

Molekula  $\longrightarrow$  Číselný popis (deskriptory)  $\longrightarrow$  Vlastnost = funkce (deskriptory)

Ilustrativní příklad ze života:



Tělo člověka



Výška a váha

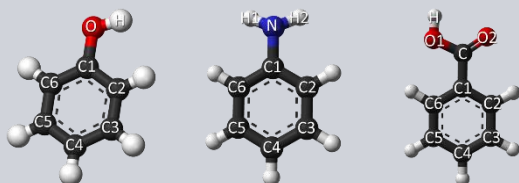
**BMI = váha / výška<sup>2</sup>**

BMI (Body Mass Index):

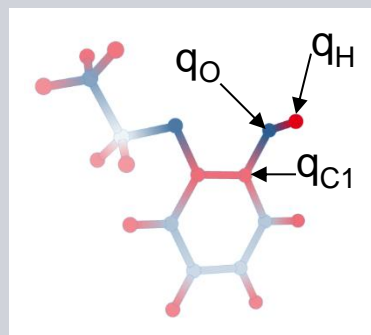
Podváha: BMI < 18,5

Obezita: BMI > 30

Chemoinformatika



3D struktura molekuly



Náboje na atomech

$$pK_a = c_H \cdot q_H + c_O \cdot q_O + c_{C1} \cdot q_{C1}$$

Kde  $c_H$ ,  $c_O$  a  $c_{C1}$  jsou parametry