

## Vzorečky

**Relativní odchylka** (pro každou molekulu zvlášť):

$$\Delta pK_a = | pK_a^{\text{exp}} - pK_a^{\text{calc}} |$$

**Průměrná relativní odchylka** = průměr relativních odchylek pro všechny molekuly. Označuje se  $\bar{\Delta}$ .

**RMSD:** V původním textu jsem chtěla, abyste vypočítali absolutní odchylku. Místo ní prosím vypočítejte RMSD. Počítá se takto:

$$RMSD = \frac{\sqrt{\sum_{i=1}^N (pK_a^{\text{exp}} - pK_a^{\text{calc}})^2}}{N}$$

**t-hodnota:**

$$t = \sqrt{\frac{N \cdot RMSD^2}{N - k - 1}}$$

kde k je počet deskriptorů v modelu

Tabulka s minimálními hodnotami t:

<https://www.itl.nist.gov/div898/handbook/eda/section3/eda3672.htm>

Příklad: Pokud máte 10 vzorků a chcete, aby byla pravděpodobnost, že dané výsledky vzniknou náhodně, menší než 0.05 (neboli pravděpodobnost 0.95, že váš model funguje), použijete sloupec s nadpisem 0.95 a řádek s nadpisem 10. Je tam hodnota 1.812. Pokud je vaše t-hodnota větší než 1.812, je t-test v pořádku.