

Исследователи из Манитобского университета и Технологического института Карлсруэ использовали XAI для анализа предсказательных моделей в химии. Они применили XAI, чтобы выяснить, какие молекулы имеют потенциал быть эффективными антибиотиками. Результаты показали, что XAI может выявлять важные молекулы и структуры, которые могли бы быть упущены при традиционных методах анализа.

Эти открытия помогают ученым лучше понять, какие факторы влияют на активность лекарств и как улучшить модели для более точного предсказания. В будущем XAI может существенно изменить подход к созданию новых антибиотиков, улучшая эффективность и снижая риск устойчивости патогенов.