



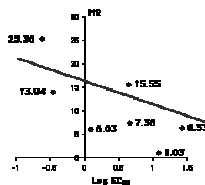
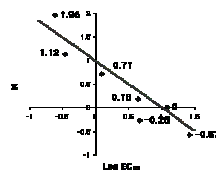
## Základní matematické vztahy

$$\text{Biologická Aktivita} = \text{konst} + (C_1 P_1) + (C_2 P_2) + (C_3 P_3) + \dots$$

Aktivita látky (LD50, stupeň kancerogenity, dráždivosti, rozložitelnosti...)

$$r^2 = \frac{\text{regression variance}}{\text{original variance}}$$

r - Korelační koeficient – r<sup>2</sup> nabývá hodnot 0 až 1.



## QSAR příklad: regrese

$\pi$  – konstanta hydrofobicity  
MR – Molekulární refraktivita  
(souvisí s velikostí molekuly)

1) pouze  $\pi$

$$\text{Log EC50} = 0.764 - (0.817 \pi)$$
$$r^2 = 0.89$$

2)  $\pi$  + MR

$$\text{Log EC50} = 0.762 - (0.819 \pi) + (0.011 \text{MR})$$
$$r^2 = 0.89$$

## QSAR – omezení využitelnosti

- Předpoklad působení shodným mechanismem
- Nepracuje příliš dobře pro polární látky
- Větší spolehlivost při interpolaci než extrapolaci

Nespecifická toxicita – především funkci 3 hlavních vlastností látek

- Hydrofobicita.
- Reaktivita.
- Sterické faktory.