

Cvičení 5

Pracovní list

1. Ze studijních materiálů 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. Diskutujte metodu automatického výběru deskriptorů. Vyberte nejlepší model.