1. Mějme množinu naměřených bodů:

x1 = 2; y1 = 0,5

x2 = 3; y2 = 15

x3 = 4; y3 = 2

x4 = 6; y4 = 6,5

Body si zadejte do Exceové tabulky a udělejte si jejich graf.

Je v této množině bodů hrubá chyba (outlier)? Pokud ano, jaká a proč. x2 = 3; y2 = 15, viz graf:

* Pracujte s množinou bodů, ze které jste odstranili hrubé chyby.
* Vypočítejte směrnici (b1) a úsek (b0) lineární rovnice, kterou proložíte těmito body (použijte lineárni regresi).

b1 = 1.5, b0 = 3

* Vypočítejte korelační index R2.

R2 = 0.9231

1. Doplňte následující tabulku:

|  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- |
|  | **Název molekuly** | **pKa** | **Náboj na atomu** | **Pka\_p** | **pKa\_d** |
| **H** |  |  |
| Tréningová sada | Carboxyacetic acid | 2.85 | 0.48 | 3.21 | 0.36 |
| Hydroxyethanoic acid | 3.83 | 0.4649 | 3.53 | 0.30 |
| Dipropylacetic acid | 4.6 | 0.3907 | 5.12 | 0.52 |
| n-Butanoic acid | 4.82 | 0.4187 | 4.52 | 0.30 |
| n-Dodecanoic acid | 5.3 | 0.396 | 5.01 | 0.29 |
| Testova- cí sada | Almond acid | 3.41 | 0.4371 | 4.13 | 0.72 |
| Amber acid | 4.21 | 0.4628 | 3.58 | 0.63 |
| n-Capric acid | 4.9 | 0.3991 | 4.94 | 0.04 |

Poznámka: V tabulce jsou karboxylové kyseliny, náboje zjišťujeme na COOH skupině. O označuje kyslík, na kterém je vázán H. Struktury molekul získáme z PubChemu. Náboje počítejte pomocí programu ACC2 (<https://acc2.ncbr.muni.cz/>), použijte defaultní nastavení (= nahrajte molekulu a dejte “Compute charges”).

* Pro QSPR model: pka = p1\*qH + p2 vytvořte v Excelu graf závislosti pKa na pH. Pro vytvoření modelu použijte jen tréningovou sadu.
* Pro tento model dopočítejte p1 a p2. p1 = -21.473, p2 = 13.514
* Pomocí modelu predikujte pKa pro všechny molekuly. (Přidejte si do tabulky sloupec pka\_p.)
* Vypočítejte relativní odchylku pro všechny body. (Přidejte si do tabulky sloupec pka\_d.)
* Vypočítejte R2, RMSD a průměrnou relativní odchylku pro tréninkovou sadu. R² = 0.8198

RMSD = 0.163

* Vypočítejte Q2, RMSD a průměrnou relativní odchylku pro testovací sadu.

Q2 = 0.3114

RMSD = 0.3196