



Лекция № 4

Регрессия

Разработал профессор П. М. Васильев
Кафедра фармакологии и биоинформатики

Для студентов, обучающихся по направлению 06.03.01 «Биология»
профили Биохимия, Генетика
при изучении дисциплины «Цифровые технологии в биологии»

План лекции

- Что такое регрессия
- Метод наименьших квадратов
- Простая линейная регрессия
- Множественная регрессия
- Пошаговая регрессия
- Нейросетевая регрессия

Регрессия

$$Y = f(X) + \nu$$

Зависимость математического ожидания случайной величины (зависимой переменной) от одной или нескольких других случайных величин (независимых переменных).

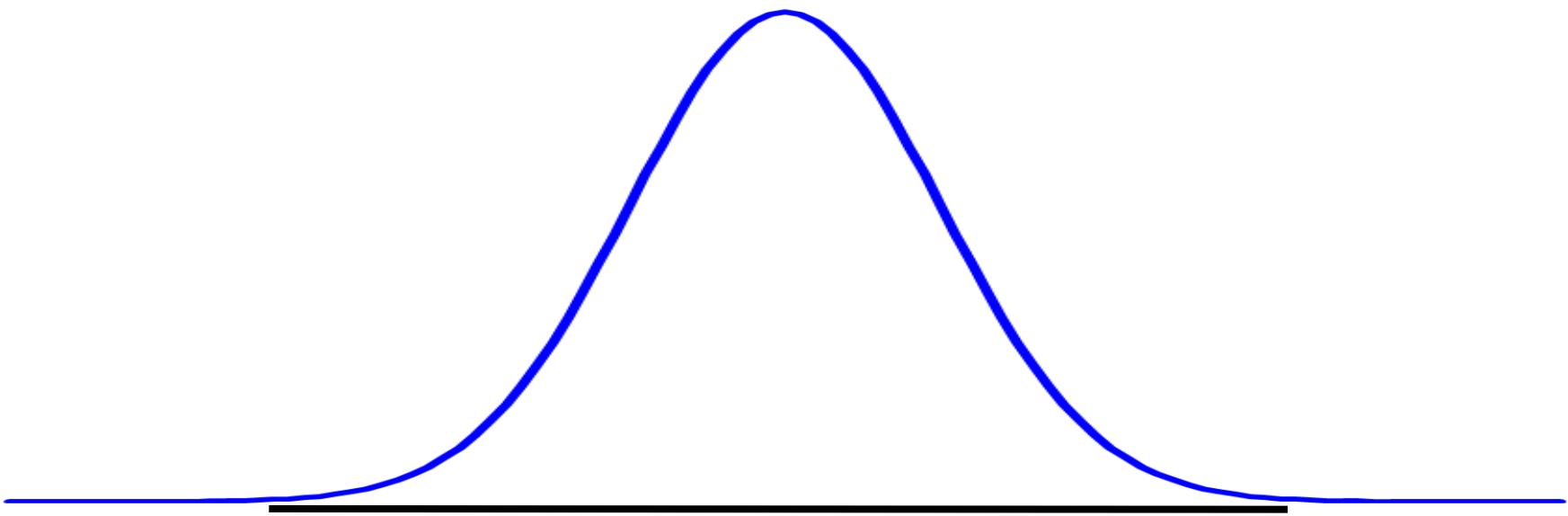
Метод наименьших квадратов

$$Q = \sum_{i=1}^N (Y_i - f_i(\theta))^2$$

Минимизация суммы квадратов отклонений наблюдаемых значений зависимой переменной от значений, предсказанных моделью.

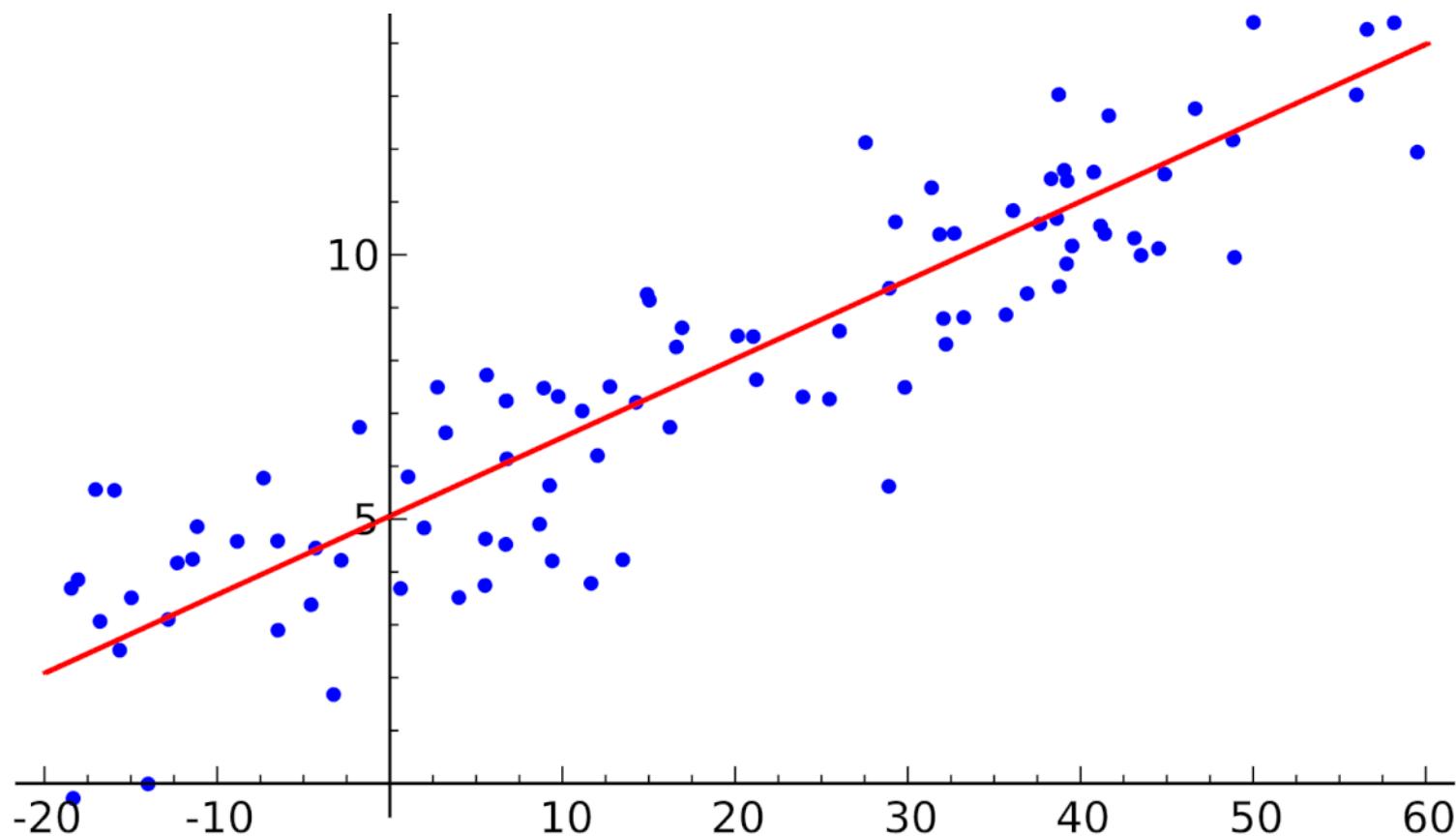
Нормальное распределение

$$f(x) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{1}{2}(\frac{x-\mu}{\sigma})^2}$$



Простая линейная регрессия

$$Y = a + b * X$$



Пример исходных данных

Code	SERT	NET	5-HT3A	ADRA1A	CHRM1	DRD1	DRD2	DAT	GABA-A GABA	GABA-A Benz	GAT1	JAK3	CAPN1	CFD
	Y	X1	X2	X3	X4	X5	X6	X7	X8	X9	X10	X11	X12	X13
L-17	-8.1	-8.0	-6.6	-7.4	-8.3	-8.1	-7.9	-7.8	-6.1	-6.3	-7.4	-8.0	-6.5	-6.0
H-16	-8.5	-8.3	-6.5	-7.1	-6.6	-8.0	-8.1	-8.1	-5.7	-6.1	-7.3	-8.0	-6.6	-6.4
H-18	-8.0	-8.6	-6.7	-6.8	-6.6	-8.2	-8.0	-8.2	-6.1	-6.3	-7.4	-7.9	-6.3	-6.4
H-29	-7.1	-7.1	-5.5	-6.2	-7.6	-7.1	-7.1	-6.7	-5.3	-5.6	-6.6	-6.8	-5.9	-5.5
H-42	-7.4	-7.4	-6.0	-6.2	-6.4	-7.5	-7.3	-7.0	-5.4	-5.6	-7.0	-7.3	-6.3	-5.8
H-69	-7.9	-8.2	-6.5	-7.1	-6.5	-8.0	-8.1	-8.1	-5.9	-6.2	-7.4	-7.8	-6.3	-6.4
H-88	-8.5	-8.6	-7.0	-7.3	-8.0	-9.3	-8.4	-8.0	-6.1	-6.4	-7.2	-7.9	-6.8	-6.3
L-19	-8.2	-8.3	-6.6	-7.1	-6.7	-8.3	-8.1	-7.9	-6.2	-6.4	-7.6	-7.9	-6.6	-6.1
L-20	-8.3	-8.4	-6.6	-7.1	-7.3	-8.2	-8.3	-8.1	-6.0	-6.3	-7.4	-8.1	-6.6	-6.1
L-31	-8.3	-8.4	-6.9	-7.4	-7.8	-8.0	-8.4	-8.1	-6.2	-6.6	-7.4	-8.0	-6.4	-6.6
L-86	-8.3	-8.3	-6.8	-6.8	-8.5	-8.9	-8.2	-8.6	-6.1	-6.2	-7.2	-8.0	-6.9	-6.2
L-87	-8.4	-8.5	-7.0	-7.5	-7.8	-8.6	-8.5	-8.9	-6.2	-6.4	-7.3	-8.2	-6.9	-6.3
L-91	-8.7	-8.6	-6.9	-6.9	-8.3	-9.2	-8.7	-8.9	-6.1	-6.4	-7.5	-8.2	-7.0	-6.3
LT-13	-8.7	-8.6	-7.2	-8.2	-7.2	-9.0	-8.9	-8.7	-6.3	-6.5	-7.5	-8.2	-6.4	-5.8
LT-21	-8.3	-8.6	-6.8	-7.1	-8.2	-8.8	-8.2	-8.1	-6.0	-6.2	-7.3	-8.0	-6.9	-6.1
LT-22	-8.5	-8.5	-6.9	-7.4	-8.3	-9.0	-8.3	-8.4	-6.0	-6.3	-7.5	-8.2	-6.8	-6.5
LT-23	-8.7	-8.5	-6.8	-7.0	-7.7	-8.8	-8.2	-8.4	-6.1	-6.4	-7.6	-8.1	-7.0	-6.0
LT-24	-8.2	-8.8	-7.1	-6.8	-7.9	-8.8	-8.5	-8.2	-5.9	-6.3	-7.4	-7.9	-6.5	-6.4
LT-29	-7.7	-7.3	-5.9	-6.3	-6.8	-7.7	-6.8	-7.2	-5.6	-5.8	-7.1	-7.2	-6.0	-5.8
LT-30	-7.9	-7.6	-6.1	-6.5	-7.2	-7.8	-7.2	-7.5	-5.6	-6.0	-7.0	-7.5	-6.0	-6.1
LT-31	-7.8	-7.8	-6.1	-6.1	-5.9	-7.8	-7.2	-7.3	-5.6	-5.9	-7.1	-7.6	-6.1	-5.7
LT-32	-7.6	-7.7	-6.2	-6.0	-6.7	-7.6	-7.3	-7.6	-5.3	-5.7	-7.0	-7.4	-6.1	-5.8
LT-33	-8.2	-8.0	-6.1	-7.2	-7.0	-7.9	-7.9	-7.7	-5.8	-5.9	-7.1	-8.0	-6.1	-5.5
LT-34	-8.1	-8.2	-6.3	-7.6	-6.5	-8.3	-8.1	-7.9	-6.0	-6.3	-7.1	-8.1	-6.3	-6.1
LT-35	-7.8	-8.1	-6.2	-7.0	-6.5	-8.5	-8.2	-8.0	-6.0	-6.3	-7.0	-7.8	-6.6	-5.9
LT-36	-8.1	-8.2	-6.3	-7.1	-6.2	-7.8	-8.1	-7.7	-5.8	-6.0	-7.0	-8.1	-6.7	-5.9
LT-37	-7.5	-9.3	-6.3	-7.0	-6.2	-8.3	-8.1	-8.1	-5.9	-6.2	-7.1	-7.7	-6.5	-5.7
LT-38	-7.6	-9.3	-6.4	-7.1	-6.0	-8.2	-8.2	-8.1	-5.9	-6.2	-7.2	-7.6	-6.3	-5.8

Регрессия в Excel

Code	SERT	NET	5-HT3A	ADRA1A	CHRM1	DRD1	DRD2	DAT	GABA-A GABA	GABA-A Benz	GAT1	JAK3	CAPN1	CFD
	Y	X1	X2	X3	X4	X5	X6	X7	X8	X9	X10	X11	X12	X13
L-17	-8.1	-8.0	-6.6	-7.4	-8.3	-8.1	-7.9	-7.8	-6.1	-6.3	-7.4	-8.0	-6.5	-6.0
H-16	-8.5	-8.3	-6.5	-7.1	-6.6	-8.0	-8.1	-8.1	-5.7	-6.1	-7.3	-8.0	-6.6	-6.4
H-18	-8.0	-8.6	-6.7	-6.8	-6.6	-8.2	-8.0	-8.2	-6.1	-6.3	-7.4	-7.9	-6.3	-6.4
H-29	-7.1	-7.1	-5.5	-6.2	-7.6	-7.1	-7.1	-6.7	-5.3	-5.6	-6.6	-6.8	-5.9	-5.5
H-42	-7.4	-7.4	6.0	6.2	6.4	7.5	7.2	7.0	5.4	5.6	7.0	-7.3	-6.3	-5.8
H-69	-7.9	-8.2										-7.8	-6.3	-6.4
H-88	-8.5	-8.6										-7.9	-6.8	-6.3
L-19	-8.2	-8.3										-7.9	-6.6	-6.1
L-20	-8.3	-8.4										-8.1	-6.6	-6.1
L-31	-8.3	-8.4										-8.0	-6.4	-6.6
L-86	-8.3	-8.3										-8.0	-6.9	-6.2
L-87	-8.4	-8.5										-8.2	-6.9	-6.3
L-91	-8.7	-8.6										-8.2	-7.0	-6.3
LT-13	-8.7	-8.6										-8.2	-6.4	-5.8
LT-21	-8.3	-8.6										-8.0	-6.9	-6.1
LT-22	-8.5	-8.5										-8.2	-6.8	-6.5
LT-23	-8.7	-8.5										-8.1	-7.0	-6.0
LT-24	-8.2	-8.8	-7.1	-6.8	-7.9	-8.8	-8.5	-8.2	-5.9	-6.3	-7.4	-7.9	-6.5	-6.4
LT-29	-7.7	-7.3	-5.9	-6.3	-6.8	-7.7	-6.8	-7.2	-5.6	-5.8	-7.1	-7.2	-6.0	-5.8
LT-30	-7.9	-7.6	-6.1	-6.5	-7.2	-7.8	-7.2	-7.5	-5.6	-6.0	-7.0	-7.5	-6.0	-6.1
LT-31	-7.8	-7.8	-6.1	-6.1	-5.9	-7.8	-7.2	-7.3	-5.6	-5.9	-7.1	-7.6	-6.1	-5.7
LT-32	-7.6	-7.7	-6.2	-6.0	-6.7	-7.6	-7.3	-7.6	-5.3	-5.7	-7.0	-7.4	-6.1	-5.8
LT-33	-8.2	-8.0	-6.1	-7.2	-7.0	-7.9	-7.9	-7.7	-5.8	-5.9	-7.1	-8.0	-6.1	-5.5
LT-34	-8.1	-8.2	-6.3	-7.6	-6.5	-8.3	-8.1	-7.9	-6.0	-6.3	-7.1	-8.1	-6.3	-6.1
LT-35	-7.8	-8.1	-6.2	-7.0	-6.5	-8.5	-8.2	-8.0	-6.0	-6.3	-7.0	-7.8	-6.6	-5.9
LT-36	-8.1	-8.2	-6.3	-7.1	-6.2	-7.8	-8.1	-7.7	-5.8	-6.0	-7.0	-8.1	-6.7	-5.9
LT-37	-7.5	-9.3	-6.3	-7.0	-6.2	-8.3	-8.1	-8.1	-5.9	-6.2	-7.1	-7.7	-6.5	-5.7
LT-38	-7.6	-9.3	-6.4	-7.1	-6.0	-8.2	-8.2	-8.1	-5.9	-6.2	-7.2	-7.6	-6.3	-5.8

Анализ данных

Инструменты анализа

Гистограмма

Скользящее среднее

Генерация случайных чисел

Ранг и перцентиль

Регрессия

Выборка

Парный двухвыборочный t-тест для средних

Двухвыборочный t-тест с одинаковыми дисперсиями

Двухвыборочный t-тест с различными дисперсиями

Двухвыборочный z-тест для средних

OK

Отмена

Справка

Регрессия в Excel

Code	SERT	NET	5-HT3A	ADRA1A	CHRM1	DRD1	DRD2	DAT	GABA-A GABA	GABA-A Benz	GAT1	JAK3	CAPN1	CFD
	Y	X1	X2	X3	X4	X5	X6	X7	X8	X9	X10	X11	X12	X13
L-17	-8.1	-8.0	-6.6	-7.4	-8.3	-8.1	-7.9	-7.8	-6.1	-6.3	-7.4	-8.0	-6.5	-6.0
H-16	-8.5	-8.3										-8.0	-6.6	-6.4
H-18	-8.0	-8.6										-7.9	-6.3	-6.4
H-29	-7.1	-7.1										-6.8	-5.9	-5.5
H-42	-7.4	-7.4										-7.3	-6.3	-5.8
H-69	-7.9	-8.2										-7.8	-6.3	-6.4
H-88	-8.5	-8.6										-7.9	-6.8	-6.3
L-19	-8.2	-8.3										-7.9	-6.6	-6.1
L-20	-8.3	-8.4		<input checked="" type="checkbox"/> Метки			<input type="checkbox"/> Константа - ноль					-8.1	-6.6	-6.1
L-31	-8.3	-8.4		<input type="checkbox"/> Уровень надежности:				95	%			-8.0	-6.4	-6.6
L-86	-8.3	-8.3										-8.0	-6.9	-6.2
L-87	-8.4	-8.5										-8.2	-6.9	-6.3
L-91	-8.7	-8.6										-8.2	-7.0	-6.3
LT-13	-8.7	-8.6		<input type="radio"/> Выходной интервал:								-8.2	-6.4	-5.8
LT-21	-8.3	-8.6		<input checked="" type="radio"/> Новый рабочий лист:								-8.0	-6.9	-6.1
LT-22	-8.5	-8.5		<input type="radio"/> Новая рабочая книга								-8.2	-6.8	-6.5
LT-23	-8.7	-8.5										-8.1	-7.0	-6.0
LT-24	-8.2	-8.8										-7.9	-6.5	-6.4
LT-29	-7.7	-7.3		<input type="checkbox"/> Остатки			<input type="checkbox"/> График остатков					-7.2	-6.0	-5.8
LT-30	-7.9	-7.6		<input type="checkbox"/> Стандартизованные остатки			<input type="checkbox"/> График подбора					-7.5	-6.0	-6.1
LT-31	-7.8	-7.8										-7.6	-6.1	-5.7
LT-32	-7.6	-7.7										-7.4	-6.1	-5.8
LT-33	-8.2	-8.0										-8.0	-6.1	-5.5
LT-34	-8.1	-8.2										-8.1	-6.3	-6.1
LT-35	-7.8	-8.1										-7.8	-6.6	-5.9
LT-36	-8.1	-8.2	-6.3	-7.1	-6.2	-7.8	-8.1	-7.7	-5.8	-6.0	-7.0	-8.1	-6.7	-5.9
LT-37	-7.5	-9.3	-6.3	-7.0	-6.2	-8.3	-8.1	-8.1	-5.9	-6.2	-7.1	-7.7	-6.5	-5.7
LT-38	-7.6	-9.3	-6.4	-7.1	-6.0	-8.2	-8.2	-8.1	-5.9	-6.2	-7.2	-7.6	-6.3	-5.8

Регрессия

Входные данные

Входной интервал Y:

\$B\$2:\$B\$43

Входной интервал X:

\$C\$2:\$C\$43

Метки

Константа - ноль

Уровень надежности:

95 %

OK

Отмена

Справка

Параметры вывода

Выходной интервал:

Новый рабочий лист:

Новая рабочая книга

Остатки

Остатки

График остатков

Стандартизованные остатки

График подбора

Нормальная вероятность

График нормальной вероятности

Регрессия в Excel

ВЫВОД ИТОГОВ							
Регрессионная статистика							
Множественный R	0.480957309						
R-квадрат	0.231319934						
Нормированный R-квадрат	0.211610188						
Стандартная ошибка	0.393205969						
Наблюдения	41						
Дисперсионный анализ							
	df	SS	MS	F	Значимость F		
Регрессия	1	1.81456383	1.81456383	11.7363228	0.001456911		
Остаток	39	6.029826414	0.154610934				
Итого	40	7.844390244					
	Коэффициенты	Стандартная ошибка	t-статистика	P-значение	Нижние 95%	Верхние 95%	Нижние 95.0%
Y-пересечение	-4.533785677	1.066241889	-4.252117388	0.00012794	-6.690463445	-2.37710791	-6.690463445
X1	0.439361702	0.128249646	3.425831698	0.00145691	0.17995231	0.698771094	0.17995231
					Верхние 95.0%		Верхние 95.0%

$$Y = -4.534 + 0.431 * X1$$

$$t = -4.25 \quad t = 3.43$$

$$p = 0.00013 \quad p = 0.0014$$

$$N = 41 \quad R = 0.481 \quad F(1,39) = 11.74 \quad p = 0.0015$$

Множественная регрессия

$$Y = a_0 + \sum_{i=1}^M a_i X_i$$

Множественная регрессия

The screenshot shows a window titled "STATISTICA - Docking TDAz_L17". The menu bar includes File, Edit, View, Insert, Format, Statistics, Data Mining, Graphs, Tools, Data, Window, Help. The toolbar below has various icons for file operations like Open, Save, Print, and zoom. Below the toolbar is a ribbon with tabs: SLH, GLS, GRM, PLS, and several others. The main area displays a data grid titled "Data: Docking TDAz_L17* (14v by 42c)". The grid has 14 columns labeled 1 through 14 at the top, and 42 rows labeled L-17 through LT-55 on the left. Column 1 is labeled Y. The data consists of numerical values ranging from approximately -9.0 to -6.0. At the bottom of the grid, there are buttons for "Docking TDAz", "C1,V1", "-8.1", "Sel OFF", "Weight OFF", and "CAP".

	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14
	Y	X1	X2	X3	X4	X5	X6	X7	X8	X9	X10	X11	X12	X13
L-17	-8.1	-8.0	-6.6	-7.4	-8.3	-8.1	-7.9	-7.8	-6.1	-6.3	-7.4	-8.0	-6.5	-6.0
H-16	-8.5	-8.3	-6.5	-7.1	-6.6	-8.0	-8.1	-8.1	-5.7	-6.1	-7.3	-8.0	-6.6	-6.4
H-18	-8.0	-8.6	-6.7	-6.8	-6.6	-8.2	-8.0	-8.2	-6.1	-6.3	-7.4	-7.9	-6.3	-6.4
H-29	-7.1	-7.1	-5.5	-6.2	-7.6	-7.1	-7.1	-6.7	-5.3	-5.6	-6.6	-6.8	-5.9	-5.5
H-42	-7.4	-7.4	-6.0	-6.2	-6.4	-7.5	-7.3	-7.0	-5.4	-5.6	-7.0	-7.3	-6.3	-5.8
H-69	-7.9	-8.2	-6.5	-7.1	-6.5	-8.0	-8.1	-8.1	-5.9	-6.2	-7.4	-7.8	-6.3	-6.4
H-88	-8.5	-8.6	-7.0	-7.3	-8.0	-9.3	-8.4	-8.0	-6.1	-6.4	-7.2	-7.9	-6.8	-6.3
L-19	-8.2	-8.3	-6.6	-7.1	-6.7	-8.3	-8.1	-7.9	-6.2	-6.4	-7.6	-7.9	-6.6	-6.1
L-20	-8.3	-8.4	-6.6	-7.1	-7.3	-8.2	-8.3	-8.1	-5.9	-6.3	-7.4	-8.1	-6.6	-6.1
L-31	-8.3	-8.4	-6.9	-7.4	-7.8	-8.0	-8.4	-8.1	-6.2	-6.5	-7.4	-8.0	-6.4	-6.6
L-86	-8.3	-8.3	-6.8	-6.8	-8.5	-8.9	-8.2	-8.6	-6.1	-6.2	-7.2	-8.0	-6.9	-6.2
L-87	-8.4	-8.5	-7.0	-7.5	-7.8	-8.6	-8.5	-8.9	-6.2	-6.4	-7.3	-8.2	-6.9	-6.3
L-91	-8.7	-8.6	-6.9	-6.9	-8.3	-9.2	-8.7	-8.9	-6.1	-6.4	-7.5	-8.2	-7.0	-6.3
LT-13	-8.7	-8.6	-7.2	-8.2	-7.2	-9.0	-8.9	-8.7	-6.3	-6.5	-7.5	-8.2	-6.4	-5.8
LT-21	-8.3	-8.6	-6.8	-7.1	-8.2	-8.8	-8.2	-8.1	-6.0	-6.2	-7.3	-8.0	-6.9	-6.1
LT-22	-8.5	-8.5	-6.9	-7.4	-8.3	-9.0	-8.3	-8.4	-6.0	-6.3	-7.5	-8.2	-6.8	-6.5
LT-23	-8.7	-8.5	-6.8	-7.0	-7.7	-8.8	-8.2	-8.4	-6.0	-6.4	-7.6	-8.1	-7.0	-6.0
LT-24	-8.2	-8.8	-7.1	-6.8	-7.9	-8.8	-8.5	-8.2	-5.9	-6.3	-7.4	-7.9	-6.5	-6.4
LT-29	-7.7	-7.3	-5.9	-6.3	-6.8	-7.7	-6.8	-7.2	-5.6	-5.8	-7.1	-7.2	-6.0	-5.8
LT-30	-7.9	-7.6	-6.1	-6.5	-7.2	-7.8	-7.2	-7.5	-5.6	-5.9	-7.0	-7.5	-6.0	-6.1
LT-31	-7.8	-7.8	-6.1	-6.1	-5.9	-7.8	-7.2	-7.3	-5.6	-5.9	-7.1	-7.6	-6.1	-5.7
LT-32	-7.6	-7.7	-6.2	-6.0	-6.7	-7.6	-7.3	-7.6	-5.3	-5.7	-7.0	-7.4	-6.1	-5.8
LT-33	-8.2	-8.0	-6.1	-7.2	-7.0	-7.9	-7.9	-7.7	-5.8	-5.9	-7.1	-8.0	-6.1	-5.5
LT-34	-8.1	-8.2	-6.3	-7.6	-6.5	-8.3	-8.1	-7.9	-5.9	-6.3	-7.1	-8.1	-6.3	-6.1
LT-35	-7.8	-8.1	-6.2	-7.0	-6.5	-8.5	-8.2	-8.0	-6.0	-6.3	-7.0	-7.8	-6.6	-5.9
LT-36	-8.1	-8.2	-6.3	-7.1	-6.2	-7.8	-8.1	-7.7	-5.8	-6.0	-7.0	-8.1	-6.7	-5.9
LT-37	-7.5	-9.3	-6.3	-7.0	-6.2	-8.3	-8.1	-8.1	-5.9	-6.2	-7.1	-7.7	-6.5	-5.7
LT-38	-7.6	-9.3	-6.4	-7.1	-6.0	-8.2	-8.2	-8.1	-5.9	-6.2	-7.2	-7.6	-6.3	-5.8
LT-39	-7.8	-8.2	-6.2	-6.7	-6.3	-8.4	-8.1	-8.2	-5.7	-6.0	-7.3	-7.6	-6.2	-5.8
LT-46	-8.6	-8.2	-6.2	-7.8	-7.8	-7.9	-8.3	-7.9	-6.0	-6.4	-7.4	-8.2	-6.2	-6.0
LT-47	-8.9	-8.5	-6.5	-7.9	-7.1	-8.2	-8.7	-8.3	-6.2	-6.7	-7.5	-8.5	-6.4	-6.3
LT-48	-8.7	-8.5	-6.4	-7.4	-6.8	-8.4	-8.6	-8.2	-6.2	-6.6	-7.6	-8.0	-6.6	-6.1
LT-49	-8.5	-9.0	-6.6	-7.0	-6.8	-8.4	-8.5	-8.4	-5.9	-6.3	-7.6	-8.0	-6.3	-6.3
LT-50	-8.1	-8.7	-6.6	-7.4	-6.8	-8.3	-8.5	-7.9	-6.2	-6.4	-7.5	-7.9	-5.9	-6.4
LT-51	-8.9	-8.4	-6.7	-7.4	-6.6	-8.1	-8.6	-8.3	-6.1	-6.5	-7.4	-8.4	-6.8	-6.1
LT-52	-8.9	-8.6	-7.1	-8.2	-7.0	-9.4	-9.2	-8.6	-6.4	-6.8	-8.2	-8.6	-7.5	-6.4
LT-53	-7.4	-7.5	-6.1	-6.3	-6.8	-7.4	-7.4	-7.2	-5.6	-5.9	-7.0	-7.4	-6.3	-5.9
LT-55	-8.4	-8.6	-7.0	-7.5	-7.3	-8.5	-8.3	-8.1	-6.0	-6.1	-7.8	-8.1	-6.7	-6.0

Множественная регрессия

STATISTICA - Docking TDAz_L17

File Edit View Insert Format Statistics Data Mining Graphs Tools Data Window Help

Resume... Ctrl+R Add to MS Word

Basic Statistics/Tables

Multiple Regression

ANOVA

Nonparametrics

Distribution Fitting

Advanced Linear/Nonlinear Models

Multivariate Exploratory Techniques

Industrial Statistics & Six Sigma

Power Analysis

Automated Neural Networks

PLS, PCA, Multivariate/Batch SPC

Variance Estimation and Precision (VEPAC)

Statistics of Block Data

STATISTICA Visual Basic

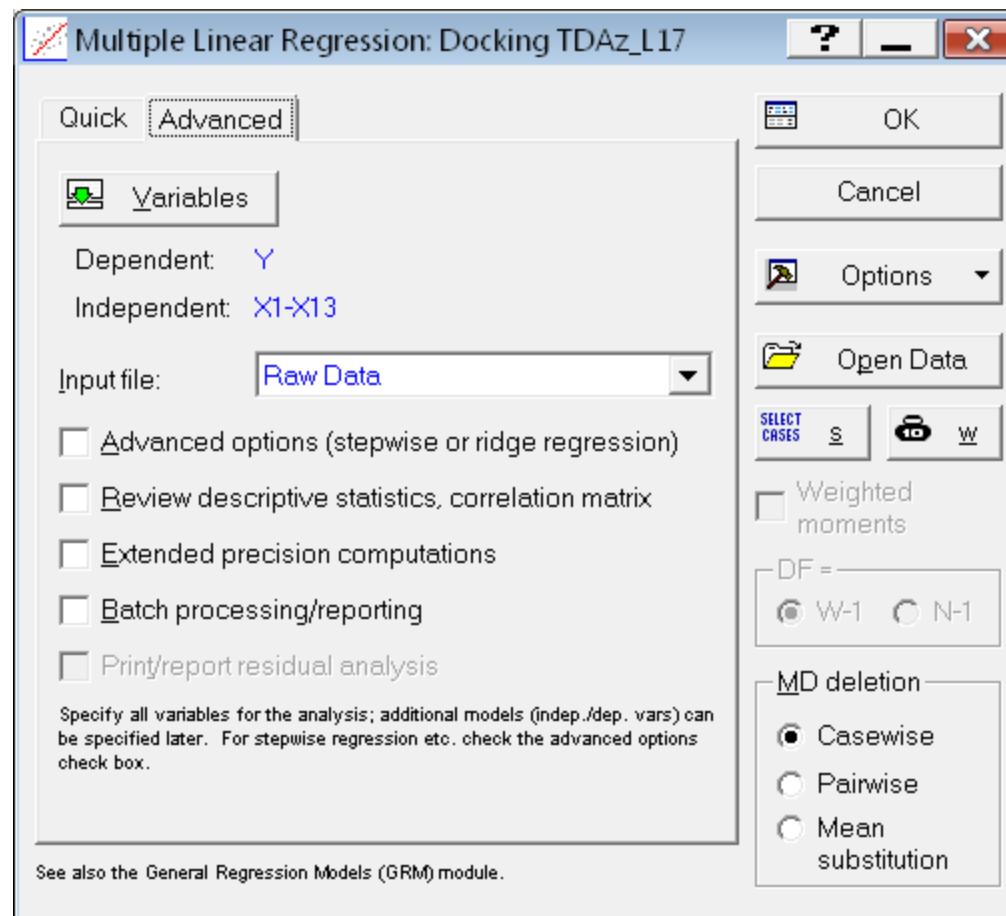
Batch (ByGroup) Analysis

Probability Calculator

Data: Docking TDAz_L17* (14)

	Docking		1	2	Y	X1	8	9	10	11	12	13	14										
	L-17	H-16	H-18	H-29	H-42	H-69	H-88	L-19	L-20	L-31	L-86	L-87	L-91	X7	X8	X9	X10	X11	X12	X13			
L-17	-8.1	-8.0	-8.5	-8.3	-8.0	-8.6	-7.1	-7.1	-7.4	-7.4	-7.9	-8.2	-8.5	-7.8	-6.1	-6.3	-7.4	-8.0	-6.5	-6.0			
H-16		-8.5	-8.0	-8.6	-7.1	-7.4	-7.9	-8.2	-8.4	-8.4	-8.5	-8.2	-8.5	-8.1	-5.7	-6.1	-7.3	-8.0	-6.6	-6.4			
H-18			-8.0	-8.6	-7.1	-7.4	-7.9	-8.2	-8.4	-8.4	-8.5	-8.2	-8.5	-8.2	-6.1	-6.3	-7.4	-7.9	-6.3	-6.4			
H-29				-7.1	-7.1	-7.4	-7.9	-8.2	-8.4	-8.4	-8.5	-8.2	-8.5	-7.7	-5.3	-5.6	-6.6	-6.8	-5.9	-5.5			
H-42					-7.4	-7.4	-7.9	-8.2	-8.4	-8.4	-8.5	-8.2	-8.5	-7.0	-5.4	-5.6	-7.0	-7.3	-6.3	-5.8			
H-69						-7.4	-7.9	-8.2	-8.4	-8.4	-8.5	-8.2	-8.5	-6.7	-5.9	-6.2	-7.4	-7.8	-6.3	-6.4			
H-88							-7.9	-8.2	-8.4	-8.4	-8.5	-8.2	-8.5	-8.0	-6.1	-6.4	-7.2	-7.9	-6.8	-6.3			
L-19								-8.2	-8.3	-8.4	-8.4	-8.3	-8.3	-7.9	-6.2	-6.4	-7.6	-7.9	-6.6	-6.1			
L-20									-8.3	-8.4	-8.4	-8.3	-8.3	-8.3	-8.1	-5.9	-6.3	-7.4	-8.1	-6.6	-6.1		
L-31										-8.3	-8.4	-8.3	-8.3	-8.3	-8.1	-6.2	-6.5	-7.4	-8.0	-6.4	-6.6		
L-86											-8.3	-8.3	-8.5	-8.6	-8.6	-6.1	-6.2	-6.2	-7.2	-8.0	-6.9	-6.2	
L-87												-8.4	-8.5	-8.9	-8.9	-6.2	-6.4	-7.3	-8.2	-6.9	-6.3		
L-91													-8.7	-8.6	-8.9	-8.9	-6.1	-6.4	-7.5	-8.2	-7.0	-6.3	
LT-13														-8.7	-8.6	-7.2	-8.2	-7.2	-9.0	-8.9			

Множественная регрессия



Множественная регрессия

Multiple Regression Results: Docking TDAz_L17

Multiple Regression Results

Dependent: Y Multiple R = .93447006 F = 14.30703
 R² = .87323430 df = 13,27
No. of cases: 41 adjusted R² = .81219896 p = .000000
 Standard error of estimate: .191910436
Intercept: .291541337 Std.Error: .9883475 t(27) = .29498 p = .7703

X1 beta=-.23 X2 beta=.083 X3 beta=-.09
X4 beta=.139 X5 beta=.193 X6 beta=-.01
X7 beta=.148 X8 beta=-.57 X9 beta=.799
X10 beta=-.03 X11 beta=.797 X12 beta=-.18
X13 beta=-.13

(significant betas are highlighted)

Alpha for highlighting effects: .05

Quick | Advanced | Residuals/assumptions/prediction |

Summary: Regression results

OK Cancel Options By Group

Множественная регрессия

Workbook1* - Regression Summary for Dependent Variable: Y (Docking TDAz_L17)

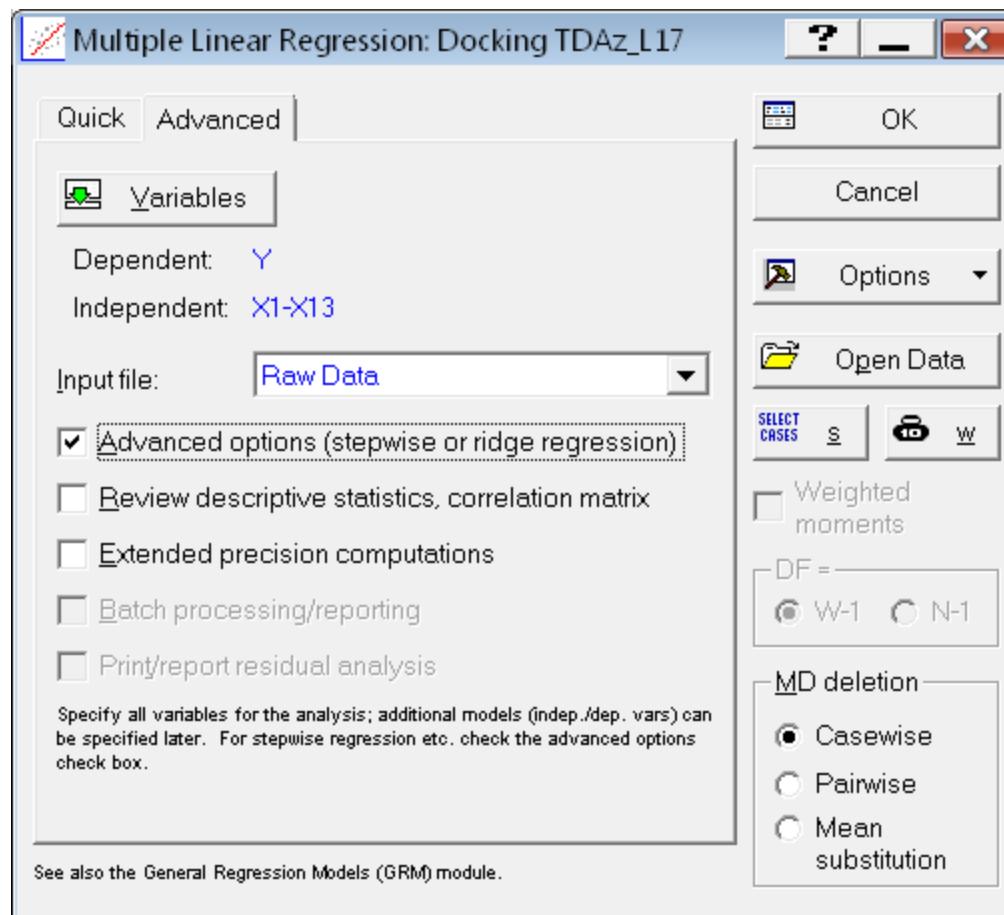
Workbook1*
Multiple Regression (Regression results)
Summary Statistics
Regression Summary

Regression Summary for Dependent Variable: Y (Docking TDAz_L17)
R= .93447006 R?= .87323430 Adjusted R?= .81219896
F(13,27)=14.307 p<.00000 Std.Error of estimate: .19191

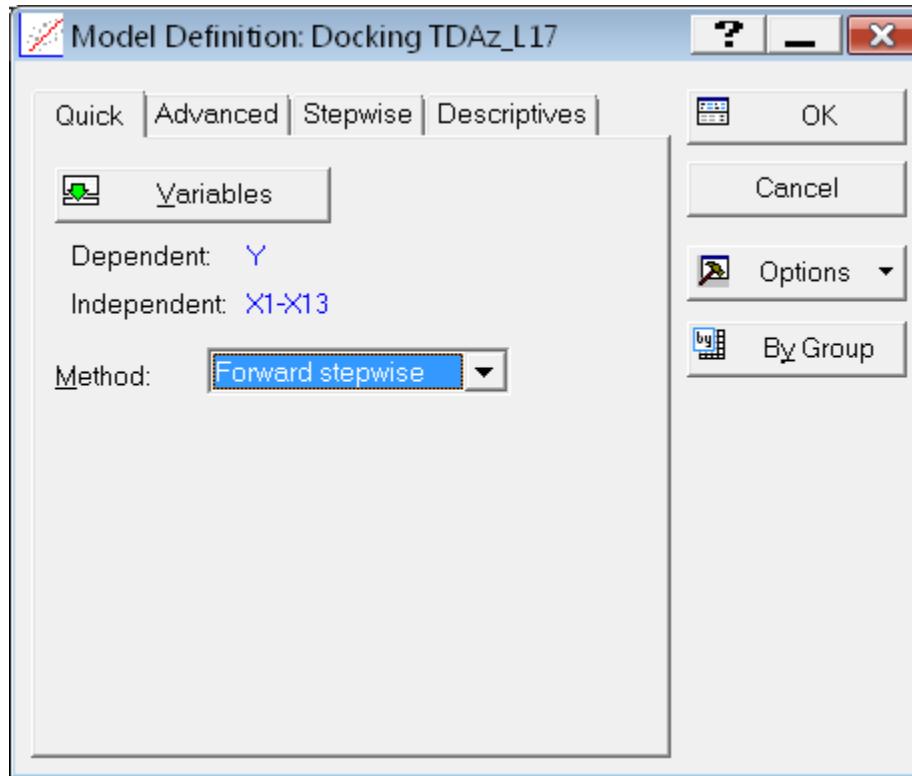
N=41	Beta	Std.Err. of Beta	B	Std.Err. of B	t(27)	p-level	
Intercept			0.291541	0.988348	0.29498	0.770267	
X1	-0.226829	0.136489	-0.207212	0.124685	-1.66189	0.108104	
X2	0.083268	0.180384	0.097437	0.211080	0.46161	0.648056	
X3	-0.089745	0.170940	-0.076470	0.145654	-0.52501	0.603863	
X4	0.138596	0.094994	0.085356	0.058503	1.45899	0.156105	
X5	0.192758	0.152140	0.165161	0.130358	1.26697	0.215985	
X6	-0.006810	0.224975	-0.005936	0.196106	-0.03027	0.976074	
X7	0.148488	0.151335	0.128070	0.130526	0.98118	0.335213	
X8	-0.566978	0.250708	-0.940539	0.415890	-2.26151	0.031991	
X9	0.799137	0.283339	1.292493	0.458261	2.82043	0.008880	
X10	-0.027918	0.128632	-0.039913	0.183897	-0.21704	0.829809	
X11	0.797070	0.182418	0.966990	0.221306	4.36948	0.000166	
X12	-0.178789	0.124090	-0.225980	0.156843	-1.44080	0.161138	
X13	-0.134954	0.115016	-0.198379	0.169072	-1.17335	0.250905	

Regression Summary for Dependent Variable: Y (Docking TDAz_L17)

Пошаговая регрессия



Пошаговая регрессия



Пошаговая регрессия

Multiple Regression Results: Docking TDAz_L17

Multiple Regression Results (Step 7)

Dependent: Y Multiple R = .92706464 F = 28.82714
 R² = .85944885 df = 7,33
No. of cases: 41 adjusted R² = .82963497 p = .000000
 Standard error of estimate: .182784695
Intercept: .550090901 Std.Error: .7413842 t(33) = .74198 p = .4633

X11 beta=.662 X4 beta=.174 X9 beta=.701
X8 beta=-.50 X13 beta=-.10 X7 beta=.216
X1 beta=-.15

(significant betas are highlighted)

Alpha for highlighting effects: .05

Quick | Advanced | Residuals/assumptions/prediction

Summary: Regression results

OK Cancel Options By Group

Пошаговая регрессия

Workbook2* - Regression Summary for Dependent Variable: Y (Docking TDAz_L17)

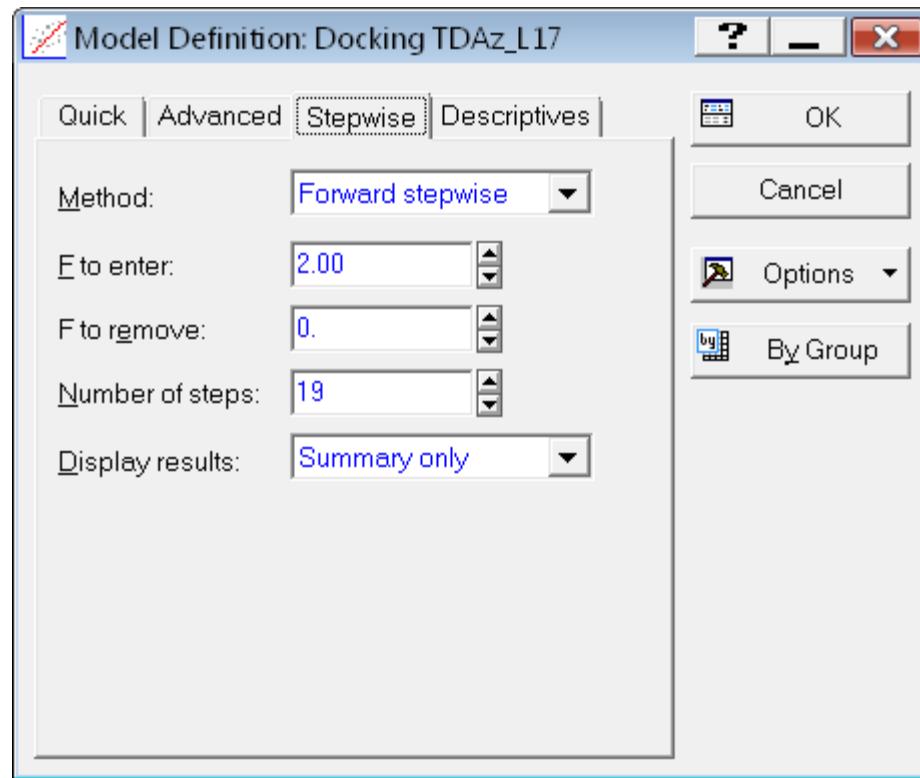
Workbook2*
Multiple Regression (Regression results)
Summary Statistics
Regression Summary

Regression Summary for Dependent Variable: Y (Docking TDAz_L17)
R= .92706464 R?= .85944885 Adjusted R?= .82963497
F(7,33)=28.827 p<.00000 Std.Error of estimate: .18278

N=41	Beta	Std.Err. of Beta	B	Std.Err. of B	t(33)	p-level
Intercept			0.550091	0.741384	0.74198	0.463349
X11	0.661871	0.130843	0.802970	0.158736	5.05852	0.000016
X4	0.174249	0.075126	0.107314	0.046267	2.31942	0.026706
X9	0.701477	0.225358	1.134542	0.364485	3.11273	0.003814
X8	-0.495377	0.224526	-0.821763	0.372458	-2.20633	0.034431
X13	-0.100060	0.086422	-0.147087	0.127038	-1.15781	0.255251
X7	0.215857	0.124320	0.186176	0.107226	1.73629	0.091841
X1	-0.153773	0.110513	-0.140474	0.100955	-1.39145	0.173399

Regression Summary for Dependent Variable: Y (Docking TDAz_L17)

Пошаговая регрессия



Пошаговая регрессия

Multiple Regression Results: Docking TDAz_L17

Multiple Regression Results (Step 4)

Dependent: Y Multiple R = .91557062 F = 46.64815
 R² = .83826956 df = 4,36
No. of cases: 41 adjusted R² = .82029951 p = .000000
 Standard error of estimate: .187725916
Intercept: 1.146150494 Std.Error: .7012737 t(36) = 1.6344 p = .1109

X11 beta=.692 X4 beta=.208 X9 beta=.632
X8 beta=-.47

(significant betas are highlighted)

Alpha for highlighting effects: .05

Quick | Advanced | Residuals/assumptions/prediction

Summary: Regression results

OK Cancel Options By Group

Пошаговая регрессия

Workbook3* - Regression Summary for Dependent Variable: Y (Docking TDAz_L17)

Workbook3*

Multiple Regression (

Regression results

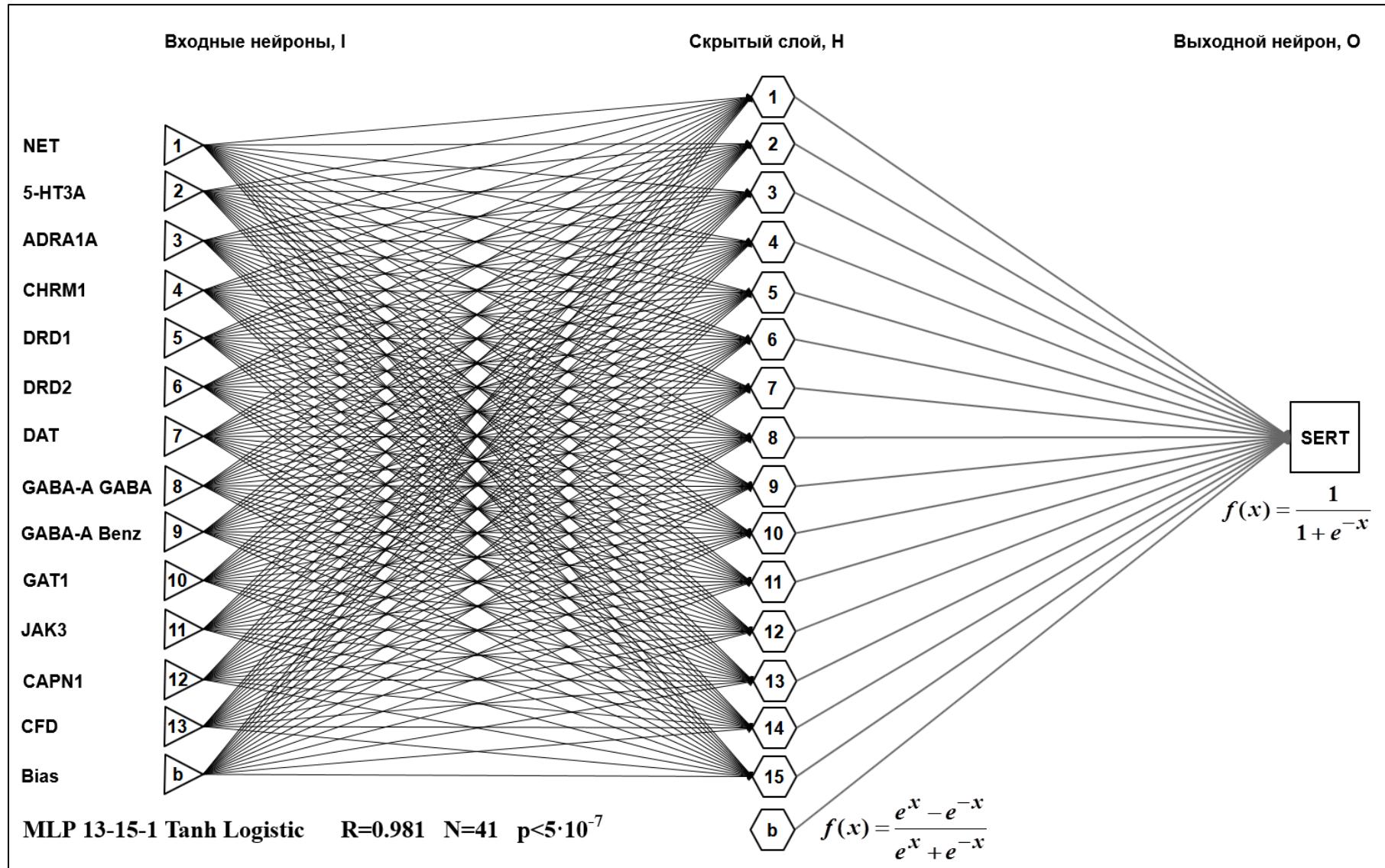
Summary Stat

Regression Sum

Regression Summary for Dependent Variable: Y (Docking TDAz_L17)
R= .91557062 R?= .83826956 Adjusted R?= .82029951
F(4,36)=46.648 p<.00000 Std.Error of estimate: .18773

N=41	Beta	Std.Err. of Beta	B	Std.Err. of B	t(36)	p-level
Intercept			1.146150	0.701274	1.63438	0.110894
X11	0.692323	0.122767	0.839913	0.148939	5.63933	0.000002
X4	0.207594	0.070924	0.127849	0.043680	2.92698	0.005898
X9	0.632379	0.221288	1.022787	0.357902	2.85772	0.007049
X8	-0.466150	0.229538	-0.773279	0.380773	-2.03081	0.049709

Нейросетевая регрессия



To be continued ...

