

GraphPad Prism 8 フィッティングガイド

有限会社エムデーエフ
www.mdf-soft.com

© 1995-2020 有限会社エムデーエフ

このガイドの内容は、Prism 8 のヘルプに準じております。

目次

	0
第1章 Prism 8 フィッティングガイドによるこそ	11
第2章 ページの引用について	11
第3章 カーブフィッティングの原理	12
1 数学的モデルについて	12
モデルとは	13
3つのモデル例	13
モデルの自動選択に関する問題点	16
助言：モデルの意味を理解する	16
2 フィットモデル	17
回帰の目的	17
線形と非線形の違い	18
異なる種類の回帰	19
3 単回帰の原理	20
線形回帰の目的	21
線形回帰の原理	22
線形回帰と相関の比較	23
線形回帰と非線形回帰の比較	24
助言：グラフを描画してみる	24
助言：Scatchard や Lineweaver-Burke などの変換を回避する	26
4 単純ロジスティック回帰の原理	27
単純ロジスティック回帰の目的	28
単純ロジスティック回帰は、どう単回帰と異なるのでしょうか	28
ロジスティック回帰による分類	30
対数オッズの理解と係数の推定値の解釈	31
対数オッズとは何でしょうか、なぜロジスティック回帰はそれを使用するのでしょうか	31
“Log”か“Ln”か?	32
ロジスティック回帰の係数の解釈	33
単純ロジスティック回帰は、どのように機能するのでしょうか	35
5 重回帰 (multiple regression) の原理	36
重回帰の目的	36
用語	37
重回帰の原理	38
段階的重回帰が無い理由	39
6 非線形回帰の原理	40
非線形回帰の入門	40
非線形回帰と他の種類の回帰の区別	41
非線形回帰の目的	41
用語	43
非線形回帰の 6 つの手順	43
非線形回帰に用いるデータの準備	45
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	45
式の再パラメーター化の効用	46
重み付き非線形回帰	49
非線形回帰における不均等重み付けの必要性	50
重み付けの数学的理論	51
基準化データに対して重み付き回帰を行わないこと	54
不適切な重み付け方式を選択した場合の結果	56

ポアソン回帰	58
用途の多いグローバル非線形回帰	59
グローバル非線形回帰とは	60
グローバル非線形回帰の動作原理	60
グローバル非線形回帰の用途	61
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	62
パラメーター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	63
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	65
フィッティングさせる非線形モデルの比較	65
モデルの比較により明らかになる事項	66
モデル比較の手法	68
F検定によるモデルの比較について	70
尤度比検定は、どのようにしてモデルを比較するでしょう	72
AICcによるモデルの比較	72
多くの統計学は、モデルを比較するものと見ることが可能	74
外れ値の除去とロバスト非線形回帰	75
外れ値自動除去を実行すべき状況	76
外れ値自動除去を避けるべき状況	77
外れ値が常に「悪い」点とは限らないこと	78
ROUT法による外れ値除去	79
ロバスト非線形回帰	80
非線形回帰の動作原理	82
なぜ二乗和を最小化するのか?	83
非線形回帰の動作原理	83
不均等な重み付けのある非線形回帰	86
平均値、nとSD/SEMとして入力されたデータの回帰	87
標準誤差の計算方法	88
対称な漸近的CIの計算手法について	88
非対称なプロファイル尤度信頼区間の計算方法	89
信頼帯と推定帯の計算方法	92
「繰り返し値」[Replicates]	93
依存度の計算方法	94
Prismによる不安定なパラメータの特定方法	97
非線形回帰の理論の開発者	98
第4章 Prism 8による回帰	98
1 Prismによる単回帰と単純ロジスティック回帰	98
操作手順：単回帰	100
最適な傾きと切片を求める手順	100
線形標準曲線からの補間	103
助言：非線形回帰により直線をフィッティングさせるべき状況	106
信頼と予測帯(線形回帰)	108
グラフ作成のヒント：単回帰	111
線形回帰と相関間の違い	111
1つの直線を2つのデータセットにフィットする方法	113
単回帰の結果	113
傾きと切片	113
r ² : 単回帰の適合度	116
残差の標準偏差	118
傾きは0と有意に異なるか?	118
傾きと切片の比較	119
線形回帰と連検定	121
分析チェックリスト：単回帰	121
操作手順：単純ロジスティック回帰	122
単純ロジスティック回帰モデルのフィット	123
例：単純ロジスティック回帰	126
単純ロジスティック回帰の結果	138
係数推定の解釈	139

50%におけるX	141
オッズ比	141
確率に係数を関連付ける	142
$\beta 1$ についての仮説検定 (P値)	142
ROC曲線下の面積	142
適合度の指標	143
分析チェックリスト: 単純ロジスティック回帰	144
単純ロジスティック回帰でのエラーメッセージ	145
デミング 回帰	147
基本概念: デミング 回帰	148
計算手順: デミング 回帰	148
Q&A: デミング 回帰	150
分析チェックリスト: デミング 回帰	151
2 Prism による重回帰	151
重回帰の入門	152
操作手順: 重回帰(とポアソン回帰)	152
重回帰のためのデータ入力	153
重回帰のためのモデルの選択	154
重回帰モデルの比較	156
重回帰での重み付け	158
重回帰での診断の選択	159
重回帰からの残差のプロット	160
重回帰 (multiple linear regression) の結果	161
重回帰のパラメータ値	162
重回帰のP値	163
重回帰のANOVAテーブル	163
重回帰の適合度	164
多重共線性 (Multicollinearity)	166
重回帰の結果をグラフにする	168
分析チェックリスト: 重回帰	169
操作手順: 多重ロジスティック回帰	171
多重ロジスティック回帰の概要	171
多重ロジスティック回帰のための入力データ	172
多重ロジスティック回帰モデルの選択	173
多重ロジスティック回帰モデルの比較	175
多重ロジスティック回帰のオプション	176
多重ロジスティック回帰の適合度	177
多重ロジスティック回帰についての分類手法	177
多重ロジスティック回帰についての疑似決定係数	178
多重ロジスティック回帰についての仮説検定	179
多重ロジスティック回帰のグラフ	180
例: 多重ロジスティック回帰	181
多重ロジスティック回帰の結果	193
パラメータ推定値	194
オッズ比	195
P 値	196
モデル診断	197
ロジスティック回帰での多重共線性	199
分類	200
疑似決定係数	201
仮説検定	203
ロジスティックROC曲線の解釈	204
分析チェックリスト: 多重ロジスティック回帰	209
ロジスティック回帰に関するエラー メッセージ	211
完全分離、準完全分離、線形依存性	211
切片のないロジスティックモデル	216
完全独立の簡単な例	218
3 標準曲線による補間	221

基本概念：補間	221
補間の方法	222
補間された値をグラフにする方法	224
例：S字状（シングモイド）標準曲線による補間	225
補間に用いる式	228
補間の結果	231
繰り返しデータ（サブカラムに入力）の補間	232
複数のデータセットを一括して補間	233
X 値が対数である場合	234
分析チェックリスト：標準曲線による補間	235
補完された値がブランクとなる理由	237
Q&A：補間	240
Prismは、なぜ‘線形範囲’を見つけようとしないのでしょ	241
Prism での補間処理について	242
標準添加法	243
標準曲線からの逆算	245
外挿	246
4 モデルなしでの曲線のフィッティング	247
スプライン曲線と Lowess 曲線	247
経験的モデルでの非線形回帰の使用	250
5 Prism の非線形回帰	251
非線形回帰のチュートリアル	252
Prismによるモデルのフィッティング方法	252
例：酵素反応速度曲線のフィッティング	254
例：酵素反応速度モデルの比較	260
例：外れ値自動除去（指数関数的減衰）	264
例：グローバル非線形回帰（用量-反応曲線）	268
例：不明確なフィッティング（用量-反応）	275
非線形回帰の設定項目	281
どの設定項目が重要か？	282
「モデル」[Model]タブ	282
「手法」[Method]タブ	283
「比較」[Compare]タブ	288
「制約」[Constrain]タブ	289
「初期値」[Initial values]タブ	292
「範囲」[Range]タブ	294
「出力」[Output]タブ	295
「信頼区間」[Confidence]タブ	296
「診断」[Diagnostics]タブ	299
「フラグ」[Flags]タブ	302
グラフ作成のヒント：非線形回帰	303
最適曲線のグラフ化	303
信頼帯や推定帯のグラフ化	304
式をグラフに追加	308
外れ値のグラフ化	309
残差プロット	311
非線形回帰の結果の解釈	316
結果の解釈：非線形回帰	317
最適パラメータ値	318
パラメータの標準誤差	319
パラメータの信頼区間	320
残差の正規性検定	323
R二乗	325
修正済みR二乗	329
二乗和	330
残差の標準偏差	330
フィットのカイ二乗値が出力されない理由	332
ポアソン回帰による適合度	333

連検定	335
繰り返し値検定	336
個々のパラメータの依存度	338
共分散行列	340
信頼帯と推定帯	341
Hougaard の歪度	343
適切な重みづけ/等分散性についての検定	345
極小値を最小値と誤認する危険性	346
「外れ値」[Outliers]	347
非線形回帰で問題が起こった場合の対処法	349
Prismバージョンで結果が異なる理由	351
結果の解釈：モデルの比較	352
モデルの比較結果の解釈	353
extra sum-of-squares F 検定の解釈	354
尤度比検定(ポアソン回帰)の解釈	356
AIC に基づくモデル比較の解釈	359
外れ値を除去した場合のモデルの比較方法	359
調整済み R ² の解釈	360
ANOVAによるフィットの比較	362
分析チェックリスト：非線形回帰	363
分析チェックリスト：モデルのフィッティング	363
分析チェックリスト：非線形フィッティングの比較	366
分析チェックリスト：標準曲線からの補間	368
非線形回帰に関するエラー メッセージ	370
パラメータや信頼限界に使用されるメッセージ	371
"「不安定」[Unstable]"	371
"非常に広い/Very wide"	372
疑問符 "???"	372
波形符号 "~"	372
不完全な信頼区間	373
"「不使用」[Not used]"	374
全てのフィットに適用されるメッセージ	374
「初期値が良くありません」"Bad initial values"	374
「中断しました」"Interrupted"	375
「収束しない」"Not converged"	376
「不明確」"Ambiguous"	377
「制約条件に当たる」"Hit constraint"	380
「フィットしません」"Don't fit"	381
「ポイントが少なすぎます」"Too few points"	381
「完全なフィット」"Perfect fit"	382
「重み付け不可」"Weighting impossible"	382
「数式が定義されていません。」"Equation is not defined"	383
「計算できません」"Can't calculate"	383
Prism の組み込みのモデル (式)	384
「用量-反応」[Dose-response] - 基本概念	385
用量-反応曲線とは?	385
数式名での用語 "agonist"、"antagonist"、および "「基準化」[normalized]"	386
濃度から対数濃度への変換	387
EC50	388
EC50 の信頼区間	390
Hill slope	392
用量-反応の式の選択	393
データの基準化の得失	396
"ロジスティック"という用語	397
「50%」とは、何の 50% なのでしょう。相対 IC50 と絶対 IC50	400
絶対 IC50 値を求める手順	403
不完全な用量-反応曲線	405

用量-反応曲線へのフィッティングで問題が起こった場合の対処法.....	406
用量-反応 - 刺激 [Dose-response - Stimulation].....	407
式: $\log(\text{agonist})$ vs. 反応.....	407
式: $\log(\text{agonist})$ vs. 反応 -- 可変傾斜.....	409
式: $\log(\text{agonist})$ vs. 基準化反応.....	410
式: $\log(\text{agonist})$ vs. 基準化反応 -- 可変傾斜.....	412
式: [Agonist] vs. 反応.....	413
式: [Agonist] vs. 反応 -- 可変傾斜.....	415
式: [Agonist] vs. 基準化反応.....	417
式: [Agonist] vs. 基準化反応 -- 可変傾斜.....	418
用量-反応 - 抑制 [Dose-response - Inhibition].....	420
式: $\log(\text{inhibitor})$ vs. 反応.....	420
式: $\log(\text{inhibitor})$ vs. 反応 -- 可変傾斜.....	422
式: $\log(\text{inhibitor})$ vs. 基準化反応.....	423
式: $\log(\text{inhibitor})$ vs. 基準化反応 -- 可変傾斜.....	425
式: [Inhibitor] vs. 反応.....	426
式: [Inhibitor] vs. 反応 -- 可変傾斜.....	428
式: [Inhibitor] vs. 基準化反応.....	430
式: [Inhibitor] vs. 基準化反応 -- 可変傾斜.....	431
用量 - 反応 - 特殊 Xは濃度 [Dose-Response -- Special, X is concentration].....	433
式: 非対称型 (5 パラメータ) [Asymmetrical (five parameter)].....	433
式: 二相型 用量 - 反応 [Biphasic dose-response].....	436
式: ベル型 用量 - 反応 [Bell-shaped dose-response].....	438
式: オペレーショナル モデル - レセプタ枯渇 [Operational model - Depletion].....	439
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 agonist].....	442
式: Gaddum/Schild EC50 シフト.....	444
式: EC50 シフト.....	448
式: アロステリック EC50 シフト [Allosteric EC50 shift].....	450
式: EC指定 [ECanything].....	452
式: 絶対IC50 [Absolute IC50].....	454
用量 - 反応 - 特殊 Xは対数濃度 [Dose-Response -- Special, X is $\log(\text{concentration})$].....	456
非対称型 (5 パラメータ) [Asymmetrical (five parameter)].....	457
式: 二相型用量 - 反応 [Biphasic dose-response].....	460
式: ベル型用量 - 反応 [Bell-shaped dose-response].....	461
式: オペレーショナル モデル -- レセプタ枯渇 [Operational model - Depletion].....	463
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 agonist].....	465
式: Gaddum/Schild EC50 シフト.....	468
式: EC50 シフト.....	471
式: アロステリック EC50 シフト [Allosteric EC50 shift].....	473
式: EC指定 [ECanything].....	475
式: 絶対IC50 [Absolute IC50].....	477
受容体結合 [receptor binding] - 基本概念.....	479
質量作用の法則.....	480
非特異的結合.....	482
リガンド枯渇.....	484
オンライン放射活性計算用ソフト.....	484
受容体結合 - 飽和結合 [saturation binding].....	486
基本概念: 飽和結合 [Saturation binding].....	486
式: 1サイト - 全結合 [One site -- Total binding].....	487
式: 1サイト - 全結合と非特異的結合 [One site -- Fit total and nonspecific binding].....	488
式: 1サイト -- 全結合、リガンド枯渇 [One site -- Total, accounting for ligand depletion].....	490
式: 1サイト -- 特異的結合 [One site -- Specific binding].....	492
結合ポテンシャル.....	495
式: 2サイト - 特異的結合のみ [Two sites -- Specific binding only].....	498
式: 2サイト - 全結合と非特異的結合 [Two sites -- Fit total and nonspecific binding].....	500
式: アロステリック モジュレータシフト [One site with allosteric modulator].....	501

式: 特異的結合、可変傾斜 [Specific binding with Hill slope].....	503
受容体結合 - 競合的結合 [Receptor binding - Competitive binding].....	505
基本概念: 競合的結合 [Competitive binding].....	505
式: 1サイト - Ki フィット [One site - Fit Ki].....	506
式: 1サイト - logIC50 フィット [One site - Fit logIC50].....	508
式: 2サイト - Ki フィット [Two sites - Fit Ki].....	509
式: 2サイト - logIC50 フィット [Two sites - Fit logIC50].....	512
式: 1サイト - リガンド枯渇 [One site - Ligand depletion].....	513
式: 1サイト - 相同結合 [One site - Homologous].....	515
式: アロステリック モジュレータ [Allosteric modulator].....	517
受容体結合 - 反応速度 [Receptor binding - Kinetics].....	519
基本概念: 結合反応速度 [Kinetics of binding].....	519
式: 解離反応速度 [Dissociation kinetics].....	521
式: 結合反応速度 (1リガンド濃度) [Association kinetics (one ligand concentration)].....	523
式: 結合反応速度 (2リガンド濃度).....	524
式: 結合と解離 [Association then dissociation].....	526
式: 競合的結合の反応速度 [Kinetics of competitive binding].....	527
酵素反応速度 [Enzyme kinetics] -- 基本概念.....	530
基本概念: 用語.....	530
基本概念: 仮定.....	532
酵素反応速度 - 基質 vs 速度 [Velocity as a function of substrate].....	532
基本概念: 基質 vs. 反応速度.....	533
式: Michaelis-Menten モデル.....	533
式: kcat.....	536
式: アロステリック阻害 [Allosteric sigmoidal].....	538
酵素反応速度 -- 抑制 [Enzyme kinetics -- Inhibition].....	540
基本概念: 酵素阻害 [Enzyme inhibition].....	540
数式: 競合的阻害 [Competitive inhibition].....	541
式: 非競合的阻害 [Noncompetitive inhibition].....	543
式: 不競合的阻害 [Uncompetitive inhibition].....	545
式: 混合型阻害 [Mixed-model inhibition].....	547
式: 基質阻害 [Substrate inhibition].....	548
式: 強阻害 (Morrison式).....	550
酵素阻害モデルの比較.....	552
指数関数 [Exponential].....	552
基本概念: 指数関数 [Exponential equations].....	553
基本概念: 指数関数的減衰の導出.....	554
式: 1フェーズ減衰 [One phase decay].....	555
式: 2フェーズ減衰 [Two phase decay].....	556
式: プラトー & 1フェーズ減衰 [Plateau followed by one phase decay].....	558
式: 3フェーズ減衰 [Three phase decay].....	560
式: 1フェーズ結合 [One phase association].....	561
式: プラトー & 1フェーズ結合 [Plateau followed by one phase association].....	563
式: 2フェーズ結合 [Two phase association].....	564
式: 指数的成長 [Exponential growth].....	565
直線 [Lines].....	567
基本概念: 直線のフィッティング.....	567
式: 非線形回帰による直線のフィット.....	568
式: 原点を通る直線.....	569
式: 領域別線形回帰.....	571
式: ヒンジ関数 ゆるやかな接続による部分回帰直線.....	573
式: 対数軸グラフへの直線のフィッティング.....	575
式: 確率軸を持つグラフへの直線のフィッティング.....	578
式: 2つの線の交差点を見つける.....	580
多項式 [Polynomial].....	582
基本概念: 多項式.....	582
中心化(Centered)多項式.....	583
式: 多項式モデル [Polynomial].....	585

ガウス関数 [Gaussian].....	586
基本概念: ガウス関数.....	586
式: ガウス分布関数 [Gaussian distribution].....	587
式: 対数正規分布関数 [Lognormal].....	588
式: 累積ガウス分布関数 [Cumulative Gaussian].....	590
式: ローレンツ分布関数 [Lorentzian].....	592
サイン曲線 [Sine waves].....	593
標準サイン曲線 [Standard sine wave].....	594
減衰サイン曲線 [Damped sine wave].....	595
sinc 曲線 [Sinc wave].....	596
ゼロ以外のベースラインによるサイン波 [Sine wave with nonzero baseline].....	597
成長曲線 [Growth curves].....	599
基本概念: 成長方程式.....	599
指数関数的(マルサス)成長 [Exponential (Malthusian) growth].....	600
指数関数的成長の対数.....	601
ロジスティック成長 [Logistic growth].....	603
ゴンペルツ成長 [Gompertz growth].....	604
指数関数的プラトー [Exponential plateau].....	605
ベータ型成長とその後の衰退 [Beta growth then decay].....	606
放射線による細胞死の線形二次モデル [Linear quadratic curves].....	607
鍵となる事実: 線形二次モデル.....	607
線形二次モデルのグラフ化.....	608
線形二次式 細胞死 (Yは残存している細胞の割合) [Linear quadratic cell death (Y is fraction of cells surviving)].....	608
線形二次生存 (Yはパーセンテージ).....	609
線形二次生存 (Yは生きている細胞の数).....	610
線形二次式 細胞死 (Yは死細胞の割合).....	612
線形二次生存 (Yは死細胞のパーセンテージ).....	613
線形二次生存 (Yは死細胞の数).....	614
旧バージョンの Prism からあった古典的な式(Classic equations from old versions of Prism).....	615
Prismに古い数式がある理由.....	615
式: 1サイト結合 (双曲線) (One site binding(hyperbola)).....	615
式: 2サイト結合 (Two site binding(hyperbola)).....	616
式: シグモイド型 用量-反応 (Sigmoidal dose-response).....	617
式: シグモイド型 用量-反応 (可変傾斜) (Sigmoidal dose-response(variable slope)).....	618
式: 1サイト競合 (One site competition).....	618
式: 2サイト競合 (Two site competition).....	619
式: Boltzmann シグモイド (Boltzmann sigmoidal).....	620
式: 1フェーズ指数関数的減衰 (One phase exponential decay).....	620
式: 2フェーズ指数関数的減衰 (Two phase exponential decay).....	621
式: 1フェーズ指数的結合 (One phase exponential association).....	622
式: 2フェーズ指数的結合 (Two phase exponential association).....	622
式: 指数的成長 [Exponential growth].....	622
式: べき乗級数 (Power series: $Y=A*X^B+C*X^D$).....	623
式: サイン曲線 (Sine wave).....	623
式: ガウス分布関数 [Gaussian distribution].....	624
ユーザ定義モデル(数式)の入力.....	624
概要: ユーザー定義の式.....	625
出力するパラメータの変換の選択.....	626
デフォルトの制約の入力.....	629
初期値についての入力規則.....	630
操作手順: フィットに使用された数式の参照.....	635
操作手順: 数式のコピー.....	635
操作手順: 新しい数式の入力.....	636
ユーザ定義の式で入力に使用される構文.....	639
式の構文の概要.....	639
複数行のモデル.....	640

式を入力する際の制限事項.....	642
微分方程式の入力.....	643
陰関数式の入力.....	644
ユーザー定義の式に使用できる関数.....	646
データを分割し異なるモデルでフィッティングする.....	650
データ セットごとに異なるモデルでフィッティングする.....	651
異なるデータセットのための異なる定数.....	652
列定数の使用.....	653
2 つ以上の独立変数を持つ式の定義.....	655
式の再パラメーター化.....	659
ユーザー定義の式のリストの管理.....	662
操作手順: 数式リストの管理.....	662
ユーザー定義の式を組み込み方程式のリストに加える方法.....	663
6 関数のプロット.....	665
操作手順: 「関数のプロット」 [Plot a function].....	665
t 分布、z 分布、F 分布、カイ二乗分布のプロット.....	668
二項分布またはPoisson分布のプロット.....	669

索引

671