

08.11.2023 8:30

- korelácie atď nerobiť funkciami ktoré programovali chemici
- **nemáme vyvážený model** - potrebujeme viac negatívnych dát - aktuálne používame metódy prevzorkovania
 - pridať **biogénne látky** ako proteín a aminokyseliny, cukry, vodu atď
- **Homolumo deskriptor** ? spraviť kód pre výpočet deskriptora (energetická medzera prvku alebo také niečo) - prípadne nájsť iný parameter, ktorý súvisí so vzdalenosťami medzi elektrónmi
- **Smiles kódy so zavináčmi** môžu robiť šarapaty - isomeric / canonical smiles
 - **Optická otáčavosť** štruktúry chemickej látky má vplyv na toxicitu
- 63 zlý smilescode
- fosfor a zinok implementovať do modelu ale skúsiť ich aj vybrať a skúsiť bez nich či to niečo nekazí
- pozrieť PSI