

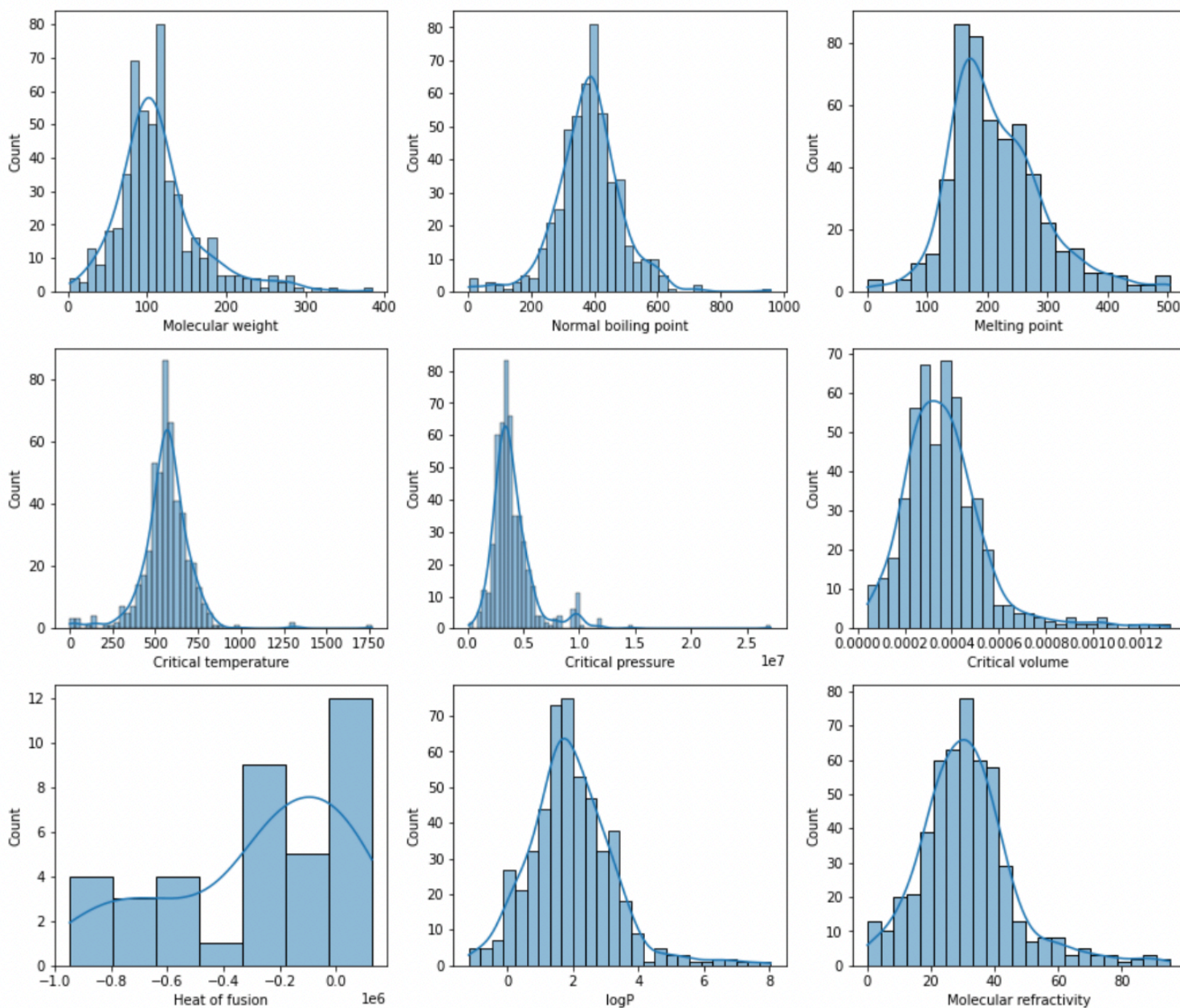
Практикум

Лоскутова Софья, 615 группа, химический факультет

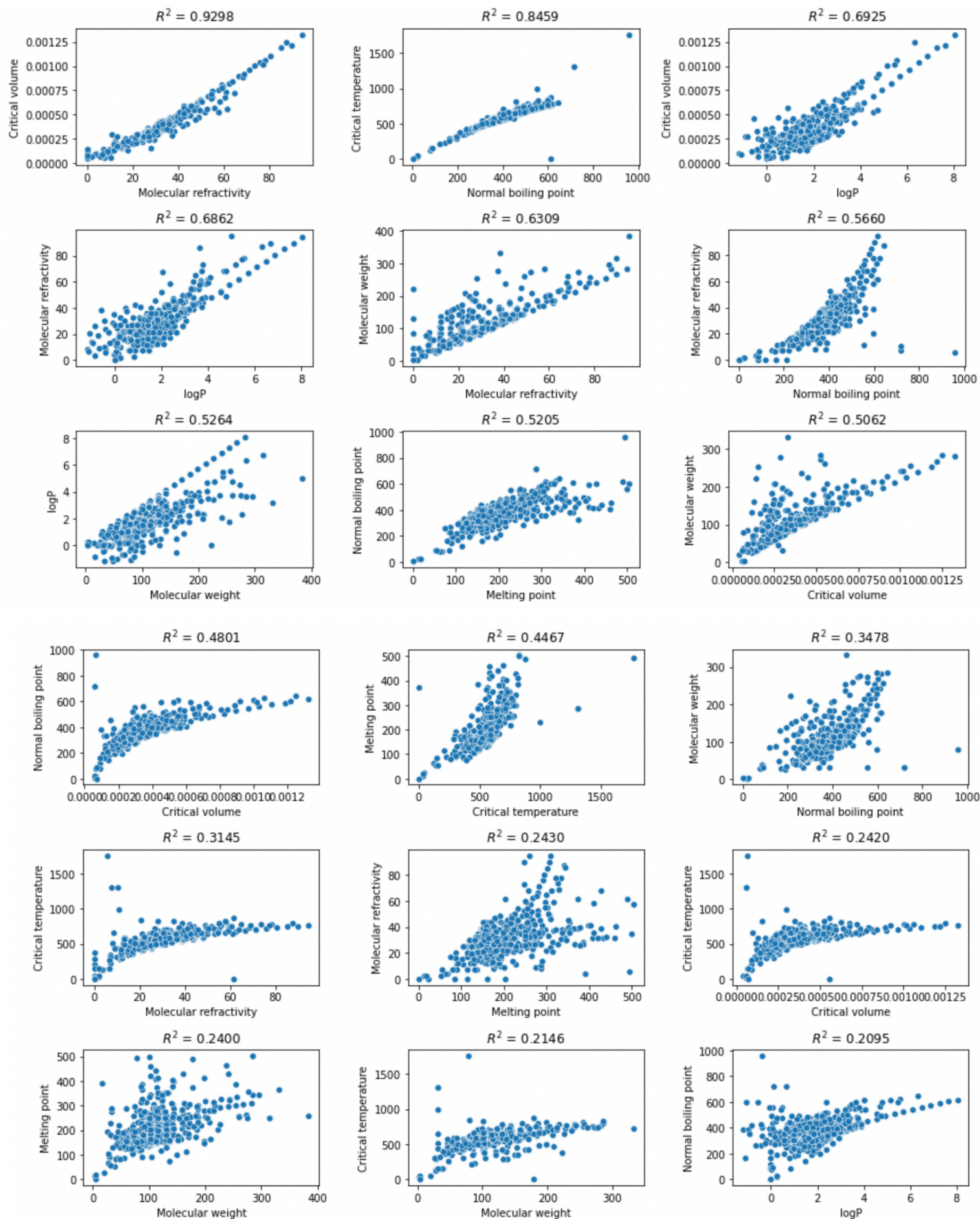
В данных есть два вещества, для которых значения свойств значительно больше относительно других веществ (smiles = C, Sc1ccccc1). В отчете будут графики без этих веществ, графики со всеми веществами представлены в ноутбуке.

https://drive.google.com/file/d/15Va4MkGSBqL_-9unqWS6uzjjAQ-1wgkQ/view?usp=sharing

Гистограммы



Графики корреляций



Некоторые свойства веществ, такие как, например: критический объем, критическая температура, молярная рефракция, температуры кипения и плавления, являются структурно-аддитивными, поэтому между данными свойствами наблюдаются корреляции.

В датасете были даны теплоты плавления некоторых веществ, но так как данных мало, то невозможно говорить о какой-либо корреляции.