

非線形回帰チュートリアル

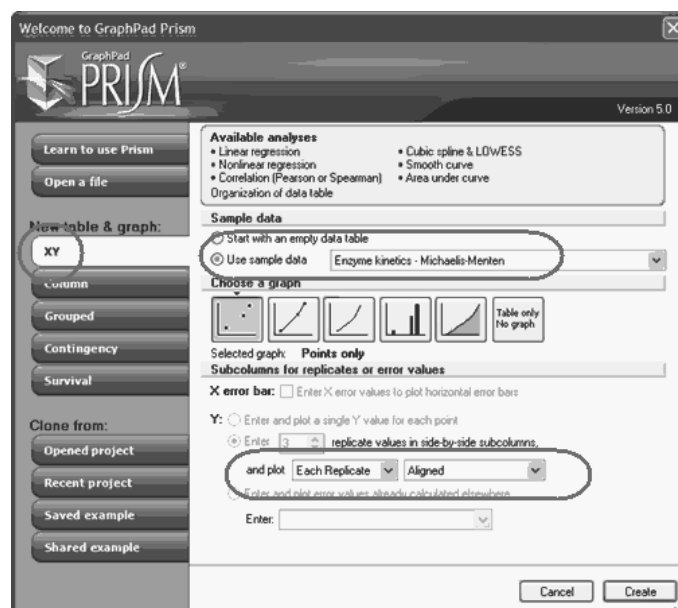
非線形回帰: 用例

Prismでは簡単にモデルのデータへのフィットが行えます。Prismを初めて使われる方はまず非線形回帰も含むこちらの用例をご参照ください。本セッション中のチュートリアルでは Prism の操作法に留まらず、非線形回帰の原理(モデルの比較、外れ値の特定、グローバルフィッティング、等を含む)についてもレビューします。

サンプル: 酵素反応速度論曲線のフィット

データテーブルの作成

“Welcome”ダイアログ上で”XY”プロットを選択、サンプルデータ”Enzyme kinetics -- Michaelis-Menten”を選択、さらに”Each replicate”(”Mean and error”ではありません)のグラフ化を選択します。



2. データのチェック

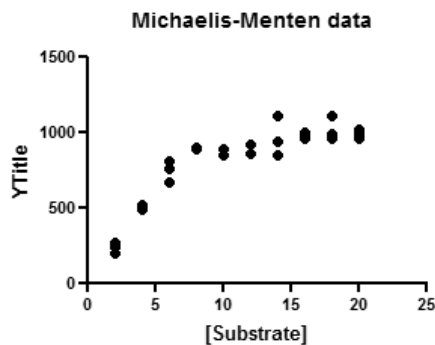
サンプルデータは一部、操作法を説明したフローティングノートによって隠されているかも知れません。適宜移動するか縮小してください。

Table format		X	A		
XY	[Substrate]	Enzyme Activity			
	X	A:Y1	A:Y2	A:Y3	
1	Title	2	265	241	195
2	Title	4	521	487	505
3	Title	6	662	805	754
4	Title	8	885	901	898
5	Title	10	884	850	
6	Title	12	852		914
7	Title	14	932	1110	851
8	Title	16	987	954	999
9	Title	18	984	961	1105
10	Title	20	954	1021	987

反復データは3重になっています。一部データが欠落していますが問題はありません。

3. グラフの表示

Prism はグラフに対しデータテーブルと同じ名称を自動的に付加します。グラフセクション中の”Michaelis-Menten data”を選択してください。

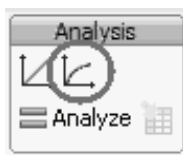


Prism が自動的に作成するグラフは比較的完成度の高いものです。しかし記号や色、軸ラベル、凡例の位置、等を適宜カスタマイズできます。

4. 非線形回帰の選択

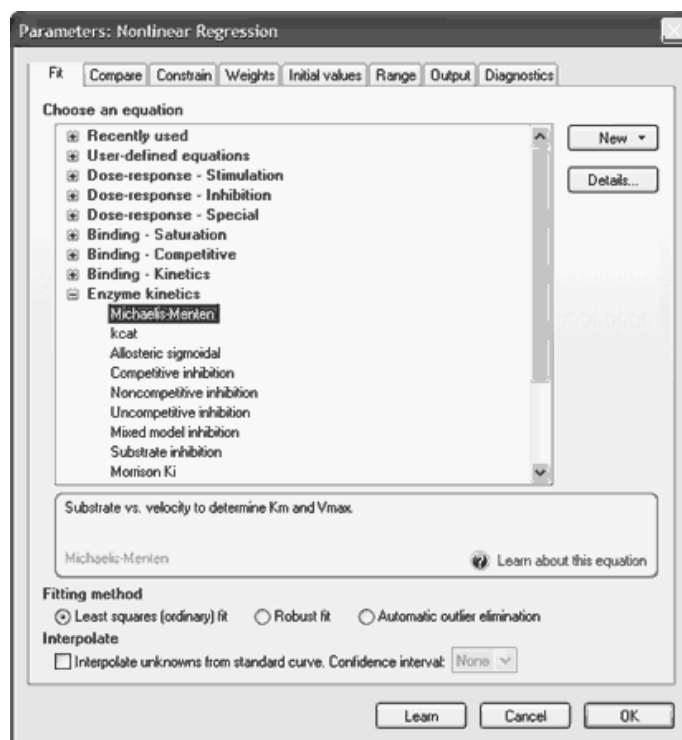
☰ Analyze をクリック、”XY analyses”の一覧中から”Nonlinear regression”を選択します。

次のショートカットボタンをクリックする形でも構いません。



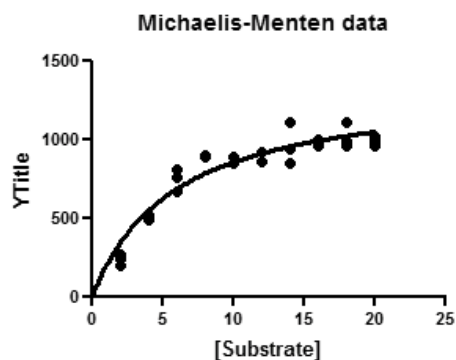
5. モデルの選択

“Nonlinear regression”ダイアログの”Fit”タブ上で”Enzyme Kinetics”をオープンし、”Michaelis-Menten”を選択します。



「酵素反応速度の原理」、「Michaelis-Menten 曲線のフィッティング」については別ページを参照ください。本例に関しては他のすべてのセッティングをデフォルトのままとします。”OK”をクリックすると曲線が追加されたグラフが生成されます。

6. グラフのチェック



7. 結果のチェック

Nonlin fit		A
		Enzyme Activity
		Y
1	Michaelis-Menten	
2	Best-fit values	
3	VMAX	1353
4	KM	5.886
5	Std. Error	
6	VMAX	75.93
7	KM	0.9498
8	95% Confidence Intervals	
9	VMAX	1197 to 1509
10	KM	3.933 to 7.839
11	Goodness of Fit	
12	Degrees of Freedom	26
13	R ²	0.9041
14	Absolute Sum of Squares	170343
15	Sy.x	80.94
16	Constraints	
17	KM	KM > 0.0
18	Number of points	
19	Analyzed	26

非線形回帰のゴールはパラメータに対する best-fit 値を見出すことです。これらはテーブルの上部にレポートされています。それら best-fit 値がどれだけ正確に関する情報がなければ安心して利用できません。それに関する情報は標準誤差と信頼区間としてレポートされています。

8. 反復データテストの実行

反復データ (Replicates) テストは反復データ間のバラツキと曲線周囲でのデータ点のバラツキとを比べることによってフィットの適合度を評価します。これはデフォルトでは計算されないため、ステップ 7 での結果中には表示されていません。

フィットをはじめからやり直す必要はありません。結果テーブル左上隅にあるボタンをクリックすると "Nonlinear regression" ダイアログに戻ることができます。

Nonlin fit		A
		Enzyme
		Y
1	Michaelis-Menten	
2	Best-fit values	
3	VMAX	1270
4	KM	5.172

“Diagnostics”タブをクリック、“Replicates test”にチェックを入れます。この設定を、今後フィットを行う際のデフォルトとする場合、“Make these diagnostics choices the default for future fits”にチェックを入れます。

すなわちデータの曲線からのバラツキが反復データ間のバラツキから期待されるものに比べて大きいということです。このことは別のモデルによるフィットを検討した方が良いことを示唆するものです。次の例はまさにこれを行うものです。

16	Replicates test for lack of fit	
17	SD replicates	60.86
18	SD lack of fit	113.8
19	Discrepancy (F)	3.499
20	P value	0.0130
21	Evidence of inadequate model?	Yes