**Об этом файле**

Глубокое обучение с подкреплением для разработки лекарств de novo, также известное как ReLeaSE DataSet

«pIC50» — это показатель, используемый в фармакологии и разработке лекарств для оценки эффективности соединения в ингибировании конкретной биологической мишени или фермента

«mol» — это представление молекулы в библиотеке RDKit, которая является широко используемым программным обеспечением для работы с молекулярными данными. В данном случае это означает, что столбец «mol» содержит объекты RDKit Mol.

«num\_atoms» — количество атомов в молекуле. В контексте хемоинформатики и анализа молекулярных данных атрибут «num\_atoms» представляет собой количество атомов в молекуле. Атомы — это фундаментальные частицы, из которых состоят молекулы. Это могут быть такие элементы, как углерод (C), водород (H), кислород (O), азот (N) и многие другие. Количество атомов в молекуле — важное свойство, которое позволяет судить о её размере, сложности и возможных химических взаимодействиях.

«logP» — это показатель того, как молекула взаимодействует с различными растворителями. Он указывает на то, что молекула предпочитает неполярную (маслянистую) или полярную (водорастворимую) среду. Более высокое значение logP означает, что молекула с большей вероятностью растворится в масле и с меньшей вероятностью растворится в воде. Это свойство важно при разработке лекарств, так как оно влияет на способность молекулы всасываться и распределяться в организме