

# Tím 20 - FOTOTOX

## Zápisnica zo stretnutia č. 3

Dátum a čas stretnutia: 19.10. 13:00

### Riešené problémy

- Vyhodnotenie prvých experimentov
  - Analýza najdôležitejších deskriptorov
- Diskusia o uplatniteľnosti regresných prístupov na riešenie problémov
  - Prístupy merania fototoxicity látok
  - Analýza dostupnosti PIF a MPE hodnôt
- Použitie Homo Lumo hodnôt ako deskriptorov

### Hotové úlohy

- Analýza korelácie deskriptorov
- Prvé experimenty s rôznymi modelmi
- Analýza vhodnosti modelov
- Príprava vyhodnotenia dôležitosti - SHAP
- Získanie dodatočných dát

### Nové úlohy

- Identifikovať cyklické a acyklické látky
- Vybudovať pipeline pre automatické spracovanie nových dát
- Pripraviť hlbšiu EDA
- Pretrénovať modely s novými deskriptormi
- Rozsiahlejšie spisovanie dokumentácie