

## 1 Функция `effectivity_model()`

### Что делает

Обучает модель `RandomForestClassifier` для предсказания эффективности кандидата на основе синтетического датасета:

`synthetic_indication_target_eff.csv`

Используемые признаки:

- `indication`
- `target`

### Что возвращает

`(model_e, le_ind_e, le_target_e)`

- обученная модель эффективности
- энкодер для `indication`
- энкодер для `target`

Модель предсказывает: **0 / 1 / 2** (низкая—средняя—высокая эффективность)

---

## 2 Функция `toxity_model()`

### Что делает

Обучает модель `RandomForest` для предсказания токсичности на основе:

`toxicity_training_dataset.csv`

Используемые признаки:

- `indication`

- `target`
- `molecular_weight`
- `logP`

### Что возвращает

`(model_t, le_ind_t, le_target_t)`

Модель предсказывает токсичность как: **0 / 1**

---

## 3 Функция `move_data()`

### Что делает

Применяет обе модели к **основному датасету df**:

1. кодирует indication/target теми же LabelEncoder-ами
2. предсказывает:
  - эффективность → `effective_model`
  - токсичность → `toxic_model`
3. записывает результаты в df
4. вызывает:
  - `build_efficiency_score()`
  - `build_toxicity_score()`
5. удаляет ненужные исходные признаки:
  - `effective_model`
  - `toxic_model`

- `has_positive_efficacy_phrase`
  - `has_severe_toxicity_phrase`
- 

## 4 Функция `build_efficiency_score()`

### Что делает

Объединяет:

- модельную эффективность → `effective_model` (0/1/2 → нормируется)
- текстовую → `has_positive_efficacy_phrase` (0/1)

и формирует **единый показатель эффективности**.

### Что записывает в df

`efficiency_score`      # итоговая эффективность 0..2

---

## 5 Функция `build_toxicity_score()`

### Что делает

Объединяет:

- модельную токсичность → `toxic_model` (0/1)
- текстовую → `has_severe_toxicity_phrase` (0/1)

и формирует **единый показатель токсичности**.

### Что записывает в df

`toxicity_score`      # итоговая токсичность 0..2

---

## 6 Функция

### `build_uniqueness_score()`

(Компактная версия — только один итоговый столбец)

#### Что делает

Рассчитывает уникальность препарата на основе:

- частоты target среди всех кандидатов
- частоты indication
- "новизны" текста:  $(1 - \text{text\_embed\_score})$

#### Что записывает в df

`uniqueness_score`    # итоговая уникальность (0..1)

## 7 Функция `raiting()`

(Компактная версия — только один итоговый столбец)

#### Что делает

Рассчитывает потенциал препарата на основе:

- эффективности
- токсичности
- "новизны" текста:  $(1 - \text{text\_embed\_score})$

#### Что записывает в df

`score`    # итоговая потенциал (0/1/2)

---

# ИТОГОВЫЕ КОЛОНКИ, КОТОРЫЕ ОСТАЮТСЯ В ГЛАВНОМ DF

После полного пайплайна у тебя в df будут (минимальный набор):

## ◆ Исходные данные:

- drug\_id
- indication
- target
- text\_embed\_score
- molecular\_weight
- logP
- market\_size\_million
- competition\_level
- expected\_profit\_score
- success\_probability
- traditional\_time\_years
- ai\_time\_years

## ◆ Добавленные итоговые метрики:

- efficiency\_score
- toxicity\_score
- uniqueness\_score
- score

## ◆ Удалённые (чтобы не засорять df):

- efective\_model

- toxic\_model
- has\_positive\_efficacy\_phrase
- has\_severe\_toxicity\_phrase