การระคายเคืองผิวหนังคือการเกิดความเสียหายต่อผิวหนังชนิดย้อนกลับได้ (Reversible damage) จากการสัมผัสสารเคมี และจำเป็นต้องมีทดสอบก่อนขึ้นทะเบียนสารเคมีทุกชนิด โดยส่วนมากมักทดสอบกับสัตว์ทดลอง แต่การใช้สัตว์ทดลองนั้นมีข้อจำกัดด้านการเงิน จริยธรรม และมนุษยธรรม การใช้การเรียนรู้ของเครื่อง(machine learning) คือการสร้างแบบจำลองทางคอมพิวเตอร์เพื่อทำนายความเป็นพิษ เพื่อให้ผลที่ทำนายได้มีความน่าเชื่อถือจึงจำเป็นต้องทดสอบแบบจำลองเพื่อหาประสิทธิภาพของแบบจำลอง โดยแบบจำลองที่มีประสิทธิภาพสูงสามารถใช้ในการทำนายการระคายเคืองผิวหนังของสารเคมีซึ่งเป็นหนึ่งในการทดสอบทางเลือกที่ลดต้นทุนและไม่มีข้อจำกัดด้านจริยธรรมและมนุษยธรรม การศึกษานี้มีวัตถุประสงค์เพื่อสร้างแบบจำลองที่สร้างทำนายการระคายเคืองผิวหนังจากโครงสร้างของสารเคมีได้ โดยการศึกษานี้ใช้ฐานข้อมูลของสารเคมีที่ถูกทดสอบในหลอดทดลองกับเซลล์ HaCaT และแปลง IC50 เป็นข้อมูลเชิงคุณภาพโดยหากสูงกว่า 10 micromolar จะเป็นสารเคมีที่ไม่ก่อให้เกิดการระคายเคืองผิวหนัง จากนั้นสร้างแบบจำลอง Random forest classifier ซึ่งใช้ข้อมูล Fingerprint 2 รูปแบบคือ pubchem และ substructure มาเปรียบเทียบเพื่อหาแบบจำลองที่ดีที่สุด และหา Fingerprint ที่มีอิทธิพลต่อความเป็นพิษสูง นอกจากนี้ยังหาประสิทธิภาพของแบบจำลองด้วยการคำนวณค่าความถูกต้อง แม่นยำ ความไว และความจำเพาะของแบบจำลอง จากผลการศึกษาพบว่า fingerprint ที่สำคัญซึ่งส่งผลต่อการทำนายการระคายเคืองผิวหนังของ pubchem fingerprint ได้แก่ PubChemFP776 PubChemFP300 PubChemFP377 PubChemFP756 PubChemFP712 PubChemFP20 PubChemFP699 PubChemFP375 PubChemFP493 PubChemFP593 และ substructure fingerprint ได้แก่ SubFP100 SubFP18 SubFP181 SubFP180 SubFP49 SubFP135 SubFP100 SubFP183 SubFP1 SubFP52 หลังจากได้แบบจำลองที่มีประสิทธิภาพในการทำนายแล้ว จึงทำการตรวจทานความถูกต้อง (model validation) ด้วยการใช้ข้อมูลการระคายเคืองผิวหนังจากภายนอก ทำให้แบบจำลองสามารถทำนายการระคายเคืองผิวหนังของสารเคมีได้