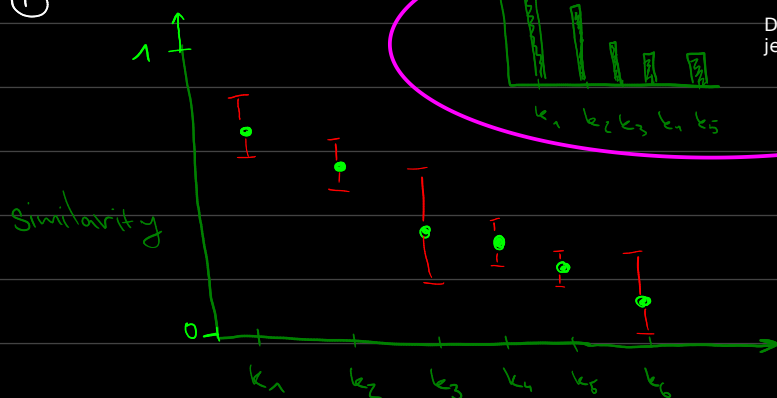


①

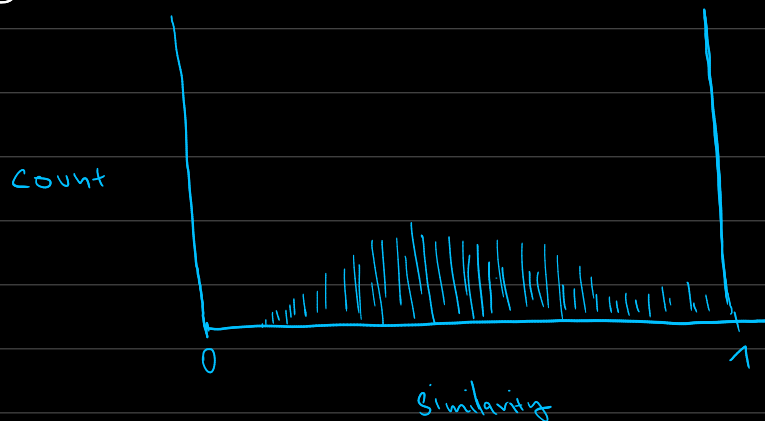


Doplující histogram, kolik je zastupců v urovních

jak rychle pada kvalita predikci a jaka je na jednotlivych urovnich variance

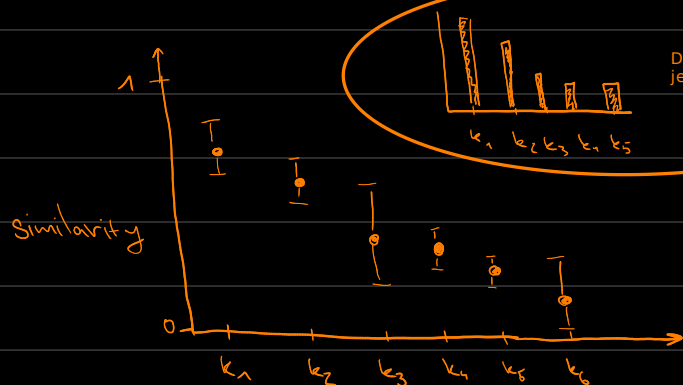
gt sorting

②



Histogram k1, detailne ukazuje to, co zelenej graf v k1 (cetnost jednotlivych hodnot podobnosti)

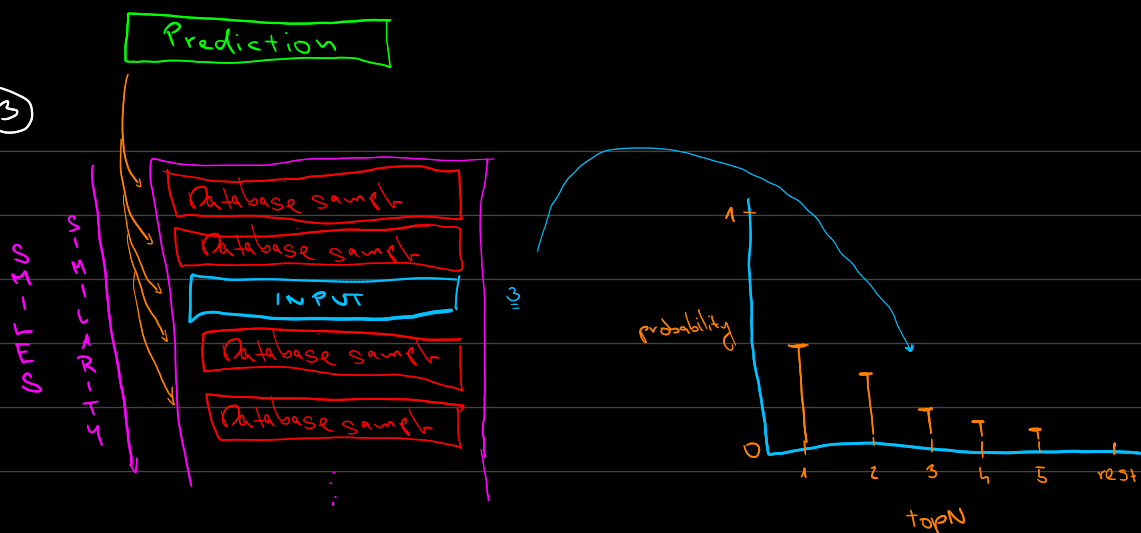
probability
sorting



Doplující histogram, kolik je zastupců v urovních

jak rychle pada kvalita predikci a jaka je na jednotlivych urovnich variance

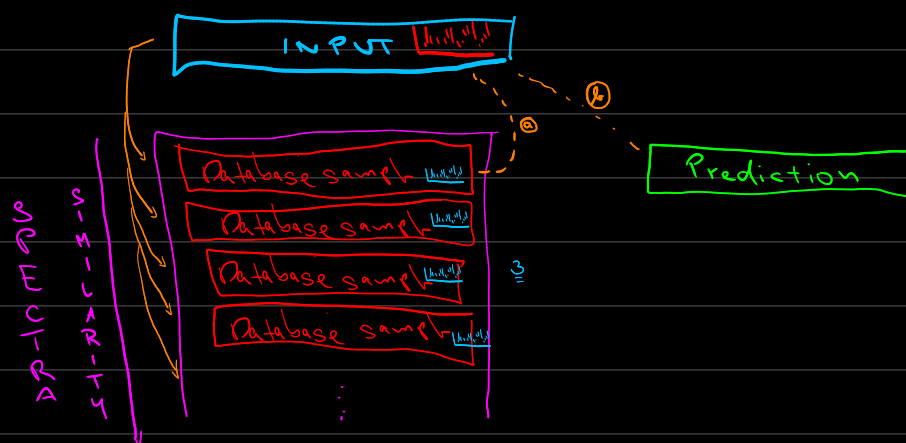
3



kolik je v databazi vhodnejsich potencialnich inputu pro nas output
=> jak moc je model zmatenej (resp pst, ze najdeme pro predikci N podobnejsich molekul, nez je input)

4) Ma model smysl pro de novo predikci?

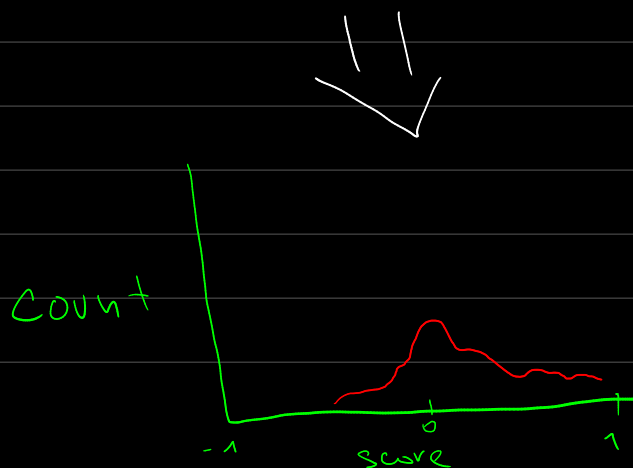
Jak je náš systém dobrej v porovnání s databázovým vyhledáním pro de novo?



a) SMILES simil mezi nejpodobnějším spectrom a inputem

b) SMILES simil mezi predikci a inputem

skóre: b - a



=> Expected value jako zřetelnej výsledek evaluace

