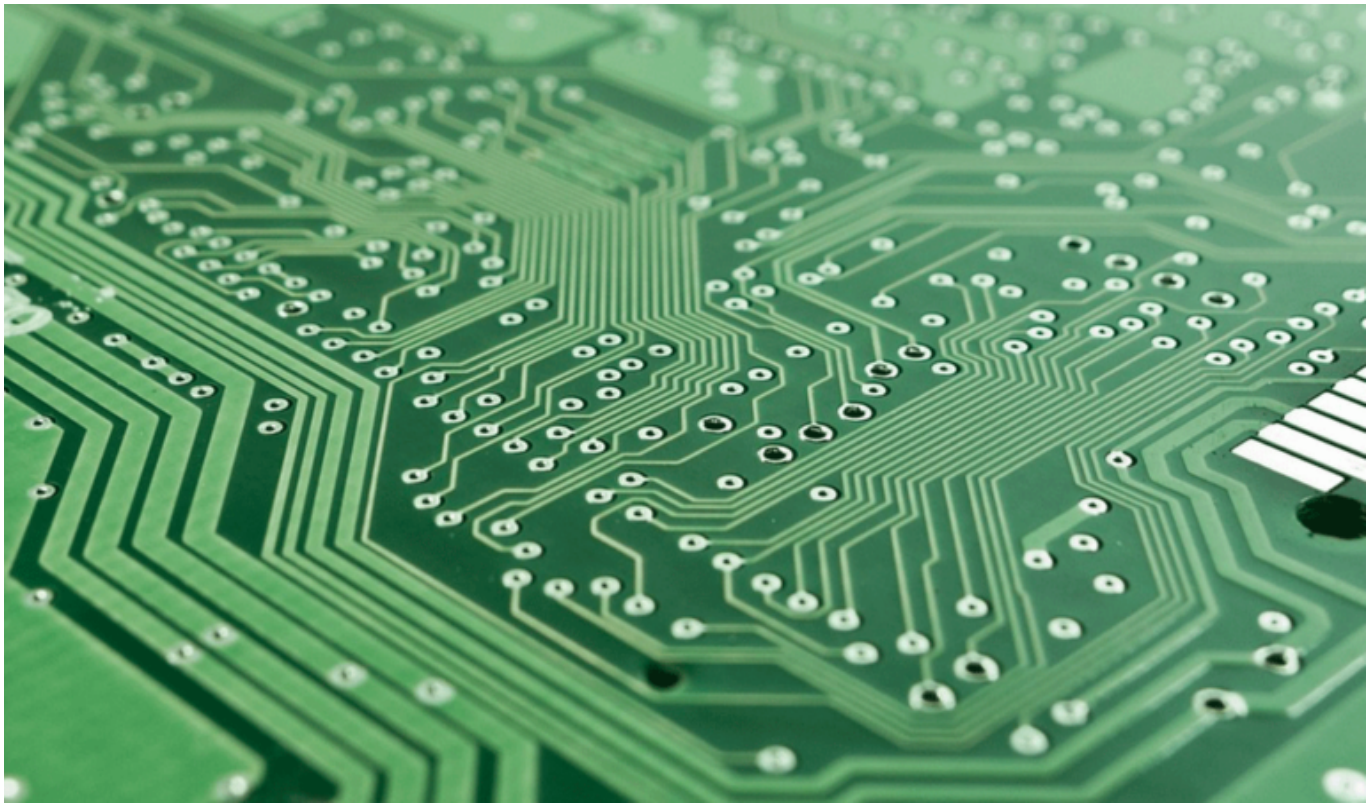
L’informatique peut-elle évaluer la toxicité des substances?

4 février 2019



L’informatique peut-elle remplacer les modèles animaux pour découvrir la toxicité d’une substance ? C’est la question à laquelle tente de répondre un article de la revue Nature publié le 14 janvier dernier.

Les demandes des autorités en Europe et aux USA sur la connaissance de la toxicité des produits chimiques commercialisés se sont accrues. Aux USA le nombre de vertébrés utilisés dans ce but est passé de 6500 en 2016 à 76000 en 2017. Les mêmes autorités s’étant engagées à diminuer le nombre d’animaux utilisés à des fins scientifiques, d’autres méthodes sont recherchées.

Dans ce domaine, **des programmes informatiques spécifiques** utilisent les données obtenues de très nombreuses substances chez l’animal et in vitro, pour estimer le profil toxicologique de nouvelles substances **en comparant leurs structures chimiques**.

L’accès récent à de puissants moyens informatiques et à de vastes bases de données (140 millions de substances) comme celle de l’agence européenne ECHA, a permis de consolider cette approche. Sur 190000 substances testées, l’exactitude de la prédictivité d’un programme a récemment été de 87%.

D’autres chercheurs **associent différents modèles** in silico et in vitro pour **comprendre les mécanismes des effets toxiques** et ainsi prédire la toxicité aigüe, les effets perturbateurs endocriniens ou l’effet sur le développement embryonnaire d’une substance inconnue.

Aujourd’hui les autorités investissent dans ces travaux mais **n’ont pas encore décidé de se passer des modèles animaux**. En effet la valeur des modélisations informatiques dépend de la connaissance qu’on a de ce qu’on veut modéliser, c’est-à-dire du vivant. Or nous sommes

encore **très loin de connaître le fonctionnement un organisme vivant**, et donc de pouvoir le modéliser de façon fiable.

Cependant, les travaux réalisés jusqu'à présent permettent d'**utiliser toutes les connaissances** et les données accumulées pour **éliminer des substances** très probablement toxiques, **remplacer** dans certains cas des modèles animaux et **réduire** le recours à d'autres. Les travaux se poursuivent.

Liens :

- https://www.nature.com/articles/s41684-018-0227-0
- https://www.science.org/news/2018/05/animal-tests-surge-under-new-us-chemical-safety-law
- https://echa.europa.eu/fr/home
- https://academic.oup.com/toxsci/article/165/1/198/5043469