


## 08.11.2023 8:30 – tímové stretnutie s vedúcou

- 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 / caonical 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 nekaží
- pozrieť PSI

## 08.11. 2023 20:30 – tímové stretnutie

(rozdelenie taskov vytvorených ráno)