# Cvičení 4

## Pracovní list

1. Ze studijních materiálu si stáhněte soubor „simple\_regression.csv“ a proveďte regresi v Excelu/Calcu a v Rku. Jaké jsou hodnoty parametru, interceptu, R2?
2. Ze studijních materiálu si stáhněte soubor „carboxylic\_acids.csv“ a „phenols.csv“, proveďte regresi v Excelu/Calcu a v Rku pro sloupce pKa a qH. Jaké jsou hodnoty parametru, interceptu, R2?
3. Ze studijních materiálu si stáhněte soubor „carboxylic\_acids.csv“ a „phenols.csv“, proveďte regresi v Rku pro sloupce pKa a všechny deskriptory. Jaké jsou hodnoty parametrů, interceptu, R2, RMSE, MAE a F?
4. Ze studijních materiálu si stáhněte soubor „mix.csv“ a proveďte regresi v Rku pro sloupce pKa a všechny deskriptory a jejich kombinaci. Jaké jsou hodnoty parametrů, interceptu, R2, RMSE, MAE a F?
5. Ze studijních materiálu si stáhněte soubor „mix\_train.csv“ a proveďte regresi v Rku pro sloupce pKa a všechny deskriptory a jejich kombinaci. Jaké jsou hodnoty parametrů, interceptu, R2, RMSE, MAE a F? Proveďte externí validaci na souboru „mix\_test.csv“. Jaké jsou hodnoty Q2, RMSE, MAE a F?
6. Ze studijních materiálu si stáhněte soubor „mix.csv“ a proveďte regresi s křížovou validací v Rku pro sloupce pKa a všechny deskriptory a jejich kombinaci. Jaké jsou hodnoty parametrů, interceptu, R2, RMSE, MAE a F?