

# 18.10. 2023 8:00 – tímové stretnutie s vedúcou

## Status:

- **Dataset** hľadáme in vivo - zatiaľ nenájdené ale WIP. Čakáme na ďalšie info.
  - *S tým čo máme by sme mohli začať pracovať - vyčistiť názvy, atd...*
  - *\* Dataset má kódy, z ktorých by malo ísť vytvárať smileskódy*
- **Deskriptory** nejaké máme - je funkcia čo nájde deskriptory k molekule /smileskódu/, ale niektoré názvy sú mätúce (ale zatiaľ to asi nieje taký problém). Bude treba upraviť dataset. Nájdené 209 podľa RDKitu
  - <https://cactus.nci.nih.gov/chemical/structure/brufen/smiles>
  - *Mohli by sme obohatiť dataset o deskriptory čo sme našli*
  - *Niektoré dáta majú dva názvy - potom to nerobí smileskódy - treba vyriešiť \**
- **Vyrovnenie datasetu** - k amesovmu testu dataset by potreboval ešte pár negatívnych testov, alebo potom bude treba vybalancovať ho pri testovaní - TBD
- **Delenie do tímov** - Lukáš + Matej + Adam - data a model
- **Web tímu** - nájsť nejaké príklady z minulých rokov /premyslieť štruktúru a pomaly začať