



Version 5.0

フィッティングガイド

Clearly the fastest,
easiest way to organize, analyze and graph
scientific data.

Harvey Motulsky

CONTENTS

相関	9
相関の基本的な考え方	9
相関の計算結果	11
分析チェックリスト: 相関	12
モデルを使わないフィッティング	14
スプラインと LOWESS 曲線	14
実験的に非線形回帰を利用する	15
曲線の作成とシミュレーション	16
関数のプロット	16
スクリプトによるシミュレーション	21
シミュレーションと信頼区間	22
線形回帰	24
線形回帰の目的	24
線形回帰の原理	25
SCATCHARD や LINEWEAVER-BURKE などの注意点	25
非線形回帰を利用すべき場合	27
線形回帰の実行方法	28
最適な傾きと切片を見つける	28
線形標準曲線を使った補間計算	30
線形回帰の実行結果	32
勾配と切片	32
線形回帰の適合度を示す R^2	32
勾配の有意差	34
勾配と切片を比較する	34
線形回帰とラン検定	36
分析チェックテスト: 線形回帰	36
グラフ作成のコツ: 線形回帰	37
DEMING 回帰	40
回帰の基本的な考え方	40
DEMING 回帰の実行方法	40
分析チェックリスト: DEMING 回帰	42
非線形回帰	43
非線形回帰の基本概念	43
線形/非線形回帰の違い	43
その他の回帰との違い	44
非線形回帰のためのデータの準備	45
モデルの理解	46
モデルとは何か?	46
モデルの例	46

モデルの自動選択	48
助言: モデルの解釈法	49
モデルの比較	51
なぜ比較が必要か?	51
モデル比較の手法	52
F 検定アプローチによるモデル比較	53
AIC アプローチによるモデル比較	54
グローバル非線形回帰	56
グローバル非線形回帰とは	56
不完全なデータセットへのグローバル回帰の適用	57
複数データセットによってパラメータ値が規定されるケース	58
カラム定数	59
データセット間で単位が異なる場合	61
外れ値の除去とロバスト非線形回帰	62
外れ値自動除去機能の使用	62
外れ値自動除去を回避すべき場合	63
外れ値は常に「悪い」点か	64
外れ値検出のための ROUT 手法	65
ロバスト非線形回帰	66
非線形回帰の動作原理	68
2乗和の最小化	68
非線形回帰の動作原理	68
非線形回帰の重み付け	70
標準誤差と信頼区間の算出法	72
信頼帯/予測帯の算出法	73
反復データ	73
依存度の計算	75
非線形回帰チュートリアル	78
非線形回帰: 用例	78
サンプル: 酵素反応速度論曲線のフィット	78
サンプル: 酵素反応速度論モデルの比較	82
サンプル: S 字状標準曲線による補間	86
サンプル: 外れ値の自動除去	90
サンプル: グローバル非線形回帰(用量反応曲線)	93
サンプル: あいまいなフィット(用量反応)	98
PRISM の非線形回帰	103
用量-反応 - 基本概念	103
EC50	104
EC50 に対する信頼区間	105
HILL SLOPE	106
用量-反応数式の選択	108
対数値への変換	109

用量-反応 - 刺激	111
数式: LOG(AGONIST) VS. 反応	111
数式: LOG(AGONIST) VS. 反応 -- 可変傾斜	112
数式: LOG (AGONIST) VS. 正規化反応	113
数式: LOG(AGONIST) VS. 正規化反応 -- 可変傾斜	114
用量 - 反応 - 抑制	116
数式: LOG(INHIBITOR) VS. 反応	116
数式: LOG(INHIBITOR) VS. 反応 -- 可変傾斜	117
数式: LOG(INHIBITOR) VS. 正規化反応	118
数式: LOG(INHIBITOR) VS. 正規化反応 -- 可変傾斜	119
用量 - 反応 - 特殊	121
数式: 非対称型(5 パラメータ)	121
数式: 2相型用量-反応	122
数式: ベル型用量-反応	123
数式: オペレーショナルモデル -- レセプタ枯渇	124
数式: オペレーショナルモデル -- PARTIAL AGONIST	126
数式: GADDUM/SCHILD EC50 シフト	128
数式: EC50 シフト	130
数式: ALLOSTERIC EC50 シフト	131
数式: EC ANYTHING	133
受容体結合 - 基本概念	135
質量作用の法則	135
非特異的結合	137
リガンドの枯渇	138
RADIOACTIVITY WEB CALCULATOR	139
受容体結合 - 飽和結合	140
基本概念: 飽和結合	140
数式: 1 サイト -- 全結合	141
数式: 1 サイト -- 全結合と非特異的結合	142
数式: 1 サイト -- 全結合・リガンド枯渇	143
数式: 1 サイト -- 特異的結合	145
数式: 1 サイト -- 特異的結合、可変傾斜	147
数式: 2 サイト -- 特異的結合	148
数式: 2 サイト -- 全結合と非特異的結合	150
数式: ALLOSTERIC MODULATOR シフト	152
受容体結合 - 競合的結合	154
基本概念: 競合的結合	154
数式: 1 サイト - KI フィット	155
数式: 1 サイト - LOGIC50 フィット	156
数式: 2 サイト - KI フィット	157
数式: 2 サイト - LOGIC50 フィット	158
数式: 1 サイト - 非相同結合・リガンド枯渇	159

数式: 1 サイト - 相同結合	161
数式: ALLOSTERIC MODULATOR 滴定	162
受容体結合 - 反応速度	165
基本概念: 結合反応速度	165
数式: 解離反応速度	166
数式: 結合反応速度 -- 1 リガンド濃度	168
数式: 結合反応速度 -- 2 リガンド濃度	169
数式: 結合と解離	170
数式: 競合結合の反応速度	171
酵素反応速度	174
基本概念: 用語	174
基本概念: 仮定	175
基本概念: モデルの選択	176
数式: MICHAELIS-MENTEN モデル	177
数式: K _{CAT}	179
数式: ALLOSTERIC SIGMOIDAL	181
数式: 競合的阻害	182
数式: NONCOMPETITIVE INHIBITION	183
数式: UNCOMPETITIVE INHIBITION	184
数式: 混合型阻害	185
数式: 基質阻害	187
数式: MORRISON K _i	187
指数関数	190
基本概念: 指数数式	190
基本概念: 指数的減衰の導出	191
数式: 1フェーズ減衰	191
数式: PLATEAU & 1フェーズ減衰	193
数式: 2フェーズ減衰	194
数式: 3フェーズ減衰	196
数式: 1フェーズ結合	197
数式: PLATEAU & 1フェーズ結合	198
数式: 2フェーズ結合	199
数式: 指数的成長	200
直線	202
基本概念: 直線のフィット	202
数式: 非線形回帰による直線のフィット	202
数式: 領域別線形回帰	204
数式: 対数軸上への直線のフィット	205
数式: 確率軸を持ったグラフへの直線のフィット	207
多項式	209
基本概念: 多項式	209
数式: 多項式モデル	210

ガウス分布曲線	211
基本概念: ガウス分布	211
数式: ガウス分布	211
数式: 対数ガウス分布	213
数式: 累積ガウス分布	214
数式: ローレンツ分布	215
サイン曲線	217
数式: 標準サイン曲線	217
数式: 減衰サイン曲線	218
数式: SINC 曲線	219
旧バージョンからの古典的数式	220
数式: 1 サイト結合	220
数式: 2 サイト結合	221
数式: SIGMOIDAL 用量-反応	221
数式: SIGMOIDAL 用量-反応(可変傾斜)	222
数式: 1 サイト競合	222
数式: 2 サイト競合	223
数式: BOLTZMANN SIGMOID	224
数式: 1フェーズ指数的減衰	224
数式: 2フェーズ指数的減衰	225
数式: 1フェーズ指数的結合	226
数式: 2フェーズ指数的結合	226
数式: 指数的成長	226
数式: ベキ乗級数	227
数式: サイン曲線	227
数式: ガウス分布	228
ユーザ定義モデル(数式)の記述	229
操作手順: 新たな数式の入力	229
操作手順: 数式のコピー	230
操作手順: 数式の管理	231
数式入力時の制限事項	232
数式の構文規則	233
ユーザ定義数式中で使える関数	234
領域別回帰	236
データセット別の数式切替え	237
初期値用ルール	238
デフォルトの制約条件	239
レポート用変換	240
非線形回帰における選択肢	243
本質的な選択肢	243
FIT タブ	243
COMPARE タブ	245
CONSTRAINTS タブ	246

WEIGHTS タブ	247
INITIAL VALUES タブ	249
RANGE タブ	250
OUTPUT タブ	251
“DIAGNOSTICS”タブ	252
非線形回帰の結果	256
パラメータの標準誤差と信頼区間	256
残差の正規性検定	258
非線形回帰の適合度	259
ランズテスト	261
反復テスト	262
依存度と共分散行列	264
FALSE MINIMUM の扱い	266
外れ値	267
PRISM 5 と PRISM 4 の違い	268
結果の解釈：モデルの比較	270
モデル比較の解釈	270
EXTRA SUM-OF-SQUARES F TEST の解釈	270
AIC 比較結果の解釈	271
外れ値を除去した場合のモデル比較	271
分析チェックリスト：非線形回帰	272
分析チェックリスト：モデルのフィット	272
分析チェックリスト：非線形フィットの比較	275
分析チェックリスト：標準的曲線による補間	277
初期値不正	278
中断	279
収束せず	280
不明確	281
制約条件ヒット	283
フィット実行せず	284
データ数過少	285
完璧フィット	286
重み付け不正	286
非線形回帰のグラフ化	287
操作手順：非線形回帰のグラフ化	287
信頼帯、予測帯	287
残差プロット	289
外れ値のグラフ化	290
APPENDIX	293
サンプルデータ	293
INDEX	299