

Cvičení 5

Pracovní list

1. Ze studijních materiálu si stáhněte soubor „carboxylic_acids.csv“ a „phenols.csv“, vypočítejte pomocí PaDELu 2D deskriptory. Vypočítejte model pro predikci pKa z těchto deskriptorů s automatickým výběrem deskriptorů.
2. Ze studijních materiálu si stáhněte soubor „mix.csv“ a vypočítejte pomocí PaDELu 2D, 3D deskriptory. Vypočítejte model pro predikci pKa z těchto deskriptorů s automatickým výběrem deskriptorů.