**Vzorečky**

**Relativní odchylka** (pro každou molekulu zvlášť):

ΔpKa = | pKaexp – pKacalc |

**Průměrná relativní odchylka** = průměr relativních odchylek pro všechny molekuly. Označuje se .

**RMSD:** V původním textu jsem chtěla, abyste vypočítali absolutní odchylku. Místo ní prosím vypočítejte RMSD. Počítá se takto:

$$RMSD=\frac{\sqrt{\sum\_{i=1}^{N}(pKa^{exp}-pKa^{calc})^{2}}}{N}$$

**t-hodnota:**

t = $\sqrt{\frac{N.RMSD^{2}}{N-k-1}}$

kde k je počet deskriptorů v modelu

Tabulka s minimálními hodnotami t:

<https://www.itl.nist.gov/div898/handbook/eda/section3/eda3672.htm>

Příklad: Pokud máte 10 vzorků a chcete, aby byla pravděpodobnost, že dané výsledky vzniknou náhodně, menší než 0.05 (neboli pravděpodobnost 0.95, že váš model funguje), použijete sloupec s nadpisem 0.95 a řádek s nadpisem 10. Je tam hodnota 1.812. Pokud je vaše t-hodnota větší než 1.812, je t-test v pořádku.