de manière automatisée les lésions cérébrales. Les radiologues peuvent maintenant prévoir les changements au fil du temps et définir plus rapidement le traitement le plus approprié.

Les radiologues considèrent que l'IA peut améliorer la qualité des soins. Il est important de noter que l'IA ne remplace pas les radiologues, mais les assiste dans leur prise de décision, en offrant une aide au diagnostic.

Les radiologues veillent à ce que ces technologies innovantes respectent les règles éthiques et déontologiques médicales (15-18).

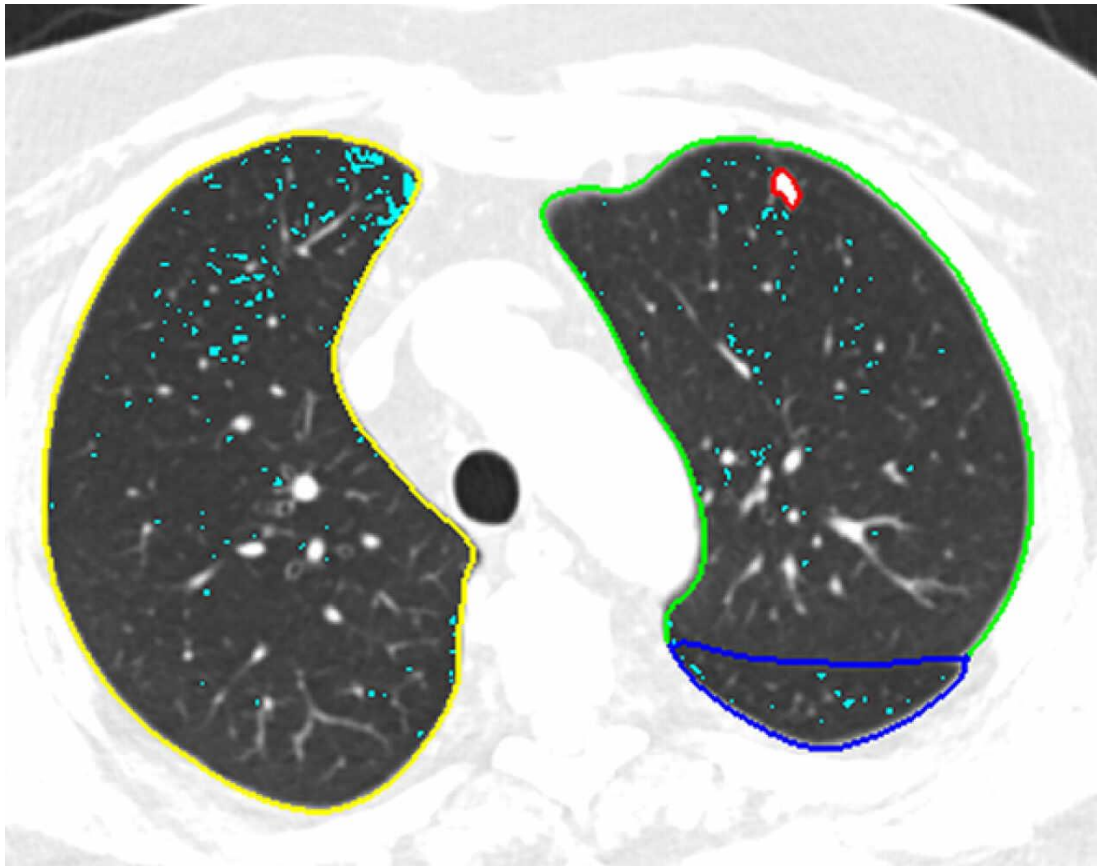


Figure 7 : Détection de nodules pulmonaires cancéreux par l'IA au scanner (19)

I.3.5. L'application de l'IA en immunologie

L'immunoscore est un exemple d'IA en immunologie, Ce test, basé sur la quantification des lymphocytes T dans la tumeur, permet d'évaluer le microenvironnement immunitaire et de prédire l'évolution clinique des patients atteints de cancer colorectal, qui est le 3e cancer le plus mortel au monde avec environ 881000 décès au monde en 2018.

Cette méthode repose sur les travaux du Dr. Jérôme Galon et de son équipe, qui se consacrent à l'étude du contexte immunitaire dans le cancer humain.

En effet, l'Immunoscore repose sur la détermination de la densité en lymphocytes T totaux CD3+ et cytotoxiques CD8+, offrant ainsi un outil précieux pour prédire l'envahissement ganglionnaire, la rechute et établir un pronostic plus précis pour les patients.

Le test de l'immunoscore permet par une approche de pathologie numérique de dénombrer les cellules immunitaires au niveau du front tumoral, puis de produire un score en appliquant une

Chapitre I : Intelligence artificielle dans le domaine médical

couche logicielle, cette approche est un processus qui consiste à numériser des lames microscopiques afin de les visualiser d'une façon similaire à celle du microscope ensuite l'interprétation via une IA.

Cette approche innovante ouvre de nouvelles perspectives dans le domaine de l'oncologie en permettant une personnalisation des traitements et une meilleure gestion des patients atteints de cancer du côlon (20-22).

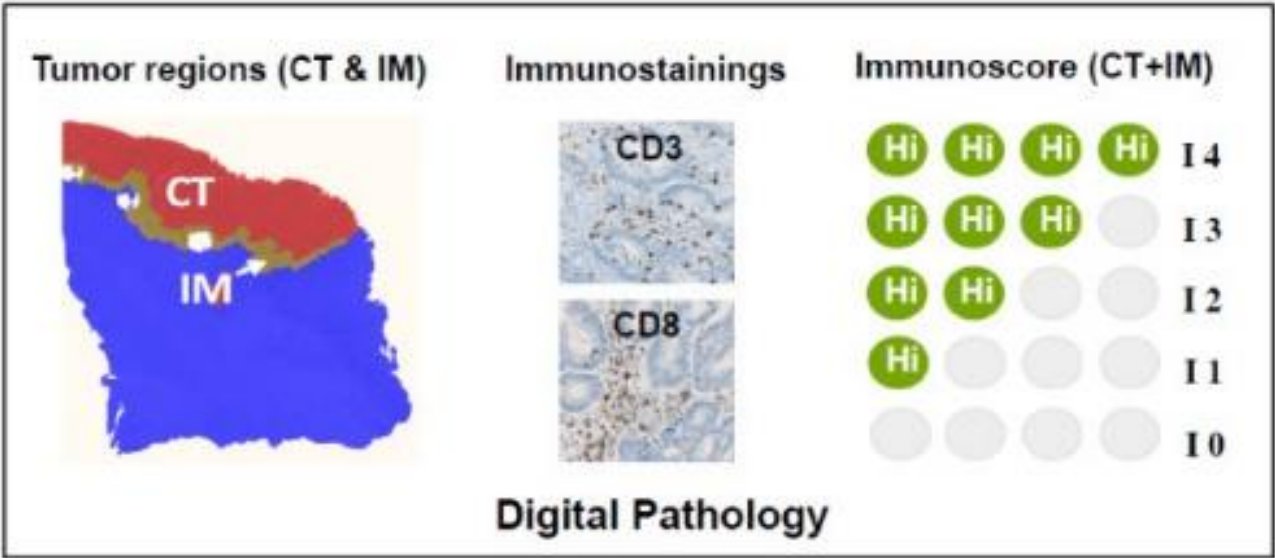
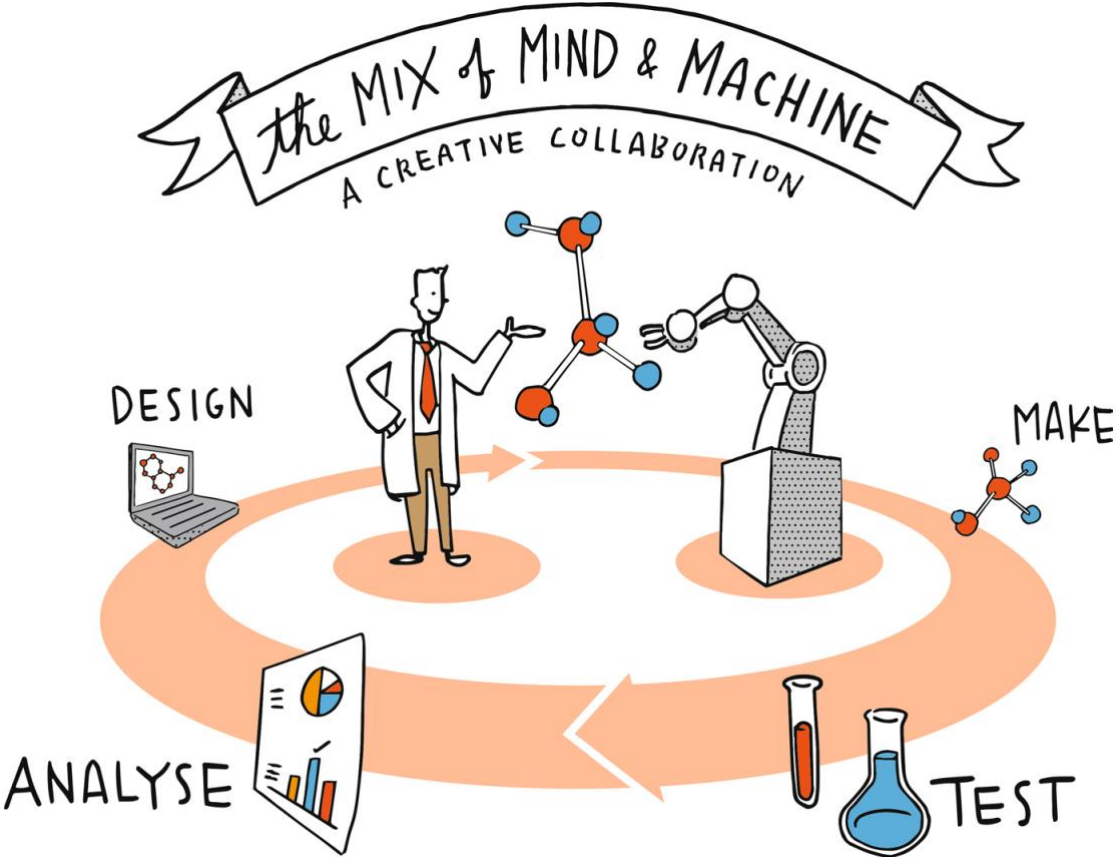


Figure 8 : Classification du cancer à l'aide de l'Immunoscore (21)

Chapitre II : Intelligence artificielle dans le domaine pharmaceutique



Chapitre II : Intelligence artificielle dans le domaine pharmaceutique

L'adoption de l'IA dans le domaine pharmaceutique promet un potentiel significatif pour améliorer les soins de santé, accélérer le processus de recherche, réduire les coûts de développement de nouveaux médicaments, optimiser les traitements et contribuer à une approche plus personnalisée de la médecine.

II.1. Applications de l'IA dans la découverte de médicaments

Le processus d'élaboration de médicaments s'est métamorphosé en un vaste domaine de recherche, caractérisé par des méthodologies multidisciplinaires extrêmement complexes, étendues dans le temps et exigeantes sur le plan financier, dirigées par une multitude d'entités à l'échelle locale, nationale et internationale.

Après avoir contribué de manière significative à des avancées dans d'autres secteurs tels que le *cloud computing* et la cyber sécurité, peut-on envisager que l'intelligence artificielle joue un rôle crucial dans le processus de découverte de médicaments ?

II.1.1. Conception moléculaire assistée par l'IA

Il faut généralement une décennie et des coûts de plusieurs millions de dollars pour qu'un médicament soit mis sur le marché. Dans le contexte des épidémies, comme celle de la Covid, la nécessité d'une solution pharmaceutique se fait pressante. L'une des approches visant à raccourcir le délai de développement d'un vaccin consiste à optimiser la phase de recherche préclinique.

L'utilisation de l'IA dans la conception moléculaire offre la possibilité de repousser les limites de la découverte de médicaments et de créer des molécules plus efficaces et mieux adaptées aux besoins spécifiques de la santé humaine en un laps de temps plus réduit. Cela permettra une innovation accélérée dans le domaine de la chimie et de la pharmacologie.

Voici quelques aspects clés de la manière dont l'IA est utilisée dans la conception moléculaire :

II.1.1.1. Exploration de l'espace chimique

L'IA peut aider à explorer l'espace chimique rapidement en identifiant des molécules potentiellement actives, en évaluant leurs propriétés et en prédisant leurs interactions avec

Chapitre II : Intelligence artificielle dans le domaine pharmaceutique

d'autres molécules. Cela accélère le processus de recherche de composés moléculaires prometteurs pour de nouveaux médicaments ou matériaux.

Une équipe de chercheurs de **BenevolentAI** a identifié le Baricitinib comme traitement potentiel du COVID-19 en seulement quatre jours. Ce médicament, initialement conçu par la société pharmaceutique américaine Eli Lilly pour traiter la polyarthrite rhumatoïde, présente la particularité de pouvoir cibler à la fois le virus COVID-19 et la réponse inflammatoire de l'organisme. Il s'agit de la première fois où l'intelligence artificielle a été utilisée pour découvrir l'application d'un médicament existant dans le contexte d'un nouveau problème.

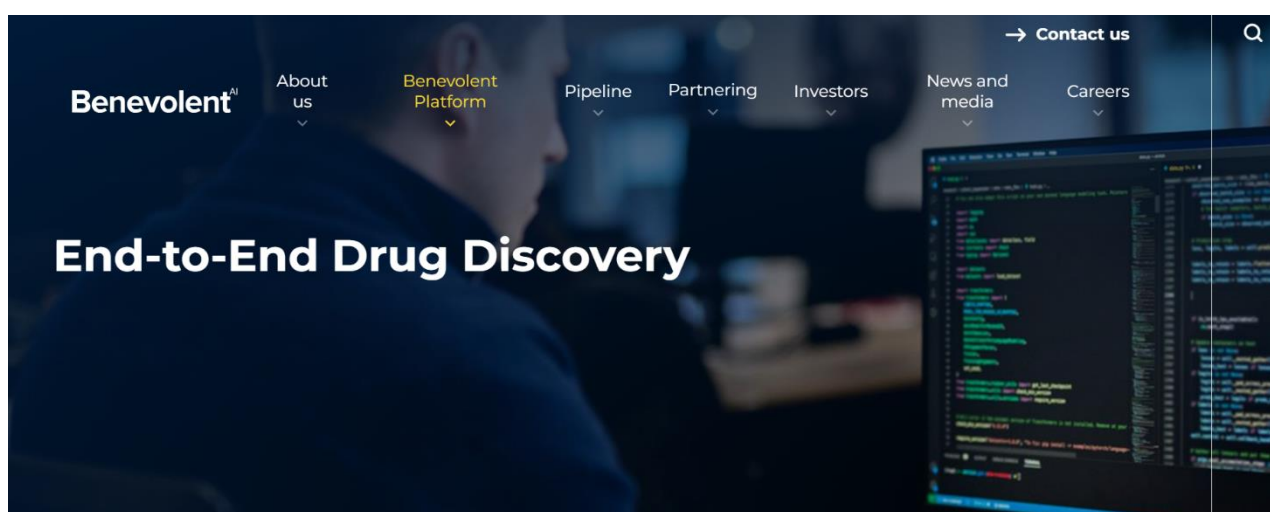


Figure 9 : interface de BenevolentAI (une société leader dans le développement de médicaments en se basant sur l'Intelligence Artificielle au stade clinique.) (23)

II.1.1.2. Prédiction de propriétés moléculaires

L'IA peut prédire avec précision les propriétés moléculaires, telles que la solubilité, la toxicité, et l'activité biologique, en utilisant des algorithmes d'apprentissage. Cela permet d'orienter la conception vers des molécules présentant des caractéristiques souhaitées.

L'un de ces dispositifs est représenté par le progiciel de conception moléculaire **OpenEye**. Ce dernier exploite des algorithmes reposant sur l'intelligence artificielle afin d'optimiser les propriétés moléculaires, incluant la dimension, la configuration et l'énergie. De plus, le logiciel est capable de prédire les propriétés de nouvelles molécules en se basant sur les caractéristiques

Chapitre II : Intelligence artificielle dans le domaine pharmaceutique

des molécules existantes. Cette méthodologie facilite l'élaboration de molécules manifestant des propriétés souhaitées, telles que leur stabilité, solubilité ou bioactivité accrues.

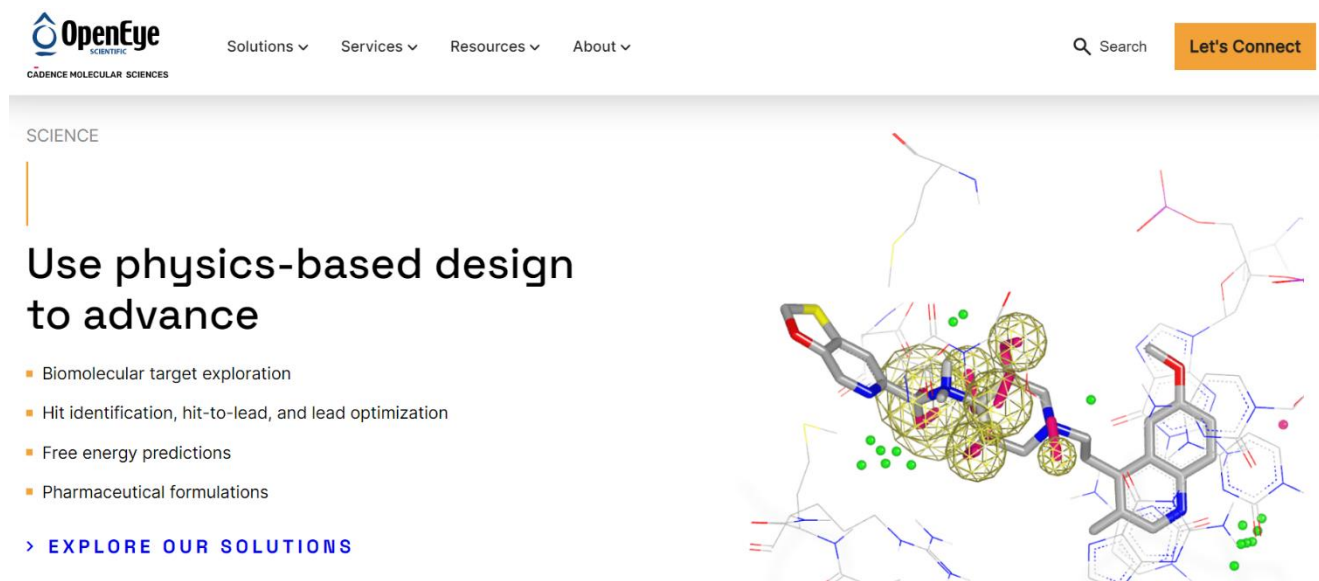


Figure 10 : interface du progiciel de conception moléculaire, OpenEye (24)

II.1.1.3. Optimisation de la synthèse chimique

En identifiant les structures moléculaires, analysant les réactions chimiques passées et en prédisant les résultats de nouvelles synthèses, l'IA peut contribuer à optimiser le processus de fabrication de composés moléculaires qui présentent les propriétés désirées, permettant une production plus efficace et économique.

En 2019, une équipe de chercheurs de l'Université de Cambridge a employé l'IA afin d'identifier rapidement un nouveau composé potentiellement efficace contre le paludisme. En quelques jours seulement, cette méthode a permis d'identifier un composé qui aurait nécessité des mois, voire des années, avec les approches traditionnelles.

II.1.1.4. Modélisation moléculaire avancée :

Les techniques de modélisation moléculaire assistées par l'IA permettent de créer des représentations virtuelles détaillées de molécules, facilitant la compréhension de leur comportement et de leurs interactions.

Chapitre II : Intelligence artificielle dans le domaine pharmaceutique

Cela élimine la nécessité de procéder à des expérimentations coûteuses et chronophages. De plus, l'utilisation de l'intelligence artificielle peut être étendue à l'optimisation de molécules déjà existantes, offrant ainsi aux sociétés pharmaceutiques la possibilité de développer des médicaments plus efficaces dans des intervalles temporels plus restreints.

Aqemia, une start-up fondée en 2019, se consacre à la création d'une plateforme de découverte de médicaments en utilisant une approche de physique statistique inspirée du quantique. Son fondateur, le chercheur Maximilien Levesque, explique que l'objectif est de concevoir des molécules qui ciblent spécifiquement des éléments biologiques responsables de maladies. L'IA, alimentée par des principes physiques, peut calculer l'affinité entre la molécule créée et sa cible biologique en se basant uniquement sur la nature physique de ces éléments. (18)



Figure 11 : interface d'AQEMIA (25)

II.1.1.5. Découverte de combinaisons synergiques

L'IA peut identifier des combinaisons de composés moléculaires qui présentent des effets synergiques, qui seraient difficiles à détecter pour les humains, améliorant ainsi l'efficacité des traitements et minimisant les effets secondaires indésirables. Cela donne aux sociétés pharmaceutiques la capacité de détecter des combinaisons plus prometteuses en vue du développement de médicaments plus efficaces.

Chapitre II : Intelligence artificielle dans le domaine pharmaceutique

L'industrie pharmaceutique s'oriente de manière croissante vers l'exploitation de l'intelligence artificielle en vue de métamorphoser fondamentalement les processus de conception et de développement des médicaments. L'utilisation de l'IA dans la conception moléculaire représente un outil qui confère aux sociétés pharmaceutiques la capacité d'identifier de nouvelles molécules présentant des propriétés spécifiques et de perfectionner celles déjà existantes, en vue de la création de médicaments d'une efficacité accrue.

Cependant, tel un outil révolutionnaire, l'IA peut engendrer des conséquences néfastes en l'absence de contrôle. Dans une démonstration récente, un modèle d'intelligence artificielle a été entraîné à partir d'un ensemble initial de molécules, chargé de procéder à des adaptations visant à accroître leur toxicité. Les résultats ont été préoccupants : en quelques heures seulement, le modèle a généré plus de 40 000 molécules présentant un potentiel de dangerosité.

Globalement, l'utilisation de la conception moléculaire basée sur l'intelligence artificielle constitue un instrument puissant permettant aux entreprises pharmaceutiques de diminuer la durée et les coûts inhérents à la découverte et au développement de médicaments, tout en améliorant la précision et l'exactitude. En exploitant les avantages de l'intelligence artificielle, les sociétés pharmaceutiques peuvent accélérer le processus de développement de médicaments, tout en atténuant le risque de dépenses conséquentes liées à des échecs potentiels (26-28).

II.1.2. Criblage virtuel et identification de cibles thérapeutiques

L'IA n'a pas encore directement abouti à la découverte de médicaments complets, mais elle apporte des innovations importantes dans le processus de recherche et de développement de médicament.

Le processus de découverte de médicaments débute par le criblage de milliards de composés. Grâce à l'intégration de l'intelligence artificielle, la recherche est optimisée, facilitant ainsi l'analyse de la structure moléculaire. Un exemple concret de cette avancée est illustré par le supercalculateur du Oak Ridge National Laboratory, qui a réussi à cribler 2 milliards de molécules en une seule journée, comparativement aux trois mois requis précédemment (18).

Chapitre II : Intelligence artificielle dans le domaine pharmaceutique

II.1.2.1. Prédiction de la bioactivité

Les modèles d'apprentissage machine, spécifiquement les modèles de relation quantitative structure à activité/propriété (QSA/PR) basés sur des réseaux de neurones profonds, sont capables de prédire et de classifier les activités biologiques des produits naturels à partir de structures chimiques. Montrant son efficacité lors du criblage virtuel pour l'enrichissement en composés actifs. Ces modèles peuvent être utilisés pour identifier des composés présentant un potentiel thérapeutique spécifique.

Dans une récente étude, des méthodes d'apprentissage machine ont été employées pour prédire *in silico* des antibiotiques contre *Acinetobacter baumannii* (A.B), une bactérie nosocomiale à Gram négatif multi-résistante aux antibiotiques. Les méthodes d'apprentissage automatique ont été utilisées pour cribler environ 7 500 molécules, identifiant ainsi l'abaucine comme un composé antibactérien efficace contre A.B. Des investigations approfondies ont révélé que l'abaucine perturbe le trafic des lipoprotéines via un mécanisme impliquant LolE. De plus, l'abaucine semble pouvoir contrôler une infection à A.B dans un modèle de plaie de souris, soulignant ainsi l'efficacité de l'apprentissage automatique dans la découverte d'antibiotiques et présentant une piste prometteuse contre cette bactérie résistante (29, 30).

II.1.2.2. Identification des composés/cibles

L'intelligence artificielle, appuyée par des algorithmes d'apprentissage machine, démontre la capacité d'analyser de manière approfondie les données spectroscopiques en vue d'identifier et de caractériser les composés présents dans les produits naturels. Ce processus s'avère être un accélérateur significatif pour l'identification et l'isolement efficace des molécules bioactives.

Dans un article publié dans *Nucleic Acids Research*, indique que l'application de l'intelligence artificielle, à travers le serveur Web NRPSpredictor2, permet d'améliorer les prédictions concernant la spécificité des substrats des domaines d'adénylation des synthétases peptidiques non ribosomales bactériennes (NRPS), qui sont responsables de la production de métabolites secondaires tels que la vancomycine et d'autres antibiotiques.

En d'autres termes, le serveur NRPSpredictor2 améliore la capacité de prédire quelles molécules spécifiques ces enzymes vont traiter, ce qui est crucial pour comprendre et manipuler la production de produits naturels par les bactéries à des fins diverses, notamment dans le domaine pharmaceutique.

Chapitre II : Intelligence artificielle dans le domaine pharmaceutique

Un autre article démontre l'utilité de l'IA pour la prédiction des groupes de gènes biosynthétiques (BGC) qui peuvent encoder des métabolites secondaires. Bien que des algorithmes existent pour prédire ces BGC, ils peuvent être améliorés. Une nouvelle méthode d'apprentissage profond appelée DeepBGC a été développée, réduisant les erreurs de prédiction et permettant d'identifier de nouvelles classes de BGC. Cette approche a été appliquée à des génomes bactériens, révélant des BGC auparavant inconnus qui pourraient produire de nouveaux médicaments. DeepBGC améliore significativement l'identification *in silico* des BGC, constituant une avancée importante dans ce domaine (31, 32).

II.2. Personnalisation des Traitements Pharmaceutiques à l'aide de L'IA

L'IA révolutionne le domaine pharmaceutique en permettant une approche plus personnalisée et efficace dans le développement et l'administration des traitements. Grâce à ses capacités d'analyse avancée et d'apprentissage automatique, l'IA ouvre de nouvelles perspectives pour une médecine plus précise et adaptée aux besoins individuels des patients.

II.2.1. Segmentation des patients

L'IA facilite la segmentation des patients en analysant de grandes quantités de données médicales et génomiques pour identifier des caractéristiques communes parmi les participants. En utilisant des algorithmes d'apprentissage automatique, l'IA peut détecter des patterns complexes et identifier les profils de patients les plus susceptibles de répondre favorablement à un traitement spécifique.

Une segmentation précise des patients grâce à l'IA permet une personnalisation accrue des traitements, une meilleure adaptation aux besoins individuels, une réduction des risques d'échec clinique et une optimisation des résultats thérapeutiques. En fin de compte, cette approche contribue à accélérer le développement de nouveaux médicaments et à améliorer la qualité des soins de santé offerts aux patients (33).

II.2.2. Analyse Pharmacogénomique

La pharmacogénomique consiste à étudier les variations génétiques du métabolisme des médicaments pour personnaliser les traitements. Cette approche permet de définir des stratégies thérapeutiques sur mesure en se basant sur le profil génétique unique de chaque individu. L'introduction de l'IA dans ce domaine apporte des avantages considérables.

L'IA peut analyser de vastes ensembles de données génomiques avec une efficacité et une rapidité bien au-delà des capacités humaines. Elle identifie des schémas complexes et des facteurs de risque potentiels pour comprendre l'effet des variations génétiques sur les réponses individuelles aux médicaments. Cela ouvre la voie à une médecine plus personnalisée et préventive, améliorant ainsi les résultats thérapeutiques et l'expérience des patients.

Dans le domaine de la pharmacogénomique, l'IA facilite également la recherche de nouvelles associations génétiques avec des réponses aux médicaments, ouvrant la voie à des découvertes de biomarqueurs pertinents. Cela accélère le processus de développement de médicaments plus ciblés et efficaces, tout en réduisant les coûts et les délais associés.

Des chercheurs de l'Université de Californie à San Francisco ont employé l'intelligence artificielle afin d'anticiper l'activité biologique de petites molécules vis-à-vis de cibles médicamenteuses particulières. En tirant des enseignements de vastes bases de données moléculaires, le modèle basé sur les Graphes Neuronaux (GNN) a discerné avec précision les composés actifs adaptés à différentes cibles protéiques (34, 35).

II.2.3. L'IA pour Atténuer les effets secondaires et les interactions médicamenteuses

L'application de l'intelligence artificielle dans le domaine médical offre des opportunités significatives pour atténuer les effets secondaires des médicaments. Traditionnellement, la gestion des effets indésirables est complexe, mais l'IA apporte des améliorations notables dans ce domaine.

L'IA peut analyser de vastes ensembles de données provenant de diverses sources, y compris des études cliniques, des dossiers médicaux électroniques et des bases de données génétiques. En utilisant des algorithmes avancés, elle identifie des corrélations entre les caractéristiques

Chapitre II : Intelligence artificielle dans le domaine pharmaceutique

individuelles des patients, leurs profils génétiques et les réactions aux médicaments. Ceci permet une prédiction plus précise des risques d'effets secondaires pour chaque individu.

De plus, l'IA peut contribuer à la conception de médicaments plus personnalisés en tenant compte des variations génétiques et des caractéristiques spécifiques des patients. Cela pourrait réduire la probabilité d'effets indésirables en ajustant les posologies en fonction des besoins individuels.

En analysant de vastes ensembles de données médicales, l'IA peut recommander des combinaisons de médicaments plus sûres et plus efficaces, réduisant ainsi les risques d'interactions médicamenteuses néfastes et d'effets indésirables

Dans le suivi post-commercialisation, L'IA permet une surveillance continue et proactive des effets indésirables des médicaments en analysant en temps réel un large éventail de données cliniques, contribuant ainsi à une détection précoce et à une gestion efficace des effets secondaires, facilitant ainsi une intervention rapide.

En résumé, l'intégration de l'IA dans la pharmacologie offre des perspectives prometteuses pour minimiser les effets secondaires des médicaments en rendant les traitements plus personnalisés, prédictifs et réactifs aux besoins individuels des patients. (34, 36)

II.3. Défis associés à l'utilisation de l'IA dans le domaine pharmaceutique

L'intégration de l'IA dans le domaine pharmaceutique ouvre la voie à des avancées prometteuses, mais elle est également confrontée à divers défis. Ces défis, allant de la confidentialité des données à la validation des résultats, soulèvent des questions cruciales quant à l'adoption et à l'efficacité de l'IA dans le secteur pharmaceutique. Il est essentiel d'identifier et de comprendre ces défis pour maximiser les avantages potentiels de l'IA tout en minimisant les risques associés à son utilisation dans le développement de médicaments et la recherche pharmaceutique.

II.3.1. Fiabilité et interprétabilité des modèles d'IA

La fiabilité et l'interprétabilité des modèles d'intelligence artificielle sont des aspects cruciaux dans le domaine pharmaceutique pour garantir la transparence, la confiance et la conformité

Chapitre II : Intelligence artificielle dans le domaine pharmaceutique

réglementaire. Les modèles d'IA, en particulier ceux basés sur des réseaux de neurones profonds, peuvent être complexes et difficiles à interpréter. Comprendre comment un modèle prend des décisions est crucial dans le domaine pharmaceutique, où la sécurité et l'efficacité des médicaments doivent être clairement établies.

Les modèles d'IA, souvent perçus comme des "boîtes noires", nécessitent une explication claire de leurs décisions pour assurer leur acceptation et leur utilisation éthique. L'interprétabilité directe, qui concerne les modèles simples comme les arbres de décision, fournit une explication directe des facteurs influençant les prédictions. En revanche, l'interprétabilité indirecte nécessite des approches plus complexes pour comprendre le fonctionnement global du modèle et les décisions prises pour chaque individu.

Les entreprises pharmaceutiques doivent privilégier la simplicité et la transparence dans leurs modèles d'IA pour maintenir le contrôle sur les décisions prises par ces systèmes. L'IA explicable permet aux développeurs de mieux comprendre, actualiser et améliorer leurs modèles tout en respectant les réglementations en vigueur. En outre, elle favorise une meilleure traçabilité des données et contribue à renforcer la confiance des utilisateurs internes et externes dans les décisions prises par ces systèmes. (37-39)

II.3.2. Intégration des données hétérogènes et protection de la confidentialité

La protection des données personnelles et sensibles est une préoccupation majeure dans l'industrie pharmaceutique. Les applications d'IA doivent respecter les normes de confidentialité des données et garantir la sécurité des informations médicales.

L'IA traite souvent des données sensibles, telles que les formules chimiques et les résultats des essais cliniques. Les réglementations telles que le Règlement Général sur la Protection des Données (RGPD) imposent des obligations strictes pour garantir la confidentialité et la sécurité des données personnelles, notamment en prévenant les patients en cas de compromission de données et en mettant en place des mesures de protection adéquates.

Les entreprises doivent mettre en place des mécanismes pour traiter efficacement les données hétérogènes, en utilisant des techniques de prétraitement et d'analyse adaptées pour assurer la confidentialité et la sécurité des informations échangées.

Chapitre II : Intelligence artificielle dans le domaine pharmaceutique

En combinant une approche conforme aux réglementations en vigueur, l'utilisation de normes techniques appropriées et une gestion adéquate des données hétérogènes, les acteurs du domaine pharmaceutique peuvent renforcer la protection de la confidentialité tout en exploitant pleinement le potentiel de l'IA pour la recherche et le développement pharmaceutique. Il est crucial de garantir que l'utilisation de l'IA respecte les normes éthiques et juridiques en matière de protection des données.

Les avancées de l'IA et les données hétérogènes posent des défis supplémentaires pour la protection de la confidentialité. Toutefois, grâce à des normes techniques et des politiques de confidentialité bien conçues, il est possible de gérer ces défis et de maintenir la sécurité des données tout en tirant parti de l'IA pour améliorer les capacités analytiques et les performances des entreprises.

II.3.3. Validation réglementaire

L'intégration de l'IA dans la recherche pharmaceutique et le développement de médicaments soulève des questions concernant la validation réglementaire de ces nouvelles technologies. Les avancées de l'IA dans la découverte de nouvelles cibles de médicaments et la conception moléculaire assistée par ordinateur nécessitent une adaptation des réglementations pour garantir la sécurité, l'efficacité et l'éthique des traitements développés. Les entreprises pharmaceutiques s'efforcent d'intégrer l'IA tout en maintenant l'expertise humaine essentielle pour définir les données à analyser et superviser les processus.

Les organismes de réglementation pharmaceutique, tels que la FDA (*Food and Drug Administration*) aux États-Unis ou l'EMA (*European Medicines Agency*) en Europe, élaborent continuellement des directives pour s'adapter aux avancées technologiques, y compris l'utilisation de l'IA. Cela crée un défi pour les entreprises qui doivent démontrer la fiabilité, la robustesse et la reproductibilité des modèles d'IA, ce qui peut être un processus complexe. (40-42)

II.3.4. Perspectives de l'IA dans le domaine pharmaceutique

En conclusion, les défis associés à l'utilisation de l'IA dans le domaine pharmaceutique sont nombreux mais peuvent être surmontés avec une approche réfléchie et collaborative. L'intégration de l'IA dans la recherche, le développement et la prestation de soins pharmaceutiques offre des avantages significatifs en termes d'efficacité, de personnalisation des traitements et de découverte de nouveaux médicaments.

Cependant, cette révolution technologique n'est pas sans défis, notamment sur le plan éthique et réglementaire. La protection des données, la responsabilité des décisions algorithmiques et l'adaptation constante aux normes réglementaires sont autant de points cruciaux qui exigent une attention soutenue.

Pour surmonter ces défis, une approche équilibrée, combinant l'innovation technologique avec des cadres éthiques solides, s'avère essentielle. Les parties prenantes de l'industrie pharmaceutique doivent collaborer étroitement avec les régulateurs pour développer des directives adaptées à cette ère nouvelle, assurant ainsi un déploiement éthique et efficace de l'IA. Il est également crucial d'investir dans la formation et le développement des compétences en IA au sein du secteur pharmaceutique afin d'assurer une utilisation responsable et éthique de cette technologie. En outre, la mise en place de mécanismes de gouvernance et de surveillance efficaces est nécessaire pour garantir la sécurité des patients et la conformité aux normes éthiques et réglementaires.

En adoptant une approche proactive et collaborative, le domaine pharmaceutique peut surmonter les défis associés à l'utilisation de l'IA et tirer pleinement parti des avantages qu'elle offre pour améliorer les soins de santé, innover dans la recherche pharmaceutique et répondre aux besoins changeants des patients.

En définitive, l'évolution rapide de l'intelligence artificielle dans le secteur pharmaceutique offre des opportunités extraordinaires, mais son succès dépendra de notre capacité à naviguer avec prudence dans ce paysage complexe, en maintenant un équilibre entre l'innovation technologique et les impératifs éthiques et réglementaires.

Chapitre III : configurer une structure générale pour la création d'une intelligence artificielle dans le domaine pharmaceutique à l'aide d'une IA



Chapitre III : configurer une structure générale pour la création d'une intelligence artificielle dans le domaine pharmaceutique à l'aide d'une IA

Pour développer une IA pharmaceutique, il est crucial d'avoir une combinaison de compétences techniques et de connaissances spécifiques à ce domaine, qu'il faut développer ou rassembler dans une équipe pour mener à bien un tel projet.

III.1. Compétences et connaissances nécessaires pour la création d'une IA pharmaceutique

III.1.1. Maîtrise des fondements de l'intelligence artificielle et de l'apprentissage automatique

Comprendre les concepts de base de l'apprentissage automatique, des réseaux neuronaux, des algorithmes d'apprentissage supervisé et non supervisé, etc.

III.1.2. Connaissances en chimie et pharmacologie

Avoir une compréhension approfondie des principes de la chimie et de la pharmacologie est essentiel pour travailler dans le domaine pharmaceutique. Cela inclut la connaissance des structures moléculaires, des interactions ligand-protéine, des voies métaboliques, etc.

III.1.3. Compétences en programmation :

La capacité à programmer est essentielle pour développer des modèles d'intelligence artificielle. Vous aurez probablement besoin de compétences en Python, qui est largement utilisé dans le domaine de l'apprentissage automatique, ainsi que dans des bibliothèques telles que TensorFlow, PyTorch, Scikit-learn, etc.

III.1.4. Analyse de données et prétraitement :

Être capable de collecter, nettoyer, prétraiter et analyser des ensembles de données est une compétence importante. Cela peut impliquer l'utilisation de pandas, NumPy, ou d'autres outils d'analyse de données.

Chapitre III : configurer une structure générale pour la création d'une intelligence artificielle dans le domaine pharmaceutique à l'aide d'une IA

III.1.5. Modélisation moléculaire et simulation

Avoir des compétences dans l'utilisation de logiciels de modélisation moléculaire et de simulation est crucial pour travailler dans le domaine pharmaceutique. Des connaissances sur des outils comme Schrödinger, OpenEye ou RDKit peuvent être nécessaires.

III.1.6. Compréhension des méthodes de validation et d'évaluation :

Savoir comment évaluer les performances des modèles d'IA, y compris la validation croisée, les courbes ROC, les courbes d'apprentissage, etc., est essentiel.

III.1.7. Connaissance des réglementations pharmaceutiques et des bonnes pratiques

Comprendre les exigences réglementaires et les bonnes pratiques de l'industrie pharmaceutique est important pour assurer la conformité de votre IA avec les normes en vigueur.

III.1.8. Compétences en communication et en collaboration

Être capable de communiquer efficacement avec d'autres membres de l'équipe, y compris des experts en domaines connexes, des responsables commerciaux, des régulateurs, etc., est crucial pour le succès du projet.

III.2. Etapes générales pour développer une intelligence artificielle dans le domaine pharmaceutique

III.2.1. Définir les objectifs et la portée

Identifiez clairement les tâches spécifiques que vous souhaitez que votre IA accomplisse dans le domaine pharmaceutique. Cela pourrait inclure la conception de médicaments, l'analyse de données cliniques, la prédiction des effets secondaires etc.

- Dans notre cas on souhaite développer une IA pour la prédiction de l'activité biologique des molécules.

Chapitre III : configurer une structure générale pour la création d'une intelligence artificielle dans le domaine pharmaceutique à l'aide d'une IA

III.2.2. Collecte et prétraitement des données :

Rassemblez des ensembles de données pertinents pour l'entraînement de votre IA. Cela peut inclure des données sur les structures moléculaires, les propriétés physicochimiques des composés, les données génomiques, les profils d'expression génique, les résultats d'essais cliniques, etc. Assurez-vous de nettoyer et de prétraiter ces données pour éliminer les valeurs aberrantes et les erreurs.

Dans notre cas on doit rassembler des données qui permettront à notre modèle d'apprentissage automatique de comprendre les relations entre les caractéristiques moléculaires et l'activité biologique cible, c'est donné doivent inclure :

➤ **Structures moléculaires**

Cela peut inclure les coordonnées atomiques tridimensionnelles, les formules moléculaires, les dessins de structures, les représentations graphiques en 2D et 3D.

➤ **Descripteurs moléculaires**

Ce sont des caractéristiques numériques qui décrivent diverses propriétés moléculaires, telles que la taille, la forme, l'électronégativité, la polarité, la flexibilité, etc. Ces descripteurs peuvent être calculés à partir des structures moléculaires à l'aide de logiciels de chimie computationnelle.

➤ **Activité biologique**

Les données d'activité biologique comprennent les résultats d'essais biologiques ou biochimiques qui mesurent l'effet d'une molécule sur une cible biologique spécifique. Cela peut inclure des données d'activité inhibitrice, agoniste, antagoniste, de liaison à des récepteurs, etc.

➤ **Données de criblage virtuel**

Le criblage virtuel indique si une molécule a été identifiée comme active ou inactive lors d'un criblage à haut débit contre une cible biologique donnée.

➤ **Données chimiques et pharmacologiques**

Des données supplémentaires sur les propriétés chimiques et pharmacologiques des molécules peuvent être utiles. Cela peut inclure des données sur la solubilité, la stabilité, la toxicité, la pharmacocinétique, etc.

Chapitre III : configurer une structure générale pour la création d'une intelligence artificielle dans le domaine pharmaceutique à l'aide d'une IA

➤ **Informations sur la cible biologique**

Cela peut inclure des informations sur la structure de la cible, son rôle biologique, son importance dans la maladie, etc.

III.2.3. Choix de l'algorithme et de l'architecture

Sélectionnez les algorithmes d'apprentissage automatique et les architectures de réseau neuronal appropriés pour votre tâche spécifique.

Dans notre cas on aura besoin de :

➤ **Réseaux de neurones convolutifs (CNN)**

Ces réseaux sont efficaces pour l'analyse d'images moléculaires, telles que les représentations en deux dimensions de structures chimiques. Ils peuvent être utilisés pour extraire des caractéristiques importantes des molécules.

➤ **Réseaux de neurones récurrents (RNN)**

Les RNN sont adaptés pour modéliser des séquences de données, ce qui est utile lorsque les molécules sont représentées sous forme de séquences de caractères ou de graphes.

➤ **Réseaux de neurones profonds (DNN)**

Ces réseaux sont capables d'apprendre des représentations hiérarchiques complexes à partir de données. Ils sont souvent utilisés pour la prédiction de l'activité biologique en raison de leur capacité à capturer des relations non linéaires entre les propriétés chimiques et biologiques.

➤ **Réseaux de neurones récurrents à état caché (LSTM, GRU)**

Ces architectures sont des variantes des RNN qui peuvent mieux gérer les dépendances à long terme dans les données séquentielles, ce qui peut être important pour la prédiction de l'activité biologique.

➤ **Réseaux antagonistes génératifs (GAN)**

Les GAN peuvent être utilisés pour générer de nouvelles molécules potentiellement actives en s'appuyant sur un ensemble de données existant.

➤ **Méthodes d'apprentissage par transfert**

Plutôt que de former un modèle à partir de zéro, des techniques de transfert d'apprentissage peuvent être utilisées pour transférer des connaissances à partir de modèles pré-entraînés sur des tâches similaires.

Chapitre III : configurer une structure générale pour la création d'une intelligence artificielle dans le domaine pharmaceutique à l'aide d'une IA

➤ **Méthodes de ML traditionnelles**

Des approches telles que les machines à vecteurs de support (SVM), les forêts aléatoires, et les méthodes de régression peuvent également être utilisées, en particulier lorsque les données sont relativement petites et que la complexité du modèle doit être contrôlée.

III.2.4. Entraînement du modèle

Entraînez votre IA en utilisant les données que vous avez collectées et prétraitées. Cela implique d'ajuster les paramètres du modèle pour minimiser l'erreur ou maximiser la précision par rapport à un ensemble de données d'entraînement.

Dans le cas de notre IA on doit suivre ces étapes :

- Divisez les données en ensembles d'entraînement, de validation et de test. Cela permettra d'évaluer les performances du modèle de manière fiable.
- Entraînez le modèle sur l'ensemble d'entraînement en ajustant les poids du réseau neuronal pour minimiser une fonction de perte. Cette fonction mesure la différence entre les prédictions du modèle et les valeurs réelles d'activité biologique.
- Utilisez l'ensemble de validation pour ajuster les hyper-paramètres du modèle et éviter le sur-ajustement. Cela garantira que le modèle généralise bien aux données invisibles.

III.2.5. Validation et évaluation

Évaluez les performances de l'IA en utilisant des ensembles de données de validation et de test. Mesurez des métriques telles que la précision, le rappel, la F1-score, etc., en fonction de la tâche spécifique de votre IA.

III.2.6. Déploiement et intégration

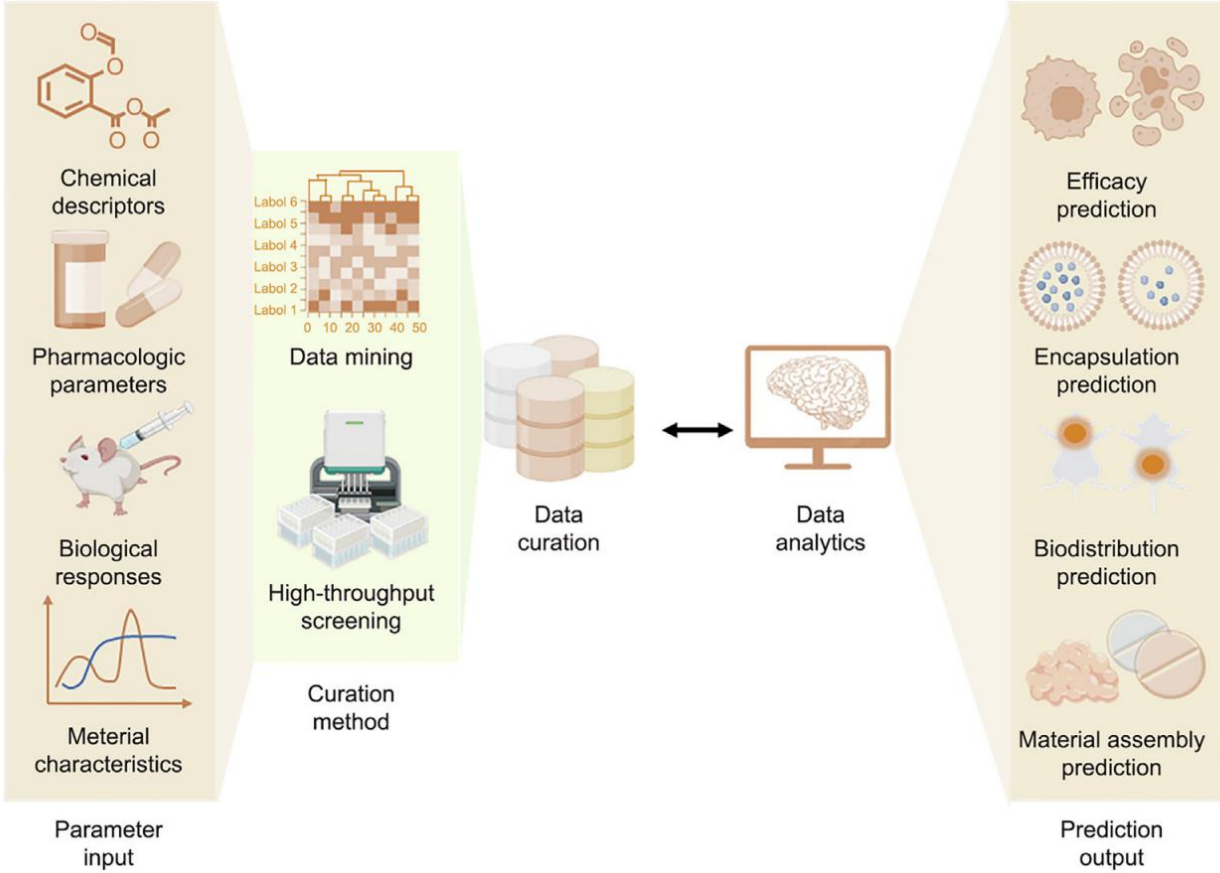
Intégrez votre IA dans des applications et des systèmes pharmaceutiques existants. Assurez-vous que votre modèle est capable de fonctionner de manière fiable et efficace dans des environnements réels.

Chapitre III : configurer une structure générale pour la création d'une intelligence artificielle dans le domaine pharmaceutique à l'aide d'une IA

III.2.7. Maintenance et amélioration

Surveillez les performances de votre IA en production et effectuez des ajustements au besoin. Continuez à collecter des données et à ré-entraîner périodiquement votre modèle pour qu'il reste précis et à jour.

Chapitre IV : partie pratique



IV.1. Contexte et justification de l'étude

IV.1.1. Contexte

L'intelligence artificielle (IA) a révolutionné de nombreux secteurs, y compris celui de la santé. Dans le domaine médical, l'IA offre des capacités avancées pour le diagnostic, le traitement personnalisé, la recherche et l'optimisation des opérations hospitalières. L'une des applications prometteuses de l'IA est la dermatologie, où des algorithmes sophistiqués peuvent analyser des images de la peau pour identifier des pathologies telles que le cancer de la peau, l'acné, et d'autres maladies cutanées. Cette technologie permet d'améliorer la précision et la rapidité des diagnostics, tout en réduisant la charge de travail des dermatologues.

IV.1.2. Justification

L'IA en dermatologie présente un potentiel significatif pour combler les lacunes actuelles en matière de diagnostic et de traitement. Malgré les avancées technologiques, il existe encore des défis à relever pour garantir la fiabilité et l'acceptabilité des systèmes d'IA. Comparer les résultats des IA dermatologiques avec ceux des dermatologues est crucial pour évaluer l'efficacité de ces technologies. Cette comparaison permet non seulement de vérifier la précision des algorithmes, mais aussi de renforcer la confiance des professionnels de santé et des patients envers ces nouvelles solutions technologiques.

L'étude vise à démontrer que les systèmes d'IA peuvent non seulement égaler, mais dans certains cas, surpasser les diagnostics des dermatologues humains en termes de rapidité et de précision. En justifiant l'intégration de l'IA dans la pratique dermatologique, cette recherche contribuera à l'amélioration des soins de santé et à la personnalisation des traitements pour les patients.

IV.2. L'utilisation d'une intelligence artificielle en médecine

IV.2.1. Objectifs

Un seul objectif primaire a été fixé :

- **Évaluer la précision des diagnostics d'IA** : Comparer les résultats des diagnostics réalisés par une IA dermatologique avec ceux de dermatologues expérimentés.

D'autres objectifs secondaires ont été fixés :

- **Analyser la fiabilité** : Identifier les cas où l'IA excelle ou échoue par rapport aux médecins dermatologues.
- **Optimiser le processus** : Étudier comment l'IA peut être intégrée dans les pratiques dermatologiques pour améliorer l'efficacité des soins.

IV.2.2. Matériel et méthodes

La méthodologie suivante a été suivie :

- **Collecte de données** : Utiliser des images cliniques de pathologies cutanées diverses pour l'analyse.
- **Entraînement de l'IA** : S'assurer que l'algorithme d'IA est formé avec un ensemble de données suffisamment vaste et diversifié.
- **Comparaison des résultats** : Évaluer les diagnostics de l'IA contre ceux fournis par des dermatologues, en se basant sur des critères de précision, de sensibilité et de spécificité.

Cette étude est essentielle pour valider les applications pratiques de l'IA dans le domaine médical et pour favoriser une adoption plus large de ces technologies innovantes.

IV.2.3. Critères d'inclusion et d'exclusion

IV.2.3.1. Critères d'inclusion

- Images cliniques de haute qualité représentant diverses pathologies cutanées (cancers de la peau, acné, pathologies virales, etc.).
- Images annotées et validées par des dermatologues certifiés.
- Patients de tous âges ayant été diagnostiqués avec des pathologies cutanées spécifiques.
- Consentement éclairé obtenu pour l'utilisation des images à des fins de recherche.
- Images claires et bien éclairées, sans obstruction ou artefacts.

IV.2.3.2. Critères d'exclusion

- Images floues, mal éclairées ou contenant des artefacts qui pourraient affecter l'analyse.
- Images sans annotation ou validation par un dermatologue certifié.

IV.2.4. Matériel

Nom de l'IA : Skinive

Skinive est une application de dermatologie assistée par intelligence artificielle conçue pour aider les utilisateurs à surveiller et à analyser leur santé cutanée. Skinive est un outil dermatologique basé sur l'IA conçu pour fournir aux utilisateurs une analyse complète de la santé de la peau. L'outil peut identifier diverses maladies et affections cutanées et fournir aux utilisateurs une évaluation personnalisée des risques, ainsi que des conseils et astuces sur la façon d'améliorer la santé de leur peau. L'outil est conçu à la fois pour un usage domestique et pour les professionnels de la santé, et est marqué CE et approuvé par les dermatologues. De plus, l'outil permet aux utilisateurs d'accéder à une carte cutanée 3D, ce qui augmente la précision et accélère le diagnostic

Fonctionnalités :

- **Analyse de la peau :** Skinive utilise des algorithmes d'IA pour analyser les images de la peau et identifier diverses conditions cutanées, telles que les névus bénins, les carcinomes basocellulaires, et l'acné.

- **Caméra en temps réel** : La version premium offre une fonctionnalité de caméra intelligente en temps réel pour une analyse immédiate.
- **Partage des résultats** : Les utilisateurs peuvent partager les résultats de l'analyse via PDF avec leur professionnel de santé.
- **Bases de données et support** : L'application comprend une base de données de conditions dermatologiques et des informations de support pour les utilisateurs et les professionnels de la santé.

Utilisation et accessibilité :

- **Disponibilité** : Skinive est disponible sur les plateformes iOS et Android, avec une version gratuite offrant des fonctionnalités de base et des options d'abonnement pour des fonctionnalités avancées.
- **Langues** : L'application est disponible en plusieurs langues, y compris l'anglais, le français, l'allemand, et le russe.

Développement et confidentialité :

- **Développeur** : L'application est développée par Skinive Holding B.V., basée aux Pays-Bas.
- **Confidentialité** : Skinive adhère à des pratiques strictes de confidentialité des données, collectant et utilisant les informations des utilisateurs conformément à leur politique de confidentialité.

Le CEO de Skinive est **Kirill Sokol**. Il est également le fondateur de l'entreprise et gère la stratégie, le produit et l'équipe. En plus de ses responsabilités chez Skinive, Kirill travaille sur de nouvelles opportunités commerciales et des partenariats avec des institutions médicales, des compagnies d'assurance et pharmaceutiques, ainsi que des développeurs de solutions IT pour la santé. De plus, il est président de la *Stichting Skinive Foundation*, une organisation caritative dédiée à la réduction des maladies de la peau.

IV.2.5. Méthode

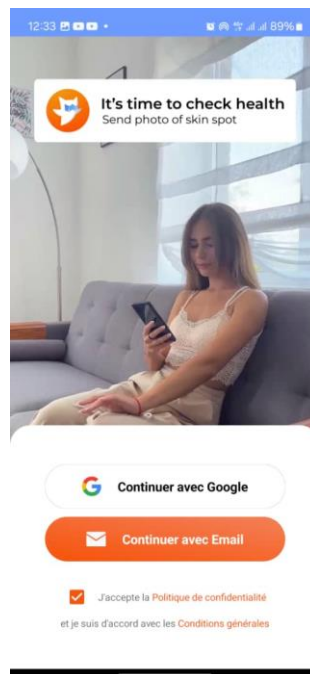
Comment accéder et utiliser l'application Skinive ?

-Pour accéder à l'application Skinive, vous pouvez la télécharger depuis les app stores correspondants à votre appareil :

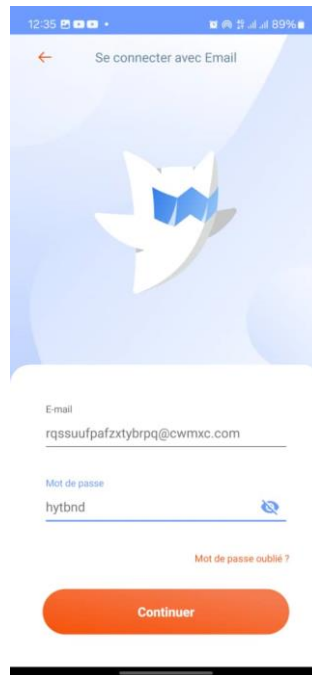
1. **Pour les appareils iOS (Apple) :** Rendez-vous sur l'App Store et recherchez "Skinive".
2. **Pour les appareils Android :** Allez sur Google Play Store et recherchez "Skinive".

-Pour utiliser l'application Skinive après l'avoir téléchargée, suivez ces étapes :

1. **Ouvrir l'application :** Lancez l'application Skinive sur votre appareil.



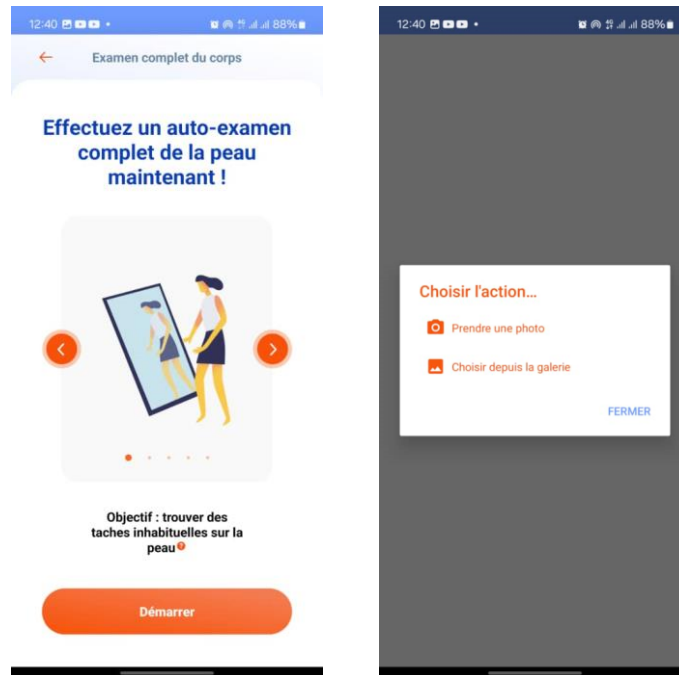
2. **Créer un compte :** Inscrivez-vous en utilisant votre adresse e-mail ou connectez-vous via un compte existant (Google, Facebook, etc.).



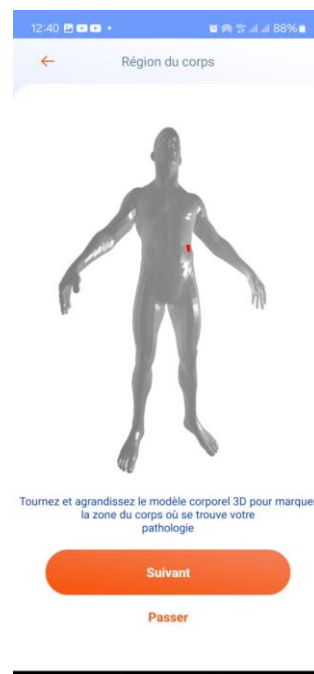
3. **Configurer votre profil** : Entrez des informations de base sur votre santé et votre peau si demandé.



4. **Prendre des photos** : Utilisez l'application pour prendre des photos (ou télécharger de la galerie) de votre peau à analyser.



5. **Sélectionner** : sélectionner la zone du corps où se trouve la pathologie sur un modèle corporel 3D.



6. **Recevoir les résultats** : Consultez les résultats et les recommandations fournies par l'application.

7. **Suivi et partage** : Partagez les résultats avec un professionnel de la santé si nécessaire et suivez les conseils de l'application pour la gestion de votre santé cutanée.

IV.2.5. Résultats

Cas N°1 : Rosacée papulo-pustuleuse chez un enfant de 2 ans (DDH)

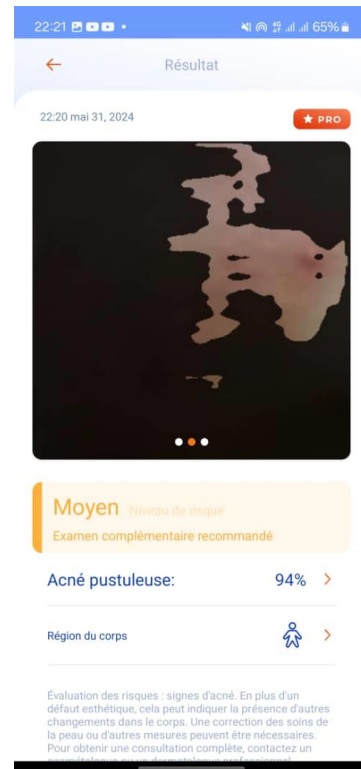
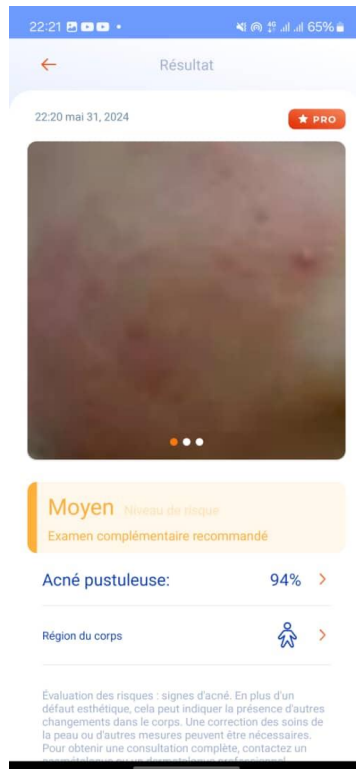


Les manifestations cutanées décrites chez les enfants semblent identiques à celles observées chez l'adulte, à l'exception de la rosacée hypertrophique jamais rapportée dans cette tranche d'âge. On décrit essentiellement des formes inflammatoires de rosacée papulo-pustuleuse, localisées aux parties convexes de la face (essentiellement les joues, mais parfois aussi le menton). Les papulo-pustules siègent habituellement sur un fond d'érythème permanent et il y a parfois de fines télangiectasies.

Résultat de Skinive

Email : rqssuufpafzxybrpq@cwmxc.com

MDP : hytbnd



Cas N°2 : Surdosage au méthotrexate suite à une erreur de posologie

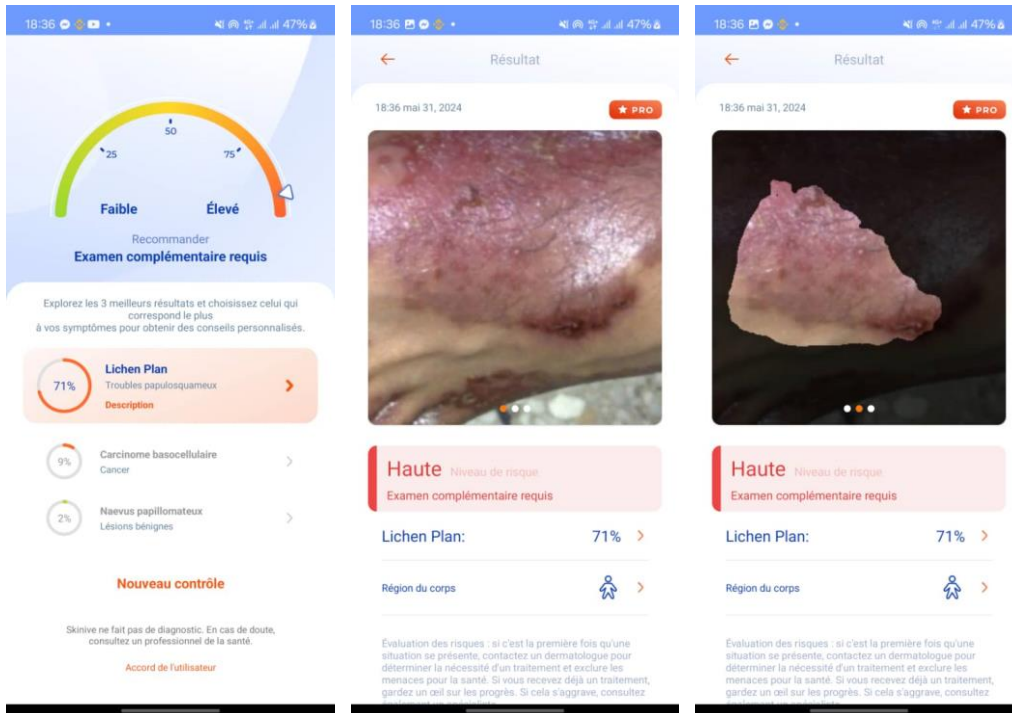


Un homme âgé de 26 ans aux antécédents de psoriasis été adressé pour des ulcérations cutanées et muqueuses apparues suite à une erreur de posologie au méthotrexate. La dose administrée était de 20 mg par semaine, mais le patient qui n'a pas reçu suffisamment de renseignements a pris 20 mg de méthotrexate en dose quotidienne. Après une dose totale de 60 mg, sont apparues des lésions érosives cutanées et muqueuses buccales, génitales et anales. L'examen ophtalmologique mettait en évidence une dystrophie maculaire. Les examens biologiques révélaient une thrombopénie, une leucopénie et un syndrome

inflammatoire. Des cristaux étaient retrouvés lors de l'examen macroscopique et microscopique des urines (43).

Résultat de Skinive :

Email: pzbligcqxkgcznsss@cazlg.com et mot de passe: lgthbn



Cas N°3 : Aphte Buccale chez un homme âgé de 26 ans

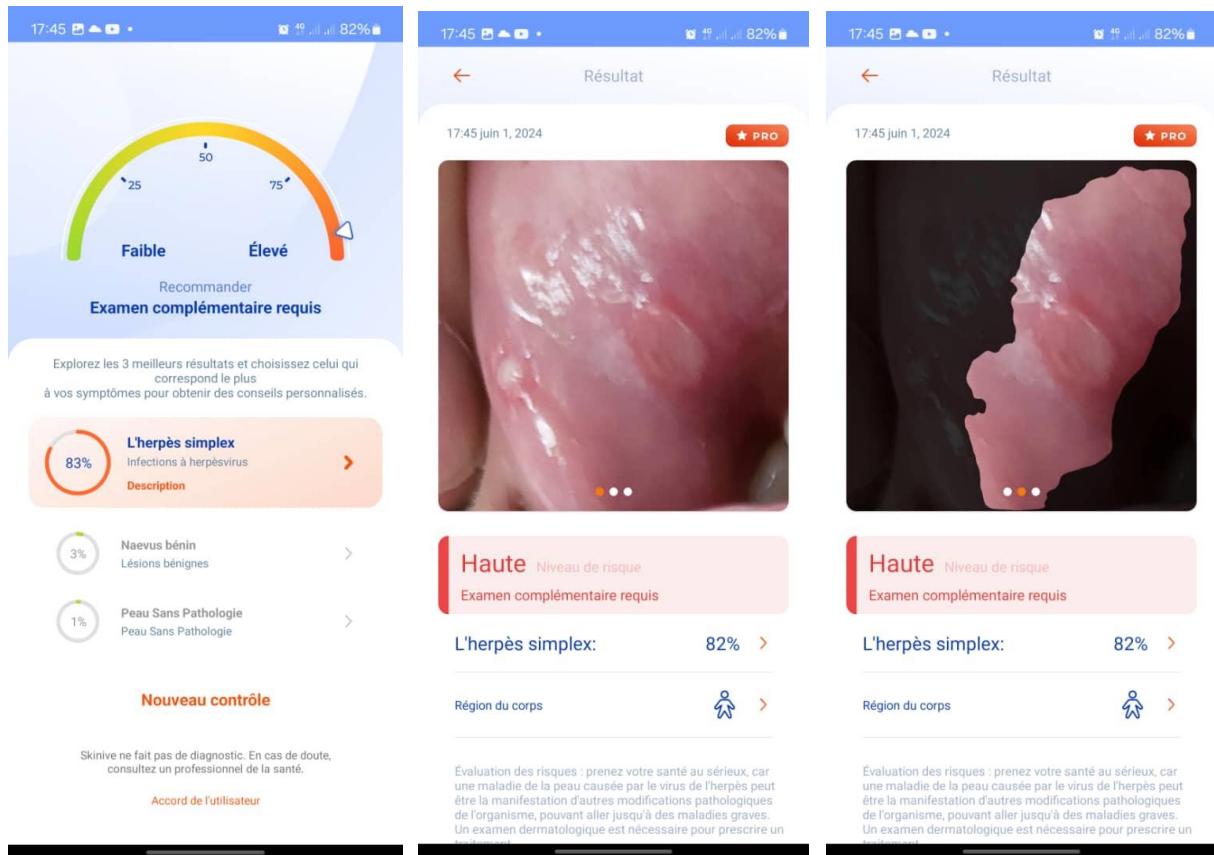


Les aphtes buccaux sont de petites lésions douloureuses qui apparaissent à l'intérieur de la bouche, sur les muqueuses buccales, les gencives ou la langue. Elles se présentent sous forme de petites ulcérations rondes ou ovales, souvent entourées d'un halo rougeâtre. Les causes exactes des aphtes ne sont pas complètement comprises, mais des facteurs comme le stress, les blessures buccales, certains aliments, et des déficiences nutritionnelles peuvent les déclencher. Bien que généralement

bénins, ils peuvent être très inconfortables et perturbent la consommation d'aliments et de boissons.

Résultat de Skinive :

Email : fripbilznyhvpsasgg@cazlp.com et mot de passe : sprthx



Cas N°4 : Rosacée chez une femme



La rosacée est certainement le résultat de l'influence de facteurs environnementaux, climatiques et peut-être infectieux, sur un terrain prédisposé génétiquement aux troubles de la microcirculation. On observe essentiellement des formes érythémateuses et papulopustuleuses, les formes œdémateuses et hypertrophiques.

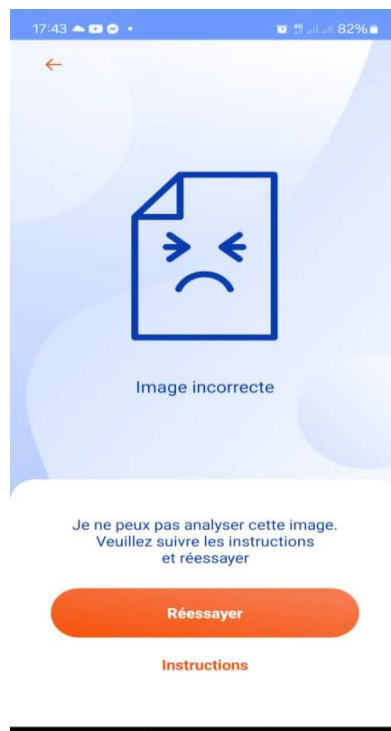
Cas N°5 : Tuberculose palatine



Une femme de 27 ans présentant des érosions douloureuses du palais évoluant depuis 9 mois. L'examen retrouvait des érosions superficielles jaunâtres reposant sur un fond érythémateux. Des adénopathies cervicales sont apparues secondairement. La patiente rapportait une dysphagie, un amaigrissement de 11 kg en 9 mois et une asthénie. L'interrogatoire retrouvait la notion de contact tuberculeux. Une première biopsie muqueuse n'était pas concluante puis une deuxième série de biopsies muqueuses confirmait le diagnostic de tuberculose en mettant en évidence le granulome

épithélioïde giganto-cellulaire avec nécrose caséuse. La patiente était traitée avec succès par thérapie antituberculeuse (44).

Résultats de Skinive pour les CAS N 4 et 5



IV.2.6. Discussion

Les résultats de notre étude montrent que les interprétations des pathologies cutanées par l'IA Skinive diffèrent significativement de celles des dermatologues humains. Plusieurs facteurs peuvent expliquer ces divergences :

- **Manque de Contexte Clinique** : Contrairement aux dermatologues, l'IA n'a pas accès aux antécédents médicaux complets des patients ni à d'autres informations cliniques contextuelles qui pourraient influencer le diagnostic. Les dermatologues peuvent poser des questions supplémentaires pour mieux comprendre les symptômes et l'historique de la maladie, ce que l'IA ne peut pas faire.
- **Entraînement et Données** : L'algorithme de l'IA est entraîné sur des images et des données annotées, ce qui peut limiter sa capacité à généraliser à des cas réels complexes. Les dermatologues, quant à eux, bénéficient de leur expérience clinique et de leur capacité à interpréter les nuances dans les présentations cliniques.
- **Spécificité vs. Sensibilité** : Il est possible que l'IA soit plus sensible à certains types de lésions cutanées, détectant des anomalies que les dermatologues pourraient juger bénignes. Inversement, elle pourrait manquer des cas où la présentation visuelle seule ne suffit pas pour un diagnostic précis.

Limites de l'IA Skinive :

- **Absence de Contexte Clinique** : Skinive analyse uniquement des images et manque de données cliniques contextuelles, telles que les antécédents médicaux et les symptômes rapportés par les patients, ce qui peut limiter la précision des diagnostics.
- **Sélection de Zones Affectées** : Actuellement, Skinive ne permet pas de sélectionner plusieurs zones affectées sur le modèle corporel 3D, ce qui limite son efficacité pour les patients présentant la même lésion cutanée à plusieurs endroits.
- **Validation Clinique Insuffisante** : Bien que Skinive utilise des ensembles de validation, une validation clinique rigoureuse et continue est nécessaire pour garantir la précision et la sécurité des diagnostics dans des contextes réels.
- **Évolution de la Technologie** : Les modèles d'IA disponibles au public peuvent manquer de robustesse face à la variété des présentations cliniques réelles, contrairement aux IA utilisés par les géants de l'industrie médicales.
- **Limitation Technologique** : Les algorithmes actuels de Skinive peuvent ne pas être en mesure de capturer toutes les nuances et variations des pathologies cutanées, surtout

dans des images de qualité suboptimale ou dans des conditions de prise de vue non idéales.

Une étude a été réalisée sur le réseau neuronal Skinive, elle a pour but de comparer 2 versions de l'IA celles de 2020 et 2021, les critères de sensibilité se base sur 3 ensembles de données : (pathologie cutanée virale, précancer + cancer et acné) contenant chacun 285 images. La spécificité a été mesurée sur un ensemble de 6 000 cas de tumeurs bénignes.

SCANNER DE L'IA PEAU
Un dermatologue IA en ligne pour vous

COMMENCER VOIR LA VIDÉO

250K+
Utilisateurs satisfaits

4.86
Note moyenne
★★★★★

Skin, nail, hair mycoses
▲ Medium risk
Les maladies fongiques de la peau peuvent réduire considérablement la qualité de vie et être contagieuses, un traitement est donc nécessaire.

HPV & Herpes
▲ High risk
L'herpès cutané est une infection virale dangereuse qui peut entraîner des complications graves si elle n'est pas traitée à temps.

Psoriasis & lichen
▲ High risk
Les affections papulosquameuses aggravent souvent l'état de santé général et provoquent des défauts esthétiques.

Perspectives d'Amélioration

- **Intégration de Données Multimodales** : L'ajout de données cliniques supplémentaires, telles que les antécédents médicaux et les réponses à des questionnaires, pourrait améliorer la précision diagnostique de l'IA.
- **Collaboration Homme-Machine** : Utiliser l'IA comme un outil d'aide au diagnostic plutôt que comme un substitut complet aux dermatologues. L'IA peut pré-trier les cas ou fournir des seconds avis rapides, permettant aux dermatologues de se concentrer sur des diagnostics plus complexes.
- **Amélioration Continue** : Enrichir les bases de données d'entraînement de l'IA avec des cas cliniques variés et réels, en incluant des annotations fournies par des dermatologues expérimentés, pour améliorer la précision et la robustesse des algorithmes.

En conclusion, bien que l'IA montre un potentiel significatif pour assister dans le diagnostic dermatologique, elle ne peut pas encore remplacer l'expertise humaine. Les futures recherches et développements doivent se concentrer sur l'intégration harmonieuse de l'IA dans les pratiques cliniques, en exploitant ses points forts tout en compensant ses faiblesses.

IV.3. L'utilisation d'une intelligence artificielle en pharmacie

L'industrie biopharmaceutique a été l'un des principaux bénéficiaires de l'intelligence artificielle, principalement parce que cette dernière contribue à rationaliser la recherche et le développement de médicaments et à réduire les coûts de recherche et le nombre de médicaments soumis à des essais cliniques.

L'industrie pharmaceutique moderne se caractérise par des cycles de développement de nouveaux médicaments longs et coûteux, ainsi que par des pressions sur les prix de la part des patients, des compagnies d'assurance et des États. Le coût typique du développement d'un nouveau médicament est estimé à 2,5 milliards de dollars, et ce processus prend en moyenne 10 à 15 ans (45).

L'IA pourrait accroître l'efficacité et réduire les coûts de découverte et de développement de médicaments dans l'industrie pharmaceutique (46).

L'IA est une combinaison d'algorithmes et de systèmes mathématiques capables d'effectuer des tâches auparavant réservées aux humains (47). La principale différence entre l'IA et les autres systèmes automatisés réside dans la capacité de l'IA à apprendre de manière indépendante et à prendre ou recommander des décisions pour les humains (48).

Dans le domaine de l'industrie pharmaceutique, les processus de l'IA sont utilisés pour optimiser la recherche lors de la création d'un nouveau médicament ou d'une autre application de médicaments déjà connus. De telles méthodes sont utilisées pour analyser des bases de données biologiques, chimiques et médicales. Les algorithmes d'IA sont utilisés pour une analyse sémantique approfondie d'informations spécialisées ou ouvertes, par exemple des articles scientifiques, des rapports de conférence, des articles de journaux, des bases de données génétiques, etc. qui pourraient constituer une source d'informations de base (49). Toute donnée non structurée sur un sujet spécifique pourrait devenir la base d'une formation et d'une recherche de relations sans intervention humaine. À leur tour, les informations traitées servent de base à l'évaluation du potentiel et de l'efficacité de la molécule obtenue (46).

Plusieurs IA ont été sélectionnées pour notre étude mais malheureusement aucune d'entre elles n'a donné l'accès aux utilisateurs directement. Il s'agit d'un domaine très sécurisé soit une enquête avec des autorisation de l'institution académique ou ils demandent carrément d'envoyer le CV pour une éventuelle opportunité de recrutement.

Vu qu'aucun essai ne peut être réalisé, nous avons fait une recherche sur les IA qui révolutionnent le domaine de la pharmacie ces dernières années.

Synthèse des recherches

Au cours des dernières décennies, l'industrie pharmaceutique a été limitée par l'ampleur de la recherche de pointe en sciences pharmaceutiques, car le développement de nouveaux médicaments est un processus long et complexe accompagné de risques et de coûts élevés. En d'autres termes, le domaine actuel de la recherche et du développement (R&D) de médicaments nécessite des améliorations significatives de la productivité pour réduire le temps de cycle et le coût du développement de médicaments (50). Des technologies telles que le *network pharmacology*, le séquençage d'ARN (RNA-seq), le criblage à haut débit (HTS) ou le criblage virtuel (VS) ont toutes accéléré la découverte de nouvelles cibles, ainsi que de nouveaux médicaments (51-56). Néanmoins, ces technologies ont rarement contribué de manière significative au processus actuel de découverte de nouveaux médicaments (57).

Les chercheurs soulignent souvent la recherche de médicaments pour les maladies rares comme l'une des applications les plus prometteuses de l'IA dans l'industrie pharmaceutique (58, 59) surtout que les sociétés pharmaceutiques sont moins susceptibles de consacrer des ressources au développement de médicaments si la demande du marché est insuffisante.

Le temps et les coûts financiers nécessaires sont plus élevés que jamais, et la forte probabilité d'erreur réduit l'intérêt des investisseurs et des entreprises pour le développement de nouveaux médicaments.

L'IA est capable de sélectionner les meilleurs candidats pour les essais cliniques. Former un profil de candidats optimaux pourrait réduire considérablement la probabilité d'échec au stade des essais cliniques, le plus coûteux de l'industrie pharmaceutique (46).

La législation actuelle dans la plupart des pays ne permet pas de prendre des décisions sans présence humaine, notamment en ce qui concerne la vie et la santé humaines, comme dans l'industrie pharmaceutique. De plus, la plupart des études médicales suggèrent que l'IA peut mieux détecter les topologies que les humains, mais la collaboration entre un humain et l'IA reste plus productive (60).

A. L'utilisation de l'IA dans la synthèse de médicaments

L'application de l'IA est particulièrement importante au stade de la synthèse des médicaments, car elle peut effectivement raccourcir le cycle de R&D de nouveaux médicaments en accélérant la découverte d'une nouvelle voie de synthèse pour les molécules cibles et en réduisant le taux d'échec de synthèse lorsque la structure de la molécule cible est connue (57).

Afin de prédire les meilleures voies de rétro-synthèse, Segler et coll.(61) ont combiné trois réseaux neuronaux différents avec toutes les réactions publiées avec la recherche arborescente MC (MCTS) (technique de recherche générale pour la prise de décision séquentielle avec de grands facteurs). Ce modèle était 30 fois plus rapide que les algorithmes conventionnels et double le nombre de molécules résolues.

Afin de prédire les conditions appropriées des réactions, Gao et coll. (62) ont proposé une IA à l'aide de dix millions d'exemples sur Reaxys et l'ont testé sur un million de réactions. Le modèle a démontré sa capacité à prédire des conditions de réaction dans 69,6 % des cas.

Coley et coll. (63) ont proposé un modèle de réseau neuronal pour prédire les résultats des réactions. Ils ont utilisé 15 000 exemples de réactions tirés de la documentation de l'Office des brevets et des marques des États-Unis (USPTO). Le modèle a atteint une précision de 71,8 %.

Le programme, Chemputer, du système robotique Chemputer proposée par Steiner et al. (64) permet de compiler des instructions de bas niveau afin de synthétiser des composés via une plateforme robotique modulaire. Il a été utilisé pour synthétiser trois composés médicamenteux – le chlorhydrate de diphenhydramine, le flufénamide et le sildénafil – avec des rendements comparables à ceux de la synthèse manuelle.

B. L'utilisation de l'IA dans la formulation et la libération de médicaments

Shamay et coll. (65) ont prédit l'auto-assemblage à l'aide de calculs de prédiction quantitative de l'assemblage de structures et de nanoparticules (QSNAP). Ils ont découvert deux descripteurs moléculaires permettant de prédire quels médicaments formeront des nanoparticules avec l'indocyanine. Cette méthode a également révélé les caractéristiques structurales moléculaires qui permettent la formation de nanoparticules : sulfate d'indocyanine, a permis d'obtenir des nanoparticules avec une efficacité d'encapsulation de 90%.

Traverso et al. (66) ont utilisé des simulations MD, ML et une plateforme de co-agrégation pour déterminer les combinaisons d'excipients nécessaires pour obtenir des nanoparticules solides

stables sans ajouter des stabilisants. En utilisant 788 principes actifs et 2686 excipients, ces chercheurs ont pu isoler 100 nanoparticules provenant de 2,1 millions de paires d'excipients. Les nanoparticules de sorafénib – glycyrrhizine et d'acide terbinafine – taurocholique ont été utilisées pour la validation du modèle *in vitro* et *in vivo*. Les résultats suggèrent que cette IA peut servir pour formulation des nanoparticules avec des taux d'encapsulation élevés et une biodisponibilité améliorée.

C. L'utilisation de l'IA dans la prédiction du devenir *in-vivo* des candidats médicaments

Une approche DL composée d'une architecture classique de réseau neuronal à rétropropagation (BPNN) et une approche répétée de double validation croisée (rdCV) ont été combinées pour estimer la pénétration de la barrière hémato-encéphalique (67).

Wang et al. (68) ont développé un modèle DL pour prédire les métabolites des médicaments avec une précision supérieure à la méthode populaire basée sur des règles de génération systématique de métabolites potentiels (SyGMa).

Divers logiciels ADME et serveurs Web conviviaux ont été développés pour prédire les propriétés ADME des molécules : ADMETlab 2.0 (69) est basé sur un cadre d'attention graphique multitâche (MGA) et peut prédire plusieurs propriétés ADME des médicaments. Il contient un total de 88 paramètres pertinents avec 23 propriétés ADME, 27 paramètres de toxicité et huit règles toxicophores. La plupart des données utilisées provenaient des données de bioactivité de la base de données en libre accès, de la littérature pertinente et d'un logiciel de prévision de la toxicité (outil logiciel d'estimation de la toxicité (TEST)).

D. L'utilisation de l'IA dans la conception des essais cliniques

Le taux d'échec des essais cliniques est élevé, environ 90 % des candidats médicaments étant éliminés dans les essais cliniques (70), où chaque essai clinique échoué coûte environ 0,8 à 1,4 milliards USD. Pour surmonter ce problème des IA ont été développées pour améliorer le recrutement, le suivi des patients et optimiser le dosage (71).

Pour résoudre améliorer le recrutement, l'IA peut être utilisée pour :

- Proposer les meilleurs composés pour les essais cliniques (72);
- Une meilleure sélection des patients en explorant l'association des biomarqueurs des patients avec des indications externes et prédire la réponse probable au traitement des patients, ce qui peut aider à dépister les patients ayant un succès clinique élevé (73, 74).

- Réduire l'hétérogénéité de la population de patients en utilisant l'e-phénotypage (75)
- Faciliter la sélection des patients grâce à un enrichissement pronostique ou prédictif (76, 77).
- D'utiliser des cibles mieux validées (pour diminuer le nombre d'échecs dus à l'efficacité, en particulier dans les phases cliniques II et III, qui ont un impact profond sur la réussite globale du projet et dans lesquelles la validation des cibles n'est probablement pas encore là où on le souhaiterait être (78).

Le suivi des patients dans les essais cliniques est également un processus critique. L'IA peut être utilisée pour automatiser et personnaliser la surveillance des patients en temps réel et améliorant les problèmes d'observance des médicaments (57, 79). AiCure – une nouvelle plateforme d'IA utilisée pour mesurer l'observance des médicaments – a montré une amélioration de 25 % de l'observance par rapport aux thérapies traditionnelles dans un essai de phase II sur la schizophrénie (80).

L'IA a été également utilisée pour optimiser le dosage afin de réduire les effets indésirables, d'améliorer la sécurité des protocoles d'essai (81).

La plateforme « inClinico » développée par la société « Insilico Medicine » permet une prédiction multimodale basée sur les données pour la probabilité de succès (PoS) d'un seul essai clinique (57).

Link RecruitmentTM est une plateforme de la société LinkDoc fondée sur la plus grande base de données médicales de Chine, les données pertinentes sont extraites des documents d'essais cliniques afin d'évaluer le traitement approprié pour les patients (57).

E. L'utilisation de l'IA dans la surveillance post-commercialisation et prévision du pronostic

L'exploration des dossiers de santé électroniques est une source de données importante pour les applications d'IA dans la surveillance post-commercialisation.

Morel et coll. (82) ont utilisé le modèle évolutif de séries de cas d'autocontrôle (SCCS) en se basant sur dossiers de santé électroniques permettant de prédire les caractéristiques longitudinales, Convolutional SCCS (ConvSCCS). Les résultats ont montré une amélioration significative de la vitesse de calcul et de la précision de la méthode et ont permis la détection des effets indésirables des médicaments dans une cohorte de patients diabétiques.

Lorberbaum et coll. (83) ont utilisé un algorithme basé sur un réseau impliquant l'assemblage modulaire de sous-réseaux de sécurité des médicaments (MADSS). La validation de cet algorithme a été réalisée par une combinaison des modèles de pharmacologie systémique avec des statistiques de pharmacovigilance. Cette IA a permis l'amélioration de la prédiction des effets indésirables de quatre médicaments.

F. L'utilisation de l'IA pour développer des médicaments contre COVID-19

Au cours de la pandémie de COVID-19 la réutilisation des médicaments grâce à l'IA a été étudiée pour trouver des médicaments bénéfiques pour stopper la COVID-19. Sweta Mohanty et al ont d'abord étudiée et analysée à partir de diverses sources telles que les bases de données Scopus, Google Scholar, PubMed et IEEE Xplore les documents publiés en utilisant les termes de recherche « COVID-19 », « AI 0 » et « Drug Repurposing ». Une IA a été mise en œuvre dans la conception sur le terrain via la génération du modèle de prédiction d'apprentissage et effectue un filtrage virtuel rapide pour afficher avec précision le résultat. Grâce à une stratégie de repositionnement des médicaments, cette IA a permis de détecter rapidement les médicaments capables de lutter contre la COVID-19. La réutilisation des médicaments basée sur l'IA est une approche moins chère, plus rapide et efficace et peut minimiser les échecs des essais cliniques. Grâce à la collaboration de l'IA avec la pharmacologie, l'efficacité de la réutilisation des médicaments peut s'améliorer considérablement (84).

Plusieurs AI ont été développées et utilisées pour trouver des solutions contre la COVID-19 :

- Benevolent AI : L'organisation, basée au Royaume-Uni, utilise l'IA pour réutiliser tous les médicaments actuellement approuvés contre le nouveau coronavirus (85).
- Innoplexus : La société indo-allemande a commencé par évaluer la capacité de traitements comme l'hydroxychloroquine et le Remdesivir contre la COVID-19 en utilisant les informations provenant des patients. Leur stade d'IA proposait une viabilité plus élevée pour un mélange de chloroquine et de tocilizumab, de chloroquine et de remdesivir, et le troisième mélange d'hydroxychloroquine avec de la clarithromycine ou du plérixafor (86).
- Deargen : La firme coréenne, en collaboration avec l'Université Dankook, a anticipé l'action des médicaments antiviraux disponibles contre le nouveau coronavirus. L'IA a recommandé que l'atazanavir ait une efficacité élevée. Abbvie, en 2020, a muni une étude préliminaire avec ses antiviraux comparatifs contre le VIH, le lopinavir et le ritonavir (86).

- Gero : La société singapourienne a identifié 9 médicaments grâce à sa plateforme d'IA. Parmi les principales molécules décelées être efficaces contre la COVID-19 on cite le niclosamide et le nitazoxanide (86).
- Cyclica : sur sa plateforme de réutilisation de médicaments basée sur l'IA, MatchMaker, la société canadienne a annoncé, en 2020, le criblage de 6 700 molécules approuvées par la FDA ou au moins en phase I d'essais cliniques. Ils se sont associés à l'Institut chinois de matière médicale pour une évaluation in vitro et in vivo (86).
- Healx : La société basée au Royaume-Uni utilise a pu découvrir des combinaisons bi et tri de médicaments approuvés contre le virus sur sa plateforme d'AI. Cette société spécialisée dans les maladies rares, a exploité les données expliquant pourquoi la mortalité est plus élevée en cas de comorbidités des systèmes respiratoire et cardiaque (86).
- VantAI : La société Américaine a utilisé une approche de biologie systémique pour comprendre l'interaction entre les interactions des protéines virales avec éventuellement plus de 500 protéines humaines au cours de l'infection. La société a découvert plusieurs voies cibles prometteuses, par exemple le blocage de l'activité du virus dans l'appareil de Golgi (86).

Bibliographie

1. INSERM. Intelligence artificielle et santé 2024 [01/02/2024]. Available from: <https://www.inserm.fr/dossier/intelligence-artificielle-et-sante/>.
2. Muller O, Abbe E, Mach F. L'intelligence artificielle et la cardiologie : la machine est lancée. 2022.
3. Besiaud C. Exploiter l'intelligence artificielle pour le diagnostic précoce des maladies: coalitioncovid.org; 2023 [28 avril 2023]. Available from: <https://www.coalitioncovid.org/exploiter-intelligence-artificielle/>.
4. Stambouli OB, Djellouli N, Mahi I, Aboubaker K, Benchachou R, editors. Lymphome T/NK de type nasal et neurosyphilis: à propos d'un cas. Annales de Dermatologie et de Vénérologie; 2018: Elsevier.
5. Besiaud C. Exploiter l'intelligence artificielle pour le diagnostic précoce des maladies 2023 [04/02/2024]. Available from: <https://www.coalitioncovid.org/exploiter-intelligence-artificielle/>.
6. L'intelligence artificielle pour détecter la maladie d'Alzheimer 2023 [04/02/2024]. Available from: <https://www.lefigaro.fr/actualite-france/l-intelligence-artificielle-pour-detecter-la-maladie-d-alzheimer-20230904>.
7. CARPEM. INTELLIGENCE ARTIFICIELLE ET MÉDECINE PERSONNALISÉE: CARPEM; 2021 [04/02/2024]. Available from: <https://carpem.fr/intelligence-artificielle-et-medecine-personnalisee/>.
8. médical fplr. L'intelligence artificielle au service de la santé. FRMORG. 2021.
9. Houten Hv. La force de la prédiction : comment l'IA peut aider les hôpitaux à prévoir et gérer les flux de patients. philips. 2021.
10. Benoit M-C. L'intelligence artificielle en soutien aux cardiologues pour la détection précoce de l'arythmie cardiaque. 2021.
11. Santélog Éd. DERMATO : L'IA pour diagnostiquer les maladies de peau. Journal of Investigative Dermatology 2020.
12. Dermatologues-Vénérologues SNd. Comment l'intelligence artificielle peut aider les dermatologues à détecter les maladies de la peau ? : Syndicat National des Dermatologues-Vénérologues; 2024 [07/02/2024]. Available from: <https://dermatos.fr/comment-lintelligence-artificielle-peut-aider-les-dermatologues-a-detecter-les-maladies-de-la-peau/>.
13. Raimbault L. L'INTELLIGENCE ARTIFICIELLE, NOTRE FUTUR PSYCHIATRE ? Pop'Sciences - Université de Lyon. 2023.
14. Gaire C. COMMENT L'IA EST DEVENUE L'OUTIL INDISPENSABLE DES RADIOLOGUES. BFM BUSINESS. 2023.
15. Haidar-ahmad H, Salih MAH, Luangrath A, Sede T, Zugaj L. Intelligence Artificielle et Imagerie Médicale: Bibliothèque des travaux Master; 2022 [04/02/2024]. Available from: <https://travaux.master.utc.fr/formations-master/ingenierie-de-la-sante/ids122/>.
16. Paris Aho. L'intelligence artificielle s'installe en imagerie médicale: American hospital of Paris; 2022 [06/02/2024]. Available from: <https://www.american-hospital.org/nous-soutenir/les-projets/lintelligence-artificielle-sinstalle-en-imagerie-medicale>.

17. DSIH. La Société française de radiologie pour une utilisation raisonnée de l'IA. DSIH. 2023.
18. Académie de pharmacie i, médicament intelligent. La nouvelle intelligence du médicament » Rencontre entre intelligence artificielle et sciences du médicament. biotechinfo. 2023.
19. Belot L. Comment l'intelligence artificielle modifie les pratiques médicales. le monde. 2023.
20. Chollat-Namy C. Intelligence artificielle et sante prédictive : l'exemple de l'Immunoscore® dans le cancer du côlon. Hal. 2021.
21. Galon J, Franck P, Marincola FM, Angell H. Cancer classification using the Immunoscore: A worldwide task force. journal of translational medicine. 2022.
22. Sénégas-Balas F. Immunoscore : un test pour améliorer la prise en charge et le traitement du cancer du côlon. Inserm. 2018.
23. AI b. benevolent AI: benevolent AI; 2020 [03/03/2024]. Available from: <https://www.benevolent.com/>.
24. openeye. openeye: openeye; 2022 [03/03/2024]. Available from: <https://www.eyesopen.com/>.
25. aqemia. aqemia: aqemia.com; 2019 [04/03/2024]. Available from: <https://www.aqemia.com/>.
26. Bausson É. L'intelligence artificielle, un moteur dans la recherche en chimie ! mediachimie. 2023.
27. Ker E. De l'IA dans la recherche des nouveaux médicaments. allnews. 2022.
28. Chaix B. Impact de l'intelligence artificielle dans la recherche clinique et la collecte de données en vie réelle. ResearchGate. 2018.
29. Akinori Sato TM, Swarit Jasial, Kimito Funatsu Comparaison de la capacité prédictive des modèles QSAR/QSPR à l'aide de représentations moléculaires 2D et 3D. PUBMED. 2021.
30. Gary Liu DBC, Khushi Rathod, Kyle Swanson, Wengong Jin, Jody C Mohammed, Anush Chiappino-Pepé, Saad A Syed, Meghan Fragis, Kenneth Rachwalski, Jacob Magolan, Michael G Surette, Brian K Coombes, Tommi Jaakkola, Régina Barzilay, James J Collins, Jonathan M. Stokes Découverte guidée par l'apprentissage profond d'un antibiotique ciblant *Acinetobacter baumannii*. PUBMED. 2023.
31. Marc Rottig MHM, Kai Blin, Tilmann Weber, Christian Rausch, Olivier Kohlbacher. NRPSpredictor2 - un serveur Web pour prédire la spécificité du domaine d'adénylation NRPS. PUBMED. 2011.
32. Geoffrey D Hannigan DP, Andrej Palicka, Jindrich Soukup, Ondrej Klempir, Léna Rampula, Jindrich Durcak, Michael Wurst, Jakub Kotowski, Dan Chang, Rurun Wang, Grazia Piizzi, Gergély Temesi, Daria J. Hazuda, Christopher H Woelk, Danny A. Bitton Une stratégie d'exploration du génome par apprentissage profond pour la prédiction des groupes de gènes biosynthétiques. Pubmed. 2019.
33. Globant. Pharma AI : le rôle de l'intelligence artificielle dans la médecine du futur. Globant. 2022.
34. Calmedica. Guide de l'intelligence artificielle dans le domaine de la santé. calmedica. 2021.

35. Eliaçık E. L'IA générative déclenche une renaissance de la découverte de médicaments. *dataconomy*. 2023.
36. Jay ACeN. Contre les effets indésirables, une IA pour personnaliser les doses de médicaments. *la tribune*. 2019.
37. Annabelle Blangero SM. Modèles d'IA et interprétabilité : privilégier la simplicité pour garder le contrôle *LeMagIT*. 2022.
38. Alteryx. Le guide incontournable de l'IA explicable (XAI). Alteryx. 2022.
39. Merindol H. L'importance de l'explicabilité dans les systèmes d'IA : Un guide complet pour les décideurs. *Golemai*. 2023.
40. platonai. Les 4 principaux défis liés au déploiement de l'IA dans les chaînes d'approvisionnement de la santé et de l'industrie pharmaceutique – L'effet réseau. *platonai*. 2024.
41. Wittkop J. Qu'est-ce que la confidentialité des données ? . *proofpoint*. 2021.
42. Ralhan K. Le rôle émergent de l'IA dans la recherche de médicaments à base de produits naturels. *CAS*. 2024.
43. Stambouli OB, Mahi I, editors. Surdosage au méthotrexate suite à une erreur de posologie: à propos d'un cas. *Annales de Dermatologie et de Vénérologie*; 2018: Elsevier.
44. Mahi I, Stambouli OB. Tuberculose palatine: une localisation rare à ne pas méconnaître. *65ème Congrès de la SFCO*. 2017:02011.
45. Mignani S, Huber S, Tomás H, Rodrigues J, Majoral J-P. Why and how have drug discovery strategies in pharma changed? What are the new mindsets? *Drug discovery today*. 2016;21(2):239-49.
46. Kulkov I. The role of artificial intelligence in business transformation: A case of pharmaceutical companies. *Technology in Society*. 2021;66:101629.
47. Jackson PC. Introduction to artificial intelligence: Courier Dover Publications; 2019.
48. Szolovits P. Artificial intelligence and medicine. *Artificial intelligence in medicine*: Routledge; 2019. p. 1-19.
49. Kumar SH, Talasila D, Gowrav M, Gangadharappa H. Adaptations of Pharma 4.0 from Industry 4.0. *Drug Invention Today*. 2020;14(3).
50. Moore TJ, Zhang H, Anderson G, Alexander GC. Estimated costs of pivotal trials for novel therapeutic agents approved by the US Food and Drug Administration, 2015-2016. *JAMA internal medicine*. 2018;178(11):1451-7.
51. Hopkins AL. Network pharmacology: the next paradigm in drug discovery. *Nature chemical biology*. 2008;4(11):682-90.
52. Wang Z, Gerstein M, Snyder M. RNA-Seq: a revolutionary tool for transcriptomics. *Nature reviews genetics*. 2009;10(1):57-63.
53. Giacomotto J, Ségalat L. High-throughput screening and small animal models, where are we? *British journal of pharmacology*. 2010;160(2):204-16.
54. Mayr LM, Bojanic D. Novel trends in high-throughput screening. *Current opinion in pharmacology*. 2009;9(5):580-8.
55. Shoichet BK. Virtual screening of chemical libraries. *Nature*. 2004;432(7019):862-5.
56. Kitchen DB, Decornez H, Furr JR, Bajorath J. Docking and scoring in virtual screening for drug discovery: methods and applications. *Nature reviews Drug discovery*. 2004;3(11):935-49.

57. Lu M, Yin J, Zhu Q, Lin G, Mou M, Liu F, et al. Artificial intelligence in pharmaceutical sciences. *Engineering*. 2023.
58. Colombo S. Applications of artificial intelligence in drug delivery and pharmaceutical development. *Artificial intelligence in healthcare: Elsevier*; 2020. p. 85-116.
59. Southall NT, Natarajan M, Lau LPL, Jonker AH, Deprez B, Guilliams T, et al. The use or generation of biomedical data and existing medicines to discover and establish new treatments for patients with rare diseases—recommendations of the irdirc data mining and repurposing task force. *Orphanet Journal of Rare Diseases*. 2019;14:1-8.
60. Lundberg SM, Erion G, Chen H, DeGrave A, Prutkin JM, Nair B, et al. From local explanations to global understanding with explainable AI for trees. *Nature machine intelligence*. 2020;2(1):56-67.
61. Segler MH, Preuss M, Waller MP. Planning chemical syntheses with deep neural networks and symbolic AI. *Nature*. 2018;555(7698):604-10.
62. Gao H, Struble TJ, Coley CW, Wang Y, Green WH, Jensen KF. Using machine learning to predict suitable conditions for organic reactions. *ACS central science*. 2018;4(11):1465-76.
63. Coley CW, Barzilay R, Jaakkola TS, Green WH, Jensen KF. Prediction of organic reaction outcomes using machine learning. *ACS central science*. 2017;3(5):434-43.
64. Steiner S, Wolf J, Glatzel S, Andreou A, Granda JM, Keenan G, et al. Organic synthesis in a modular robotic system driven by a chemical programming language. *Science*. 2019;363(6423):eaav2211.
65. Shamay Y, Shah J, Işık M, Mizrahi A, Leibold J, Tschaharganeh DF, et al. Quantitative self-assembly prediction yields targeted nanomedicines. *Nature materials*. 2018;17(4):361-8.
66. Reker D, Rybakova Y, Kirtane AR, Cao R, Yang JW, Navamajiti N, et al. Computationally guided high-throughput design of self-assembling drug nanoparticles. *Nature nanotechnology*. 2021;16(6):725-33.
67. Radchenko EV, Dyabina AS, Palyulin VA. Towards deep neural network models for the prediction of the blood–brain barrier permeability for diverse organic compounds. *Molecules*. 2020;25(24):5901.
68. Wang D, Liu W, Shen Z, Jiang L, Wang J, Li S, et al. Deep learning based drug metabolites prediction. *Frontiers in Pharmacology*. 2020;10:501593.
69. Xiong G, Wu Z, Yi J, Fu L, Yang Z, Hsieh C, et al. ADMETlab 2.0: an integrated online platform for accurate and comprehensive predictions of ADMET properties. *Nucleic acids research*. 2021;49(W1):W5-W14.
70. Hay M, Thomas DW, Craighead JL, Economides C, Rosenthal J. Clinical development success rates for investigational drugs. *Nature biotechnology*. 2014;32(1):40-51.
71. Harrer S, Shah P, Antony B, Hu J. Artificial intelligence for clinical trial design. *Trends in pharmacological sciences*. 2019;40(8):577-91.
72. Bender A, Cortés-Ciriano I. Artificial intelligence in drug discovery: what is realistic, what are illusions? Part 1: Ways to make an impact, and why we are not there yet. *Drug discovery today*. 2021;26(2):511-24.
73. Perez-Gracia JL, Sanmamed MF, Bosch A, Patiño-Garcia A, Schalper KA, Segura V, et al. Strategies to design clinical studies to identify predictive biomarkers in cancer research. *Cancer Treatment Reviews*. 2017;53:79-97.

74. Wong CH, Siah KW, Lo AW. Estimation of clinical trial success rates and related parameters. *Biostatistics*. 2019;20(2):273-86.
75. Banda JM, Seneviratne M, Hernandez-Boussard T, Shah NH. Advances in electronic phenotyping: from rule-based definitions to machine learning models. *Annual review of biomedical data science*. 2018;1:53-68.
76. Palmqvist S, Insel PS, Zetterberg H, Blennow K, Brix B, Stomrud E, et al. Accurate risk estimation of β -amyloid positivity to identify prodromal Alzheimer's disease: cross-validation study of practical algorithms. *Alzheimer's & Dementia*. 2019;15(2):194-204.
77. Romero K, Ito K, Rogers J, Polhamus D, Qiu R, Stephenson D, et al. The future is now: model-based clinical trial design for Alzheimer's disease. *Clinical Pharmacology & Therapeutics*. 2015;97(3):210-4.
78. Lin A, Giuliano CJ, Palladino A, John KM, Abramowicz C, Yuan ML, et al. Off-target toxicity is a common mechanism of action of cancer drugs undergoing clinical trials. *Science translational medicine*. 2019;11(509):eaaw8412.
79. Woo M. An AI boost for clinical trials. *Nature*. 2019;573(7775):S100-S.
80. Bain EE, Shafner L, Walling DP, Othman AA, Chuang-Stein C, Hinkle J, et al. Use of a novel artificial intelligence platform on mobile devices to assess dosing compliance in a phase 2 clinical trial in subjects with schizophrenia. *JMIR mHealth and uHealth*. 2017;5(2):e7030.
81. Yauney G, Shah P, editors. Reinforcement learning with action-derived rewards for chemotherapy and clinical trial dosing regimen selection. *Machine Learning for Healthcare Conference*; 2018: PMLR.
82. Morel M, Bacry E, Gaïffas S, Guilloux A, Leroy F. ConvSCCS: convolutional self-controlled case series model for lagged adverse event detection. *Biostatistics*. 2020;21(4):758-74.
83. Lorberbaum T, Nasir M, Keiser MJ, Vilar S, Hripesak G, Tatonetti NP. Systems pharmacology augments drug safety surveillance. *Clinical Pharmacology & Therapeutics*. 2015;97(2):151-8.
84. Mohanty S, Rashid MHA, Mridul M, Mohanty C, Swayamsiddha S. Application of Artificial Intelligence in COVID-19 drug repurposing. *Diabetes & Metabolic Syndrome: Clinical Research & Reviews*. 2020;14(5):1027-31.
85. Mak K-K, Pichika MR. Artificial intelligence in drug development: present status and future prospects. *Drug discovery today*. 2019;24(3):773-80.
86. Amandeep S. How AI is fighting COVID-19: the companies using intelligent tech to find new drugs.: *Pharmaphorum* 2020 [29/03/2024]. Available from: <https://pharmaphorum.com/viewsanalysis-digital/how-ai-is-fighting-covid-19-the-companies-using-intelligent-tech-to-find-new-drugs>.

Récapitulatif de Mémoire : L'intelligence artificielle dans le domaine médical

Ce mémoire examine l'intégration de l'intelligence artificielle (IA) dans le secteur médical, en mettant en lumière ses applications, ses avantages et ses défis.

Partie Théorique

La première section du mémoire offre une définition de l'IA et explore son historique. Elle se concentre ensuite sur l'intérêt de l'IA dans le domaine médical, en détaillant ses applications pour :

- Le diagnostic précoce et précis
- Les traitements personnalisés
- La recherche médicale
- L'imagerie médicale
- La prévention des maladies
- L'optimisation des opérations hospitalières

L'impact de l'IA dans diverses spécialités médicales, telles que la cardiologie, la dermatologie, la psychiatrie, la radiologie et l'immunologie, est également analysé. De plus, l'IA dans le domaine pharmaceutique est étudiée, notamment pour la découverte de médicaments et la personnalisation des traitements. Les défis associés à l'utilisation de l'IA dans ce domaine, comme la fiabilité des modèles et l'intégration des données, sont également abordés.

Partie Pratique

La première section de la partie pratique compare les résultats d'une IA dermatologique avec ceux des dermatologues. Cette comparaison révèle des divergences d'interprétation et souligne les limites des modèles d'IA accessibles au public, en comparaison avec ceux utilisés par des institutions spécialisées comme BenevolentAI ou OpenEye.

La seconde section explore l'utilisation de l'IA en pharmacie, à travers une recherche sur les IA qui ont révolutionné ce domaine ces dernières années. Cette recherche met en avant les technologies récentes et leur impact sur la découverte et la personnalisation des traitements pharmaceutiques, en l'absence d'essais cliniques directs.

Conclusion

Le mémoire conclut en soulignant l'importance de l'IA dans le domaine médical et pharmaceutique, tout en reconnaissant les défis et les améliorations nécessaires pour maximiser son efficacité. La recherche montre que bien que l'IA ait un potentiel énorme, des efforts supplémentaires sont nécessaires pour améliorer la précision des algorithmes et intégrer des données contextuelles pour une meilleure performance et fiabilité des systèmes d'IA

Résumé

Ce mémoire explore l'utilisation de l'intelligence artificielle (IA) dans le domaine médical et pharmaceutique. La partie théorique aborde la définition de l'IA, son rôle en médecine et son impact sur la découverte et la personnalisation des traitements pharmaceutiques. La partie pratique comprend deux sections : une comparaison entre les résultats d'une IA dermatologique et ceux de dermatologues, et une recherche sur les IA révolutionnaires en pharmacie. Les conclusions soulignent les avantages et les défis de l'IA, ainsi que les améliorations nécessaires pour maximiser son efficacité.

Mots clés : Intelligence artificielle, médecine, pharmacie, diagnostic, recherche.

Abstract

This thesis explores the application of artificial intelligence (AI) in the medical and pharmaceutical fields. The theoretical part discusses the definition of AI, its role in medicine, and its impact on drug discovery and personalized treatments. The practical part includes a comparison between the results of a dermatological AI and dermatologists, as well as research on AI advancements in pharmacy. The conclusions highlight the benefits and challenges of AI and the necessary improvements to maximize its effectiveness.

Keywords: Artificial intelligence, medicine, pharmacy, diagnosis, research.

ملخص

يستكشف هذا البحث تطبيقات الذكاء الاصطناعي في المجالات الطبية والصيدلانية. الجزء النظري يغطي تعريف الذكاء الاصطناعي ودوره في الطب وتأثيره على اكتشاف الأدوية والعلاجات الشخصية. الجزء العملي ينقسم إلى قسمين: مقارنة بين نتائج الذكاء الاصطناعي في الأمراض الجلدية ونتائج أطباء الأمراض الجلدية، وبحث حول التقدم في الذكاء الاصطناعي في الصيدلة. الخاتمة تسلط الضوء على فوائد وتحديات الذكاء الاصطناعي والتحسينات اللازمة لتعزيز فعاليته.

الكلمات المفتاحية: الذكاء الاصطناعي، الطب، الصيدلة، التشخيص، البحث.