

Регрессионный анализ в изучении количественной зависимости «структура-активность» производных антралиловой кислоты

Регрессионные исследования «структура-активность» позволяют провести целенаправленный синтез и сократить временные и материальные затраты на виртуальный скрининг биологически активных веществ. Изучена количественная зависимость «структура-активность» с использованием экспериментальных значений биологической активности проведением множественного линейного регрессионного анализа. Выполнен отбор значимых уравнений с наибольшими значениями коэффициента множественной регрессии (R), критерия Фишера (F) и критерия оценки методом перекрестного контроля исключением по одному (Q^2_{LOO}) и проведена проверка на независимой выборке.