

Calculadora IC50

IC₅₀ representa la concentración a la que A ejerce sustancias medio de su efecto inhibitor máximo. Este valor se usa típicamente para caracterizar un antagonista de un proceso biológico (por ejemplo, fosforilación). En farmacología, es una medida importante de la potencia de un agente determinado. Tradicionalmente, este valor se expresa como concentración molar.

Esta calculadora genera un IC₅₀ valor típicamente pensado como la relación IC₅₀. Para obtener asistencia técnica sobre el uso de esta calculadora, comuníquese con websupport@aatbio.com.

Esta herramienta se ha actualizado recientemente. Para obtener la versión anterior de esta herramienta, haga clic [aquí](#).

Cómo utilizar esta herramienta

1. Pegue los datos experimentales en el cuadro de la derecha. Los datos se pueden copiar directamente de las columnas de Excel. Los datos también pueden ser valores separados por comas, tabuladores o separados por espacios. Si ingresa datos manualmente, solo ingrese una concentración por línea.

Las réplicas se pueden graficar simultáneamente. El gráfico generará barras de error basadas en el error estándar de la media (SEM). Simplemente pegue o ingrese todas las columnas de datos para comenzar. El formato debe ser el siguiente:

Concentración	Respuesta 1	Respuesta 2...	
C ₁	R1 ₁	R2 ₁	...
C ₂	R1 ₂	R2 ₂	...
C ₃	R1 ₃	R2 ₃	...
...

Los usuarios pueden representar gráficamente hasta tres conjuntos de datos en el mismo gráfico para fines de comparación. Para agregar un nuevo conjunto de datos, presione la pestaña "+" sobre el área de entrada de datos. Los conjuntos de datos se pueden renombrar haciendo doble clic en la pestaña. Cada conjunto de datos generará un correspondiente valor así como la ecuación para la línea de mejor ajuste.

2. Verifique que sus datos sean precisos en la tabla que aparece.

3. Presione el botón "Calcular" para mostrar los resultados, incluidos los cálculos y el gráfico.

Entrada de datos

Datos 1	+
Pegue los datos aquí	

Procesar datos

La calculadora Quest Graph™ IC50 intenta modelar un conjunto experimental utilizando un modelo de regresión logística de cuatro parámetros, llamado así porque tiene cuatro parámetros clave en una ecuación de la forma:

$$Y = \text{Min} + \frac{\text{Máximo mínimo}}{1 + \left(\frac{X}{\text{IC}_{50}}\right)^{\text{Coeficiente de colina}}}$$

Este modelo generalmente se resuelve como una función sigmoidea o una curva en forma de "S". Para la promoción biológica, el coeficiente de Hill de la ecuación será (-) negativo, con la pendiente de la curva ascendente ("S"). Para la inhibición biológica, el coeficiente de Hill de la ecuación será (+) positivo, con la pendiente de la curva descendente ("∩").

Con respecto a IC50, la [función sigmoidea](#) en sí misma es un caso especial de la [distribución log-logística](#), que es parte de una familia más amplia de [distribuciones y funciones logísticas](#). Sin embargo, a diferencia de las distribuciones logísticas estándar, una distinción principal de esta calculadora es que no necesita la normalización previa de los datos, ni impone estos límites en el modelado de un conjunto experimental. Es decir, en una distribución logística estándar, los valores de respuesta (Y) van de 0 a 1 valores de probabilidad. Esto es típicamente lo que se ve en el análisis probit / logit y lo que se usa comúnmente al modelar las tasas de supervivencia de la población. En esta calculadora, los valores de respuesta pueden ser cualquier número real positivo, lo que puede resultar en modelos de regresión que no se adhieren a los límites de distribución logística de 0 a 1. Este es especialmente el caso cuando los controles de un conjunto experimental no aclaran los límites superior e inferior de los datos. En tales casos, no es raro generar un modelo de regresión que se extienda mucho hacia el eje Y negativo o aumente exponencialmente.

Debido a que los valores de respuesta negativa suelen ser incoherentes en contextos biológicos, a menudo es deseable restringir los modelos de regresión analíticos al dominio de respuesta positiva. Esto se puede lograr computacionalmente fijando el valor de respuesta mínimo en cero. Esto reduce el modelo logístico de cuatro parámetros a un modelo logístico de tres parámetros con la ecuación simplificada de la siguiente manera:

$$Y = \frac{\text{Max}}{1 + \left(\frac{X}{\text{IC}_{50}}\right)^{\text{Coeficiente de colina}}}$$

Con esta forma, el modelo de regresión tiene límites inferiores fijos en cero, eliminando cualquier modelo que de otra manera se podría extender al dominio de respuesta negativa.

Hay dos puntos finales que hacer sobre esta calculadora. La primera es que la curva logística de cuatro parámetros es un modelo de regresión simétrica alrededor del punto de inflexión, es decir, el IC₅₀. En términos generales, esto implica que la forma de la función sigmoidea en un lado del punto de inflexión reflejará la del otro lado. Para modelar un conjunto experimental que es de naturaleza asimétrica, se requiere una curva logística de cinco parámetros. En segundo lugar, es inadecuado utilizar R² cuando se habla de la bondad de ajuste de un modelo de regresión de cuatro parámetros. Como se ha demostrado en varios trabajos, R² se puede utilizar cuando se describen modelos de regresión lineal, pero no logra captar el grado de ruido y la variabilidad en los modelos no lineales.