

Сриджит Сил, приглашенный ученый на платформе визуализации Broad, обучил несколько прогнозных моделей машинного обучения для выявления химических и структурных характеристик лекарств, которые могут вызвать токсические эффекты у людей.

В совокупности эти инструменты оценивают, как лекарство может повлиять на различные показатели, представляющие интерес для разработчиков лекарств: общее здоровье клеток, фармакокинетику, а также функцию сердца и печени. На сегодняшний день опубликованы статьи, описывающие три из этих инструментов машинного обучения, в журналах *Journal of Chemical Information and Modeling*, *Molecular Biology of the Cell* и *Chemical Research in Toxicology*. Четвертый находится в разработке.

Прогностические модели не исключают лабораторных экспериментов, но они могут помочь исследователям сузить круг потенциальных лекарств, выделяя больше времени и ресурсов для экспериментов с более перспективными кандидатами. Сил начал эту работу, задумавшись, нельзя ли извлечь больше токсикологических данных из химической структуры потенциального лекарства.