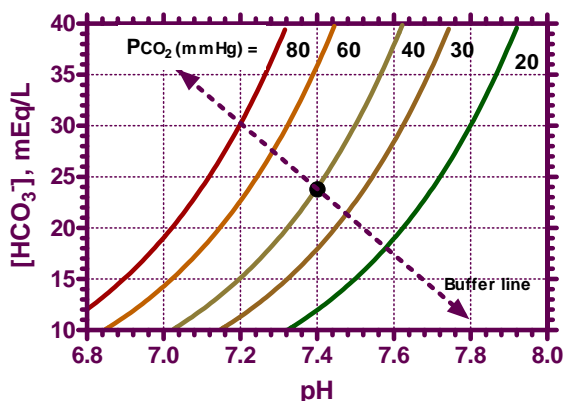


17: 理論曲線群の作成

3つ以上の変数の関係をグラフで表現する方法の一つとして、曲線群を利用する方法があります。各曲線において、独立変数に対して従属変数をプロットしますが、もう一つの独立変数を定数として固定します。固定させた第2の独立変数を任意に変化させることで、複数の曲線を描きます。このセクションでは酸塩基ダイアグラム¹、つまり、血中の $[\text{HCO}_3^-]$ 、 PCO_2 、pH のデータを用いた理論曲線群の作成方法を紹介します。



酸塩基ダイアグラム

物理学の世界では血液ガスと化学計測値をダイアグラムにプロットし、正常値(グラフ上の黒点)からの変位に基づく、酸塩基かく乱/補償の状態について分析を行います。呼吸器と代謝のメカニズムは変位を「buffer line」と並行な成分や PCO_2 の等高線と並行な成分に分解することで予測できます。

Prism には理論曲線群を簡単に、しかも、すばやく作成する機能が用意されています。このセクションでは上図のグラフを作成する方法を紹介します。

理論曲線の作成とプロット

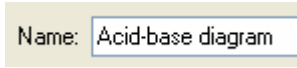
理論曲線を作成する場合、わざわざデータをデータテーブルに用意する必要はありません。プロジェクトファイルを開き、デフォルトの設定のまま Welcome ダイアログで **OK** ボタンをクリックします。そしてデータテーブルの画面で **Analyze** ボタンをクリックします。

¹ Davenport, H.W., *The ABC of Acid-Base Chemistry*, Chicago, University of Chicago Press, 1975.

Analyze Data ダイアログが表示されます。 **Simulate and generate** ラジオボタンをチェックして右側のリストで **Create a family of theoretical curves** を選びます。

Prism は内蔵の関数、またはユーザ定義の関数を使って理論曲線を作成します。ここではユーザ定義の関数を利用します。 **Parameters: Create a Family of Theoretical Curves** ダイアログで **More equations** のラジオボタンをチェックします。そしてリストで **Enter your own equation** をクリックします。

User-defined Equation ダイアログが表示されます。下図のようなユーザ定義関数名を入力します。



Name: Acid-base diagram

我々は Henderson-Hasselbalch 方程式を編集した式を使って理論曲線をプロットします。

$$pH = pK + \log \frac{[HCO_3^-]}{0.03 \cdot PCO_2}$$

Prism に関数を入力する場合は、必ず従属変数の Y を、単独で左辺に記述しなければなりません。

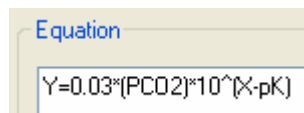
$$[HCO_3^-] = 0.03 \cdot PCO_2 \cdot 10^{(pH-pK)}$$

そして従属変数と独立変数は明瞭に Y と X で記述する必要があります。

$$y = 0.03 \cdot PCO_2 \cdot 10^{(x-pK)}$$

PCO₂ を変更することによって、曲線群を作成します。また、pK は定数 6.1 と記述しても良いのですが、関数形を明確に表現するために変数パラメータとして、そのまま表記することにします。

User-defined Equation ダイアログの **Enter Equation** タブで、次のように入力し、**OK** ボタンをクリックします。



Equation
Y=0.03*(PCO2)*10^(X-pK)

Prism は PCO₂ と pK をパラメータとして認識します。同時にプロットする理論曲線の本数は 5 本ですから、 **Simulate a family of 5 curves** とします。

Simulate a family of curves.

最初の曲線のためのパラメータを入力します。(Curve A).

	Value
PCO2	20.0
PK	6.1

Curve B として **Copy Previous Parameters** ボタンをクリックします。そして PCO₂ の値だけを変更します。

	Value
PCO2	30.0
PK	6.1

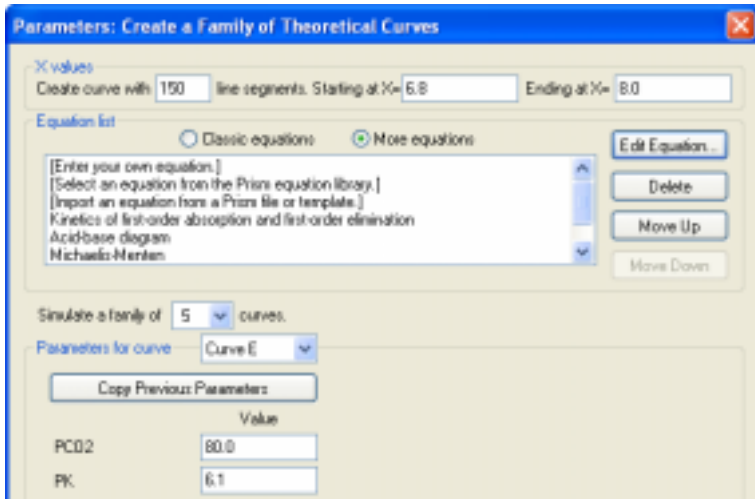
同じように操作して PCO₂ の値を変更します。5本の曲線 A-E において、PCO₂ は 20, 30, 40, 60, 80 とします。

ここでは pK を変数パラメータとし、**Copy Previous Parameters** 機能で連続的に設定を行いました。もちろん、次に示すように **User-defined Equation** ダイアログで直接、数値を入力しても全く問題はありません。

Equation

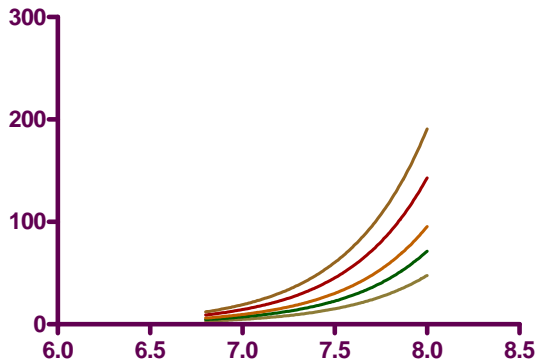
$$Y=0.03*(PCO2)*10^{(X-6.1)}$$

ダイアログの先頭で X の範囲を **X = 6.8** から **X = 8.0** と設定します。次に示すダイアログのように設定してください。



OK ボタンをクリックすると理論曲線がグラフ上にプロットされます。

Theoretical curve:Curve

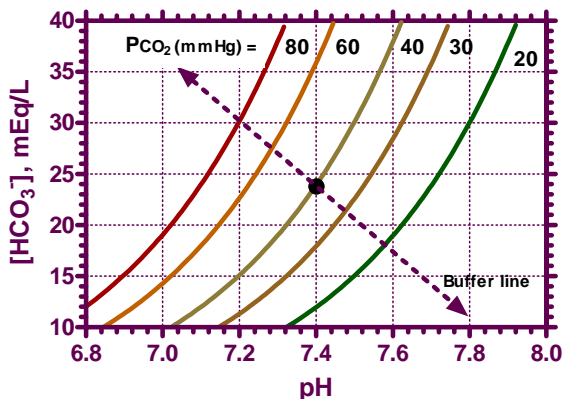


曲線が図のようにプロットされないときは、「Analysis parameters」ボタンをクリックしてパラメータダイアログの内容を確認します。



グラフの仕上げ

次に示すようなグラフを作成してみましょう。



Change... Size & Frame と操作して **Format Axes** ダイアログを表示します。 **General** タブを選択して **Frame & axes** のドロップダウンリストから **Frame with grid** を選びます。

同じダイアログの **X axis** タブを表示します。 **Range** 項目の **Auto** オプションを外します。そして **Minimum** と **Maximum** の値を次の図のように変更します。 **Tick options** の項目を同じ要領で変更します。



次は **Left Y axis** タブを表示します。同じように範囲と目盛の設定を変更します。



グラフタイトルは自由に変更してください。 X 軸や Y 軸のタイトルに下付き文字や上付き文字を入力する場合は該当するテキストツールを利用します。



プロットエリア内に文字を入力する場合は次のテキストツールを利用します。

T

最初にテキストツールボタンをクリックします。そしてラベルを入力する位置をクリックして、文字を入力します。文字の入力が完了したら、余白をクリックします。入力モードが解除されます。ラベルの位置を微調整する時は、目的のラベルをクリックし、キーボードの矢印キーを使って慎重に移動します。

ラベルがグリッド線と重なって、よく見えない事があります。そんな時はラベルを選択し、**Change... Selected text...** と操作します。Format Text ダイアログが表示されますので、**Borders and Fill...** ボタンをクリックします。**Format Object** ダイアログで **Interior...Fill** として、プロットの背景と一致するような色を選択します。

「buffer line」は次に示すドロツールを利用して作成します。



ドロツールで、とりあえず矢印を引きます。矢印をダブルクリックすると、**Format Object** ダイアログが表示されますので、**Thickness, Style, Direction** などの項目を編集します。

サンプル図の中央にある「normal」ポイントを作成します。何も入力しなかった最初のデータテーブルを表示し、たとえば、 $X = 7.4, Y = 24$ という値を入力します。そしてグラフに戻り、**Change... Add Data Sets....** と操作して、**Add Data Sets to Graph** ダイアログで **Data sets to add** に表示される目的のデータテーブル(おそらく Data 1)を選択して **OK** ボタンをクリックします。データポイントがグラフに表示されたら、記号をダブルクリックして **Format Symbols and Lines** ダイアログを表示します。そして、記号の形状を編集します。