Cvičení 4

Pracovní list

1. Ze studijních materiálu si stáhněte soubor „simple_regression.csv“ a proveďte regresi v Excelu/Calcu a v Rku. Jaké jsou hodnoty parametru, interceptu, R2?

2. Ze studijních materiálu si stáhněte soubor „carboxylic_acids.csv“ a „phenols.csv“, proveďte regresi v Excelu/Calcu a v Rku pro sloupce pKa a qH. Jaké jsou hodnoty parametru, interceptu, R2?

3. Ze studijních materiálu si stáhněte soubor „carboxylic_acids.csv“ a „phenols.csv“, proveďte regresi v Rku pro sloupce pKa a všechny deskriptory. Jaké jsou hodnoty parametrů, interceptu, R2, RMSE, MAE a F?

4. Ze studijních materiálu si stáhněte soubor „mix.csv“ a proveďte regresi v Rku pro sloupce pKa a všechny deskriptory a jejich kombinaci. Jaké jsou hodnoty parametrů, interceptu, R2, RMSE, MAE a F?

5. Ze studijních materiálu si stáhněte soubor „mix_train.csv“ a proveďte regresi v Rku pro sloupce pKa a všechny deskriptory a jejich kombinaci. Jaké jsou hodnoty parametrů, interceptu, R2, RMSE, MAE a F? Proveďte externí validaci na souboru „mix_test.csv“. Jaké jsou hodnoty Q2, RMSE, MAE a F?

6. Ze studijních materiálu si stáhněte soubor „mix.csv“ a proveďte regresi s křížovou validací v Rku pro sloupce pKa a všechny deskriptory a jejich kombinaci. Jaké jsou hodnoty parametrů, interceptu, R2, RMSE, MAE a F?