

GraphPad Prism 7 フィッティングガイド

有限会社エムデーエフ
www.mdf-soft.com

© 1995-2016 有限会社エムデーエフ

これは、GraphPad Prism 7の3つのガイドの1つです。
内容は、Prism 7のヘルプに準じております。

目次

	0
第1章 ページの引用について	10
第2章 カーブフィッティングの原理	10
1 数学的モデルについて	11
モデルとは	11
3つのモデル例	12
モデルの自動選択に関する問題点	14
助言：モデルの意味を理解する	14
2 線形回帰の原理	15
線形回帰の目的	16
線形回帰の原理	16
線形回帰と相関の比較	17
線形回帰と非線形回帰の比較	18
助言：グラフを描画してみる	19
助言：Scatchard や Lineweaver-Burke などの変換を回避する	20
3 非線形回帰の入門	21
非線形回帰と他の回帰との違い	22
非線形回帰の目的	23
非線形回帰の 6 つの手順	24
非線形回帰に用いるデータの準備	25
平滑化したデータにモデルをフィッティングさせないこと	26
式の再パラメーター化の効用	27
4 重み付き非線形回帰	30
非線形回帰における不均等重み付けの必要性	30
重み付けの数学的理論	31
基準化データに対して重み付き回帰を行わないこと	34
不適切な重み付け方式を選択した場合の結果	36
5 用途の多いグローバル非線形回帰	38
グローバル非線形回帰とは	38
グローバル非線形回帰の用途	39
グローバル回帰により不完全なデータ セットにフィッティング	39
パラメータが複数のデータセットによって決まる場合のモデル フィッティング	41
助言：データセットによって単位が異なる場合にはグローバル回帰を適用しない	42
6 フィッティングさせる非線形モデルの比較	43
モデルの比較により明らかになる事項	44
モデル比較の手法	45
F 検定によるモデルの比較	47
AICc によるモデルの比較	48
7 外れ値の除去とロバスト非線形回帰	49
外れ値自動除去を実行すべき状況	50
外れ値自動除去を避けるべき状況	51
外れ値が常に「悪い」点とは限らない	52
ROUT 法による外れ値除去	53
ロバスト非線形回帰	55
8 非線形回帰の動作原理	56
なぜ二乗和を最小化するのか?	57
非線形回帰の動作原理	57
不均等な重み付けのある非線形回帰	60

標準誤差の計算方法	61
信頼区間の計算方法	61
信頼帯と推定帯の計算方法	64
繰り返し測定データ	66
依存度の計算方法	67
非線形回帰の理論の開発者	69
第3章 Prism 7のカーブフィッティング機能	70
1 Prism の線形回帰	70
計算手順: 線形回帰	71
最適な傾きと切片を求める手順	71
線形標準曲線からの補間	73
助言: 非線形回帰により直線をフィットさせるべき状況	76
信頼と推定帯 (線形回帰)	78
グラフ作成のヒント: 線形回帰	81
線形回帰の結果	81
傾きと切片	81
r^2 : 線形回帰の適合度	83
傾きは 0 と有意に異なるか?	85
傾きと切片の比較	86
線形回帰と連検定	87
分析チェックリスト: 線形回帰	88
よくある質問とその回答	89
デミング 回帰	92
基本概念: デミング 回帰	93
計算手順: デミング 回帰	93
Q&A: デミング 回帰	95
分析チェックリスト: デミング 回帰	96
2 標準曲線による補間	96
基本概念: 補間	97
補間の方法	98
補間された値のグラフ化	100
例: S 字状 (シグモイド) 標準曲線による補間	100
補間に用いる式	103
補間の結果	105
繰り返しデータ (サブカラムに入力) の補間	106
複数のデータ セットを一括して補間	109
X 値が対数である場合	109
分析チェックリスト: 標準曲線による補間	110
補完された値がブランクとなる理由	112
Q&A: 補間	114
Prism での補間処理について	116
標準添加法	116
3 非線形回帰のチュートリアル	118
例: 酵素反応速度曲線のフィッティング	118
例: 酵素反応速度モデルの比較	123
例: 外れ値自動除去 (指数関数的減衰)	127
例: グローバル非線形回帰 (用量-反応曲線)	130
例: 不明確なフィッティング (用量-反応)	136
4 Prism の非線形回帰	142
Prism でモデルのフィッティングを行う方法	142
どの設定項目が重要か?	144
非線形回帰の設定項目	144
「フィット」 [Fit] タブ	145
「比較」 [Compare] タブ	146
「制約」 [Constrain] タブ	147
「重み付け」 [Weights] タブ	150

「初期値」 [Initial values] タブ.....	152
「範囲」 [Range] タブ.....	153
「出力」 [Output] タブ.....	154
信頼区間 [Confidence] タブ.....	155
「診断」 [Diagnostics] タブ.....	157
「フラグ」 [Flags] タブ.....	161
グラフ作成のヒント: 非線形回帰.....	162
最適曲線のグラフ化.....	162
信頼帯や推定帯のグラフ化.....	163
式をグラフに追加.....	167
外れ値のグラフ化.....	168
残差プロット.....	170
5 非線形回帰の結果の解釈	171
結果の解釈: 非線形回帰.....	172
最適パラメータ値.....	173
パラメータの標準誤差.....	174
パラメータの信頼区間.....	174
残差の正規性検定.....	176
R二乗.....	177
二乗和.....	181
残差の標準偏差.....	182
フィッティングのカイ二乗値が出力されない理由.....	183
連検定.....	185
繰り返し値検定.....	186
個々のパラメータの依存度.....	188
共分散行列.....	190
信頼帯と推定帯.....	191
Hougaard の歪度.....	194
適切な重み付け/等分散性についての検定.....	195
極小値を最小値と誤認する危険性.....	196
外れ値.....	197
非線形回帰で問題が起こった場合の対処法.....	199
Prismバージョンで結果が異なる理由.....	200
結果の解釈: モデルの比較.....	201
モデルの比較結果の解釈.....	202
extra sum-of-squares F 検定の解釈.....	203
AIC に基づくモデル比較の解釈.....	205
外れ値を除去した場合のモデルの比較方法.....	206
調整済み R二乗 の解釈.....	206
ANOVAによるフィットの比較.....	208
分析チェックリスト: 非線形回帰.....	209
分析チェックリスト: モデルのフィッティング.....	209
分析チェックリスト: 非線形フィッティングの比較.....	212
分析チェックリスト: 標準曲線による補間.....	214
非線形回帰に関するエラー メッセージ.....	216
「初期値が良くありません」 "Bad initial values".....	217
「中断しました」 "Interrupted".....	217
「収束しない」 "Not converged".....	218
不明確.....	219
「不明確」 "Ambiguous".....	219
「制約条件に当たる」 "Hit constraint".....	221
「フィットしません」 "Don't fit".....	222
「ポイントが少なすぎます」 "Too few points".....	223
「完全なフィット」 "Perfect fit".....	223
「重み付け不可」 "Weighting impossible".....	223
「数式が定義されていません。」 "Equation is not defined".....	223
「計算できません」 "Can't calculate".....	224
6 Prism の組み込みのモデル (式)	224

用量-反応 [Dose-response] - 基本概念	225
用量-反応曲線とは?	225
数式名での用語 "agonist"、 "antagonist"、 および "「基準化」 [normalized]"	226
濃度から対数濃度への変換	227
EC50	228
EC50 の信頼区間	229
Hill slope	231
用量-反応の式の選択	233
データの基準化の得失	234
「ロジスティック」という用語	235
何の 50% か? 相対 IC50 と絶対 IC50	237
絶対 IC50 値を求める手順	240
不完全な用量-反応曲線	242
用量-反応曲線へのフィットで問題が起こった場合の対処法	243
用量-反応 - 刺激 [Dose-response - Stimulation]	244
式: $\log(\text{agonist})$ vs. 反応 [$\log(\text{agonist})$ vs. response]	244
式: $\log(\text{agonist})$ vs. 反応 -- 可変傾斜 [$\log(\text{agonist})$ vs. response -- Variable slope]	245
式: $\log(\text{agonist})$ vs. 基準化反応 [$\log(\text{agonist})$ vs. normalized response]	247
式: $\log(\text{agonist})$ vs. 基準化反応 -- 可変傾斜 [$\log(\text{agonist})$ vs. normalized response -- Variable slope]	248
式: [Agonist] vs. 反応 [[Agonist] vs. response]	250
式: [[Agonist] vs. 反応 - 可変傾斜 [[Agonist] vs. response -- Variable slope]	252
式: [Agonist] vs. 基準化反応 [[Agonist] vs. normalized response]	253
式: [Agonist] vs. 基準化反応 - 可変傾斜 [[Agonist] vs. normalized response -- Variable slope]	255
用量-反応 - 抑制 [Dose-response - Inhibition]	257
式: $\log(\text{inhibitor})$ vs. 反応 [$\log(\text{inhibitor})$ vs. response]	257
式: $\log(\text{inhibitor})$ vs. 反応 -- 可変傾斜 [$\log(\text{inhibitor})$ vs. response -- Variable slope]	258
式: $\log(\text{inhibitor})$ vs. 基準化反応 [$\log(\text{inhibitor})$ vs. normalized response]	260
式: $\log(\text{inhibitor})$ vs. 基準化反応 -- 可変傾斜 [$\log(\text{inhibitor})$ vs. normalized response -- variable slope]	261
式: [Inhibitor] vs. 反応 [[Inhibitor] vs. response]	263
式: [Inhibitor] vs. 反応 -- 可変傾斜 [[Inhibitor] vs. response -- Variable slope]	264
数式: [Inhibitor] vs. 基準化反応 [[Inhibitor] vs. normalized response]	266
式: [Inhibitor] vs. 基準化反応 -- 可変傾斜 [$\log(\text{inhibitor})$ vs. normalized response -- variable slope]	267
用量-反応 -- 特殊 [Dose-Response -- Special]	269
非対称型 (5 パラメータ) [Asymmetrical (five parameter)]	269
式: 2相型用量 - 反応 [Biphasic dose-response]	271
式: ベル型の用量 - 反応 [Bell-shaped dose-response]	272
式: オペレーショナル モデル -- レセプタ枯渇 [Operational Model - Depletion]	274
式: オペレーショナル モデル -- パーシャルアゴニスト [Operational Model - Partial agonists]	276
式: Gaddum/Schild EC50 シフト [Gaddum/Schild EC50 shift]	279
式: EC50 シフト [EC50 shift]	282
式: アロステリック EC50 シフト [Allosteric EC50 shift]	284
式: $\log(\text{agonist})$ vs. 反応 -- EC指定 [$\log(\text{agonist})$ vs. response -- Find ECanything]	286
受容体結合 [receptor binding] - 基本概念	288
質量作用の法則	288
非特異的結合	291
リガンドの枯渇	292
オンライン放射活性計算用ソフト	293
受容体結合 - 飽和結合 [saturation binding]	294

基本概念: 飽和結合	294
式: 1 サイト -- 全結合 [One site -- Total]	295
式: 1 サイト -- 全結合と非特異的結合 [One site -- Total and nonspecific binding]	296
式: 1 サイト -- 全結合、リガンド枯渇 [One site -- Total, accounting for ligand depletion]	298
式: 1 サイト -- 特異的結合 [One site specific binding]	300
結合ポテンシャル	303
式: 2 サイト -- 特異的結合のみ [Two sites -- Specific binding]	305
式: 2 サイト -- 全結合と非特異的結合 [Two site -- Total and nonspecific binding]	308
式: アロステリック モジューラシフト [Allosteric modulator shift]	309
式: 特異的結合、可変傾斜 [Specific binding with Hill slope]	311
受容体結合 - 競合的結合 [competitive binding]	312
基本概念: 競合的結合	313
式: 1 サイト - Ki フィット [One site - Fit Ki]	314
式: 1 サイト - logIC50 フィット [One site - Fit logEC50]	315
式: 2 サイト - Ki フィット [Two sites - Fit Ki]	316
式: 2 サイト - logIC50 フィット [Two sites - Fit logIC50]	318
式: 1 サイト - リガンド枯渇 [One site -- Heterologous with depletion]	320
式: 1 サイト - 相同結合 [One site - Homologous]	322
式: アロステリック モジューラ [Allosteric modulator titration]	323
受容体結合 - 反応速度 [Kinetics]	326
基本概念: 結合反応速度 [kinetic binding]	326
式: 解離反応速度 [Dissociation - One phase exponential decay]	327
式: 結合反応速度 (1リガンド濃度) [Association kinetics - One conc. of hot]	329
式: 結合反応速度 (2リガンド濃度) [Association - Two or more conc. of hot]	330
式: 結合と解離 [Association then dissociation]	332
式: 競合的結合の反応速度 [Kinetics of competitive binding]	333
酵素反応速度 [enzyme kinetics] -- 基本概念	335
基本概念: 用語	335
基本概念: 前提	337
酵素反応速度 - 基質対速度 [Substrate vs. Velocity]	337
基本概念: 基質 vs. 反応速度	337
式: Michaelis-Menten モデル [Michaelis-Menten]	338
式: kcat [kcat]	340
式: アロステリック阻害 [Allosteric sigmoidal]	342
酵素反応速度 -- 抑制 [Inhibition]	344
基本概念: 酵素阻害	344
式: 競合的阻害 [Competitive inhibition]	345
式: 非競合的阻害 [Noncompetitive inhibition]	346
式: 不競合的阻害 [Uncompetitive inhibition]	348
式: 混合型阻害 [Mixed model inhibition]	349
式: 基質阻害 [Substrate inhibition]	351
式: Morrison Ki	352
酵素阻害モデルの比較	353
指数関数 [Exponential]	354
基本概念: 指数関数	354
基本概念: 指数関数的減衰の導出	355
式: 1 フェーズ減衰 [One phase decay]	356
式: プラトー & 1 フェーズ減衰 [Plateau followed by one phase decay]	358
式: 2 フェーズ減衰 [Two phase decay]	359
式: 3 フェーズ減衰 [Three phase decay]	361
式: 1 フェーズ結合 [One phase association]	362
式: プラトー & 1 フェーズ結合 [Plateau followed by one phase association]	364
式: 2 フェーズ結合 [Two phase association]	365
式: 指数的成長 [Exponential growth]	367
直線 [Lines]	368
基本概念: 直線のフィット	368
式: 直線 [Straight line]	369

式: 原点を通る直線 [Line Through Origin].....	370
式: 領域別線形回帰 [Segmental linear regression].....	372
式: 対数軸グラフへの直線のフィット.....	374
式: 確率軸を持つグラフへの直線のフィット.....	377
多項式 [Polynomial].....	379
基本概念: 多項式.....	379
中心化した(Centered)多項式.....	381
式: 多項式モデル.....	382
ガウス分布[Gaussian].....	383
基本概念: ガウス分布.....	383
式: ガウス分布 [Gaussian].....	384
式: 対数ガウス分布 [Log(Gaussian)].....	386
式: 累積ガウス分布 [Cumulative Gaussian].....	387
式: ローレンツ分布 [Lorentzian].....	389
サイン曲線 [Sine waves].....	390
標準サイン曲線 [Standard sine wave].....	391
減衰サイン曲線 [Damped sine wave].....	392
sinc 曲線 [Sinc()].....	393
ゼロ以外のベースラインによるサイン波 [Sine wave with nonzero baseline].....	394
旧バージョンの Prism からあった古典的な式(Classic equations from prior versions of Prism).....	395
式: 1 サイト結合 (双曲線) (One site binding(hyperbola)).....	395
式: 2 サイト結合 (Two site binding(hyperbola)).....	396
式: シグモイド型 用量-反応 (Sigmoidal dose-response).....	396
式: シグモイド型 用量-反応 (可変傾斜) (Sigmoidal dose-response(variable slope)).....	397
式: 1 サイト競合 (One site competition).....	398
式: 2 サイト競合 (Two site competition).....	398
式: Boltzmann シグモイド (Boltzmann sigmoidal).....	399
式: 1 フェーズ指数関数的減衰 (One phase exponential decay).....	399
式: 2 フェーズ指数関数的減衰 (Two phase exponential decay).....	400
式: 1 フェーズ指数的結合 (One phase exponential association).....	401
式: 2 フェーズの指数的結合 (Two phase exponential association).....	401
式: 指数的成長 (Exponential growth).....	401
式: ベキ乗級数 (Power series: $Y=A*X^B+C*X^D$).....	402
式: サイン曲線 (Sine wave).....	402
式: ガウス分布 (Gaussian distribution).....	402
7 ユーザー定義モデル (数式) の入力.....	403
概要: ユーザー定義の式.....	404
操作手順: 新しい数式の入力.....	404
操作手順: 数式のコピー.....	407
操作手順: 数式の管理.....	408
ユーザー定義の式の構文.....	409
複数行のモデル.....	410
式を入力する際の制限事項.....	411
微分方程式の入力.....	412
陰関数式の入力.....	414
ユーザー定義の式に使用できる関数.....	415
データを分割し異なるモデルでフィットする.....	419
データ セットごとに異なるモデルでフィットする.....	421
列定数の使用.....	422
2 つ以上の独立変数を持つ式の定義.....	424
式の再パラメーター化.....	428
初期値に関するルール.....	431
デフォルトの制約条件.....	435
変換したパラメーターの出力.....	436
8 関数のプロット.....	439
方法: 関数をプロットする.....	439

t 分布、z 分布、F 分布、カイニ乗分布のプロット.....	441
二項分布またはポワソン分布のプロット.....	443
9 モデルなしでの曲線のフィット.....	444
スプライン曲線と Lowess 曲線.....	444
経験的モデルでの非線形回帰の使用.....	446
索引	447