

Tím 20 - FOTOTOX

Zápisnica zo stretnutia č. 4

Dátum a čas stretnutia: 26.10. 13:00

Riešené problémy

- Prezentácia analýzy nových dát a korelácie jednotlivých deskriptorov
- Vyhodnotenie experimentov na ďalšej iterácii modelu
- Diskusia o nájdenej databáze Homo Lumo hodnôt
- Diskusia o programe Spartan, pre výpočet Homo Lumo hodnôt jednotlivých molekúl
- Diskusia o rozdieloch výslednej fototoxicity pri in vivo a epidermálnych experimentoch
 - 3T3 overprediction
- Konzultácia výsledkov EDA
- Nezrovnalosti v hodnotách deskriptorov z rôznych databáz

Hotové úlohy

- Návrh architektúry pre automatické spracovanie dát
- Pretrénovanie modelu s novými deskriptormi
- Výpočet nových deskriptorov z chemickej štruktúry
- Zostavenie stacking ML modelu
- EDA na doterajších dátach

Nové úlohy

- Identifikovať molekuly ktoré majú rôzne deskriptory v SwissTarget a SwissADME
- Spraviť covariance filter pre použité deskriptory
- Extrahovať dáta z novodostupných článkov
- Dokončiť a podať prihlášku na TP cup
- Pripraviť otázky na ďalšie stretnutie - pre kolegyňu našej vedúcej