(12) 特許協力条約に基づいて公開された国際出願

(19) 世界知的所有権機関
国際事務局

(43) 国際公開日
2013 年 8 月 8 日(08.08.2013)

WIPO | PCT

(10) 国際公開番号
WO 2013/115283 A1

(51) 国際特許分類:
G01N 33/49 (2006.01) *A61B 10/00* (2006.01)

(21) 国際出願番号: PCT/JP2013/052115

(22) 国際出願日: 2013 年 1 月 30 日(30.01.2013)

(25) 国際出願の言語: 日本語

(26) 国際公開の言語: 日本語

(30) 優先権データ:
特願 2012-018862 2012 年 1 月 31 日(31.01.2012) JP

(71) 出願人: 味の素株式会社(AJINOMOTO CO., INC.) [JP/JP]; 〒1048315 東京都中央区京橋一丁目１５番１号 Tokyo (JP).

(72) 発明者: 新原 温子(SHINHARA, Atsuko); 〒2108681 神奈川県川崎市川崎区鈴木町１－１ 味の素株式会社内 Kanagawa (JP). 村松 孝彦(MURAMATSU, Takahiko); 〒2108681 神奈川県川崎市川崎区鈴木町１－１ 味の素株式会社内 Kanagawa (JP). 小野 信和(ONO, Nobukazu); 〒2108681 神奈川県川崎市川崎区鈴木町１－１ 味の素株式会社内 Kanagawa (JP). 久米 真司(KUME, Shinji); 〒5202192 滋賀県大津市瀬田月輪町 国立大学法人滋賀医科大学内 Shiga (JP). 荒木 信一(ARAKI, Shinichi); 〒5202192 滋賀県大津市瀬田月輪町 国立大学法人滋賀医科大学内 Shiga (JP). 宇津 貴(UZU, Takashi); 〒5202192 滋賀県大津市瀬田月輪町 国立大学法人滋賀医科大学内 Shiga (JP). 前川 聡(MAEGAWA, Hiroshi); 〒5202192 滋賀県大津市瀬田月輪町 国立大学法人滋賀医科大学内 Shiga (JP).

(74) 代理人: 酒井 宏明, 外(SAKAI, Hiroaki et al.); 〒1006020 東京都千代田区霞が関三丁目２番５号 霞が関ビルディング 酒井国際特許事務所 Tokyo (JP).

(81) 指定国 (表示のない限り、全ての種類の国内保護が可能): AE, AG, AL, AM, AO, AT, AU, AZ, BA, BB, BG, BH, BN, BR, BW, BY, BZ, CA, CH, CL, CN, CO, CR, CU, CZ, DE, DK, DM, DO, DZ, EC, EE, EG, ES, FI, GB, GD, GE, GH, GM, GT, HN, HR, HU, ID, IL, IN, IS, KE, KG, KM, KN, KP, KR, KZ, LA, LC, LK, LR, LS, LT, LU, LY, MA, MD, ME, MG, MK, MN, MW, MX, MY, MZ, NA, NG, NI, NO, NZ, OM, PA, PE, PG, PH, PL, PT, QA, RO, RS, RU, RW, SC, SD, SE, SG, SK, SL, SM, ST, SV, SY, TH, TJ, TM, TN, TR, TT, TZ, UA, UG, US, UZ, VC, VN, ZA, ZM, ZW.

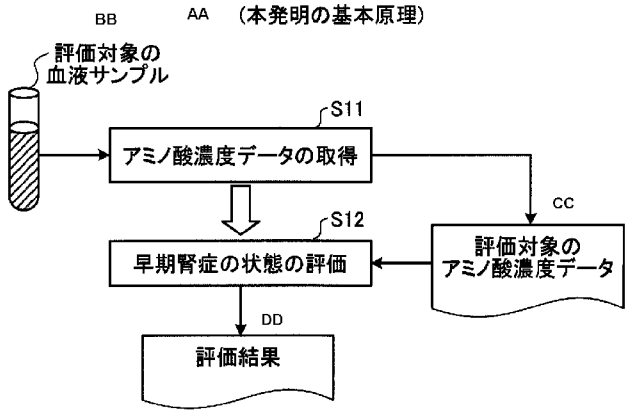
(84) 指定国 (表示のない限り、全ての種類の広域保護が可能): ARIPO (BW, GH, GM, KE, LR, LS, MW, MZ, NA, RW, SD, SL, SZ, TZ, UG, ZM, ZW), ユーラシ

[続葉有]

WO 2013/115283 A1

(54) **Title**: METHOD FOR EVALUATING EARLY STAGE NEPHROPATHY, EARLY STAGE NEPHROPATHY EVALUATION DEVICE, EARLY STAGE NEPHROPATHY EVALUATION METHOD, EARLY STAGE NEPHROPATHY EVALUATION PROGRAM, EARLY STAGE NEPHROPATHY EVALUATION SYSTEM AND INFORMATION COMMUNICATION TERMINAL DEVICE

(54) 発明の名称 : 早期腎症の評価方法、早期腎症評価装置、早期腎症評価方法、早期腎症評価プログラム、早期腎症評価システムおよび情報通信端末装置



AA (Basic principle of invention)
BB Blood sample of subject to be evaluated
CC Amino acid concentration data of subject to be evaluated
DD Evaluation result
S11 Acquiring amino acid concentration data
S12 Evaluating early stage nephropathy conditions

(57) **Abstract**: The present invention addresses the problem of providing a method for evaluating early stage nephropathy whereby early stage nephropathy conditions can be highly accurately evaluated using the concentration of an amino acid in the blood, an early stage nephropathy evaluation device, an early stage nephropathy evaluation method, an early stage nephropathy evaluation program, an early stage nephropathy evaluation system and an information communication terminal device. According to an embodiment of the present invention, amino acid concentration data relating to the concentration of an amino acid in the blood sampled from a subject to be evaluated is acquired, and the early stage nephropathy conditions of the subject are evaluated on the basis of the amino acid concentration data of the subject thus acquired.

(57) 要約: 血液中のアミノ酸の濃度を利用して早期腎症の状態を精度よく評価することができる早期腎症の評価方法、早期腎症評価装置、早期腎症評価方法、早期腎症評価プログラム、早期腎症評価システムおよび情報通信端末装置を提供することを課題とする。本実施形態では、評価対象から採取した血液中のアミノ酸の濃度値に関するアミノ酸濃度データを取得し、取得した評価対象のアミノ酸濃度データに基づいて、評価対象につき早期腎症の状態を評価する。

ア (AM, AZ, BY, KG, KZ, RU, TJ, TM), ヨーロッパ (AL, AT, BE, BG, CH, CY, CZ, DE, DK, EE, ES, FI, FR, GB, GR, HR, HU, IE, IS, IT, LT, LU, LV, MC, MK, MT, NL, NO, PL, PT, RO, RS, SE, SI, SK, SM, TR), OAPI (BF, BJ, CF, CG, CI, CM, GA, GN, GQ, GW, ML, MR, NE, SN, TD, TG).

添付公開書類:

— 国際調査報告（条約第 21 条(3)）

明　細　書

発明の名称 ：

早期腎症の評価方法、早期腎症評価装置、早期腎症評価方法、早期腎症評価プログラム、早期腎症評価システムおよび情報通信端末装置

技術分野

[0001] 本発明は、早期腎症の評価方法、早期腎症評価装置、早期腎症評価方法、早期腎症評価プログラム、早期腎症評価システムおよび情報通信端末装置に関するものである。

背景技術

[0002] 糖尿病性腎症（以下では「腎症」と記す場合がある。）は、糖尿病に伴う細動脈血管障害の一つであり、一定の糖尿病罹患期間の後に微量アルブミンの尿中排泄量増加をもって診断される。糖尿病性腎症は、尿中アルブミン排泄量および蛋白排泄量の増加から顕性蛋白尿を経て慢性腎不全へと連続的に進行していく。糖尿病性腎症は、診断基準によって、Ｉ期（腎症前期）・ＩＩ期（早期腎症期）・ＩＩＩ期（顕性腎症期）・ＩＶ期（腎不全期）・Ｖ期（透析療法期）の病期に分類される（非特許文献１）。

[0003] 我が国において、糖尿病患者の増加を背景として糖尿病性腎症の有病率も年々増加しており、糖尿病性腎症は現在、新規透析導入原疾患の第１位である。糖尿病性腎症に対する進行抑制を主な目的とした治療指針が定められており、病期に応じた血糖管理・血圧管理・食事療法が設定されている（非特許文献１）。

[0004] 更に近年、大規模臨床試験および疫学研究の結果から、厳格な血糖コントロール・レニンアンギオテンシン系阻害薬を用いた降圧療法・積極的な脂質コントロールにより、病期の進行抑制のみならず病期の改善（アルブミン尿の消退）ももたらさることが明らかとされている（非特許文献２および非特許文献３）。

[0005] このように、腎症早期の段階においては集学的治療の有効性が強く認めら

れる。一方で、腎症ＩＩＩ期以降になると集学的治療の有効性が限られるため、不可逆的な経過を辿って末期腎不全へと進行する患者が多くなっていくことが糖尿病性腎症治療における問題点の一つと考えられている。よって、糖尿病性腎症の早期発見が治療そして腎予後を大きく左右することとなり、早期発見および適切な治療介入により腎予後の改善が期待される。

[0006] ところが、糖尿病性腎症早期では自覚症状が全くないため、腎症を早期に検出するためには糖尿病患者全例を対象とした腎症に対するスクリーニング検査を実施する必要がある。

[0007] そこで、糖尿病性腎症に対する早期診断法の開発が精力的に進められてきた結果、現在では、尿中微量アルブミン測定が腎症早期のスクリーニング法として広く臨床で普及し、尿中アルブミンの排泄量の程度によって病期分類も行われている。

[0008] しかし、尿中アルブミン排泄量は被験者の体調不良・運動で変動するため尿中アルブミン測定では被験者の体調不良・運動によって診断結果が擬陽性となり得ることや、尿中アルブミン排泄量には日内変動があるため尿中アルブミン測定の再現性が得られないなどの問題も指摘されている。これらの問題は、患者の腎予後や、治療法の決定、そして臨床試験などにおける予後評価の結果に大きな影響を与える。

[0009] また、臨床現場での問題として、糖尿病患者に対して血液サンプルを用いた血糖コントロール指標の測定は略全患者に且つ高頻度に行われているにもかかわらず、一方で尿サンプルを用いたアルブミン排泄量の測定は全患者数の３０％程度しか行われていないことが挙げられる（非特許文献４）。この問題は、治療可能な早期腎症を見逃す結果をもたらし、患者の腎予後を悪化させる一要因となっている。また、非特許文献４に記載されている尿サンプルを用いたアルブミン排泄量の測定に関しては、擬陽性・測定再現性・診断性能が十分ではないという問題がある。

[0010] よって、現在用いられている尿中アルブミン排泄の検出に替わる、より有効かつ簡便な早期腎症のスクリーニング法の開発が望まれている。

[0011] なお、先行特許として、アミノ酸濃度と生体状態とを関連付ける方法に関する特許文献１、特許文献２、および特許文献３が公開されている。また、アミノ酸濃度を用いてメタボリックシンドロームの状態を評価する方法に関する特許文献４、アミノ酸濃度を用いて内臓脂肪蓄積の状態を評価する方法に関する特許文献５、アミノ酸濃度を用いて耐糖能異常の状態を評価する方法に関する特許文献６およびアミノ酸濃度を用いて肥満の状態を評価する方法に関する特許文献７が公開されている。また、慢性腎臓病の検出に関する特許文献８および非特許文献５が公開されている。

先行技術文献

特許文献

[0012] 特許文献1：国際公開第２００４／０５２１９１号

特許文献2：国際公開第２００６／０９８１９２号

特許文献3：国際公開第２００９／０５４３５１号

特許文献4：国際公開第２００８／０１５９２９号

特許文献5：国際公開第２００９／００１８６２号

特許文献6：国際公開第２００９／０５４３５０号

特許文献7：国際公開第２０１０／０９５６８２号

特許文献8：特開２０１１－５８８６３号公報

非特許文献

[0013] 非特許文献1：糖尿病治療ガイド２０１０　社団法人日本糖尿病学会

非特許文献2：Ａｒａｋｉ　Ｓ．　ｅｔ　ａｌ．，Ｄｉａｂｅｔｅｓ．，２００５，Ｏｃｔ，５４（１０），２９８３－７

非特許文献3：Ｐｅｒｋｉｎｓ　ＢＡ．　ｅｔ　ａｌ．，Ｎ　Ｅｎｇｌ　Ｊ　Ｍｅｄ．，２００３，Ｊｕｎ　５，３４８（２３），２２８５－９３

非特許文献4：滋賀県医師会糖尿病実態調査委員会，滋賀県内全医療機関を対象とした糖尿病実態調査　－平成１２年と１８年の比較から－，日本医事新報，２００８年８月１６日，Ｎｏ．４３９９，７１－７４

非特許文献5：Ｔａｋａｆｕｍｉ　Ｔｏｙｏｈａｒａ　ｅｔ　ａｌ．，Ｈｙｐ

ｅｒｔｅｎｓ Ｒｅｓ．，２０１０，Ｓｅｐ，３３（９），９４４－５２

発明の概要

発明が解決しようとする課題

[0014] しかしながら、血中アミノ酸濃度を早期腎症のスクリーニングに応用した報告はない。また、特許文献１～７に開示されている指標式群を早期腎症の診断に用いても、診断対象が異なるので、早期腎症の状態評価について十分な精度を得ることはできない。つまり、血中アミノ酸濃度を利用して早期腎症の状態を評価する方法の開発は行われておらず、また実用化もされていないという問題点があった。

[0015] 本発明は、上記問題点に鑑みてなされたもので、血液中のアミノ酸の濃度を利用して早期腎症の状態を精度よく評価することができる早期腎症の評価方法、早期腎症評価装置、早期腎症評価方法、早期腎症評価プログラム、早期腎症評価システムおよび情報通信端末装置を提供することを目的とする。

課題を解決するための手段

[0016] 上述した課題を解決し、目的を達成するために、本発明にかかる早期腎症の評価方法は、評価対象から採取した血液中のアミノ酸の濃度値に関するアミノ酸濃度データを取得する取得ステップと、前記取得ステップで取得した前記評価対象の前記アミノ酸濃度データに含まれるＥｔＯＨＮＨ２，Ｇｌｙ，Ｓａｒ，Ａｌａ，β－ＡＩＢＡ，α－ＡＢＡ，Ｓｅｒ，Ｐｒｏ，Ｖａｌ，Ｔｈｒ，Ｔａｕ，Ｈｙｐｒｏ，Ｉｌｅ，Ｌｅｕ，Ａｓｎ，Ｏｒｎ，Ａｓｐ，ＧＩｎ，Ｌｙｓ，Ｇｌｕ，Ｍｅｔ，Ｈｉｓ，α－ＡＡＡ，Ｐｈｅ，３－ＭｅＨｉｓ，Ａｒｇ，Ｃｉｔ，Ｔｙｒ，Ｔｒｐ，Ｃｙｓのうち少なくとも１つの前記濃度値に基づいて、前記評価対象につき早期腎症の状態を評価する濃度値基準評価ステップとを含むことを特徴とする。

[0017] ここで、本明細書では各種アミノ酸を主に略称で表記するが、それらの正式名称は以下の通りである。

（略称）	（正式名称）
ＥｔＯＨＮＨ２	Ｅｔｈａｎｏｌａｍｉｎｅ

Gly	Glycine
Sar	Sarcosine
Ala	Alanine
β－AIBA	β－Amino－iso－butyric acid
α－ABA	α－Aminobutyric acid
Ser	Serine
Pro	Proline
Val	Valine
Thr	Threonine
Tau	Taurine
Hypro	Hydroxyproline
Ile	Isoleucine
Leu	Leucine
Asn	Asparagine
Orn	Ornithine
Asp	Aspartic acid
Gln	Glutamine
Lys	Lysine
Glu	Glutamic acid
Met	Methionine
His	Histidine
α－AAA	α－Aminoadipic acid
Phe	Phenylalanine
1－MeHis	1－Methylhistidine
3－MeHis	3－Methylhistidine
Arg	Arginine
Cit	Citrulline

Ｔｙｒ	Ｔｙｒｏｓｉｎｅ
Ｔｒｐ	Ｔｒｙｐｔｏｐｈａｎ
Ｃｙｓ	Ｃｙｓｔｉｎｅ

[0018] また、本発明にかかる早期腎症の評価方法は、前記の早期腎症の評価方法において、前記濃度値基準評価ステップは、前記アミノ酸濃度データに含まれるＳａｒ，Ａｌａ，β－ＡＩＢＡ，α－ＡＢＡ，Ｓｅｒ，Ｐｒｏ，Ｖａｌ，Ｈｙｐｒｏ，Ｉｌｅ，Ｌｅｕ，Ｏｒｎ，Ｌｙｓ，Ｇｌｕ，Ｍｅｔ，Ｈｉｓ，α－ＡＡＡ，Ｐｈｅ，３－ＭｅＨｉｓ，Ａｒｇ，Ｃｉｔ，Ｔｒｐ，Ｃｙｓのうち少なくとも１つの前記濃度値に基づいて、前記評価対象が前記早期腎症を有するかを評価すること、を特徴とする。

[0019] また、本発明にかかる早期腎症の評価方法は、前記の早期腎症の評価方法において、前記濃度値基準評価ステップは、前記アミノ酸濃度データに含まれるβ－ＡＩＢＡ，３－ＭｅＨｉｓ，Ｃｉｔ，Ｔｒｐ，Ｃｙｓ，Ｇｌｕ，Ｈｙｐｒｏ，Ｓａｒ，Ｌｅｕ，Ｈｉｓ，Ａｒｇ，Ｌｙｓ，Ｓｅｒ，Ｐｈｅ，Ａｌａ，Ｏｒｎ，Ｐｒｏ，Ｉｌｅのうち少なくとも１つの前記濃度値に基づいて、前記評価対象が将来、心血管イベントを発症するかをさらに評価すること、を特徴とする。

[0020] ここで、本明細書において、心血管イベントには、冠動脈疾患（心筋梗塞、狭心症、心不全など）、脳血管障害（脳虚血、脳梗塞、脳出血など）及びその他の血管障害（内頚動脈狭窄症、末梢閉塞性動脈疾患など）が含まれる。

[0021] また、本発明にかかる早期腎症の評価方法は、前記の早期腎症の評価方法において、前記濃度値基準評価ステップは、前記アミノ酸濃度データに含まれるＥｔＯＨＮＨ２，Ｓａｒ，β－ＡＩＢＡ，α－ＡＢＡ，Ｓｅｒ，Ｖａｌ，Ｔｈｒ，Ｔａｕ，Ｈｙｐｒｏ，Ｉｌｅ，Ａｓｎ，Ｏｒｎ，Ａｓｐ，Ｇｌｎ，α－ＡＡＡ，Ａｒｇ，Ｔｙｒ，Ｃｙｓ，Ｇｌｙ，Ａｌａ，Ｐｒｏ，Ｌｅｕ，Ｌｙｓ，Ｍｅｔ，Ｈｉｓ，Ｐｈｅのうち少なくとも１つの前記濃度値に基づいて、前記評価対象が将来、前記早期腎症を発症するかを評価すること、

を特徴とする。

[0022] また、本発明にかかる早期腎症の評価方法は、前記の早期腎症の評価方法において、前記濃度値基準評価ステップは、前記アミノ酸濃度データに含まれるＥｔＯＨＮＨ２，Ｇｌｙ，Ｓａｒ，Ａｌａ，β－ＡＩＢＡ，α－ＡＢＡ，Ｓｅｒ，Ｐｒｏ，Ｖａｌ，Ｔｈｒ，Ｔａｕ，Ｈｙｐｒｏ，Ｉｌｅ，Ｌｅｕ，Ａｓｎ，Ｏｒｎ，Ａｓｐ，Ｇｌｎ，Ｌｙｓ，Ｇｌｕ，Ｍｅｔ，Ｈｉｓ，α－ＡＡＡ，Ｐｈｅ，３－ＭｅＨｉｓ，Ａｒｇ，Ｃｉｔ，Ｔｙｒ，Ｔｒｐ，Ｃｙｓのうち少なくとも１つの前記濃度値、および前記アミノ酸の濃度を変数として含みＥｔＯＨＮＨ２，Ｇｌｙ，Ｓａｒ，Ａｌａ，β－ＡＩＢＡ，α－ＡＢＡ，Ｓｅｒ，Ｐｒｏ，Ｖａｌ，Ｔｈｒ，Ｔａｕ，Ｈｙｐｒｏ，Ｉｌｅ，Ｌｅｕ，Ａｓｎ，Ｏｒｎ，Ａｓｐ，Ｇｌｎ，Ｌｙｓ，Ｇｌｕ，Ｍｅｔ，Ｈｉｓ，α－ＡＡＡ，Ｐｈｅ，３－ＭｅＨｉｓ，Ａｒｇ，Ｃｉｔ，Ｔｙｒ，Ｔｒｐ，Ｃｙｓのうち少なくとも１つを前記変数として含む予め設定された、前記早期腎症の前記状態を評価するための多変量判別式に基づいて、当該多変量判別式の値である判別値を算出する判別値算出ステップをさらに含むこと、を特徴とする。

[0023] また、本発明にかかる早期腎症の評価方法は、前記の早期腎症の評価方法において、前記多変量判別式は、ロジスティック回帰式、分数式、線形判別式、重回帰式、サポートベクターマシンで作成された式、マハラノビス距離法で作成された式、正準判別分析で作成された式、決定木で作成された式、Ｃｏｘ比例ハザードモデル式のいずれか１つであること、を特徴とする。

[0024] また、本発明にかかる早期腎症の評価方法は、前記の早期腎症の評価方法において、前記濃度値基準評価ステップは、前記判別値算出ステップで算出した前記判別値に基づいて、前記評価対象につき前記早期腎症の前記状態を評価する判別値基準評価ステップをさらに含むこと、を特徴とする。

[0025] また、本発明にかかる早期腎症の評価方法は、前記の早期腎症の評価方法において、前記判別値算出ステップは、前記アミノ酸濃度データに含まれるＳａｒ，Ａｌａ，β－ＡＩＢＡ，α－ＡＢＡ，Ｓｅｒ，Ｐｒｏ，Ｖａｌ，Ｈ

ｙｐｒｏ，Ｉｌｅ，Ｌｅｕ，Ｏｒｎ，Ｌｙｓ，Ｇｌｕ，Ｍｅｔ，Ｈｉｓ，α－ＡＡＡ，Ｐｈｅ，３－ＭｅＨｉｓ，Ａｒｇ，Ｃｉｔ，Ｔｒｐ，Ｃｙｓのうち少なくとも１つの前記濃度値、およびＳａｒ，Ａｌａ，β－ＡＩＢＡ，α－ＡＢＡ，Ｓｅｒ，Ｐｒｏ，Ｖａｌ，Ｈｙｐｒｏ，Ｉｌｅ，Ｌｅｕ，Ｏｒｎ，Ｌｙｓ，Ｇｌｕ，Ｍｅｔ，Ｈｉｓ，α－ＡＡＡ，Ｐｈｅ，３－ＭｅＨｉｓ，Ａｒｇ，Ｃｉｔ，Ｔｒｐ，Ｃｙｓのうち少なくとも１つを前記変数として含む前記多変量判別式に基づいて、前記判別値を算出し、前記判別値基準評価ステップは、前記判別値に基づいて、前記評価対象が前記早期腎症を有するかを評価すること、を特徴とする。

[0026] また、本発明にかかる早期腎症の評価方法は、前記の早期腎症の評価方法において、前記早期腎症の前記評価で用いられる前記多変量判別式は、Ａｌａ，Ｏｒｎ，Ｇｌｕ，３－ＭｅＨｉｓ，Ｔｒｐ，Ｃｙｓを前記変数として含む前記ロジスティック回帰式、Ａｌａ，Ｓｅｒ，Ｌｅｕ，Ｌｙｓ，Ｃｉｔ，Ｔｒｐを前記変数として含む前記ロジスティック回帰式、Ａｌａ，Ｇｌｕ，３－ＭｅＨｉｓ，Ｃｉｔ，Ｔｒｐ，Ｃｙｓを前記変数として含む前記線形判別式、またはＡｌａ，Ｓｅｒ，Ｉｌｅ，Ｌｙｓ，Ｐｈｅ，Ｔｒｐを前記変数として含む前記線形判別式であること、を特徴とする。

[0027] また、本発明にかかる早期腎症の評価方法は、前記の早期腎症の評価方法において、前記判別値算出ステップは、前記アミノ酸濃度データに含まれるβ－ＡＩＢＡ，３－ＭｅＨｉｓ，Ｃｉｔ，Ｔｒｐ，Ｃｙｓ，Ｇｌｕ，Ｈｙｐｒｏ，Ｓａｒ，Ｌｅｕ，Ｈｉｓ，Ａｒｇ，Ｌｙｓ，Ｓｅｒ，Ｐｈｅ，Ａｌａ，Ｏｒｎ，Ｐｒｏ，Ｉｌｅのうち少なくとも１つの前記濃度値、およびβ－ＡＩＢＡ，３－ＭｅＨｉｓ，Ｃｉｔ，Ｔｒｐ，Ｃｙｓ，Ｇｌｕ，Ｈｙｐｒｏ，Ｓａｒ，Ｌｅｕ，Ｈｉｓ，Ａｒｇ，Ｌｙｓ，Ｓｅｒ，Ｐｈｅ，Ａｌａ，Ｏｒｎ，Ｐｒｏ，Ｉｌｅのうち少なくとも１つを前記変数として含む前記多変量判別式に基づいて、前記判別値を算出し、前記判別値基準評価ステップは、前記判別値に基づいて、前記評価対象が将来、心血管イベントを発症するかをさらに評価すること、を特徴とする。

[0028] また、本発明にかかる早期腎症の評価方法は、前記の早期腎症の評価方法において、前記心血管イベントの前記評価で用いられる前記多変量判別式は、Ａｌａ，Ｏｒｎ，Ｇｌｕ，３－ＭｅＨｉｓ，Ｔｒｐ，Ｃｙｓを前記変数として含む前記ロジスティック回帰式、Ｈｙｐｒｏ，Ｇｌｕ，Ｈｉｓ，３－ＭｅＨｉｓ，Ａｒｇ，Ｔｒｐを前記変数として含む前記ロジスティック回帰式、Ａｌａ，Ｓｅｒ，Ｌｅｕ，Ｌｙｓ，Ｃｉｔ，Ｔｒｐを前記変数として含む前記ロジスティック回帰式、Ｓｅｒ，Ｏｒｎ，Ｈｉｓ，Ａｒｇ，Ｔｒｐを前記変数として含む前記ロジスティック回帰式、Ａｌａ，Ｇｌｕ，３－ＭｅＨｉｓ，Ｃｉｔ，Ｔｒｐ，Ｃｙｓを前記変数として含む前記線形判別式、Ｓａｒ，Ｌｅｕ，Ｇｌｕ，３－ＭｅＨｉｓ，Ａｒｇ，Ｔｒｐを前記変数として含む前記線形判別式、Ａｌａ，Ｓｅｒ，Ｉｌｅ，Ｌｙｓ，Ｐｈｅ，Ｔｒｐを前記変数として含む前記線形判別式、Ｓｅｒ，Ｌｙｓ，Ｈｉｓ，Ｃｉｔ，Ｔｒｐを前記変数として含む前記線形判別式、Ｈｙｐｒｏ，Ｇｌｕ，３－ＭｅＨｉｓ，Ｔｒｐを前記変数として含む前記Ｃｏｘ比例ハザードモデル式、またはＳｅｒ，Ｌｙｓ，Ｈｉｓ，Ｃｉｔ，Ｔｒｐを前記変数として含む前記Ｃｏｘ比例ハザードモデル式であること、を特徴とする。

[0029] また、本発明にかかる早期腎症の評価方法は、前記の早期腎症の評価方法において、前記判別値算出ステップは、前記アミノ酸濃度データに含まれるＥｔＯＨＮＨ２，Ｓａｒ，β－ＡＩＢＡ，α－ＡＢＡ，Ｓｅｒ，Ｖａｌ，Ｔｈｒ，Ｔａｕ，Ｈｙｐｒｏ，Ｉｌｅ，Ａｓｎ，Ｏｒｎ，Ａｓｐ，Ｇｌｎ，α－ＡＡＡ，Ａｒｇ，Ｔｙｒ，Ｃｙｓ，Ｇｌｙ，Ａｌａ，Ｐｒｏ，Ｌｅｕ，Ｌｙｓ，Ｍｅｔ，Ｈｉｓ，Ｐｈｅのうち少なくとも１つの前記濃度値、およびＥｔＯＨＮＨ２，Ｓａｒ，β－ＡＩＢＡ，α－ＡＢＡ，Ｓｅｒ，Ｖａｌ，Ｔｈｒ，Ｔａｕ，Ｈｙｐｒｏ，Ｉｌｅ，Ａｓｎ，Ｏｒｎ，Ａｓｐ，Ｇｌｎ，α－ＡＡＡ，Ａｒｇ，Ｔｙｒ，Ｃｙｓ，Ｇｌｙ，Ａｌａ，Ｐｒｏ，Ｌｅｕ，Ｌｙｓ，Ｍｅｔ，Ｈｉｓ，Ｐｈｅのうち少なくとも１つを前記変数として含む前記多変量判別式に基づいて、前記判別値を算出し、前記判別値基準評価ステップは、前記判別値に基づいて、前記評価対象が将来、前記早期腎症を発

症するかを評価すること、を特徴とする。

[0030] また、本発明にかかる早期腎症の評価方法は、前記の早期腎症の評価方法において、前記多変量判別式は、β－ＡＩＢＡ，Ｖａｌ，Ｔａｕ，Ｉｌｅ，α－ＡＡＡ，Ａｒｇを前記変数として含む前記ロジスティック回帰式、Ｓｅｒ，Ｖａｌ，Ｍｅｔ，Ａｒｇ，Ｔｙｒを前記変数として含む前記ロジスティック回帰式、Ｖａｌ，Ｔａｕ，Ｉｌｅ，α－ＡＡＡ，Ｐｈｅ，Ａｒｇを前記変数として含む前記線形判別式、またはＳｅｒ，Ｐｒｏ，Ｖａｌ，Ｉｌｅ，Ｌｅｕ，Ａｒｇを前記変数として含む前記線形判別式であること、を特徴とする。

[0031] また、本発明にかかる早期腎症評価装置は、制御部と記憶部とを備え、評価対象につき早期腎症の状態を評価する早期腎症評価装置であって、前記制御部は、アミノ酸の濃度値に関する前記評価対象のアミノ酸濃度データに含まれるＥｔＯＨＮＨ２，Ｇｌｙ，Ｓａｒ，Ａｌａ，β－ＡＩＢＡ，α－ＡＢＡ，Ｓｅｒ，Ｐｒｏ，Ｖａｌ，Ｔｈｒ，Ｔａｕ，Ｈｙｐｒｏ，Ｉｌｅ，Ｌｅｕ，Ａｓｎ，Ｏｒｎ，Ａｓｐ，Ｇｌｎ，Ｌｙｓ，Ｇｌｕ，Ｍｅｔ，Ｈｉｓ，α－ＡＡＡ，Ｐｈｅ，３－ＭｅＨｉｓ，Ａｒｇ，Ｃｉｔ，Ｔｙｒ，Ｔｒｐ，Ｃｙｓのうち少なくとも１つの前記濃度値、および前記アミノ酸の濃度を変数として含みＥｔＯＨＮＨ２，Ｇｌｙ，Ｓａｒ，Ａｌａ，β－ＡＩＢＡ，α－ＡＢＡ，Ｓｅｒ，Ｐｒｏ，Ｖａｌ，Ｔｈｒ，Ｔａｕ，Ｈｙｐｒｏ，Ｉｌｅ，Ｌｅｕ，Ａｓｎ，Ｏｒｎ，Ａｓｐ，Ｇｌｎ，Ｌｙｓ，Ｇｌｕ，Ｍｅｔ，Ｈｉｓ，α－ＡＡＡ，Ｐｈｅ，３－ＭｅＨｉｓ，Ａｒｇ，Ｃｉｔ，Ｔｙｒ，Ｔｒｐ，Ｃｙｓのうち少なくとも１つを前記変数として含む前記記憶部に記憶された、前記早期腎症の前記状態を評価するための多変量判別式に基づいて、当該多変量判別式の値である判別値を算出する判別値算出手段を備えたこと、を特徴とする。

[0032] また、本発明にかかる早期腎症評価装置は、前記の早期腎症評価装置において、前記制御部は、前記判別値算出手段で算出した前記判別値に基づいて、前記評価対象につき前記早期腎症の前記状態を評価する判別値基準評価手

段をさらに備えたこと、を特徴とする。

[0033] なお、本発明にかかる早期腎症評価装置は、前記の早期腎症評価装置において、（ｉ）前記制御部は、前記アミノ酸濃度データと前記早期腎症の状態を表す指標に関する早期腎症状態指標データとを含む前記記憶部に記憶された早期腎症状態情報に基づいて、前記記憶部で記憶する前記多変量判別式を作成する多変量判別式作成手段をさらに備え、（ｉｉ）前記多変量判別式作成手段は、前記早期腎症状態情報から所定の式作成手法に基づいて、前記多変量判別式の候補である候補多変量判別式を作成する候補多変量判別式作成手段と、前記候補多変量判別式作成手段で作成した前記候補多変量判別式を、所定の検証手法に基づいて検証する候補多変量判別式検証手段と、所定の変数選択手法に基づいて前記候補多変量判別式の変数を選択することで、前記候補多変量判別式を作成する際に用いる前記早期腎症状態情報に含まれる前記アミノ酸濃度データの組み合わせを選択する変数選択手段と、をさらに備え、前記候補多変量判別式作成手段、前記候補多変量判別式検証手段および前記変数選択手段を繰り返し実行して蓄積した前記検証結果に基づいて、複数の前記候補多変量判別式の中から前記多変量判別式として採用する前記候補多変量判別式を選出することで、前記多変量判別式を作成すること、を特徴としてもよい。

[0034] また、本発明にかかる早期腎症評価方法は、制御部と記憶部とを備えた情報処理装置において実行される、評価対象につき早期腎症の状態を評価する早期腎症評価方法であって、前記制御部において実行される、アミノ酸の濃度値に関する前記評価対象のアミノ酸濃度データに含まれるＥｔＯＨＮＨ２，Ｇｌｙ，Ｓａｒ，Ａｌａ，β－ＡＩＢＡ，α－ＡＢＡ，Ｓｅｒ，Ｐｒｏ，Ｖａｌ，Ｔｈｒ，Ｔａｕ，Ｈｙｐｒｏ，Ｉｌｅ，Ｌｅｕ，Ａｓｎ，Ｏｒｎ，Ａｓｐ，ＧＩｎ，Ｌｙｓ，Ｇｌｕ，Ｍｅｔ，Ｈｉｓ，α－ＡＡＡ，Ｐｈｅ，３－ＭｅＨｉｓ，Ａｒｇ，Ｃｉｔ，Ｔｙｒ，Ｔｒｐ，Ｃｙｓのうち少なくとも１つの前記濃度値、および前記アミノ酸の濃度を変数として含みＥｔＯＨＮＨ2，Ｇｌｙ，Ｓａｒ，Ａｌａ，β－ＡＩＢＡ，α－ＡＢＡ，Ｓｅｒ，Ｐ

ｒｏ，Ｖａｌ，Ｔｈｒ，Ｔａｕ，Ｈｙｐｒｏ，Ｉｌｅ，Ｌｅｕ，Ａｓｎ，Ｏｒｎ，Ａｓｐ，ＧＩｎ，Ｌｙｓ，Ｇｌｕ，Ｍｅｔ，Ｈｉｓ，α－ＡＡＡ，Ｐｈｅ，３－ＭｅＨｉｓ，Ａｒｇ，Ｃｉｔ，Ｔｙｒ，Ｔｒｐ，Ｃｙｓのうち少なくとも１つを前記変数として含む前記記憶部に記憶された、前記早期腎症の前記状態を評価するための多変量判別式に基づいて、当該多変量判別式の値である判別値を算出する判別値算出ステップを含むこと、を特徴とする。

[0035] また、本発明にかかる早期腎症評価プログラムは、制御部と記憶部とを備えた情報処理装置において実行させるための、評価対象につき早期腎症の状態を評価する早期腎症評価プログラムであって、前記制御部において実行させるための、アミノ酸の濃度値に関する前記評価対象のアミノ酸濃度データに含まれるＥｔＯＨＮＨ２，Ｇｌｙ，Ｓａｒ，Ａｌａ，β－ＡＩＢＡ，α－ＡＢＡ，Ｓｅｒ，Ｐｒｏ，Ｖａｌ，Ｔｈｒ，Ｔａｕ，Ｈｙｐｒｏ，Ｉｌｅ，Ｌｅｕ，Ａｓｎ，Ｏｒｎ，Ａｓｐ，ＧＩｎ，Ｌｙｓ，Ｇｌｕ，Ｍｅｔ，Ｈｉｓ，α－ＡＡＡ，Ｐｈｅ，３－ＭｅＨｉｓ，Ａｒｇ，Ｃｉｔ，Ｔｙｒ，Ｔｒｐ，Ｃｙｓのうち少なくとも１つの前記濃度値、および前記アミノ酸の濃度を変数として含みＥｔＯＨＮＨ２，Ｇｌｙ，Ｓａｒ，Ａｌａ，β－ＡＩＢＡ，α－ＡＢＡ，Ｓｅｒ，Ｐｒｏ，Ｖａｌ，Ｔｈｒ，Ｔａｕ，Ｈｙｐｒｏ，Ｉｌｅ，Ｌｅｕ，Ａｓｎ，Ｏｒｎ，Ａｓｐ，ＧＩｎ，Ｌｙｓ，Ｇｌｕ，Ｍｅｔ，Ｈｉｓ，α－ＡＡＡ，Ｐｈｅ，３－ＭｅＨｉｓ，Ａｒｇ，Ｃｉｔ，Ｔｙｒ，Ｔｒｐ，Ｃｙｓのうち少なくとも１つを前記変数として含む前記記憶部に記憶された、前記早期腎症の前記状態を評価するための多変量判別式に基づいて、当該多変量判別式の値である判別値を算出する判別値算出ステップを含むこと、を特徴とする。

[0036] また、本発明にかかる記録媒体は、一時的でないコンピュータ読み取り可能な記録媒体であって、情報処理装置に前記早期腎症評価方法を実行させるためのプログラム化された命令を含むこと、を特徴とする。

[0037] また、本発明にかかる早期腎症評価システムは、制御部と記憶部とを備え、評価対象につき早期腎症の状態を評価する早期腎症評価装置と、制御部を

備え、アミノ酸の濃度値に関する前記評価対象のアミノ酸濃度データを提供する情報通信端末装置とを、ネットワークを介して通信可能に接続して構成された早期腎症評価システムであって、前記情報通信端末装置の前記制御部は、前記評価対象の前記アミノ酸濃度データを前記早期腎症評価装置へ送信するアミノ酸濃度データ送信手段と、前記早期腎症評価装置から送信された、多変量判別式の値である判別値を受信する結果受信手段とを備え、前記早期腎症評価装置の前記制御部は、前記情報通信端末装置から送信された前記アミノ酸濃度データを受信するアミノ酸濃度データ受信手段と、前記アミノ酸濃度データ受信手段で受信した前記アミノ酸濃度データに含まれるＥｔＯＨＮＨ２，Ｇｌｙ，Ｓａｒ，Ａｌａ，β－ＡＩＢＡ，α－ＡＢＡ，Ｓｅｒ，Ｐｒｏ，Ｖａｌ，Ｔｈｒ，Ｔａｕ，Ｈｙｐｒｏ，Ｉｌｅ，Ｌｅｕ，Ａｓｎ，Ｏｒｎ，Ａｓｐ，Ｇｌｎ，Ｌｙｓ，Ｇｌｕ，Ｍｅｔ，Ｈｉｓ，α－ＡＡＡ，Ｐｈｅ，３－ＭｅＨｉｓ，Ａｒｇ，Ｃｉｔ，Ｔｙｒ，Ｔｒｐ，Ｃｙｓのうち少なくとも１つの前記濃度値、および前記アミノ酸の濃度を変数として含みＥｔＯＨＮＨ２，Ｇｌｙ，Ｓａｒ，Ａｌａ，β－ＡＩＢＡ，α－ＡＢＡ，Ｓｅｒ，Ｐｒｏ，Ｖａｌ，Ｔｈｒ，Ｔａｕ，Ｈｙｐｒｏ，Ｉｌｅ，Ｌｅｕ，Ａｓｎ，Ｏｒｎ，Ａｓｐ，Ｇｌｎ，Ｌｙｓ，Ｇｌｕ，Ｍｅｔ，Ｈｉｓ，α－ＡＡＡ，Ｐｈｅ，３－ＭｅＨｉｓ，Ａｒｇ，Ｃｉｔ，Ｔｙｒ，Ｔｒｐ，Ｃｙｓのうち少なくとも１つを前記変数として含む前記記憶部に記憶された、前記早期腎症の前記状態を評価するための前記多変量判別式に基づいて、前記判別値を算出する判別値算出手段と、前記判別値算出手段で算出した前記判別値を前記情報通信端末装置へ送信する結果送信手段と、を備えたこと、を特徴とする。

[0038] また、本発明にかかる早期腎症評価システムは、前記の早期腎症評価システムにおいて、前記早期腎症評価装置の前記制御部は、前記判別値算出手段で算出した前記判別値に基づいて、前記評価対象につき前記早期腎症の前記状態を評価する判別値基準評価手段をさらに備え、前記結果送信手段は、前記判別値基準評価手段で得られた前記評価対象の評価結果を前記情報通信端

末装置へ送信し、前記結果受信手段は、前記情報通信端末装置から送信された前記評価対象の前記評価結果を受信すること、を特徴とする。

[0039] また、本発明にかかる情報通信端末装置は、制御部を備え、アミノ酸の濃度値に関する評価対象のアミノ酸濃度データを提供する情報通信端末装置であって、前記制御部は、多変量判別式の値である判別値を取得する結果取得手段を備え、前記判別値は、前記評価対象の前記アミノ酸濃度データに含まれるＥｔＯＨＮＨ２，Ｇｌｙ，Ｓａｒ，Ａｌａ，β－ＡＩＢＡ，α－ＡＢＡ，Ｓｅｒ，Ｐｒｏ，Ｖａｌ，Ｔｈｒ，Ｔａｕ，Ｈｙｐｒｏ，Ｉｌｅ，Ｌｅｕ，Ａｓｎ，Ｏｒｎ，Ａｓｐ，Ｇｌｎ，Ｌｙｓ，Ｇｌｕ，Ｍｅｔ，Ｈｉｓ，α－ＡＡＡ，Ｐｈｅ，３－ＭｅＨｉｓ，Ａｒｇ，Ｃｉｔ，Ｔｙｒ，Ｔｒｐ，Ｃｙｓのうち少なくとも１つの前記濃度値、および前記アミノ酸の濃度を変数として含みＥｔＯＨＮＨ２，Ｇｌｙ，Ｓａｒ，Ａｌａ，β－ＡＩＢＡ，α－ＡＢＡ，Ｓｅｒ，Ｐｒｏ，Ｖａｌ，Ｔｈｒ，Ｔａｕ，Ｈｙｐｒｏ，Ｉｌｅ，Ｌｅｕ，Ａｓｎ，Ｏｒｎ，Ａｓｐ，Ｇｌｎ，Ｌｙｓ，Ｇｌｕ，Ｍｅｔ，Ｈｉｓ，α－ＡＡＡ，Ｐｈｅ，３－ＭｅＨｉｓ，Ａｒｇ，Ｃｉｔ，Ｔｙｒ，Ｔｒｐ，Ｃｙｓのうち少なくとも１つを前記変数として含む早期腎症の状態を評価するための多変量判別式に基づいて算出したものであること、を特徴とする。

[0040] また、本発明にかかる情報通信端末装置は、前記の情報通信端末装置において、前記評価対象につき前記早期腎症の前記状態を評価する早期腎症評価装置とネットワークを介して通信可能に接続されており、前記制御部は、前記評価対象の前記アミノ酸濃度データを前記早期腎症評価装置へ送信するアミノ酸濃度データ送信手段をさらに備え、前記結果取得手段は、前記早期腎症評価装置から送信された前記判別値を受信すること、を特徴とする。

[0041] また、本発明にかかる情報通信端末装置は、前記の情報通信端末装置において、前記結果取得手段は、前記早期腎症評価装置から送信された、前記評価対象の前記早期腎症の前記状態に関する評価結果を受信し、前記評価結果は、前記判別値に基づいて前記評価対象につき前記早期腎症の前記状態を評

価した結果であること、を特徴とする。

[0042] また、本発明にかかる早期腎症評価装置は、アミノ酸の濃度値に関する評価対象のアミノ酸濃度データを提供する情報通信端末装置とネットワークを介して通信可能に接続された、制御部と記憶部とを備え、前記評価対象につき早期腎症の状態を評価する早期腎症評価装置であって、前記制御部は、前記情報通信端末装置から送信された前記アミノ酸濃度データを受信するアミノ酸濃度データ受信手段と、前記アミノ酸濃度データ受信手段で受信した前記アミノ酸濃度データに含まれるＥｔＯＨＮＨ２，Ｇｌｙ，Ｓａｒ，Ａｌａ，β－ＡＩＢＡ，α－ＡＢＡ，Ｓｅｒ，Ｐｒｏ，Ｖａｌ，Ｔｈｒ，Ｔａｕ，Ｈｙｐｒｏ，Ｉｌｅ，Ｌｅｕ，Ａｓｎ，Ｏｒｎ，Ａｓｐ，Ｇｌｎ，Ｌｙｓ，Ｇｌｕ，Ｍｅｔ，Ｈｉｓ，α－ＡＡＡ，Ｐｈｅ，３－ＭｅＨｉｓ，Ａｒｇ，Ｃｉｔ，Ｔｙｒ，Ｔｒｐ，Ｃｙｓのうち少なくとも１つの前記濃度値、および前記アミノ酸の濃度を変数として含みＥｔＯＨＮＨ２，Ｇｌｙ，Ｓａｒ，Ａｌａ，β－ＡＩＢＡ，α－ＡＢＡ，Ｓｅｒ，Ｐｒｏ，Ｖａｌ，Ｔｈｒ，Ｔａｕ，Ｈｙｐｒｏ，Ｉｌｅ，Ｌｅｕ，Ａｓｎ，Ｏｒｎ，Ａｓｐ，Ｇｌｎ，Ｌｙｓ，Ｇｌｕ，Ｍｅｔ，Ｈｉｓ，α－ＡＡＡ，Ｐｈｅ，３－ＭｅＨｉｓ，Ａｒｇ，Ｃｉｔ，Ｔｙｒ，Ｔｒｐ，Ｃｙｓのうち少なくとも１つを前記変数として含む前記記憶部に記憶された、前記早期腎症の前記状態を評価するための多変量判別式に基づいて、当該多変量判別式の値である判別値を算出する判別値算出手段と、前記判別値算出手段で算出した前記判別値を前記情報通信端末装置へ送信する結果送信手段と、を備えたこと、を特徴とする。

[0043] また、本発明にかかる早期腎症評価装置は、前記の早期腎症評価装置において、前記制御部は、前記判別値算出手段で算出した前記判別値に基づいて、前記評価対象につき前記早期腎症の前記状態を評価する判別値基準評価手段をさらに備え、前記結果送信手段は、前記判別値基準評価手段で得られた前記評価対象の評価結果を前記情報通信端末装置へ送信すること、を特徴とする。

[0044] また、本発明にかかる早期腎症の予防・改善物質の探索方法は、１つ又は

複数の物質から成る所望の物質群が投与された評価対象から採取した血液中のアミノ酸の濃度値に関するアミノ酸濃度データを取得する取得ステップと、前記取得ステップで取得した前記評価対象の前記アミノ酸濃度データに基づいて、前記評価対象につき早期腎症の状態を評価する濃度値基準評価ステップと、前記濃度値基準評価ステップでの評価結果に基づいて、前記所望の前記物質群が、前記早期腎症を予防させる又は前記早期腎症の状態を改善させるものであるか否かを判定する判定ステップと、を含むことを特徴とする。

発明の効果

[0045] 本発明によれば、評価対象から採取した血液中のアミノ酸の濃度値に関するアミノ酸濃度データを取得し、取得した評価対象のアミノ酸濃度データに含まれるＥｔＯＨＮＨ２，Ｇｌｙ，Ｓａｒ，Ａｌａ，β－ＡＩＢＡ，α－ＡＢＡ，Ｓｅｒ，Ｐｒｏ，Ｖａｌ，Ｔｈｒ，Ｔａｕ，Ｈｙｐｒｏ，Ｉｌｅ，Ｌｅｕ，Ａｓｎ，Ｏｒｎ，Ａｓｐ，Ｇｌｎ，Ｌｙｓ，Ｇｌｕ，Ｍｅｔ，Ｈｉｓ，α－ＡＡＡ，Ｐｈｅ，３－ＭｅＨｉｓ，Ａｒｇ，Ｃｉｔ，Ｔｙｒ，Ｔｒｐ，Ｃｙｓのうち少なくとも１つの濃度値に基づいて、評価対象につき早期腎症の状態を評価する。これにより、血液中のアミノ酸の濃度のうち早期腎症の状態評価に有用なアミノ酸の濃度を利用して早期腎症の状態を精度よく評価することができるという効果を奏する。

[0046] また、本発明によれば、アミノ酸濃度データに含まれるＳａｒ，Ａｌａ，β－ＡＩＢＡ，α－ＡＢＡ，Ｓｅｒ，Ｐｒｏ，Ｖａｌ，Ｈｙｐｒｏ，Ｉｌｅ，Ｌｅｕ，Ｏｒｎ，Ｌｙｓ，Ｇｌｕ，Ｍｅｔ，Ｈｉｓ，α－ＡＡＡ，Ｐｈｅ，３－ＭｅＨｉｓ，Ａｒｇ，Ｃｉｔ，Ｔｒｐ，Ｃｙｓのうち少なくとも１つの濃度値に基づいて、評価対象が早期腎症を有するかを評価する。これにより、血液中のアミノ酸の濃度のうち、早期腎症の現在の発症に関する評価に有用なアミノ酸の濃度を利用して当該評価を精度よく行うことができるという効果を奏する。

[0047] また、本発明によれば、アミノ酸濃度データに含まれるβ－ＡＩＢＡ，３

－ＭｅＨｉｓ，Ｃｉｔ，Ｔｒｐ，Ｃｙｓ，Ｇｌｕ，Ｈｙｐｒｏ，Ｓａｒ，Ｌｅｕ，Ｈｉｓ，Ａｒｇ，Ｌｙｓ，Ｓｅｒ，Ｐｈｅ，Ａｌａ，Ｏｒｎ，Ｐｒｏ，Ｉｌｅのうち少なくとも１つの濃度値に基づいて、評価対象が将来、心血管イベントを発症するかをさらに評価する。これにより、早期腎症の現在の発症に関する評価に有用なアミノ酸の濃度のうち、心血管イベントの将来の発症に関する評価にも有用なアミノ酸の濃度を利用して、当該心血管イベントの将来の発症に関する評価も精度よく行うことができるという効果を奏する。

[0048] また、本発明によれば、アミノ酸濃度データに含まれるＥｔＯＨＮＨ２，Ｓａｒ，β－ＡＩＢＡ，α－ＡＢＡ，Ｓｅｒ，Ｖａｌ，Ｔｈｒ，Ｔａｕ，Ｈｙｐｒｏ，Ｉｌｅ，Ａｓｎ，Ｏｒｎ，Ａｓｐ，Ｇｌｎ，α－ＡＡＡ，Ａｒｇ，Ｔｙｒ，Ｃｙｓ，Ｇｌｙ，Ａｌａ，Ｐｒｏ，Ｌｅｕ，Ｌｙｓ，Ｍｅｔ，Ｈｉｓ，Ｐｈｅのうち少なくとも１つの濃度値に基づいて、評価対象が将来、早期腎症を発症するかを評価する。これにより、血液中のアミノ酸の濃度のうち、早期腎症の将来の発症に関する評価に有用なアミノ酸の濃度を利用して、当該評価を精度よく行うことができるという効果を奏する。

[0049] また、本発明によれば、アミノ酸濃度データに含まれるＥｔＯＨＮＨ２，Ｇｌｙ，Ｓａｒ，Ａｌａ，β－ＡＩＢＡ，α－ＡＢＡ，Ｓｅｒ，Ｐｒｏ，Ｖａｌ，Ｔｈｒ，Ｔａｕ，Ｈｙｐｒｏ，Ｉｌｅ，Ｌｅｕ，Ａｓｎ，Ｏｒｎ，Ａｓｐ，Ｇｌｎ，Ｌｙｓ，Ｇｌｕ，Ｍｅｔ，Ｈｉｓ，α－ＡＡＡ，Ｐｈｅ，３－ＭｅＨｉｓ，Ａｒｇ，Ｃｉｔ，Ｔｙｒ，Ｔｒｐ，Ｃｙｓのうち少なくとも１つの濃度値、およびアミノ酸の濃度を変数として含みＥｔＯＨＮＨ２，Ｇｌｙ，Ｓａｒ，Ａｌａ，β－ＡＩＢＡ，α－ＡＢＡ，Ｓｅｒ，Ｐｒｏ，Ｖａｌ，Ｔｈｒ，Ｔａｕ，Ｈｙｐｒｏ，Ｉｌｅ，Ｌｅｕ，Ａｓｎ，Ｏｒｎ，Ａｓｐ，Ｇｌｎ，Ｌｙｓ，Ｇｌｕ，Ｍｅｔ，Ｈｉｓ，α－ＡＡＡ，Ｐｈｅ，３－ＭｅＨｉｓ，Ａｒｇ，Ｃｉｔ，Ｔｙｒ，Ｔｒｐ，Ｃｙｓのうち少なくとも１つを変数として含む予め設定された、早期腎症の状態を評価するための多変量判別式に基づいて、当該多変量判別式の値である判別値を算出する。これ

により、早期腎症の状態評価に有用な多変量判別式を利用して、評価対象の早期腎症の状態を反映した判別値を得ることができるという効果を奏する。

[0050] また、本発明によれば、多変量判別式は、ロジスティック回帰式、分数式、線形判別式、重回帰式、サポートベクターマシンで作成された式、マハラノビス距離法で作成された式、正準判別分析で作成された式、決定木で作成された式、Ｃｏｘ比例ハザードモデル式のいずれか１つである。これにより、早期腎症の状態評価に有用な多変量判別式を利用して、評価対象の早期腎症の状態を反映した判別値を得ることができるという効果を奏する。

[0051] また、本発明によれば、算出した判別値に基づいて、評価対象につき早期腎症の状態を評価する。これにより、早期腎症の状態評価に有用な多変量判別式で得られる判別値を利用して、早期腎症の状態を精度よく評価することができるという効果を奏する。

[0052] また、本発明によれば、アミノ酸濃度データに含まれるＳａｒ，Ａｌａ，β－ＡＩＢＡ，α－ＡＢＡ，Ｓｅｒ，Ｐｒｏ，Ｖａｌ，Ｈｙｐｒｏ，Ｉｌｅ，Ｌｅｕ，Ｏｒｎ，Ｌｙｓ，Ｇｌｕ，Ｍｅｔ，Ｈｉｓ，α－ＡＡＡ，Ｐｈｅ，３－ＭｅＨｉｓ，Ａｒｇ，Ｃｉｔ，Ｔｒｐ，Ｃｙｓのうち少なくとも１つの濃度値、およびＳａｒ，Ａｌａ，β－ＡＩＢＡ，α－ＡＢＡ，Ｓｅｒ，Ｐｒｏ，Ｖａｌ，Ｈｙｐｒｏ，Ｉｌｅ，Ｌｅｕ，Ｏｒｎ，Ｌｙｓ，Ｇｌｕ，Ｍｅｔ，Ｈｉｓ，α－ＡＡＡ，Ｐｈｅ，３－ＭｅＨｉｓ，Ａｒｇ，Ｃｉｔ，Ｔｒｐ，Ｃｙｓのうち少なくとも１つを変数として含む多変量判別式に基づいて、判別値を算出し、算出した判別値に基づいて、評価対象が早期腎症を有するかを評価する。これにより、早期腎症の現在の発症に関する評価に有用な多変量判別式で得られる判別値を利用して、当該評価を精度よく行うことができるという効果を奏する。また、本発明によれば、多変量判別式は、Ａｌａ，Ｏｒｎ，Ｇｌｕ，３－ＭｅＨｉｓ，Ｔｒｐ，Ｃｙｓを変数として含むロジスティック回帰式、Ａｌａ，Ｓｅｒ，Ｌｅｕ，Ｌｙｓ，Ｃｉｔ，Ｔｒｐを変数として含むロジスティック回帰式、Ａｌａ，Ｇｌｕ，３－ＭｅＨｉｓ，Ｃｉｔ，Ｔｒｐ，Ｃｙｓを変数として含む線形判別式、またはＡｌａ，Ｓ

ｅｒ，Ｉｌｅ，Ｌｙｓ，Ｐｈｅ，Ｔｒｐを変数として含む線形判別式である。これにより、早期腎症の現在の発症に関する評価に特に有用な多変量判別式で得られる判別値を利用して、当該評価をさらに精度よく行うことができるという効果を奏する。

[0053] また、本発明によれば、アミノ酸濃度データに含まれるβ－ＡＩＢＡ，３－ＭｅＨｉｓ，Ｃｉｔ，Ｔｒｐ，Ｃｙｓ，Ｇｌｕ，Ｈｙｐｒｏ，Ｓａｒ，Ｌｅｕ，Ｈｉｓ，Ａｒｇ，Ｌｙｓ，Ｓｅｒ，Ｐｈｅ，Ａｌａ，Ｏｒｎ，Ｐｒｏ，Ｉｌｅのうち少なくとも１つの濃度値、およびβ－ＡＩＢＡ，３－ＭｅＨｉｓ，Ｃｉｔ，Ｔｒｐ，Ｃｙｓ，Ｇｌｕ，Ｈｙｐｒｏ，Ｓａｒ，Ｌｅｕ，Ｈｉｓ，Ａｒｇ，Ｌｙｓ，Ｓｅｒ，Ｐｈｅ，Ａｌａ，Ｏｒｎ，Ｐｒｏ，Ｉｌｅのうち少なくとも１つを変数として含む多変量判別式に基づいて、判別値を算出し、算出した判別値に基づいて、評価対象が将来、心血管イベントを発症するかをさらに評価する。これにより、早期腎症の現在の発症に関する評価に有用な多変量判別式のうち、心血管イベントの将来の発症に関する評価にも有用な多変量判別式で得られる判別値を利用して、当該心血管イベントの将来の発症に関する評価もさらに精度よく行うことができるという効果を奏する。また、本発明によれば、多変量判別式は、Ａｌａ，Ｏｒｎ，Ｇｌｕ，３－ＭｅＨｉｓ，Ｔｒｐ，Ｃｙｓを変数として含むロジスティック回帰式、Ｈｙｐｒｏ，Ｇｌｕ，Ｈｉｓ，３－ＭｅＨｉｓ，Ａｒｇ，Ｔｒｐを変数として含むロジスティック回帰式、Ａｌａ，Ｓｅｒ，Ｌｅｕ，Ｌｙｓ，Ｃｉｔ，Ｔｒｐを変数として含むロジスティック回帰式、Ｓｅｒ，Ｏｒｎ，Ｈｉｓ，Ａｒｇ，Ｔｒｐを変数として含むロジスティック回帰式、Ａｌａ，Ｇｌｕ，３－ＭｅＨｉｓ，Ｃｉｔ，Ｔｒｐ，Ｃｙｓを変数として含む線形判別式、Ｓａｒ，Ｌｅｕ，Ｇｌｕ，３－ＭｅＨｉｓ，Ａｒｇ，Ｔｒｐを変数として含む線形判別式、Ａｌａ，Ｓｅｒ，Ｉｌｅ，Ｌｙｓ，Ｐｈｅ，Ｔｒｐを変数として含む線形判別式、Ｓｅｒ，Ｌｙｓ，Ｈｉｓ，Ｃｉｔ，Ｔｒｐを変数として含む線形判別式、Ｈｙｐｒｏ，Ｇｌｕ，３－ＭｅＨｉｓ，Ｔｒｐを変数として含むＣｏｘ比例ハザードモデル式、またはＳｅｒ，Ｌｙｓ，Ｈｉｓ，Ｃ

ｉｔ，Ｔｒｐを変数として含むＣｏｘ比例ハザードモデル式である。これにより、心血管イベントの将来の発症に関する評価にも特に有用な多変量判別式で得られる判別値を利用して、当該評価もさらに精度よく行うことができるという効果を奏する。

[0054] また、本発明によれば、アミノ酸濃度データに含まれるＥｔＯＨＮＨ２，Ｓａｒ，β－ＡＩＢＡ，α－ＡＢＡ，Ｓｅｒ，Ｖａｌ，Ｔｈｒ，Ｔａｕ，Ｈｙｐｒｏ，Ｉｌｅ，Ａｓｎ，Ｏｒｎ，Ａｓｐ，Ｇｌｎ，α－ＡＡＡ，Ａｒｇ，Ｔｙｒ，Ｃｙｓ，Ｇｌｙ，Ａｌａ，Ｐｒｏ，Ｌｅｕ，Ｌｙｓ，Ｍｅｔ，Ｈｉｓ，Ｐｈｅのうち少なくとも１つの濃度値、およびＥｔＯＨＮＨ２，Ｓａｒ，β－ＡＩＢＡ，α－ＡＢＡ，Ｓｅｒ，Ｖａｌ，Ｔｈｒ，Ｔａｕ，Ｈｙｐｒｏ，Ｉｌｅ，Ａｓｎ，Ｏｒｎ，Ａｓｐ，Ｇｌｎ，α－ＡＡＡ，Ａｒｇ，Ｔｙｒ，Ｃｙｓ，Ｇｌｙ，Ａｌａ，Ｐｒｏ，Ｌｅｕ，Ｌｙｓ，Ｍｅｔ，Ｈｉｓ，Ｐｈｅのうち少なくとも１つを変数として含む多変量判別式に基づいて、判別値を算出し、算出した判別値に基づいて、評価対象が将来、早期腎症を発症するかを評価する。これにより、早期腎症の将来の発症に関する評価に有用な多変量判別式で得られる判別値を利用して、当該評価を精度よく行うことができるという効果を奏する。また、本発明によれば、多変量判別式は、β－ＡＩＢＡ，Ｖａｌ，Ｔａｕ，Ｉｌｅ，α－ＡＡＡ，Ａｒｇを変数として含むロジスティック回帰式、Ｓｅｒ，Ｖａｌ，Ｍｅｔ，Ａｒｇ，Ｔｙｒを変数として含むロジスティック回帰式、Ｖａｌ，Ｔａｕ，Ｉｌｅ，α－ＡＡＡ，Ｐｈｅ，Ａｒｇを変数として含む線形判別式、またはＳｅｒ，Ｐｒｏ，Ｖａｌ，Ｉｌｅ，Ｌｅｕ，Ａｒｇを変数として含む線形判別式である。これにより、早期腎症の将来の発症に関する評価に特に有用な多変量判別式で得られる判別値を利用して、当該評価をさらに精度よく行うことができるという効果を奏する。

[0055] なお、本発明によれば、アミノ酸濃度データと早期腎症の状態を表す指標に関する早期腎症状態指標データとを含む記憶手段に記憶された早期腎症状態情報に基づいて、記憶手段で記憶する多変量判別式を作成してもよい。具

体的には、（ｉ）早期腎症状態情報から所定の式作成手法に基づいて候補多変量判別式を作成し、（ｉｉ）作成した候補多変量判別式を所定の検証手法に基づいて検証し、（ｉｉｉ）所定の変数選択手法に基づいて候補多変量判別式の変数を選択することで、候補多変量判別式を作成する際に用いる早期腎症状態情報に含まれるアミノ酸濃度データの組み合わせを選択し、（ｉｖ）（ｉ）、（ｉｉ）および（ｉｉｉ）を繰り返し実行して蓄積した検証結果に基づいて、複数の候補多変量判別式の中から多変量判別式として採用する候補多変量判別式を選出することで、多変量判別式を作成してもよい。これにより、早期腎症の状態評価に最適な多変量判別式を作成することができるという効果を奏する。

[0056] また、本発明によれば、１つ又は複数の物質から成る所望の物質群が投与された評価対象から採取した血液中のアミノ酸の濃度値に関するアミノ酸濃度データを取得し、取得したアミノ酸濃度データに基づいて、評価対象につき早期腎症の状態を評価し、評価結果に基づいて、所望の物質群が、早期腎症を予防させる又は早期腎症の状態を改善させるものであるか否かを判定するので、血液中のアミノ酸の濃度を利用して早期腎症の状態を精度よく評価することができる早期腎症の評価方法を用いて、早期腎症を予防させる又は早期腎症の状態を改善させる物質を精度よく探索することができるという効果を奏する。また、本発明によれば、早期腎症での典型的なアミノ酸濃度変動パターンの情報や早期腎症に対応する多変量判別式を利用することで、早期腎症の状態を一部反映した既存の動物モデルや、臨床で早期に有効な薬物を選択することが可能になる。

[0057] なお、本発明では、早期腎症の現在または将来の状態または心血管イベントの将来の状態を評価する際、アミノ酸の濃度以外に、他の生体情報（例えば、年齢、ＡＥＲ(尿中アルブミン排泄率)、ＢＮＰ(脳性ナトリウム利尿ペプチド)など）をさらに用いてもかまわない。また、本発明では、早期腎症の現在または将来の状態または心血管イベントの将来の状態を評価する際、多変量判別式における変数として、アミノ酸の濃度以外に、他の生体情報（例え

ば、年齢、ＡＥＲ(尿中アルブミン排泄率)、ＢＮＰ(脳性ナトリウム利尿ペプチド)など）をさらに用いてもかまわない。

図面の簡単な説明

[0058] [図1]図１は、第１実施形態の基本原理を示す原理構成図である。

[図2]図２は、第１実施形態にかかる早期腎症の評価方法の一例を示すフローチャートである。

[図3]図３は、第２実施形態の基本原理を示す原理構成図である。

[図4]図４は、本システムの全体構成の一例を示す図である。

[図5]図５は、本システムの全体構成の他の一例を示す図である。

[図6]図６は、本システムの早期腎症評価装置１００の構成の一例を示すブロック図である。

[図7]図７は、利用者情報ファイル１０６ａに格納される情報の一例を示す図である。

[図8]図８は、アミノ酸濃度データファイル１０６ｂに格納される情報の一例を示す図である。

[図9]図９は、早期腎症状態情報ファイル１０６ｃに格納される情報の一例を示す図である。

[図10]図１０は、指定早期腎症状態情報ファイル１０６ｄに格納される情報の一例を示す図である。

[図11]図１１は、候補多変量判別式ファイル１０６ｅ１に格納される情報の一例を示す図である。

[図12]図１２は、検証結果ファイル１０６ｅ２に格納される情報の一例を示す図である。

[図13]図１３は、選択早期腎症状態情報ファイル１０６ｅ３に格納される情報の一例を示す図である。

[図14]図１４は、多変量判別式ファイル１０６ｅ４に格納される情報の一例を示す図である。

[図15]図１５は、判別値ファイル１０６ｆに格納される情報の一例を示す図

である。

[図16]図１６は、評価結果ファイル１０６ｇに格納される情報の一例を示す図である。

[図17]図１７は、多変量判別式作成部１０２ｈの構成を示すブロック図である。

[図18]図１８は、判別値基準評価部１０２ｊの構成を示すブロック図である。

[図19]図１９は、本システムのクライアント装置２００の構成の一例を示すブロック図である。

[図20]図２０は、本システムのデータベース装置４００の構成の一例を示すブロック図である。

[図21]図２１は、本システムで行う早期腎症評価サービス処理の一例を示すフローチャートである。

[図22]図２２は、本システムの早期腎症評価装置１００で行う多変量判別式作成処理の一例を示すフローチャートである。

[図23]図２３は、変数の組み合わせを３１種のアミノ酸から探索した結果得られた、正常群と早期腎症群の判別について良好な判別能を持つロジスティック回帰式の一覧を示す図である。

[図24]図２４は、変数の組み合わせを３１種のアミノ酸から探索した結果得られた、正常群と早期腎症群の判別について良好な判別能を持つロジスティック回帰式の一覧を示す図である。

[図25]図２５は、変数の組み合わせを３１種のアミノ酸から探索した結果得られた、正常群と早期腎症群の判別について良好な判別能を持つロジスティック回帰式の一覧を示す図である。

[図26]図２６は、変数の組み合わせを３１種のアミノ酸から探索した結果得られた、正常群と早期腎症群の判別について良好な判別能を持つロジスティック回帰式の一覧を示す図である。

[図27]図２７は、変数の組み合わせを１９種のアミノ酸から探索した結果得

られた、正常群と早期腎症群の判別について良好な判別能を持つロジスティック回帰式の一覧を示す図である。

[図28]図２８は、変数の組み合わせを１９種のアミノ酸から探索した結果得られた、正常群と早期腎症群の判別について良好な判別能を持つロジスティック回帰式の一覧を示す図である。

[図29]図２９は、変数の組み合わせを１９種のアミノ酸から探索した結果得られた、正常群と早期腎症群の判別について良好な判別能を持つロジスティック回帰式の一覧を示す図である。

[図30]図３０は、変数の組み合わせを１９種のアミノ酸から探索した結果得られた、正常群と早期腎症群の判別について良好な判別能を持つロジスティック回帰式の一覧を示す図である。

[図31]図３１は、変数の組み合わせを３１種のアミノ酸から探索した結果得られた、正常群と早期腎症群の判別について良好な判別能を持つ線形判別式の一覧を示す図である。

[図32]図３２は、変数の組み合わせを３１種のアミノ酸から探索した結果得られた、正常群と早期腎症群の判別について良好な判別能を持つ線形判別式の一覧を示す図である。

[図33]図３３は、変数の組み合わせを３１種のアミノ酸から探索した結果得られた、正常群と早期腎症群の判別について良好な判別能を持つ線形判別式の一覧を示す図である。

[図34]図３４は、変数の組み合わせを３１種のアミノ酸から探索した結果得られた、正常群と早期腎症群の判別について良好な判別能を持つ線形判別式の一覧を示す図である。

[図35]図３５は、変数の組み合わせを１９種のアミノ酸から探索した結果得られた、正常群と早期腎症群の判別について良好な判別能を持つ線形判別式の一覧を示す図である。

[図36]図３６は、変数の組み合わせを１９種のアミノ酸から探索した結果得られた、正常群と早期腎症群の判別について良好な判別能を持つ線形判別式

の一覧を示す図である。

[図37]図３７は、変数の組み合わせを１９種のアミノ酸から探索した結果得られた、正常群と早期腎症群の判別について良好な判別能を持つ線形判別式の一覧を示す図である。

[図38]図３８は、変数の組み合わせを１９種のアミノ酸から探索した結果得られた、正常群と早期腎症群の判別について良好な判別能を持つ線形判別式の一覧を示す図である。

[図39]図３９は、変数の組み合わせを３１種のアミノ酸から探索した結果得られた、将来、正常群または早期腎症群であるかの判別について良好な判別能を持つロジスティック回帰式の一覧を示す図である。

[図40]図４０は、変数の組み合わせを３１種のアミノ酸から探索した結果得られた、将来、正常群または早期腎症群であるかの判別について良好な判別能を持つロジスティック回帰式の一覧を示す図である。

[図41]図４１は、変数の組み合わせを３１種のアミノ酸から探索した結果得られた、将来、正常群または早期腎症群であるかの判別について良好な判別能を持つロジスティック回帰式の一覧を示す図である。

[図42]図４２は、変数の組み合わせを３１種のアミノ酸から探索した結果得られた、将来、正常群または早期腎症群であるかの判別について良好な判別能を持つロジスティック回帰式の一覧を示す図である。

[図43]図４３は、変数の組み合わせを１９種のアミノ酸から探索した結果得られた、将来、正常群または早期腎症群であるかの判別について良好な判別能を持つロジスティック回帰式の一覧を示す図である。

[図44]図４４は、変数の組み合わせを１９種のアミノ酸から探索した結果得られた、将来、正常群または早期腎症群であるかの判別について良好な判別能を持つロジスティック回帰式の一覧を示す図である。

[図45]図４５は、変数の組み合わせを１９種のアミノ酸から探索した結果得られた、将来、正常群または早期腎症群であるかの判別について良好な判別能を持つロジスティック回帰式の一覧を示す図である。

[図46]図４６は、変数の組み合わせを１９種のアミノ酸から探索した結果得られた、将来、正常群または早期腎症群であるかの判別について良好な判別能を持つロジスティック回帰式の一覧を示す図である。

[図47]図４７は、変数の組み合わせを３１種のアミノ酸から探索した結果得られた、将来、正常群または早期腎症群であるかの判別について良好な判別能を持つ線形判別式の一覧を示す図である。

[図48]図４８は、変数の組み合わせを３１種のアミノ酸から探索した結果得られた、将来、正常群または早期腎症群であるかの判別について良好な判別能を持つ線形判別式の一覧を示す図である。

[図49]図４９は、変数の組み合わせを３１種のアミノ酸から探索した結果得られた、将来、正常群または早期腎症群であるかの判別について良好な判別能を持つ線形判別式の一覧を示す図である。

[図50]図５０は、変数の組み合わせを３１種のアミノ酸から探索した結果得られた、将来、正常群または早期腎症群であるかの判別について良好な判別能を持つ線形判別式の一覧を示す図である。

[図51]図５１は、変数の組み合わせを１９種のアミノ酸から探索した結果得られた、将来、正常群または早期腎症群であるかの判別について良好な判別能を持つ線形判別式の一覧を示す図である。

[図52]図５２は、変数の組み合わせを１９種のアミノ酸から探索した結果得られた、将来、正常群または早期腎症群であるかの判別について良好な判別能を持つ線形判別式の一覧を示す図である。

[図53]図５３は、変数の組み合わせを１９種のアミノ酸から探索した結果得られた、将来、正常群または早期腎症群であるかの判別について良好な判別能を持つ線形判別式の一覧を示す図である。

[図54]図５４は、変数の組み合わせを１９種のアミノ酸から探索した結果得られた、将来、正常群または早期腎症群であるかの判別について良好な判別能を持つ線形判別式の一覧を示す図である。

[図55]図５５は、変数の組み合わせを３１種のアミノ酸から探索した結果得

られた、将来、心血管イベント発症群または心血管イベント非発症群であるかの判別について良好な判別能を持つロジスティック回帰式の一覧を示す図である。

[図56]図５６は、変数の組み合わせを３１種のアミノ酸から探索した結果得られた、将来、心血管イベント発症群または心血管イベント非発症群であるかの判別について良好な判別能を持つロジスティック回帰式の一覧を示す図である。

[図57]図５７は、変数の組み合わせを３１種のアミノ酸から探索した結果得られた、将来、心血管イベント発症群または心血管イベント非発症群であるかの判別について良好な判別能を持つロジスティック回帰式の一覧を示す図である。

[図58]図５８は、変数の組み合わせを３１種のアミノ酸から探索した結果得られた、将来、心血管イベント発症群または心血管イベント非発症群であるかの判別について良好な判別能を持つロジスティック回帰式の一覧を示す図である。

[図59]図５９は、変数の組み合わせを１９種のアミノ酸から探索した結果得られた、将来、心血管イベント発症群または心血管イベント非発症群であるかの判別について良好な判別能を持つロジスティック回帰式の一覧を示す図である。

[図60]図６０は、変数の組み合わせを１９種のアミノ酸から探索した結果得られた、将来、心血管イベント発症群または心血管イベント非発症群であるかの判別について良好な判別能を持つロジスティック回帰式の一覧を示す図である。

[図61]図６１は、変数の組み合わせを１９種のアミノ酸から探索した結果得られた、将来、心血管イベント発症群または心血管イベント非発症群であるかの判別について良好な判別能を持つロジスティック回帰式の一覧を示す図である。

[図62]図６２は、変数の組み合わせを１９種のアミノ酸から探索した結果得

られた、将来、心血管イベント発症群または心血管イベント非発症群であるかの判別について良好な判別能を持つロジスティック回帰式の一覧を示す図である。

[図63]図６３は、変数の組み合わせを３１種のアミノ酸から探索した結果得られた、将来、心血管イベント発症群または心血管イベント非発症群であるかの判別について良好な判別能を持つ線形判別式の一覧を示す図である。

[図64]図６４は、変数の組み合わせを３１種のアミノ酸から探索した結果得られた、将来、心血管イベント発症群または心血管イベント非発症群であるかの判別について良好な判別能を持つ線形判別式の一覧を示す図である。

[図65]図６５は、変数の組み合わせを３１種のアミノ酸から探索した結果得られた、将来、心血管イベント発症群または心血管イベント非発症群であるかの判別について良好な判別能を持つ線形判別式の一覧を示す図である。

[図66]図６６は、変数の組み合わせを３１種のアミノ酸から探索した結果得られた、将来、心血管イベント発症群または心血管イベント非発症群であるかの判別について良好な判別能を持つ線形判別式の一覧を示す図である。

[図67]図６７は、変数の組み合わせを１９種のアミノ酸から探索した結果得られた、将来、心血管イベント発症群または心血管イベント非発症群であるかの判別について良好な判別能を持つ線形判別式の一覧を示す図である。

[図68]図６８は、変数の組み合わせを１９種のアミノ酸から探索した結果得られた、将来、心血管イベント発症群または心血管イベント非発症群であるかの判別について良好な判別能を持つ線形判別式の一覧を示す図である。

[図69]図６９は、変数の組み合わせを１９種のアミノ酸から探索した結果得られた、将来、心血管イベント発症群または心血管イベント非発症群であるかの判別について良好な判別能を持つ線形判別式の一覧を示す図である。

[図70]図７０は、変数の組み合わせを１９種のアミノ酸から探索した結果得られた、将来、心血管イベント発症群または心血管イベント非発症群であるかの判別について良好な判別能を持つ線形判別式の一覧を示す図である。

[図71]図７１は、変数の組み合わせを３１種のアミノ酸から探索した結果得

られた、将来、心血管イベント発症群または心血管イベント非発症群であるかの判別について良好な判別能を持つロジスティック回帰式の一覧を示す図である。

[図72]図７２は、変数の組み合わせを３１種のアミノ酸から探索した結果得られた、将来、心血管イベント発症群または心血管イベント非発症群であるかの判別について良好な判別能を持つロジスティック回帰式の一覧を示す図である。

[図73]図７３は、変数の組み合わせを３１種のアミノ酸から探索した結果得られた、将来、心血管イベント発症群または心血管イベント非発症群であるかの判別について良好な判別能を持つロジスティック回帰式の一覧を示す図である。

[図74]図７４は、変数の組み合わせを３１種のアミノ酸から探索した結果得られた、将来、心血管イベント発症群または心血管イベント非発症群であるかの判別について良好な判別能を持つロジスティック回帰式の一覧を示す図である。

[図75]図７５は、変数の組み合わせを１４種のアミノ酸から探索した結果得られた、将来、心血管イベント発症群または心血管イベント非発症群であるかの判別について良好な判別能を持つロジスティック回帰式の一覧を示す図である。

[図76]図７６は、変数の組み合わせを１４種のアミノ酸から探索した結果得られた、将来、心血管イベント発症群または心血管イベント非発症群であるかの判別について良好な判別能を持つロジスティック回帰式の一覧を示す図である。

[図77]図７７は、変数の組み合わせを１４種のアミノ酸から探索した結果得られた、将来、心血管イベント発症群または心血管イベント非発症群であるかの判別について良好な判別能を持つロジスティック回帰式の一覧を示す図である。

[図78]図７８は、変数の組み合わせを１４種のアミノ酸から探索した結果得

られた、将来、心血管イベント発症群または心血管イベント非発症群であるかの判別について良好な判別能を持つロジスティック回帰式の一覧を示す図である。

[図79]図７９は、変数の組み合わせを３１種のアミノ酸から探索した結果得られた、将来、心血管イベント発症群または心血管イベント非発症群であるかの判別について良好な判別能を持つ線形判別式の一覧を示す図である。

[図80]図８０は、変数の組み合わせを３１種のアミノ酸から探索した結果得られた、将来、心血管イベント発症群または心血管イベント非発症群であるかの判別について良好な判別能を持つ線形判別式の一覧を示す図である。

[図81]図８１は、変数の組み合わせを３１種のアミノ酸から探索した結果得られた、将来、心血管イベント発症群または心血管イベント非発症群であるかの判別について良好な判別能を持つ線形判別式の一覧を示す図である。

[図82]図８２は、変数の組み合わせを３１種のアミノ酸から探索した結果得られた、将来、心血管イベント発症群または心血管イベント非発症群であるかの判別について良好な判別能を持つ線形判別式の一覧を示す図である。

[図83]図８３は、変数の組み合わせを１４種のアミノ酸から探索した結果得られた、将来、心血管イベント発症群または心血管イベント非発症群であるかの判別について良好な判別能を持つ線形判別式の一覧を示す図である。

[図84]図８４は、変数の組み合わせを１４種のアミノ酸から探索した結果得られた、将来、心血管イベント発症群または心血管イベント非発症群であるかの判別について良好な判別能を持つ線形判別式の一覧を示す図である。

[図85]図８５は、変数の組み合わせを１４種のアミノ酸から探索した結果得られた、将来、心血管イベント発症群または心血管イベント非発症群であるかの判別について良好な判別能を持つ線形判別式の一覧を示す図である。

[図86]図８６は、変数の組み合わせを１４種のアミノ酸から探索した結果得られた、将来、心血管イベント発症群または心血管イベント非発症群であるかの判別について良好な判別能を持つ線形判別式の一覧を示す図である。

[図87]図８７は、変数の組み合わせを３１種のアミノ酸から探索した結果得

られた、将来、心血管イベント発症群または心血管イベント非発症群であるかの判別について良好な判別能を持つＣｏｘ比例ハザードモデル式の一覧を示す図である。

[図88]図８８は、変数の組み合わせを３１種のアミノ酸から探索した結果得られた、将来、心血管イベント発症群または心血管イベント非発症群であるかの判別について良好な判別能を持つＣｏｘ比例ハザードモデル式の一覧を示す図である。

[図89]図８９は、変数の組み合わせを３１種のアミノ酸から探索した結果得られた、将来、心血管イベント発症群または心血管イベント非発症群であるかの判別について良好な判別能を持つＣｏｘ比例ハザードモデル式の一覧を示す図である。

[図90]図９０は、変数の組み合わせを３１種のアミノ酸から探索した結果得られた、将来、心血管イベント発症群または心血管イベント非発症群であるかの判別について良好な判別能を持つＣｏｘ比例ハザードモデル式の一覧を示す図である。

[図91]図９１は、変数の組み合わせを１４種のアミノ酸から探索した結果得られた、将来、心血管イベント発症群または心血管イベント非発症群であるかの判別について良好な判別能を持つＣｏｘ比例ハザードモデル式の一覧を示す図である。

[図92]図９２は、変数の組み合わせを１４種のアミノ酸から探索した結果得られた、将来、心血管イベント発症群または心血管イベント非発症群であるかの判別について良好な判別能を持つＣｏｘ比例ハザードモデル式の一覧を示す図である。

[図93]図９３は、変数の組み合わせを１４種のアミノ酸から探索した結果得られた、将来、心血管イベント発症群または心血管イベント非発症群であるかの判別について良好な判別能を持つＣｏｘ比例ハザードモデル式の一覧を示す図である。

[図94]図９４は、変数の組み合わせを１４種のアミノ酸から探索した結果得

られた、将来、心血管イベント発症群または心血管イベント非発症群であるかの判別について良好な判別能を持つＣｏｘ比例ハザードモデル式の一覧を示す図である。

発明を実施するための形態

[0059] 以下に、早期腎症の評価方法の実施形態（第１実施形態）、ならびに早期腎症評価装置、早期腎症評価方法、早期腎症評価プログラム、記録媒体、早期腎症評価システムおよび情報通信端末装置の実施形態（第２実施形態）を、図面に基づいて詳細に説明する。なお、本発明はこれらの実施形態により限定されるものではない。

[0060] ［第１実施形態］

［１－１．第１実施形態の概要］

ここでは、第１実施形態の概要について図１を参照して説明する。図１は第１実施形態の基本原理を示す原理構成図である。

[0061] まず、評価対象（例えば動物やヒト（例えば糖尿病患者など）などの個体）から採取した血液（例えば血漿、血清などを含む）中のアミノ酸の濃度値に関するアミノ酸濃度データを取得する（ステップＳ１１）。なお、ステップＳ１１では、例えば、アミノ酸濃度測定を行う企業等が測定したアミノ酸濃度データを取得してもよく、また、評価対象から採取した血液から、例えば以下の（Ａ）または（Ｂ）などの測定方法でアミノ酸濃度データを測定することでアミノ酸濃度データを取得してもよい。ここで、アミノ酸濃度の単位は、例えばモル濃度や重量濃度、これらの濃度に任意の定数を加減乗除することで得られるものでもよい。

（Ａ）採取した血液サンプルを遠心することにより血液から血清を分離した。全ての血清サンプルは、アミノ酸濃度の測定時まで－８０℃で凍結保存した。アミノ酸濃度測定時には、アセトニトリルを添加し除蛋白処理を行った後、標識試薬（３－アミノピリジル－Ｎ－ヒドロキシスクシンイミジルカルバメート）を用いてプレカラム誘導体化を行い、そして、液体クロマトグラフ質量分析計（ＬＣ／ＭＳ／ＭＳ）によりアミノ酸濃度を分析した（国際公

開第２００３／０６９３２８号、国際公開第２００５／１１６６２９号を参照）。

（Ｂ）採取した血液サンプルを遠心することにより血液から血清を分離した。全ての血清サンプルは、アミノ酸濃度の測定時まで－８０℃で凍結保存した。アミノ酸濃度測定時には、スルホサリチル酸を添加し除蛋白処理を行った後、ニンヒドリン試薬を用いたポストカラム誘導体化法を原理としたアミノ酸分析計によりアミノ酸濃度を分析した。

[0062] つぎに、ステップＳ１１で取得したアミノ酸濃度データに基づいて、評価対象につき早期腎症の状態を評価する（ステップＳ１２）。

[0063] 以上、第１実施形態によれば、評価対象から採取した血液中のアミノ酸の濃度値に関するアミノ酸濃度データを取得し、取得した評価対象のアミノ酸濃度データに基づいて、評価対象につき早期腎症の状態を評価する（要するに、評価対象につき早期腎症の状態を評価するための情報を提供する）。これにより、血液中のアミノ酸の濃度を利用して早期腎症の状態を精度よく評価することができる（要するに、早期腎症の状態を評価するための精度のよい情報を提供することができる）。

[0064] ここで、ステップＳ１２を実行する前に、ステップＳ１１で取得したアミノ酸濃度データから欠損値や外れ値などのデータを除去してもよい。これにより、早期腎症の状態をさらに精度よく評価することができる。

[0065] また、ステップＳ１２では、ステップＳ１１で取得したアミノ酸濃度データに含まれるＥｔＯＨＮＨ２，Ｇｌｙ，Ｓａｒ，Ａｌａ，β－ＡＩＢＡ，α－ＡＢＡ，Ｓｅｒ，Ｐｒｏ，Ｖａｌ，Ｔｈｒ，Ｔａｕ，Ｈｙｐｒｏ，Ｉｌｅ，Ｌｅｕ，Ａｓｎ，Ｏｒｎ，Ａｓｐ，Ｇｌｎ，Ｌｙｓ，Ｇｌｕ，Ｍｅｔ，Ｈｉｓ，α－ＡＡＡ，Ｐｈｅ，３－ＭｅＨｉｓ，Ａｒｇ，Ｃｉｔ，Ｔｙｒ，Ｔｒｐ，Ｃｙｓのうち少なくとも１つの濃度値に基づいて、評価対象につき早期腎症の状態を評価してもよい。これにより、血液中のアミノ酸の濃度のうち早期腎症の状態評価に有用なアミノ酸の濃度を利用して早期腎症の状態を精度よく評価することができる。

[0066] 具体的には、アミノ酸濃度データに含まれるＳａｒ，Ａｌａ，β－ＡＩＢＡ，α－ＡＢＡ，Ｓｅｒ，Ｐｒｏ，Ｖａｌ，Ｈｙｐｒｏ，Ｉｌｅ，Ｌｅｕ，Ｏｒｎ，Ｌｙｓ，Ｇｌｕ，Ｍｅｔ，Ｈｉｓ，α－ＡＡＡ，Ｐｈｅ，３－ＭｅＨｉｓ，Ａｒｇ，Ｃｉｔ，Ｔｒｐ，Ｃｙｓのうち少なくとも１つの濃度値に基づいて、評価対象が早期腎症を有するかを評価してもよい。例えば、評価対象が早期腎症または非早期腎症であるか否かを判別したり、また、早期腎症に罹患している可能性の程度を考慮して定義された複数の区分（ランク）のうちのどれか１つに評価対象を分類したりしてもよい。これにより、血液中のアミノ酸の濃度のうち、早期腎症の現在の発症に関する評価に有用なアミノ酸の濃度を利用して当該評価を精度よく行うことができる。

[0067] なお、早期腎症の現在の発症に関する評価においては、アミノ酸濃度データに含まれるβ－ＡＩＢＡ，３－ＭｅＨｉｓ，Ｃｉｔ，Ｔｒｐ，Ｃｙｓ，Ｇｌｕ，Ｈｙｐｒｏ，Ｓａｒ，Ｌｅｕ，Ｈｉｓ，Ａｒｇ，Ｌｙｓ，Ｓｅｒ，Ｐｈｅ，Ａｌａ，Ｏｒｎ，Ｐｒｏ，Ｉｌｅのうち少なくとも１つの濃度値に基づいて、評価対象が将来、心血管イベントを発症するかをさらに評価してもよい。例えば、評価対象が将来、心血管イベントを発症するか否かをさらに判別したり、また、将来、心血管イベントを発症する可能性の程度を考慮して定義された複数の区分（ランク）のうちのどれか１つに評価対象をさらに分類したりしてもよい。これにより、早期腎症の現在の発症に関する評価に有用なアミノ酸の濃度のうち、心血管イベントの将来の発症に関する評価にも有用なアミノ酸の濃度を利用して、当該心血管イベントの将来の発症に関する評価も精度よく行うことができる。

[0068] また、具体的には、アミノ酸濃度データに含まれるＥｔＯＨＮＨ２，Ｓａｒ，β－ＡＩＢＡ，α－ＡＢＡ，Ｓｅｒ，Ｖａｌ，Ｔｈｒ，Ｔａｕ，Ｈｙｐｒｏ，Ｉｌｅ，Ａｓｎ，Ｏｒｎ，Ａｓｐ，Ｇｌｎ，α－ＡＡＡ，Ａｒｇ，Ｔｙｒ，Ｃｙｓ，Ｇｌｙ，Ａｌａ，Ｐｒｏ，Ｌｅｕ，Ｌｙｓ，Ｍｅｔ，Ｈｉｓ，Ｐｈｅのうち少なくとも１つの濃度値に基づいて、評価対象が将来、早期腎症を発症するかを評価してもよい。例えば、評価対象が将来、早期腎症を

発症するか否かを判別したり、また、将来、早期腎症を発症する可能性の程度を考慮して定義された複数の区分（ランク）のうちのどれか１つに評価対象を分類したりしてもよい。これにより、血液中のアミノ酸の濃度のうち、早期腎症の将来の発症に関する評価に有用なアミノ酸の濃度を利用して、当該評価を精度よく行うことができる。

[0069] また、濃度値の取り得る範囲が所定範囲（例えば０．０から１．０までの範囲、０．０から１０．０までの範囲、０．０から１００．０までの範囲、又はー１０．０から１０．０までの範囲、など）に収まるように、例えば、濃度値に対して任意の値を加減乗除したり、また、濃度値を所定の変換手法（例えば、指数変換、対数変換、角変換、平方根変換、プロビット変換、又は逆数変換など）で変換したり、また、濃度値に対してこれらの計算を組み合わせて行ったりすることで、濃度値を変換してもよい。例えば、濃度値を指数としネイピア数を底とする指数関数の値（具体的には、早期腎症に罹患している確率ｐ（将来、心血管イベントを発症する確率、または、将来、早期腎症を発症する確率でもよい。）を定義したときの自然対数ｌｎ（ｐ／（１－ｐ））が濃度値と等しいとした場合におけるｐ／（１－ｐ）の値）をさらに算出してもよく、また、算出した指数関数の値を１と当該値との和で割った値（具体的には、確率ｐの値）をさらに算出してもよい。

また、特定の条件のときの変換後の値が特定の値となるように、濃度値を変換してもよい。例えば、特異度が８０％のときの変換後の値が５．０となり且つ特異度が９５％のときの変換後の値が８．０となるように濃度値を変換してもよい。

[0070] また、ステップＳ１２では、ステップＳ１１で取得したアミノ酸濃度データ、およびアミノ酸の濃度を変数として含む予め設定された多変量判別式に基づいて、当該多変量判別式の値である判別値を算出してもよく、さらに、算出した判別値に基づいて、評価対象につき早期腎症の状態を評価してもよい。これにより、アミノ酸の濃度を変数として含む多変量判別式を利用して、評価対象の早期腎症の状態を反映した判別値を得ることができたり、さら

には、アミノ酸の濃度を変数として含む多変量判別式で得られる判別値を利用して、早期腎症の状態を精度よく評価することができたりする。

[0071] なお、多変量判別式は、ロジスティック回帰式、分数式、線形判別式、重回帰式、サポートベクターマシンで作成された式、マハラノビス距離法で作成された式、正準判別分析で作成された式、決定木で作成された式、Ｃｏｘ比例ハザードモデル式のいずれか１つでもよい。これにより、早期腎症の状態評価に有用な多変量判別式で得られる判別値を利用して、早期腎症の状態を精度よく評価することができる。

[0072] また、ステップＳ１２では、ステップＳ１１で取得したアミノ酸濃度データに含まれるＥｔＯＨＮＨ２，Ｇｌｙ，Ｓａｒ，Ａｌａ，β－ＡＩＢＡ，α－ＡＢＡ，Ｓｅｒ，Ｐｒｏ，Ｖａｌ，Ｔｈｒ，Ｔａｕ，Ｈｙｐｒｏ，Ｉｌｅ，Ｌｅｕ，Ａｓｎ，Ｏｒｎ，Ａｓｐ，ＧＩｎ，Ｌｙｓ，Ｇｌｕ，Ｍｅｔ，Ｈｉｓ，α－ＡＡＡ，Ｐｈｅ，３－ＭｅＨｉｓ，Ａｒｇ，Ｃｉｔ，Ｔｙｒ，Ｔｒｐ，Ｃｙｓのうち少なくとも１つの濃度値、およびＥｔＯＨＮＨ２，Ｇｌｙ，Ｓａｒ，Ａｌａ，β－ＡＩＢＡ，α－ＡＢＡ，Ｓｅｒ，Ｐｒｏ，Ｖａｌ，Ｔｈｒ，Ｔａｕ，Ｈｙｐｒｏ，Ｉｌｅ，Ｌｅｕ，Ａｓｎ，Ｏｒｎ，Ａｓｐ，ＧＩｎ，Ｌｙｓ，Ｇｌｕ，Ｍｅｔ，Ｈｉｓ，α－ＡＡＡ，Ｐｈｅ，３－ＭｅＨｉｓ，Ａｒｇ，Ｃｉｔ，Ｔｙｒ，Ｔｒｐ，Ｃｙｓのうち少なくとも１つを変数として含む多変量判別式に基づいて、判別値を算出し、算出した判別値に基づいて、評価対象につき早期腎症の状態を評価してもよい。これにより、早期腎症の状態評価に有用な多変量判別式で得られる判別値を利用して、早期腎症の状態を精度よく評価することができる。

[0073] 具体的には、アミノ酸濃度データに含まれるＳａｒ，Ａｌａ，β－ＡＩＢＡ，α－ＡＢＡ，Ｓｅｒ，Ｐｒｏ，Ｖａｌ，Ｈｙｐｒｏ，Ｉｌｅ，Ｌｅｕ，Ｏｒｎ，Ｌｙｓ，Ｇｌｕ，Ｍｅｔ，Ｈｉｓ，α－ＡＡＡ，Ｐｈｅ，３－ＭｅＨｉｓ，Ａｒｇ，Ｃｉｔ，Ｔｒｐ，Ｃｙｓのうち少なくとも１つの濃度値、およびＳａｒ，Ａｌａ，β－ＡＩＢＡ，α－ＡＢＡ，Ｓｅｒ，Ｐｒｏ，Ｖａｌ，Ｈｙｐｒｏ，Ｉｌｅ，Ｌｅｕ，Ｏｒｎ，Ｌｙｓ，Ｇｌｕ，Ｍｅｔ，Ｈｉ

ｓ，α－ＡＡＡ，Ｐｈｅ，３－ＭｅＨｉｓ，Ａｒｇ，Ｃｉｔ，Ｔｒｐ，Ｃｙｓのうち少なくとも１つを変数として含む多変量判別式に基づいて、判別値を算出し、算出した判別値に基づいて、評価対象が早期腎症を有するかを評価してもよい。例えば、評価対象が早期腎症または非早期腎症であるか否かを判別したり、また、早期腎症に罹患している可能性の程度を考慮して定義された複数の区分（ランク）のうちのどれか１つに評価対象を分類したりしてもよい。これにより、早期腎症の現在の発症に関する評価に有用な多変量判別式で得られる判別値を利用して、当該評価を精度よく行うことができる。

[0074] なお、早期腎症の現在の発症に関する評価で用いられる多変量判別式は、Ａｌａ，Ｏｒｎ，Ｇｌｕ，３－ＭｅＨｉｓ，Ｔｒｐ，Ｃｙｓを変数として含むロジスティック回帰式、Ａｌａ，Ｓｅｒ，Ｌｅｕ，Ｌｙｓ，Ｃｉｔ，Ｔｒｐを変数として含むロジスティック回帰式、Ａｌａ，Ｇｌｕ，３－ＭｅＨｉｓ，Ｃｉｔ，Ｔｒｐ，Ｃｙｓを変数として含む線形判別式、またはＡｌａ，Ｓｅｒ，Ｉｌｅ，Ｌｙｓ，Ｐｈｅ，Ｔｒｐを変数として含む線形判別式でもよい。これにより、早期腎症の現在の発症に関する評価に特に有用な多変量判別式で得られる判別値を利用して、当該評価をさらに精度よく行うことができる。

[0075] ここで、早期腎症の現在の発症に関する評価においては、アミノ酸濃度データに含まれるβ－ＡＩＢＡ，３－ＭｅＨｉｓ，Ｃｉｔ，Ｔｒｐ，Ｃｙｓ，Ｇｌｕ，Ｈｙｐｒｏ，Ｓａｒ，Ｌｅｕ，Ｈｉｓ，Ａｒｇ，Ｌｙｓ，Ｓｅｒ，Ｐｈｅ，Ａｌａ，Ｏｒｎ，Ｐｒｏ，Ｉｌｅのうち少なくとも１つの濃度値、およびβ－ＡＩＢＡ，３－ＭｅＨｉｓ，Ｃｉｔ，Ｔｒｐ，Ｃｙｓ，Ｇｌｕ，Ｈｙｐｒｏ，Ｓａｒ，Ｌｅｕ，Ｈｉｓ，Ａｒｇ，Ｌｙｓ，Ｓｅｒ，Ｐｈｅ，Ａｌａ，Ｏｒｎ，Ｐｒｏ，Ｉｌｅのうち少なくとも１つを変数として含む多変量判別式に基づいて、判別値を算出し、算出した判別値に基づいて、評価対象が将来、心血管イベントを発症するかをさらに評価してもよい。例えば、評価対象が将来、心血管イベントを発症するか否かをさらに判別したり、

また、将来、心血管イベントを発症する可能性の程度を考慮して定義された複数の区分（ランク）のうちのどれか１つに評価対象をさらに分類したりしてもよい。これにより、早期腎症の現在の発症に関する評価に有用な多変量判別式のうち、心血管イベントの将来の発症に関する評価にも有用な多変量判別式で得られる判別値を利用して、当該心血管イベントの将来の発症に関する評価も精度よく行うことができる。

[0076] なお、心血管イベントの将来の発症に関する評価で用いられる多変量判別式は、Ａｌａ，Ｏｒｎ，Ｇｌｕ，３－ＭｅＨｉｓ，Ｔｒｐ，Ｃｙｓを変数として含むロジスティック回帰式、Ｈｙｐｒｏ，Ｇｌｕ，Ｈｉｓ，３－ＭｅＨｉｓ，Ａｒｇ，Ｔｒｐを変数として含むロジスティック回帰式、Ａｌａ，Ｓｅｒ，Ｌｅｕ，Ｌｙｓ，Ｃｉｔ，Ｔｒｐを変数として含むロジスティック回帰式、Ｓｅｒ，Ｏｒｎ，Ｈｉｓ，Ａｒｇ，Ｔｒｐを変数として含むロジスティック回帰式、Ａｌａ，Ｇｌｕ，３－ＭｅＨｉｓ，Ｃｉｔ，Ｔｒｐ，Ｃｙｓを変数として含む線形判別式、Ｓａｒ，Ｌｅｕ，Ｇｌｕ，３－ＭｅＨｉｓ，Ａｒｇ，Ｔｒｐを変数として含む線形判別式、Ａｌａ，Ｓｅｒ，Ｉｌｅ，Ｌｙｓ，Ｐｈｅ，Ｔｒｐを変数として含む線形判別式、Ｓｅｒ，Ｌｙｓ，Ｈｉｓ，Ｃｉｔ，Ｔｒｐを変数として含む線形判別式、Ｈｙｐｒｏ，Ｇｌｕ，３－ＭｅＨｉｓ，Ｔｒｐを変数として含むＣｏｘ比例ハザードモデル式、またはＳｅｒ，Ｌｙｓ，Ｈｉｓ，Ｃｉｔ，Ｔｒｐを変数として含むＣｏｘ比例ハザードモデル式でもよい。これにより、心血管イベントの将来の発症に関する評価にも特に有用な多変量判別式で得られる判別値を利用して、当該評価もさらに精度よく行うことができる。

[0077] また、具体的には、アミノ酸濃度データに含まれるＥｔＯＨＮＨ２，Ｓａｒ，β－ＡＩＢＡ，α－ＡＢＡ，Ｓｅｒ，Ｖａｌ，Ｔｈｒ，Ｔａｕ，Ｈｙｐｒｏ，Ｉｌｅ，Ａｓｎ，Ｏｒｎ，Ａｓｐ，Ｇｌｎ，α－ＡＡＡ，Ａｒｇ，Ｔｙｒ，Ｃｙｓ，Ｇｌｙ，Ａｌａ，Ｐｒｏ，Ｌｅｕ，Ｌｙｓ，Ｍｅｔ，Ｈｉｓ，Ｐｈｅのうち少なくとも１つの濃度値、およびＥｔＯＨＮＨ２，Ｓａｒ，β－ＡＩＢＡ，α－ＡＢＡ，Ｓｅｒ，Ｖａｌ，Ｔｈｒ，Ｔａｕ，Ｈｙｐｒｏ

，Ｉｌｅ，Ａｓｎ，Ｏｒｎ，Ａｓｐ，Ｇｌｎ，α－ＡＡＡ，Ａｒｇ，Ｔｙｒ，Ｃｙｓ，Ｇｌｙ，Ａｌａ，Ｐｒｏ，Ｌｅｕ，Ｌｙｓ，Ｍｅｔ，Ｈｉｓ，Ｐｈｅのうち少なくとも１つを変数として含む多変量判別式に基づいて、判別値を算出し、算出した判別値に基づいて、評価対象が将来、早期腎症を発症するかを評価してもよい。例えば、評価対象が将来、早期腎症を発症するか否かを判別したり、また、将来、早期腎症を発症する可能性の程度を考慮して定義された複数の区分（ランク）のうちのどれか１つに評価対象を分類したりしてもよい。これにより、早期腎症の将来の発症に関する評価に有用な多変量判別式で得られる判別値を利用して、当該評価を精度よく行うことができる。

[0078] なお、早期腎症の将来の発症に関する評価で用いられる多変量判別式は、β－ＡＩＢＡ，Ｖａｌ，Ｔａｕ，Ｉｌｅ，α－ＡＡＡ，Ａｒｇを変数として含むロジスティック回帰式、Ｓｅｒ，Ｖａｌ，Ｍｅｔ，Ａｒｇ，Ｔｙｒを変数として含むロジスティック回帰式、Ｖａｌ，Ｔａｕ，Ｉｌｅ，α－ＡＡＡ，Ｐｈｅ，Ａｒｇを変数として含む線形判別式、またはＳｅｒ，Ｐｒｏ，Ｖａｌ，Ｉｌｅ，Ｌｅｕ，Ａｒｇを変数として含む線形判別式でもよい。これにより、早期腎症の将来の発症に関する評価に特に有用な多変量判別式で得られる判別値を利用して、当該評価をさらに精度よく行うことができる。

[0079] また、判別値の取り得る範囲が所定範囲（例えば０．０から１．０までの範囲、０．０から１０．０までの範囲、０．０から１００．０までの範囲、又は－１０．０から１０．０までの範囲、など）に収まるように、例えば、判別値に対して任意の値を加減乗除したり、また、判別値を所定の変換手法（例えば、指数変換、対数変換、角変換、平方根変換、プロビット変換、又は逆数変換など）で変換したり、また、判別値に対してこれらの計算を組み合わせて行ったりすることで、判別値を変換してもよい。例えば、判別値を指数としネイピア数を底とする指数関数の値（具体的には、早期腎症に罹患している確率ｐ（将来、心血管イベントを発症する確率、または、将来、早期腎症を発症する確率でもよい。）を定義したときの自然対数Ｌｎ（ｐ／（

１－ｐ））が判別値と等しいとした場合におけるｐ／（１－ｐ）の値）をさらに算出してもよく、また、算出した指数関数の値を１と当該値との和で割った値（具体的には、確率ｐの値）をさらに算出してもよい。

また、特定の条件のときの変換後の値が特定の値となるように、判別値を変換してもよい。例えば、特異度が８０％のときの変換後の値が５．０となり且つ特異度が９５％のときの変換後の値が８．０となるように判別値を変換してもよい。

なお、本明細書における判別値は、多変量判別式の値そのものであってもよく、多変量判別式の値を変換した後の値であってもよい。

[0080] ここで、上記した各多変量判別式は、例えば、本出願人による国際出願である国際公開第２００４／０５２１９１号に記載の方法または本出願人による国際出願である国際公開第２００６／０９８１９２号に記載の方法で作成してもよい。なお、これら方法で得られた多変量判別式であれば、入力データとしてのアミノ酸濃度データにおけるアミノ酸濃度の単位に因らず、当該多変量判別式を早期腎症の状態評価に好適に用いることができる。

[0081] また、多変量判別式とは、一般に多変量解析で用いられる式の形式を意味し、例えば分数式、重回帰式、多重ロジスティック回帰式、線形判別関数、マハラノビス距離、正準判別関数、サポートベクターマシン、決定木、Ｃｏｘ比例ハザードモデルなどを包含する。また、異なる形式の多変量判別式の和で示されるような式も含まれる。また、重回帰式、多重ロジスティック回帰式、正準判別関数においては各変数に係数および定数項が付加されるが、この場合の係数および定数項は、好ましくは実数であること、より好ましくはデータから判別を行うために得られた係数および定数項の９９％信頼区間の範囲に属する値、さらに好ましくはデータから判別を行うために得られた係数および定数項の９５％信頼区間の範囲に属する値であればかまわない。また、各係数の値、及びその信頼区間は、それを実数倍したものでもよく、定数項の値、及びその信頼区間は、それに任意の実定数を加減乗除したものでもよい。ロジスティック回帰、線形判別、重回帰分析などの表示式を指標

に用いる場合、表示式の線形変換（定数の加算、定数倍）や単調増加（減少）の変換（例えばｌｏｇｉｔ変換など）は判別性能を変えるものではなく同等であるので、表示式はそれらを含むものである。

[0082] なお、分数式とは、当該分数式の分子がアミノ酸Ａ，Ｂ，Ｃ，・・・の和で表わされ及び／又は当該分数式の分母がアミノ酸ａ，ｂ，ｃ，・・・の和で表わされるものである。また、分数式には、このような構成の分数式α，β，γ，・・・の和（例えばα＋βのようなもの）も含まれる。また、分数式には、分割された分数式も含まれる。なお、分子や分母に用いられるアミノ酸にはそれぞれ適当な係数がついてもかまわない。また、分子や分母に用いられるアミノ酸は重複してもかまわない。また、各分数式に適当な係数がついてもかまわない。また、各変数の係数の値や定数項の値は、実数であればかまわない。分数式で、分子の変数と分母の変数を入れ替えた組み合わせは、目的変数との相関の正負の符号は概して逆転するが、それらの相関性は保たれるので、判別性では同等と見なせるので、分子の変数と分母の変数を入れ替えた組み合わせも、包含するものである。

[0083] そして、第１実施形態では、早期腎症の現在または将来の状態または心血管イベントの将来の状態を評価する際、アミノ酸の濃度以外に、他の生体情報（例えば、年齢、ＡＥＲ(尿中アルブミン排泄率)、ＢＮＰ(脳性ナトリウム利尿ペプチド)など）をさらに用いてもかまわない。また、第１実施形態では、早期腎症の現在または将来の状態または心血管イベントの将来の状態を評価する際、多変量判別式における変数として、アミノ酸の濃度以外に、他の生体情報（例えば、年齢、ＡＥＲ(尿中アルブミン排泄率)、ＢＮＰ(脳性ナトリウム利尿ペプチド)など）をさらに用いてもかまわない。

[0084] なお、ステップＳ１１を実行する前に、評価対象に１つまたは複数の物質から成る所望の物質群を投与し、当該評価対象から血液を採取しておき、ステップＳ１１で、当該採取した血液からアミノ酸濃度データを取得する場合には、ステップＳ１２での評価結果（例えば、早期腎症の現在の発症に関する判別結果・分類結果、または、早期腎症の将来の発症に関する判別結果・

分類結果）に基づいて、当該投与した物質群が、早期腎症を予防させるまたは早期腎症の状態を改善させるものであるか否かを判定してもよい。これにより、血液中のアミノ酸の濃度を利用して早期腎症の状態を精度よく評価することができる早期腎症の評価方法を用いて、早期腎症を予防させる又は早期腎症の状態を改善させる物質を精度よく探索することができる。例えば、ステップＳ１１を実行する前に、ヒトに投与可能な既存の薬物・アミノ酸・食品・サプリメントを適宜組み合わせたもの（例えば、早期腎症の予防または改善に効果があること知られている薬物（例えば、ＡＣＥ（アンジオテンシン変換酵素）阻害剤、ＡＲＢ（アンジオテンシンＩＩ受容体拮抗薬）など）・サプリメント（例えば、低タンパク食、ポリフェノールなど）などを適宜組み合わせたもの）を、所定の期間（例えば１日から１２ヶ月の範囲）にわたり、所定量ずつ所定の頻度・タイミング（例えば１日３回・食後）で、所定の投与方法（例えば経口投与）により投与してもよい。ここで、投与方法や用量、剤形は、病状に応じて適宜組み合わせてもよい。なお、剤形は、公知の技術に基づいて決めてもよい。また、用量は、特に定めは無いが、例えば有効成分として１ｕｇから１００ｇを含有した形態で与えてもよい。

[0085] そして、この判定結果が「予防させるまたは改善させる」というものであった場合には、当該投与した物質群が早期腎症を予防させるまたは早期腎症の状態を改善させるものとして探索されてもよい。なお、この探索方法によって探索された物質として、例えば、「Ｓａｒ，Ａｌａ，β－ＡＩＢＡ，α－ＡＢＡ，Ｓｅｒ，Ｐｒｏ，Ｖａｌ，Ｈｙｐｒｏ，Ｉｌｅ，Ｌｅｕ，Ｏｒｎ，Ｌｙｓ，Ｇｌｕ，Ｍｅｔ，Ｈｉｓ，α－ＡＡＡ，Ｐｈｅ，３－ＭｅＨｉｓ，Ａｒｇ，Ｃｉｔ，Ｔｒｐ，Ｃｙｓのうち少なくとも１つを含むアミノ酸群」または「ＥｔＯＨＮＨ２，Ｓａｒ，β－ＡＩＢＡ，α－ＡＢＡ，Ｓｅｒ，Ｖａｌ，Ｔｈｒ，Ｔａｕ，Ｈｙｐｒｏ，Ｉｌｅ，Ａｓｎ，Ｏｒｎ，Ａｓｐ，Ｇｌｎ，α－ＡＡＡ，Ａｒｇ，Ｔｙｒ，Ｃｙｓ，Ｇｌｙ，Ａｌａ，Ｐｒｏ，Ｌｅｕ，Ｌｙｓ，Ｍｅｔ，Ｈｉｓ，Ｐｈｅのうち少なくとも１つを含むアミノ酸群」が挙げられる。

[0086] また、「Ｓａｒ，Ａｌａ，β－ＡＩＢＡ，α－ＡＢＡ，Ｓｅｒ，Ｐｒｏ，Ｖａｌ，Ｈｙｐｒｏ，Ｉｌｅ，Ｌｅｕ，Ｏｒｎ，Ｌｙｓ，Ｇｌｕ，Ｍｅｔ，Ｈｉｓ，α－ＡＡＡ，Ｐｈｅ，３－ＭｅＨｉｓ，Ａｒｇ，Ｃｉｔ，Ｔｒｐ，Ｃｙｓのうち少なくとも１つを含むアミノ酸群」または「ＥｔＯＨＮＨ２，Ｓａｒ，β－ＡＩＢＡ，α－ＡＢＡ，Ｓｅｒ，Ｖａｌ，Ｔｈｒ，Ｔａｕ，Ｈｙｐｒｏ，Ｉｌｅ，Ａｓｎ，Ｏｒｎ，Ａｓｐ，Ｇｌｎ，α－ＡＡＡ，Ａｒｇ，Ｔｙｒ，Ｃｙｓ，Ｇｌｙ，Ａｌａ，Ｐｒｏ，Ｌｅｕ，Ｌｙｓ，Ｍｅｔ，Ｈｉｓ，Ｐｈｅのうち少なくとも１つを含むアミノ酸群」の濃度値や各多変量判別式の判別値を正常化させる物質を、第１実施形態の早期腎症の評価方法や第２実施形態の早期腎症評価装置を用いて選択することができる。

[0087] また、「予防させる又は改善させる物質を探索する」とは、早期腎症の予防・改善に有効な新規物質を見出すことのみならず、公知物質の早期腎症の予防・改善用途を新規に見出すことや、早期腎症の予防・改善に有効性を期待できる既存の薬剤・サプリメント等を組み合わせた新規組成物を見出すことや、上記した適切な用法・用量・組み合わせを見出し、それをキットとすることや、食事・運動等も含めた予防・治療メニューを提示することや、当該予防・治療メニューの効果をモニタリングし、必要に応じて個人ごとにメニューの変更を提示すること等が含まれる。

[0088] ［１－２．第１実施形態の具体例］

ここでは、第１実施形態の具体例について図２を参照して説明する。図２は、第１実施形態にかかる早期腎症の評価方法の一例を示すフローチャートである。

[0089] まず、動物やヒト（例えば糖尿病患者など）などの個体から採取した血液中のアミノ酸の濃度値に関するアミノ酸濃度データを取得する（ステップＳＡ１１）。なお、ステップＳＡ１１では、例えば、アミノ酸濃度測定を行う企業等が測定したアミノ酸濃度データを取得してもよく、また、個体から採取した血液から例えば上述した（Ａ）または（Ｂ）などの測定方法でアミノ酸濃度データを測定することでアミノ酸濃度データを取得してもよい。

[0090] つぎに、ステップＳＡ１１で取得した個体のアミノ酸濃度データから欠損値や外れ値などのデータを除去する（ステップＳＡ１２）。

[0091] つぎに、ステップＳＡ１２で欠損値や外れ値などのデータが除去された個体のアミノ酸濃度データに基づいて、以下に示す１１．または１２．の２群判別を実行する（ステップＳＡ１３）。

[0092] １１．早期腎症の現在の発症に関する２群判別

以下の（１１Ａ）または（１１Ｂ）の２群判別を実行する。

（１１Ａ）アミノ酸濃度データに含まれるＳａｒ，Ａｌａ，β－ＡＩＢＡ，α－ＡＢＡ，Ｓｅｒ，Ｐｒｏ，Ｖａｌ，Ｈｙｐｒｏ，Ｉｌｅ，Ｌｅｕ，Ｏｒｎ，Ｌｙｓ，Ｇｌｕ，Ｍｅｔ，Ｈｉｓ，α－ＡＡＡ，Ｐｈｅ，３－ＭｅＨｉｓ，Ａｒｇ，Ｃｉｔ，Ｔｒｐ，Ｃｙｓのうち少なくとも１つの濃度値と予め設定された閾値（カットオフ値）とを比較することで、個体が現在、早期腎症であるか否か（個体が現在、早期腎症を発症しているか否か）を判別する。

（１１Ｂ）アミノ酸濃度データに含まれるＳａｒ，Ａｌａ，β－ＡＩＢＡ，α－ＡＢＡ，Ｓｅｒ，Ｐｒｏ，Ｖａｌ，Ｈｙｐｒｏ，Ｉｌｅ，Ｌｅｕ，Ｏｒｎ，Ｌｙｓ，Ｇｌｕ，Ｍｅｔ，Ｈｉｓ，α－ＡＡＡ，Ｐｈｅ，３－ＭｅＨｉｓ，Ａｒｇ，Ｃｉｔ，Ｔｒｐ，Ｃｙｓのうち少なくとも１つの濃度値、およびＳａｒ，Ａｌａ，β－ＡＩＢＡ，α－ＡＢＡ，Ｓｅｒ，Ｐｒｏ，Ｖａｌ，Ｈｙｐｒｏ，Ｉｌｅ，Ｌｅｕ，Ｏｒｎ，Ｌｙｓ，Ｇｌｕ，Ｍｅｔ，Ｈｉｓ，α－ＡＡＡ，Ｐｈｅ，３－ＭｅＨｉｓ，Ａｒｇ，Ｃｉｔ，Ｔｒｐ，Ｃｙｓのうち少なくとも１つを変数として含む多変量判別式に基づいて、判別値を算出し、算出した判別値と予め設定された閾値（カットオフ値）とを比較することで、個体が現在、早期腎症であるか否か（個体が現在、早期腎症を発症しているか否か）を判別する。

[0093] なお、上記１１．の２群判別においては、以下の（１１Ｃ）または（１１Ｄ）の２群判別（心血管イベントの将来の発症に関する２群判別）をさらに実行してもよい。

（１１Ｃ）アミノ酸濃度データに含まれるβ－ＡＩＢＡ，３－ＭｅＨｉｓ，Ｃｉｔ，Ｔｒｐ，Ｃｙｓ，Ｇｌｕ，Ｈｙｐｒｏ，Ｓａｒ，Ｌｅｕ，Ｈｉｓ，Ａｒｇ，Ｌｙｓ，Ｓｅｒ，Ｐｈｅ，Ａｌａ，Ｏｒｎ，Ｐｒｏ，Ｉｌｅのうち少なくとも１つの濃度値と予め設定された閾値（カットオフ値）とを比較することで、個体が将来、心血管イベントを発症するか否かを判別する。

（１１Ｄ）アミノ酸濃度データに含まれるβ－ＡＩＢＡ，３－ＭｅＨｉｓ，Ｃｉｔ，Ｔｒｐ，Ｃｙｓ，Ｇｌｕ，Ｈｙｐｒｏ，Ｓａｒ，Ｌｅｕ，Ｈｉｓ，Ａｒｇ，Ｌｙｓ，Ｓｅｒ，Ｐｈｅ，Ａｌａ，Ｏｒｎ，Ｐｒｏ，Ｉｌｅのうち少なくとも１つの濃度値、およびβ－ＡＩＢＡ，３－ＭｅＨｉｓ，Ｃｉｔ，Ｔｒｐ，Ｃｙｓ，Ｇｌｕ，Ｈｙｐｒｏ，Ｓａｒ，Ｌｅｕ，Ｈｉｓ，Ａｒｇ，Ｌｙｓ，Ｓｅｒ，Ｐｈｅ，Ａｌａ，Ｏｒｎ，Ｐｒｏ，Ｉｌｅのうち少なくとも１つを変数として含む多変量判別式に基づいて、判別値を算出し、算出した判別値と予め設定された閾値（カットオフ値）とを比較することで、個体が将来、心血管イベントを発症するか否かを判別する。

[0094] １２．早期腎症の将来の発症に関する２群判別

以下の（１２Ａ）または（１２Ｂ）の２群判別を実行する。

（１２Ａ）アミノ酸濃度データに含まれるＥｔＯＨＮＨ２，Ｓａｒ，β－ＡＩＢＡ，α－ＡＢＡ，Ｓｅｒ，Ｖａｌ，Ｔｈｒ，Ｔａｕ，Ｈｙｐｒｏ，Ｉｌｅ，Ａｓｎ，Ｏｒｎ，Ａｓｐ，Ｇｌｎ，α－ＡＡＡ，Ａｒｇ，Ｔｙｒ，Ｃｙｓ，Ｇｌｙ，Ａｌａ，Ｐｒｏ，Ｌｅｕ，Ｌｙｓ，Ｍｅｔ，Ｈｉｓ，Ｐｈｅのうち少なくとも１つの濃度値と予め設定された閾値（カットオフ値）とを比較することで、個体が将来、早期腎症を発症するか否かを判別する。

（１２Ｂ）アミノ酸濃度データに含まれるＥｔＯＨＮＨ２，Ｓａｒ，β－ＡＩＢＡ，α－ＡＢＡ，Ｓｅｒ，Ｖａｌ，Ｔｈｒ，Ｔａｕ，Ｈｙｐｒｏ，Ｉｌｅ，Ａｓｎ，Ｏｒｎ，Ａｓｐ，Ｇｌｎ，α－ＡＡＡ，Ａｒｇ，Ｔｙｒ，Ｃｙｓ，Ｇｌｙ，Ａｌａ，Ｐｒｏ，Ｌｅｕ，Ｌｙｓ，Ｍｅｔ，Ｈｉｓ，Ｐｈｅのうち少なくとも１つの濃度値、およびＥｔＯＨＮＨ２，Ｓａｒ，β－ＡＩＢＡ，α－ＡＢＡ，Ｓｅｒ，Ｖａｌ，Ｔｈｒ，Ｔａｕ，Ｈｙｐｒｏ，Ｉｌｅ，

Ａｓｎ，Ｏｒｎ，Ａｓｐ，Ｇｌｎ，α－ＡＡＡ，Ａｒｇ，Ｔｙｒ，Ｃｙｓ，Ｇｌｙ，Ａｌａ，Ｐｒｏ，Ｌｅｕ，Ｌｙｓ，Ｍｅｔ，Ｈｉｓ，Ｐｈｅのうち少なくとも１つを変数として含む多変量判別式に基づいて、判別値を算出し、算出した判別値と予め設定された閾値（カットオフ値）とを比較することで、個体が将来、早期腎症を発症するか否かを判別する。

[0095] ［第２実施形態］

［２－１．第２実施形態の概要］

ここでは、第２実施形態の概要について図３を参照して説明する。図３は第２実施形態の基本原理を示す原理構成図である。

[0096] まず、制御部は、アミノ酸の濃度値に関する予め取得した評価対象（例えば動物やヒト（例えば糖尿病患者など）などの個体）のアミノ酸濃度データ、およびアミノ酸の濃度を変数として含む記憶部に記憶された多変量判別式に基づいて、当該多変量判別式の値である判別値を算出する（ステップＳ２１）。

[0097] つぎに、制御部は、ステップＳ２１で算出した判別値に基づいて、評価対象につき早期腎症の状態を評価する（ステップＳ２２）。

[0098] 以上、第２実施形態によれば、評価対象のアミノ酸濃度データ、およびアミノ酸の濃度を変数として含む多変量判別式に基づいて、当該多変量判別式の値である判別値（要するに、評価対象の早期腎症の状態を反映した判別値）を算出し、算出した判別値に基づいて、評価対象につき早期腎症の状態を評価する（要するに、評価対象につき早期腎症の状態を評価するための情報を提供する）。これにより、アミノ酸の濃度を変数として含む多変量判別式を利用して、評価対象の早期腎症の状態を反映した判別値を得ることができたり、さらには、アミノ酸の濃度を変数として含む多変量判別式で得られる判別値を利用して、早期腎症の状態を精度よく評価することができたりする（要するに、早期腎症の状態を評価するための精度のよい情報を提供することができる）。

[0099] なお、多変量判別式は、ロジスティック回帰式、分数式、線形判別式、重

回帰式、サポートベクターマシンで作成された式、マハラノビス距離法で作成された式、正準判別分析で作成された式、決定木で作成された式、Ｃｏｘ比例ハザードモデル式のいずれか１つでもよい。これにより、早期腎症の状態評価に有用な多変量判別式で得られる判別値を利用して、早期腎症の状態を精度よく評価することができる。

[0100] また、ステップＳ２１では、アミノ酸濃度データに含まれるＥｔＯＨＮＨ２，Ｇｌｙ，Ｓａｒ，Ａｌａ，β－ＡＩＢＡ，α－ＡＢＡ，Ｓｅｒ，Ｐｒｏ，Ｖａｌ，Ｔｈｒ，Ｔａｕ，Ｈｙｐｒｏ，Ｉｌｅ，Ｌｅｕ，Ａｓｎ，Ｏｒｎ，Ａｓｐ，ＧＩｎ，Ｌｙｓ，Ｇｌｕ，Ｍｅｔ，Ｈｉｓ，α－ＡＡＡ，Ｐｈｅ，３－ＭｅＨｉｓ，Ａｒｇ，Ｃｉｔ，Ｔｙｒ，Ｔｒｐ，Ｃｙｓのうち少なくとも１つの濃度値、およびＥｔＯＨＮＨ２，Ｇｌｙ，Ｓａｒ，Ａｌａ，β－ＡＩＢＡ，α－ＡＢＡ，Ｓｅｒ，Ｐｒｏ，Ｖａｌ，Ｔｈｒ，Ｔａｕ，Ｈｙｐｒｏ，Ｉｌｅ，Ｌｅｕ，Ａｓｎ，Ｏｒｎ，Ａｓｐ，ＧＩｎ，Ｌｙｓ，Ｇｌｕ，Ｍｅｔ，Ｈｉｓ，α－ＡＡＡ，Ｐｈｅ，３－ＭｅＨｉｓ，Ａｒｇ，Ｃｉｔ，Ｔｙｒ，Ｔｒｐ，Ｃｙｓのうち少なくとも１つを変数として含む多変量判別式に基づいて、判別値を算出し、ステップＳ２２では、ステップＳ２１で算出した判別値に基づいて、評価対象につき早期腎症の状態を評価してもよい。これにより、早期腎症の状態評価に有用な多変量判別式で得られる判別値を利用して、早期腎症の状態を精度よく評価することができる。

[0101] 具体的には、ステップＳ２１では、アミノ酸濃度データに含まれるＳａｒ，Ａｌａ，β－ＡＩＢＡ，α－ＡＢＡ，Ｓｅｒ，Ｐｒｏ，Ｖａｌ，Ｈｙｐｒｏ，Ｉｌｅ，Ｌｅｕ，Ｏｒｎ，Ｌｙｓ，Ｇｌｕ，Ｍｅｔ，Ｈｉｓ，α－ＡＡＡ，Ｐｈｅ，３－ＭｅＨｉｓ，Ａｒｇ，Ｃｉｔ，Ｔｒｐ，Ｃｙｓのうち少なくとも１つの濃度値、およびＳａｒ，Ａｌａ，β－ＡＩＢＡ，α－ＡＢＡ，Ｓｅｒ，Ｐｒｏ，Ｖａｌ，Ｈｙｐｒｏ，Ｉｌｅ，Ｌｅｕ，Ｏｒｎ，Ｌｙｓ，Ｇｌｕ，Ｍｅｔ，Ｈｉｓ，α－ＡＡＡ，Ｐｈｅ，３－ＭｅＨｉｓ，Ａｒｇ，Ｃｉｔ，Ｔｒｐ，Ｃｙｓのうち少なくとも１つを変数として含む多変量判別式に基づいて、判別値を算出し、ステップＳ２２では、ステップＳ２１で算

出した判別値に基づいて、評価対象が早期腎症を有するかを評価してもよい。例えば、評価対象が早期腎症または非早期腎症であるか否かを判別したり、また、早期腎症に罹患している可能性の程度を考慮して定義された複数の区分（ランク）のうちのどれか１つに評価対象を分類したりしてもよい。これにより、早期腎症の現在の発症に関する評価に有用な多変量判別式で得られる判別値を利用して、当該評価を精度よく行うことができる。

[0102] なお、早期腎症の現在の発症に関する評価で用いられる多変量判別式は、Ａｌａ，Ｏｒｎ，Ｇｌｕ，３－ＭｅＨｉｓ，Ｔｒｐ，Ｃｙｓを変数として含むロジスティック回帰式、Ａｌａ，Ｓｅｒ，Ｌｅｕ，Ｌｙｓ，Ｃｉｔ，Ｔｒｐを変数として含むロジスティック回帰式、Ａｌａ，Ｇｌｕ，３－ＭｅＨｉｓ，Ｃｉｔ，Ｔｒｐ，Ｃｙｓを変数として含む線形判別式、またはＡｌａ，Ｓｅｒ，Ｉｌｅ，Ｌｙｓ，Ｐｈｅ，Ｔｒｐを変数として含む線形判別式でもよい。これにより、早期腎症の現在の発症に関する評価に特に有用な多変量判別式で得られる判別値を利用して、当該評価をさらに精度よく行うことができる。

[0103] ここで、早期腎症の現在の発症に関する評価においては、アミノ酸濃度データに含まれるβ－ＡＩＢＡ，３－ＭｅＨｉｓ，Ｃｉｔ，Ｔｒｐ，Ｃｙｓ，Ｇｌｕ，Ｈｙｐｒｏ，Ｓａｒ，Ｌｅｕ，Ｈｉｓ，Ａｒｇ，Ｌｙｓ，Ｓｅｒ，Ｐｈｅ，Ａｌａ，Ｏｒｎ，Ｐｒｏ，Ｉｌｅのうち少なくとも１つの濃度値、およびβ－ＡＩＢＡ，３－ＭｅＨｉｓ，Ｃｉｔ，Ｔｒｐ，Ｃｙｓ，Ｇｌｕ，Ｈｙｐｒｏ，Ｓａｒ，Ｌｅｕ，Ｈｉｓ，Ａｒｇ，Ｌｙｓ，Ｓｅｒ，Ｐｈｅ，Ａｌａ，Ｏｒｎ，Ｐｒｏ，Ｉｌｅのうち少なくとも１つを変数として含む多変量判別式に基づいて、判別値を算出し、算出した判別値に基づいて、評価対象が将来、心血管イベントを発症するかをさらに評価してもよい。例えば、評価対象が将来、心血管イベントを発症するか否かをさらに判別したり、また、将来、心血管イベントを発症する可能性の程度を考慮して定義された複数の区分（ランク）のうちのどれか１つに評価対象をさらに分類したりしてもよい。これにより、早期腎症の現在の発症に関する評価に有用な多変量

判別式のうち、心血管イベントの将来の発症に関する評価にも有用な多変量判別式で得られる判別値を利用して、当該心血管イベントの将来の発症に関する評価も精度よく行うことができる。

[0104] なお、心血管イベントの将来の発症に関する評価で用いられる多変量判別式は、Ａｌａ，Ｏｒｎ，Ｇｌｕ，３－ＭｅＨｉｓ，Ｔｒｐ，Ｃｙｓを変数として含むロジスティック回帰式、Ｈｙｐｒｏ，Ｇｌｕ，Ｈｉｓ，３－ＭｅＨｉｓ，Ａｒｇ，Ｔｒｐを変数として含むロジスティック回帰式、Ａｌａ，Ｓｅｒ，Ｌｅｕ，Ｌｙｓ，Ｃｉｔ，Ｔｒｐを変数として含むロジスティック回帰式、Ｓｅｒ，Ｏｒｎ，Ｈｉｓ，Ａｒｇ，Ｔｒｐを変数として含むロジスティック回帰式、Ａｌａ，Ｇｌｕ，３－ＭｅＨｉｓ，Ｃｉｔ，Ｔｒｐ，Ｃｙｓを変数として含む線形判別式、Ｓａｒ，Ｌｅｕ，Ｇｌｕ，３－ＭｅＨｉｓ，Ａｒｇ，Ｔｒｐを変数として含む線形判別式、Ａｌａ，Ｓｅｒ，Ｉｌｅ，Ｌｙｓ，Ｐｈｅ，Ｔｒｐを変数として含む線形判別式、Ｓｅｒ，Ｌｙｓ，Ｈｉｓ，Ｃｉｔ，Ｔｒｐを変数として含む線形判別式、Ｈｙｐｒｏ，Ｇｌｕ，３－ＭｅＨｉｓ，Ｔｒｐを変数として含むＣｏｘ比例ハザードモデル式、またはＳｅｒ，Ｌｙｓ，Ｈｉｓ，Ｃｉｔ，Ｔｒｐを変数として含むＣｏｘ比例ハザードモデル式でもよい。これにより、心血管イベントの将来の発症に関する評価にも特に有用な多変量判別式で得られる判別値を利用して、当該評価もさらに精度よく行うことができる。

[0105] また、具体的には、ステップＳ２１では、アミノ酸濃度データに含まれるＥｔＯＨＮＨ２，Ｓａｒ，β－ＡＩＢＡ，α－ＡＢＡ，Ｓｅｒ，Ｖａｌ，Ｔｈｒ，Ｔａｕ，Ｈｙｐｒｏ，Ｉｌｅ，Ａｓｎ，Ｏｒｎ，Ａｓｐ，Ｇｌｎ，α－ＡＡＡ，Ａｒｇ，Ｔｙｒ，Ｃｙｓ，Ｇｌｙ，Ａｌａ，Ｐｒｏ，Ｌｅｕ，Ｌｙｓ，Ｍｅｔ，Ｈｉｓ，Ｐｈｅのうち少なくとも１つの濃度値、およびＥｔＯＨＮＨ２，Ｓａｒ，β－ＡＩＢＡ，α－ＡＢＡ，Ｓｅｒ，Ｖａｌ，Ｔｈｒ，Ｔａｕ，Ｈｙｐｒｏ，Ｉｌｅ，Ａｓｎ，Ｏｒｎ，Ａｓｐ，Ｇｌｎ，α－ＡＡＡ，Ａｒｇ，Ｔｙｒ，Ｃｙｓ，Ｇｌｙ，Ａｌａ，Ｐｒｏ，Ｌｅｕ，Ｌｙｓ，Ｍｅｔ，Ｈｉｓ，Ｐｈｅのうち少なくとも１つを変数として含む多変量判

別式に基づいて、判別値を算出し、ステップＳ２２では、ステップＳ２１で算出した判別値に基づいて、評価対象が将来、早期腎症を発症するかを評価してもよい。例えば、評価対象が将来、早期腎症を発症するか否かを判別したり、また、将来、早期腎症を発症する可能性の程度を考慮して定義された複数の区分（ランク）のうちのどれか１つに評価対象を分類したりしてもよい。これにより、早期腎症の将来の発症に関する評価に有用な多変量判別式で得られる判別値を利用して、当該評価を精度よく行うことができる。

[0106] なお、早期腎症の将来の発症に関する評価で用いられる多変量判別式は、β－ＡＩＢＡ，Ｖａｌ，Ｔａｕ，Ｉｌｅ，α－ＡＡＡ，Ａｒｇを変数として含むロジスティック回帰式、Ｓｅｒ，Ｖａｌ，Ｍｅｔ，Ａｒｇ，Ｔｙｒを変数として含むロジスティック回帰式、Ｖａｌ，Ｔａｕ，Ｉｌｅ，α－ＡＡＡ，Ｐｈｅ，Ａｒｇを変数として含む線形判別式、またはＳｅｒ，Ｐｒｏ，Ｖａｌ，Ｉｌｅ，Ｌｅｕ，Ａｒｇを変数として含む線形判別式でもよい。これにより、早期腎症の将来の発症に関する評価に特に有用な多変量判別式で得られる判別値を利用して、当該評価をさらに精度よく行うことができる。

[0107] また、判別値の取り得る範囲が所定範囲（例えば０．０から１．０までの範囲、０．０から１０．０までの範囲、０．０から１００．０までの範囲、又は－１０．０から１０．０までの範囲、など）に収まるように、例えば、判別値に対して任意の値を加減乗除したり、また、判別値を所定の変換手法（例えば、指数変換、対数変換、角変換、平方根変換、プロビット変換、又は逆数変換など）で変換したり、また、判別値に対してこれらの計算を組み合わせて行ったりすることで、判別値を変換してもよい。例えば、判別値を指数としネイピア数を底とする指数関数の値（具体的には、早期腎症に罹患している確率ｐ（将来、心血管イベントを発症する確率、または、将来、早期腎症を発症する確率でもよい。）を定義したときの自然対数ｌｎ（ｐ／（１－ｐ））が判別値と等しいとした場合におけるｐ／（１－ｐ）の値）をさらに算出してもよく、また、算出した指数関数の値を１と当該値との和で割った値（具体的には、確率ｐの値）をさらに算出してもよい。

また、特定の条件のときの変換後の値が特定の値となるように、判別値を変換してもよい。例えば、特異度が８０％のときの変換後の値が５．０となり且つ特異度が９５％のときの変換後の値が８．０となるように判別値を変換してもよい。

なお、本明細書における判別値は、多変量判別式の値そのものであってもよく、多変量判別式の値を変換した後の値であってもよい。

[0108] ここで、上記した各多変量判別式は、例えば、本出願人による国際出願である国際公開第２００４／０５２１９１号に記載の方法または本出願人による国際出願である国際公開第２００６／０９８１９２号に記載の方法で作成してもよい。なお、これら方法で得られた多変量判別式であれば、入力データとしてのアミノ酸濃度データにおけるアミノ酸濃度の単位に因らず、当該多変量判別式を早期腎症の状態評価に好適に用いることができる。

[0109] また、多変量判別式とは、一般に多変量解析で用いられる式の形式を意味し、例えば分数式、重回帰式、多重ロジスティック回帰式、線形判別関数、マハラノビス距離、正準判別関数、サポートベクターマシン、決定木、Ｃｏｘ比例ハザードモデルなどを包含する。また、異なる形式の多変量判別式の和で示されるような式も含まれる。また、重回帰式、多重ロジスティック回帰式、正準判別関数においては各変数に係数および定数項が付加されるが、この場合の係数および定数項は、好ましくは実数であること、より好ましくはデータから判別を行うために得られた係数および定数項の９９％信頼区間の範囲に属する値、さらに好ましくはデータから判別を行うために得られた係数および定数項の９５％信頼区間の範囲に属する値であればかまわない。また、各係数の値、及びその信頼区間は、それを実数倍したものでもよく、定数項の値、及びその信頼区間は、それに任意の実定数を加減乗除したものでもよい。ロジスティック回帰、線形判別、重回帰分析などの表示式を指標に用いる場合、表示式の線形変換（定数の加算、定数倍）や単調増加（減少）の変換（例えばｌｏｇｉｔ変換など）は判別性能を変えるものではなく同等であるので、表示式はそれらを含むものである。

[0110] なお、分数式とは、当該分数式の分子がアミノ酸Ａ，Ｂ，Ｃ，・・・の和で表わされ及び／又は当該分数式の分母がアミノ酸ａ，ｂ，ｃ，・・・の和で表わされるものである。また、分数式には、このような構成の分数式α，β，γ，・・・の和（例えばα＋βのようなもの）も含まれる。また、分数式には、分割された分数式も含まれる。なお、分子や分母に用いられるアミノ酸にはそれぞれ適当な係数がついてもかまわない。また、分子や分母に用いられるアミノ酸は重複してもかまわない。また、各分数式に適当な係数がついてもかまわない。また、各変数の係数の値や定数項の値は、実数であればかまわない。分数式で、分子の変数と分母の変数を入れ替えた組み合わせは、目的変数との相関の正負の符号は概して逆転するが、それらの相関性は保たれるので、判別性では同等と見なせるので、分子の変数と分母の変数を入れ替えた組み合わせも、包含するものである。

[0111] そして、第２実施形態では、早期腎症の現在または将来の状態または心血管イベントの将来の状態を評価する際、アミノ酸の濃度以外に、他の生体情報（例えば、年齢、ＡＥＲ(尿中アルブミン排泄率)、ＢＮＰ(脳性ナトリウム利尿ペプチド)など）をさらに用いてもかまわない。また、第２実施形態では、早期腎症の現在または将来の状態または心血管イベントの将来の状態を評価する際、多変量判別式における変数として、アミノ酸の濃度以外に、他の生体情報（例えば、年齢、ＡＥＲ(尿中アルブミン排泄率)、ＢＮＰ(脳性ナトリウム利尿ペプチド)など）をさらに用いてもかまわない。

[0112] ここで、多変量判別式作成処理（工程１～工程４）の概要について詳細に説明する。なお、ここで説明する処理はあくまでも一例であり、多変量判別式の作成方法はこれに限定されない。

[0113] まず、制御部は、アミノ酸濃度データと早期腎症の状態を表す指標に関する早期腎症状態指標データとを含む記憶部に記憶された早期腎症状態情報から所定の式作成手法に基づいて、多変量判別式の候補である候補多変量判別式（例えば、$y = a_1 x_1 + a_2 x_2 + \cdots + a_n x_n$、ｙ：早期腎症状態指標データ、$x_i$：アミノ酸濃度データ、$a_i$：定数、ｉ＝１，２，・・・，ｎ）

を作成する（工程１）。なお、事前に、早期腎症状態情報から欠損値や外れ値などを持つデータを除去してもよい。

[0114] なお、工程１において、早期腎症状態情報から、複数の異なる式作成手法（主成分分析や判別分析、サポートベクターマシン、重回帰分析、ロジスティック回帰分析、ｋ－ｍｅａｎｓ法、クラスター解析、決定木、Ｃｏｘ比例ハザードモデルなどの多変量解析に関するものを含む。）を併用して複数の候補多変量判別式を作成してもよい。具体的には、多数の健常群および早期腎症群から得た血液を分析して得たアミノ酸濃度データおよび早期腎症状態指標データから構成される多変量データである早期腎症状態情報に対して、複数の異なるアルゴリズムを利用して複数群の候補多変量判別式を同時並行的に作成してもよい。例えば、異なるアルゴリズムを利用して判別分析およびロジスティック回帰分析を同時に行い、２つの異なる候補多変量判別式を作成してもよい。また、主成分分析を行って作成した候補多変量判別式を利用して早期腎症状態情報を変換し、変換した早期腎症状態情報に対して判別分析を行うことで候補多変量判別式を作成してもよい。これにより、最終的に、診断条件に合った適切な多変量判別式を作成することができる。

[0115] ここで、主成分分析を用いて作成した候補多変量判別式は、全てのアミノ酸濃度データの分散を最大にするような各アミノ酸変数を含む一次式である。また、判別分析を用いて作成した候補多変量判別式は、各群内の分散の和の全てのアミノ酸濃度データの分散に対する比を最小にするような各アミノ酸変数を含む高次式（指数や対数を含む）である。また、サポートベクターマシンを用いて作成した候補多変量判別式は、群間の境界を最大にするような各アミノ酸変数を含む高次式（カーネル関数を含む）である。また、重回帰分析を用いて作成した候補多変量判別式は、全てのアミノ酸濃度データからの距離の和を最小にするような各アミノ酸変数を含む高次式である。ロジスティック回帰分析を用いて作成した候補多変量判別式は、確率の対数オッズを表す線形モデルであり、その確率の尤度を最大にするような各アミノ酸変数を含む一次式である。また、ｋ－ｍｅａｎｓ法とは、各アミノ酸濃度デ

ータのｋ個近傍を探索し、近傍点の属する群の中で一番多いものをそのデータの所属群と定義し、入力されたアミノ酸濃度データの属する群と定義された群とが最も合致するようなアミノ酸変数を選択する手法である。また、クラスター解析とは、全てのアミノ酸濃度データの中で最も近い距離にある点同士をクラスタリング（群化）する手法である。また、決定木とは、アミノ酸変数に序列をつけて、序列が上位であるアミノ酸変数の取りうるパターンからアミノ酸濃度データの群を予測する手法である。また、Ｃｏｘ比例ハザードモデルとは、生存時間およびイベント時間ならびに打ち切りを考慮しながら、生存またはイベントに対してアミノ酸変数が与える影響を予測する手法である。

[0116] 多変量判別式作成処理の説明に戻り、制御部は、工程１で作成した候補多変量判別式を、所定の検証手法に基づいて検証（相互検証）する（工程２）。候補多変量判別式の検証は、工程１で作成した各候補多変量判別式に対して行う。

[0117] なお、工程２において、ブートストラップ法やホールドアウト法、Ｎ－フォールド法、リーブワンアウト法などのうち少なくとも１つに基づいて候補多変量判別式の判別率や感度、特異度、情報量基準、ＲＯＣ＿ＡＵＣ（受信者特性曲線の曲線下面積）などのうち少なくとも１つに関して検証してもよい。これにより、早期腎症状態情報や診断条件を考慮した予測性または頑健性の高い候補多変量判別式を作成することができる。

[0118] ここで、判別率とは、全入力データの中で、本実施形態で評価した早期腎症の状態が正しい割合である。また、感度とは、入力データに記載された早期腎症の状態になっているものの中で、本実施形態で評価した早期腎症の状態が正しい割合である。また、特異度とは、入力データに記載された早期腎症の状態が正常になっているものの中で、本実施形態で評価した早期腎症の状態が正しい割合である。また、情報量基準とは、工程１で作成した候補多変量判別式のアミノ酸変数の数と、本実施形態で評価した早期腎症の状態および入力データに記載された早期腎症の状態の差異と、を足し合わせたもの

である。また、ＲＯＣ＿ＡＵＣ（受信者特性曲線の曲線下面積）は、２次元座標上に（ｘ，ｙ）＝（１－特異度，感度）をプロットして作成される曲線である受信者特性曲線（ＲＯＣ）の曲線下面積として定義され、ＲＯＣ＿ＡＵＣの値は完全な判別では１となり、この値が１に近いほど判別性が高いことを示す。また、予測性とは、候補多変量判別式の検証を繰り返すことで得られた判別率や感度、特異性を平均したものである。また、頑健性とは、候補多変量判別式の検証を繰り返すことで得られた判別率や感度、特異性の分散である。

[0119] 多変量判別式作成処理の説明に戻り、制御部は、所定の変数選択手法に基づいて候補多変量判別式の変数を選択することで、候補多変量判別式を作成する際に用いる早期腎症状態情報に含まれるアミノ酸濃度データの組み合わせを選択する（工程３）。アミノ酸変数の選択は、工程１で作成した各候補多変量判別式に対して行ってもよい。これにより、候補多変量判別式のアミノ酸変数を適切に選択することができる。そして、工程３で選択したアミノ酸濃度データを含む早期腎症状態情報を用いて再び工程１を実行する。

[0120] なお、工程３において、工程２での検証結果からステップワイズ法、ベストパス法、近傍探索法、遺伝的アルゴリズムのうち少なくとも１つに基づいて候補多変量判別式のアミノ酸変数を選択してもよい。

[0121] ここで、ベストパス法とは、候補多変量判別式に含まれるアミノ酸変数を１つずつ順次減らしていき、候補多変量判別式が与える評価指標を最適化することでアミノ酸変数を選択する方法である。

[0122] 多変量判別式作成処理の説明に戻り、制御部は、上述した工程１、工程２および工程３を繰り返し実行し、これにより蓄積した検証結果に基づいて、複数の候補多変量判別式の中から多変量判別式として採用する候補多変量判別式を選出することで、多変量判別式を作成する（工程４）。なお、候補多変量判別式の選出には、例えば、同じ式作成手法で作成した候補多変量判別式の中から最適なものを選出する場合と、すべての候補多変量判別式の中から最適なものを選出する場合とがある。

[0123] 以上、説明したように、多変量判別式作成処理では、早期腎症状態情報に基づいて、候補多変量判別式の作成、候補多変量判別式の検証および候補多変量判別式の変数の選択に関する処理を一連の流れで体系化（システム化）して実行することにより、早期腎症の状態評価に最適な多変量判別式を作成することができる。換言すると、多変量判別式作成処理では、アミノ酸濃度を多変量の統計解析に用い、最適でロバストな変数の組を選択するために変数選択法とクロスバリデーションとを組み合わせて、診断性能の高い多変量判別式を抽出する。多変量判別式としては、ロジスティック回帰、線形判別、サポートベクターマシン、マハラノビス距離法、重回帰分析、クラスター解析、Ｃｏｘ比例ハザードモデルなどを用いることができる。

[0124] ［２－２．第２実施形態の構成］

ここでは、第２実施形態にかかる早期腎症評価システム（以下では本システムと記す場合がある。）の構成について、図４から図２０を参照して説明する。なお、本システムはあくまでも一例であり、本発明はこれに限定されない。

[0125] まず、本システムの全体構成について図４および図５を参照して説明する。図４は本システムの全体構成の一例を示す図である。また、図５は本システムの全体構成の他の一例を示す図である。本システムは、図４に示すように、評価対象につき早期腎症の状態を評価する早期腎症評価装置１００と、アミノ酸の濃度値に関する評価対象のアミノ酸濃度データを提供するクライアント装置２００（本発明の情報通信端末装置に相当）とを、ネットワーク３００を介して通信可能に接続して構成されている。

[0126] なお、本システムは、図５に示すように、早期腎症評価装置１００やクライアント装置２００の他に、早期腎症評価装置１００で多変量判別式を作成する際に用いる早期腎症状態情報や、早期腎症の状態評価を行うために用いる多変量判別式などを格納したデータベース装置４００を、ネットワーク３００を介して通信可能に接続して構成されてもよい。これにより、ネットワーク３００を介して、早期腎症評価装置１００からクライアント装置２００

やデータベース装置４００へ、あるいはクライアント装置２００やデータベース装置４００から早期腎症評価装置１００へ、早期腎症の状態に関する情報などが提供される。ここで、早期腎症の状態に関する情報とは、ヒトを含む生物の早期腎症の状態に関する特定の項目について測定した値に関する情報である。また、早期腎症の状態に関する情報は、早期腎症評価装置１００やクライアント装置２００や他の装置（例えば各種の計測装置等）で生成され、主にデータベース装置４００に蓄積される。

[0127] つぎに、本システムの早期腎症評価装置１００の構成について図６から図１８を参照して説明する。図６は、本システムの早期腎症評価装置１００の構成の一例を示すブロック図であり、該構成のうち本発明に関係する部分のみを概念的に示している。

[0128] 早期腎症評価装置１００は、当該早期腎症評価装置を統括的に制御するＣＰＵ等の制御部１０２と、ルータ等の通信装置および専用線等の有線または無線の通信回線を介して当該早期腎症評価装置をネットワーク３００に通信可能に接続する通信インターフェース部１０４と、各種のデータベースやテーブルやファイルなどを格納する記憶部１０６と、入力装置１１２や出力装置１１４に接続する入出力インターフェース部１０８と、で構成されており、これら各部は任意の通信路を介して通信可能に接続されている。ここで、早期腎症評価装置１００は、各種の分析装置（例えばアミノ酸アナライザー等）と同一筐体で構成されてもよい。

[0129] 記憶部１０６は、ストレージ手段であり、例えば、ＲＡＭ・ＲＯＭ等のメモリ装置や、ハードディスクのような固定ディスク装置、フレキシブルディスク、光ディスク等を用いることができる。記憶部１０６には、ＯＳ（Ｏｐｅｒａｔｉｎｇ　Ｓｙｓｔｅｍ）と協働してＣＰＵに命令を与え各種処理を行うためのコンピュータプログラムが記録されている。記憶部１０６は、図示の如く、利用者情報ファイル１０６ａと、アミノ酸濃度データファイル１０６ｂと、早期腎症状態情報ファイル１０６ｃと、指定早期腎症状態情報ファイル１０６ｄと、多変量判別式関連情報データベース１０６ｅと、判別値

ファイル１０６ｆと、評価結果ファイル１０６ｇと、を格納する。

[0130] 利用者情報ファイル１０６ａは、利用者に関する利用者情報を格納する。図７は、利用者情報ファイル１０６ａに格納される情報の一例を示す図である。利用者情報ファイル１０６ａに格納される情報は、図７に示すように、利用者を一意に識別するための利用者ＩＤと、利用者が正当な者であるか否かの認証を行うための利用者パスワードと、利用者の氏名と、利用者の所属する所属先を一意に識別するための所属先ＩＤと、利用者の所属する所属先の部門を一意に識別するための部門ＩＤと、部門名と、利用者の電子メールアドレスと、を相互に関連付けて構成されている。

[0131] 図６に戻り、アミノ酸濃度データファイル１０６ｂは、アミノ酸の濃度値に関するアミノ酸濃度データを格納する。図８は、アミノ酸濃度データファイル１０６ｂに格納される情報の一例を示す図である。アミノ酸濃度データファイル１０６ｂに格納される情報は、図８に示すように、評価対象である個体（サンプル）を一意に識別するための個体番号と、アミノ酸濃度データとを相互に関連付けて構成されている。ここで、図８では、アミノ酸濃度データを数値、すなわち連続尺度として扱っているが、アミノ酸濃度データは名義尺度や順序尺度でもよい。なお、名義尺度や順序尺度の場合は、それぞれの状態に対して任意の数値を与えることで解析してもよい。また、アミノ酸濃度データに、他の生体情報（例えば、年齢、ＡＥＲ(尿中アルブミン排泄率)、ＢＮＰ(脳性ナトリウム利尿ペプチド)など）を組み合わせてもよい。

[0132] 図６に戻り、早期腎症状態情報ファイル１０６ｃは、多変量判別式を作成する際に用いる早期腎症状態情報を格納する。図９は、早期腎症状態情報ファイル１０６ｃに格納される情報の一例を示す図である。早期腎症状態情報ファイル１０６ｃに格納される情報は、図９に示すように、個体番号と、早期腎症の状態を表す指標（指標T_1、指標T_2、指標T_3・・・）に関する早期腎症状態指標データ（Ｔ）と、アミノ酸濃度データと、を相互に関連付けて構成されている。ここで、図９では、早期腎症状態指標データおよびアミノ酸濃度データを数値（すなわち連続尺度）として扱っているが、早期腎症状

態指標データおよびアミノ酸濃度データは名義尺度や順序尺度でもよい。なお、名義尺度や順序尺度の場合は、それぞれの状態に対して任意の数値を与えることで解析してもよい。また、早期腎症状態指標データは、早期腎症の状態のマーカーとなる既知の単一の状態指標であり、数値データを用いてもよい。

[0133] 図６に戻り、指定早期腎症状態情報ファイル１０６ｄは、後述する早期腎症状態情報指定部１０２ｇで指定した早期腎症状態情報を格納する。図１０は、指定早期腎症状態情報ファイル１０６ｄに格納される情報の一例を示す図である。指定早期腎症状態情報ファイル１０６ｄに格納される情報は、図１０に示すように、個体番号と、指定した早期腎症状態指標データと、指定したアミノ酸濃度データと、を相互に関連付けて構成されている。

[0134] 図６に戻り、多変量判別式関連情報データベース１０６ｅは、後述する候補多変量判別式作成部１０２ｈ１で作成した候補多変量判別式を格納する候補多変量判別式ファイル１０６ｅ１と、後述する候補多変量判別式検証部１０２ｈ２での検証結果を格納する検証結果ファイル１０６ｅ２と、後述する変数選択部１０２ｈ３で選択したアミノ酸濃度データの組み合わせを含む早期腎症状態情報を格納する選択早期腎症状態情報ファイル１０６ｅ３と、後述する多変量判別式作成部１０２ｈで作成した多変量判別式を格納する多変量判別式ファイル１０６ｅ４と、で構成される。

[0135] 候補多変量判別式ファイル１０６ｅ１は、後述する候補多変量判別式作成部１０２ｈ１で作成した候補多変量判別式を格納する。図１１は、候補多変量判別式ファイル１０６ｅ１に格納される情報の一例を示す図である。候補多変量判別式ファイル１０６ｅ１に格納される情報は、図１１に示すように、ランクと、候補多変量判別式（図１１では、F_1（Ｇｌｙ，Ｌｅｕ，Ｐｈｅ，・・・）やF_2（Ｇｌｙ，Ｌｅｕ，Ｐｈｅ，・・・）、F_3（Ｇｌｙ，Ｌｅｕ，Ｐｈｅ，・・・）など）とを相互に関連付けて構成されている。

[0136] 図６に戻り、検証結果ファイル１０６ｅ２は、後述する候補多変量判別式検証部１０２ｈ２での検証結果を格納する。図１２は、検証結果ファイル１

０６ｅ２に格納される情報の一例を示す図である。検証結果ファイル１０６ｅ２に格納される情報は、図１２に示すように、ランクと、候補多変量判別式（図１２では、F_k（Ｇｌｙ，Ｌｅｕ，Ｐｈｅ，・・・）やF_m（Ｇｌｙ，Ｌｅｕ，Ｐｈｅ，・・・）、F_l（Ｇｌｙ，Ｌｅｕ，Ｐｈｅ，・・・）など）と、各候補多変量判別式の検証結果（例えば各候補多変量判別式の評価値）と、を相互に関連付けて構成されている。

[0137] 図６に戻り、選択早期腎症状態情報ファイル１０６ｅ３は、後述する変数選択部１０２ｈ３で選択した変数に対応するアミノ酸濃度データの組み合わせを含む早期腎症状態情報を格納する。図１３は、選択早期腎症状態情報ファイル１０６ｅ３に格納される情報の一例を示す図である。選択早期腎症状態情報ファイル１０６ｅ３に格納される情報は、図１３に示すように、個体番号と、後述する早期腎症状態情報指定部１０２ｇで指定した早期腎症状態指標データと、後述する変数選択部１０２ｈ３で選択したアミノ酸濃度データと、を相互に関連付けて構成されている。

[0138] 図６に戻り、多変量判別式ファイル１０６ｅ４は、後述する多変量判別式作成部１０２ｈで作成した多変量判別式を格納する。図１４は、多変量判別式ファイル１０６ｅ４に格納される情報の一例を示す図である。多変量判別式ファイル１０６ｅ４に格納される情報は、図１４に示すように、ランクと、多変量判別式（図１４では、F_p（Ｐｈｅ，・・・）やF_p（Ｇｌｙ，Ｌｅｕ，Ｐｈｅ）、F_k（Ｇｌｙ，Ｌｅｕ，Ｐｈｅ，・・・）など）と、各式作成手法に対応する閾値と、各多変量判別式の検証結果（例えば各多変量判別式の評価値）と、を相互に関連付けて構成されている。

[0139] 図６に戻り、判別値ファイル１０６ｆは、後述する判別値算出部１０２ｉで算出した判別値を格納する。図１５は、判別値ファイル１０６ｆに格納される情報の一例を示す図である。判別値ファイル１０６ｆに格納される情報は、図１５に示すように、評価対象である個体（サンプル）を一意に識別するための個体番号と、ランク（多変量判別式を一意に識別するための番号）と、判別値と、を相互に関連付けて構成されている。

[0140] 図６に戻り、評価結果ファイル１０６ｇは、後述する判別値基準評価部１０２ｊでの評価結果（具体的には、後述する判別値基準判別部１０２ｊ１での判別結果・分類結果）を格納する。図１６は、評価結果ファイル１０６ｇに格納される情報の一例を示す図である。評価結果ファイル１０６ｇに格納される情報は、評価対象である個体（サンプル）を一意に識別するための個体番号と、予め取得した評価対象のアミノ酸濃度データと、多変量判別式で算出した判別値と、早期腎症の状態評価に関する評価結果と、を相互に関連付けて構成されている。

[0141] 図６に戻り、記憶部１０６には、上述した情報以外にその他情報として、Ｗｅｂサイトをクライアント装置２００に提供するための各種のＷｅｂデータや、ＣＧＩプログラム等が記録されている。Ｗｅｂデータとしては後述する各種のＷｅｂページを表示するためのデータ等があり、これらデータは例えばＨＴＭＬやＸＭＬで記述されたテキストファイルとして形成されている。また、Ｗｅｂデータを作成するための部品用のファイルや作業用のファイルやその他一時的なファイル等も記憶部１０６に記憶される。記憶部１０６には、必要に応じて、クライアント装置２００に送信するための音声をＷＡＶＥ形式やＡＩＦＦ形式の如き音声ファイルで格納したり、静止画や動画をＪＰＥＧ形式やＭＰＥＧ２形式の如き画像ファイルで格納したりすることができる。

[0142] 通信インターフェース部１０４は、早期腎症評価装置１００とネットワーク３００（またはルータ等の通信装置）との間における通信を媒介する。すなわち、通信インターフェース部１０４は、他の端末と通信回線を介してデータを通信する機能を有する。

[0143] 入出力インターフェース部１０８は、入力装置１１２や出力装置１１４に接続する。ここで、出力装置１１４には、モニタ（家庭用テレビを含む）の他、スピーカやプリンタを用いることができる（なお、以下では、出力装置１１４をモニタ１１４として記載する場合がある。）。入力装置１１２には、キーボードやマウスやマイクの他、マウスと協働してポインティングデバ

イス機能を実現するモニタを用いることができる。

[0144] 制御部１０２は、ＯＳ（Ｏｐｅｒａｔｉｎｇ Ｓｙｓｔｅｍ）等の制御プログラム・各種の処理手順等を規定したプログラム・所要データなどを格納するための内部メモリを有し、これらのプログラムに基づいて種々の情報処理を実行する。制御部１０２は、図示の如く、大別して、要求解釈部１０２ａと閲覧処理部１０２ｂと認証処理部１０２ｃと電子メール生成部１０２ｄとＷｅｂページ生成部１０２ｅと受信部１０２ｆと早期腎症状態情報指定部１０２ｇと多変量判別式作成部１０２ｈと判別値算出部１０２ｉと判別値基準評価部１０２ｊと結果出力部１０２ｋと送信部１０２ｍとを備えている。制御部１０２は、データベース装置４００から送信された早期腎症状態情報やクライアント装置２００から送信されたアミノ酸濃度データに対して、欠損値のあるデータの除去・外れ値の多いデータの除去・欠損値のあるデータの多い変数の除去などのデータ処理も行う。

[0145] 要求解釈部１０２ａは、クライアント装置２００やデータベース装置４００からの要求内容を解釈し、その解釈結果に応じて制御部１０２の各部に処理を受け渡す。閲覧処理部１０２ｂは、クライアント装置２００からの各種画面の閲覧要求を受けて、これら画面のＷｅｂデータの生成や送信を行なう。認証処理部１０２ｃは、クライアント装置２００やデータベース装置４００からの認証要求を受けて、認証判断を行う。電子メール生成部１０２ｄは、各種の情報を含んだ電子メールを生成する。Ｗｅｂページ生成部１０２ｅは、利用者がクライアント装置２００で閲覧するＷｅｂページを生成する。

[0146] 受信部１０２ｆは、クライアント装置２００やデータベース装置４００から送信された情報（具体的には、アミノ酸濃度データや早期腎症状態情報、多変量判別式など）を、ネットワーク３００を介して受信する。早期腎症状態情報指定部１０２ｇは、多変量判別式を作成するにあたり、対象とする早期腎症状態指標データおよびアミノ酸濃度データを指定する。

[0147] 多変量判別式作成部１０２ｈは、受信部１０２ｆで受信した早期腎症状態情報や早期腎症状態情報指定部１０２ｇで指定した早期腎症状態情報に基づ

いて多変量判別式を作成する。具体的には、多変量判別式作成部１０２ｈは、早期腎症状態情報から、候補多変量判別式作成部１０２ｈ１、候補多変量判別式検証部１０２ｈ２および変数選択部１０２ｈ３を繰り返し実行させることにより蓄積された検証結果に基づいて、複数の候補多変量判別式の中から多変量判別式として採用する候補多変量判別式を選出することで、多変量判別式を作成する。

[0148] なお、多変量判別式が予め記憶部１０６の所定の記憶領域に格納されている場合には、多変量判別式作成部１０２ｈは、記憶部１０６から所望の多変量判別式を選択することで、多変量判別式を作成してもよい。また、多変量判別式作成部１０２ｈは、多変量判別式を予め格納した他のコンピュータ装置（例えばデータベース装置４００）から所望の多変量判別式を選択しダウンロードすることで、多変量判別式を作成してもよい。

[0149] ここで、多変量判別式作成部１０２ｈの構成について図１７を参照して説明する。図１７は、多変量判別式作成部１０２ｈの構成を示すブロック図であり、該構成のうち本発明に関係する部分のみを概念的に示している。多変量判別式作成部１０２ｈは、候補多変量判別式作成部１０２ｈ１と、候補多変量判別式検証部１０２ｈ２と、変数選択部１０２ｈ３と、をさらに備えている。候補多変量判別式作成部１０２ｈ１は、早期腎症状態情報から所定の式作成手法に基づいて多変量判別式の候補である候補多変量判別式を作成する。なお、候補多変量判別式作成部１０２ｈ１は、早期腎症状態情報から、複数の異なる式作成手法を併用して複数の候補多変量判別式を作成してもよい。候補多変量判別式検証部１０２ｈ２は、候補多変量判別式作成部１０２ｈ１で作成した候補多変量判別式を所定の検証手法に基づいて検証する。なお、候補多変量判別式検証部１０２ｈ２は、ブートストラップ法、ホールドアウト法、Ｎ－フォールド法、リーブワンアウト法のうち少なくとも１つに基づいて候補多変量判別式の判別率、感度、特異度、情報量基準、ＲＯＣ＿ＡＵＣ（受信者特性曲線の曲線下面積）のうち少なくとも１つに関して検証してもよい。変数選択部１０２ｈ３は、所定の変数選択手法に基づいて候補

多変量判別式の変数を選択することで、候補多変量判別式を作成する際に用いる早期腎症状態情報に含まれるアミノ酸濃度データの組み合わせを選択する。なお、変数選択部１０２ｈ３は、検証結果からステップワイズ法、ベストパス法、近傍探索法、遺伝的アルゴリズムのうち少なくとも１つに基づいて候補多変量判別式の変数を選択してもよい。

[0150] 図６に戻り、判別値算出部１０２ｉは、多変量判別式作成部１０２ｈで作成した多変量判別式、および受信部１０２ｆで受信した評価対象のアミノ酸濃度データに基づいて、当該多変量判別式の値である判別値を算出する。なお、多変量判別式は、ロジスティック回帰式、分数式、線形判別式、重回帰式、サポートベクターマシンで作成された式、マハラノビス距離法で作成された式、正準判別分析で作成された式、決定木で作成された式、Ｃｏｘ比例ハザードモデル式のいずれか１つでもよい。

[0151] 判別値算出部１０２ｉは、アミノ酸濃度データに含まれるＥｔＯＨＮＨ２，Ｇｌｙ，Ｓａｒ，Ａｌａ，β－ＡＩＢＡ，α－ＡＢＡ，Ｓｅｒ，Ｐｒｏ，Ｖａｌ，Ｔｈｒ，Ｔａｕ，Ｈｙｐｒｏ，Ｉｌｅ，Ｌｅｕ，Ａｓｎ，Ｏｒｎ，Ａｓｐ，Ｇｌｎ，Ｌｙｓ，Ｇｌｕ，Ｍｅｔ，Ｈｉｓ，α－ＡＡＡ，Ｐｈｅ，３－ＭｅＨｉｓ，Ａｒｇ，Ｃｉｔ，Ｔｙｒ，Ｔｒｐ，Ｃｙｓのうち少なくとも１つの濃度値、およびＥｔＯＨＮＨ２，Ｇｌｙ，Ｓａｒ，Ａｌａ，β－ＡＩＢＡ，α－ＡＢＡ，Ｓｅｒ，Ｐｒｏ，Ｖａｌ，Ｔｈｒ，Ｔａｕ，Ｈｙｐｒｏ，Ｉｌｅ，Ｌｅｕ，Ａｓｎ，Ｏｒｎ，Ａｓｐ，Ｇｌｎ，Ｌｙｓ，Ｇｌｕ，Ｍｅｔ，Ｈｉｓ，α－ＡＡＡ，Ｐｈｅ，３－ＭｅＨｉｓ，Ａｒｇ，Ｃｉｔ，Ｔｙｒ，Ｔｒｐ，Ｃｙｓのうち少なくとも１つを変数として含む多変量判別式に基づいて、判別値を算出してもよい。

[0152] 具体的には、判別値基準評価部１０２ｊで評価対象が早期腎症を有するかを評価する（例えば、後述する判別値基準判別部１０２ｊ１で評価対象が早期腎症または非早期腎症であるか否かを判別したり、また、早期腎症に罹患している可能性の程度を考慮して定義された複数の区分（ランク）のうちのどれか１つに評価対象を分類したりする）場合には、判別値算出部１０２ｉ

は、アミノ酸濃度データに含まれるＳａｒ，Ａｌａ，β－ＡＩＢＡ，α－ＡＢＡ，Ｓｅｒ，Ｐｒｏ，Ｖａｌ，Ｈｙｐｒｏ，Ｉｌｅ，Ｌｅｕ，Ｏｒｎ，Ｌｙｓ，Ｇｌｕ，Ｍｅｔ，Ｈｉｓ，α－ＡＡＡ，Ｐｈｅ，３－ＭｅＨｉｓ，Ａｒｇ，Ｃｉｔ，Ｔｒｐ，Ｃｙｓのうち少なくとも１つの濃度値、およびＳａｒ，Ａｌａ，β－ＡＩＢＡ，α－ＡＢＡ，Ｓｅｒ，Ｐｒｏ，Ｖａｌ，Ｈｙｐｒｏ，Ｉｌｅ，Ｌｅｕ，Ｏｒｎ，Ｌｙｓ，Ｇｌｕ，Ｍｅｔ，Ｈｉｓ，α－ＡＡＡ，Ｐｈｅ，３－ＭｅＨｉｓ，Ａｒｇ，Ｃｉｔ，Ｔｒｐ，Ｃｙｓのうち少なくとも１つを変数として含む多変量判別式に基づいて、判別値を算出してもよい。なお、早期腎症の現在の発症に関する評価で用いられる多変量判別式は、Ａｌａ，Ｏｒｎ，Ｇｌｕ，３－ＭｅＨｉｓ，Ｔｒｐ，Ｃｙｓを変数として含むロジスティック回帰式、Ａｌａ，Ｓｅｒ，Ｌｅｕ，Ｌｙｓ，Ｃｉｔ，Ｔｒｐを変数として含むロジスティック回帰式、Ａｌａ，Ｇｌｕ，３－ＭｅＨｉｓ，Ｃｉｔ，Ｔｒｐ，Ｃｙｓを変数として含む線形判別式、またはＡｌａ，Ｓｅｒ，Ｉｌｅ，Ｌｙｓ，Ｐｈｅ，Ｔｒｐを変数として含む線形判別式でもよい。

[0153] なお、判別値基準評価部１０２ｊで、評価対象が早期腎症を有するかを評価する場合において、評価対象が将来、心血管イベントを発症するかをさらに評価するとき（例えば、判別値基準判別部１０２ｊ１で、評価対象が早期腎症または非早期腎症であるか否かを判別したり、また、早期腎症に罹患している可能性の程度を考慮して定義された複数の区分（ランク）のうちのどれか１つに評価対象を分類したりする場合において、評価対象が将来、心血管イベントを発症するか否かをさらに判別したり、また、将来、心血管イベントを発症する可能性の程度を考慮して定義された複数の区分（ランク）のうちのどれか１つに評価対象をさらに分類したりするとき）には、判別値算出部１０２ｉは、アミノ酸濃度データに含まれるβ－ＡＩＢＡ，３－ＭｅＨｉｓ，Ｃｉｔ，Ｔｒｐ，Ｃｙｓ，Ｇｌｕ，Ｈｙｐｒｏ，Ｓａｒ，Ｌｅｕ，Ｈｉｓ，Ａｒｇ，Ｌｙｓ，Ｓｅｒ，Ｐｈｅ，Ａｌａ，Ｏｒｎ，Ｐｒｏ，Ｉｌｅのうち少なくとも１つの濃度値、およびβ－ＡＩＢＡ，３－ＭｅＨｉｓ，Ｃ

ｉｔ，Ｔｒｐ，Ｃｙｓ，Ｇｌｕ，Ｈｙｐｒｏ，Ｓａｒ，Ｌｅｕ，Ｈｉｓ，Ａｒｇ，Ｌｙｓ，Ｓｅｒ，Ｐｈｅ，Ａｌａ，Ｏｒｎ，Ｐｒｏ，Ｉｌｅのうち少なくとも１つを変数として含む多変量判別式に基づいて、判別値を算出してもよい。なお、心血管イベントの将来の発症に関する評価で用いられる多変量判別式は、Ａｌａ，Ｏｒｎ，Ｇｌｕ，３－ＭｅＨｉｓ，Ｔｒｐ，Ｃｙｓを変数として含むロジスティック回帰式、Ｈｙｐｒｏ，Ｇｌｕ，Ｈｉｓ，３－ＭｅＨｉｓ，Ａｒｇ，Ｔｒｐを変数として含むロジスティック回帰式、Ａｌａ，Ｓｅｒ，Ｌｅｕ，Ｌｙｓ，Ｃｉｔ，Ｔｒｐを変数として含むロジスティック回帰式、Ｓｅｒ，Ｏｒｎ，Ｈｉｓ，Ａｒｇ，Ｔｒｐを変数として含むロジスティック回帰式、Ａｌａ，Ｇｌｕ，３－ＭｅＨｉｓ，Ｃｉｔ，Ｔｒｐ，Ｃｙｓを変数として含む線形判別式、Ｓａｒ，Ｌｅｕ，Ｇｌｕ，３－ＭｅＨｉｓ，Ａｒｇ，Ｔｒｐを変数として含む線形判別式、Ａｌａ，Ｓｅｒ，Ｉｌｅ，Ｌｙｓ，Ｐｈｅ，Ｔｒｐを変数として含む線形判別式、Ｓｅｒ，Ｌｙｓ，Ｈｉｓ，Ｃｉｔ，Ｔｒｐを変数として含む線形判別式、Ｈｙｐｒｏ，Ｇｌｕ，３－ＭｅＨｉｓ，Ｔｒｐを変数として含むＣｏｘ比例ハザードモデル式、またはＳｅｒ，Ｌｙｓ，Ｈｉｓ，Ｃｉｔ，Ｔｒｐを変数として含むＣｏｘ比例ハザードモデル式でもよい。

[0154] また、具体的には、判別値基準評価部１０２ｊで評価対象が将来、早期腎症を発症するかを評価する（例えば、判別値基準判別部１０２ｊ１で、評価対象が将来、早期腎症を発症するか否かを判別したり、また、将来、早期腎症を発症する可能性の程度を考慮して定義された複数の区分（ランク）のうちのどれか１つに評価対象を分類したりする）場合には、判別値算出部１０２ｉは、アミノ酸濃度データに含まれるＥｔＯＨＮＨ２，Ｓａｒ，β－ＡＩＢＡ，α－ＡＢＡ，Ｓｅｒ，Ｖａｌ，Ｔｈｒ，Ｔａｕ，Ｈｙｐｒｏ，Ｉｌｅ，Ａｓｎ，Ｏｒｎ，Ａｓｐ，Ｇｌｎ，α－ＡＡＡ，Ａｒｇ，Ｔｙｒ，Ｃｙｓ，Ｇｌｙ，Ａｌａ，Ｐｒｏ，Ｌｅｕ，Ｌｙｓ，Ｍｅｔ，Ｈｉｓ，Ｐｈｅのうち少なくとも１つの濃度値、およびＥｔＯＨＮＨ２，Ｓａｒ，β－ＡＩＢＡ，α－ＡＢＡ，Ｓｅｒ，Ｖａｌ，Ｔｈｒ，Ｔａｕ，Ｈｙｐｒｏ，Ｉｌｅ，Ａ

ｓｎ，Ｏｒｎ，Ａｓｐ，Ｇｌｎ，α－ＡＡＡ，Ａｒｇ，Ｔｙｒ，Ｃｙｓ，Ｇｌｙ，Ａｌａ，Ｐｒｏ，Ｌｅｕ，Ｌｙｓ，Ｍｅｔ，Ｈｉｓ，Ｐｈｅのうち少なくとも１つを変数として含む多変量判別式に基づいて、判別値を算出してもよい。なお、早期腎症の将来の発症に関する評価で用いられる多変量判別式は、β－ＡＩＢＡ，Ｖａｌ，Ｔａｕ，Ｉｌｅ，α－ＡＡＡ，Ａｒｇを変数として含むロジスティック回帰式、Ｓｅｒ，Ｖａｌ，Ｍｅｔ，Ａｒｇ，Ｔｙｒを変数として含むロジスティック回帰式、Ｖａｌ，Ｔａｕ，Ｉｌｅ，α－ＡＡＡ，Ｐｈｅ，Ａｒｇを変数として含む線形判別式、またはＳｅｒ，Ｐｒｏ，Ｖａｌ，Ｉｌｅ，Ｌｅｕ，Ａｒｇを変数として含む線形判別式でもよい。

[0155] 判別値基準評価部１０２ｊは、判別値算出部１０２ｉで算出した判別値に基づいて、評価対象につき早期腎症の状態を評価する。判別値基準評価部１０２ｊは、例えば、評価対象が早期腎症を有するかを評価したり、評価対象が将来、早期腎症を発症するかを評価したり、評価対象が将来、心血管イベントを発症するかを評価したりする。判別値基準評価部１０２ｊは、判別値基準判別部１０２ｊ１をさらに備えている。ここで、判別値基準評価部１０２ｊの構成について図１８を参照して説明する。図１８は、判別値基準評価部１０２ｊの構成を示すブロック図であり、該構成のうち本発明に関係する部分のみを概念的に示している。

[0156] 判別値基準判別部１０２ｊ１は、判別値に基づいて、（１）評価対象が早期腎症または非早期腎症であるか否かを判別したり、（２）早期腎症に罹患している可能性の程度を考慮して定義された複数の区分（ランク）のうちのどれか１つに評価対象を分類したり、（３）評価対象が将来、心血管イベントを発症するか否かを判別したり、（４）将来、心血管イベントを発症する可能性の程度を考慮して定義された複数の区分（ランク）のうちのどれか１つに評価対象を分類したり、（５）評価対象が将来、早期腎症を発症するか否かを判別したり、（６）将来、早期腎症を発症する可能性の程度を考慮して定義された複数の区分（ランク）のうちのどれか１つに評価対象を分類し

たりする。具体的には、判別値基準判別部１０２ｊ１は、判別値と予め設定された閾値（カットオフ値）とを比較することで、（１）評価対象が早期腎症または非早期腎症であるか否かを判別したり、（２）早期腎症に罹患している可能性の程度を考慮して定義された複数の区分（ランク）のうちのどれか１つに評価対象を分類したり、（３）評価対象が将来、心血管イベントを発症するか否かを判別したり、（４）将来、心血管イベントを発症する可能性の程度を考慮して定義された複数の区分（ランク）のうちのどれか１つに評価対象を分類したり、（５）評価対象が将来、早期腎症を発症するか否かを判別したり、（６）将来、早期腎症を発症する可能性の程度を考慮して定義された複数の区分（ランク）のうちのどれか１つに評価対象を分類したりする。

[0157] 図６に戻り、結果出力部１０２ｋは、制御部１０２の各処理部での処理結果（判別値基準評価部１０２ｊでの評価結果（具体的には判別値基準判別部１０２ｊ１での判別結果または分類結果）を含む）等を出力装置１１４に出力する。

[0158] 送信部１０２ｍは、評価対象のアミノ酸濃度データの送信元のクライアント装置２００に対して、例えば、判別値、評価結果（例えば判別結果、分類結果など）などを送信したり、データベース装置４００に対して、例えば、早期腎症評価装置１００で作成した多変量判別式や評価結果（例えば、判別結果、分類結果など）などを送信したりする。

[0159] つぎに、本システムのクライアント装置２００の構成について図１９を参照して説明する。図１９は、本システムのクライアント装置２００の構成の一例を示すブロック図であり、該構成のうち本発明に関係する部分のみを概念的に示している。

[0160] クライアント装置２００は、制御部２１０とＲＯＭ２２０とＨＤ２３０とＲＡＭ２４０と入力装置２５０と出力装置２６０と入出力ＩＦ２７０と通信ＩＦ２８０とで構成されており、これら各部は任意の通信路を介して通信可能に接続されている。

[0161] 制御部２１０は、Ｗｅｂブラウザ２１１、電子メーラ２１２、受信部２１３、送信部２１４を備えている。Ｗｅｂブラウザ２１１は、Ｗｅｂデータを解釈し、解釈したＷｅｂデータを後述するモニタ２６１に表示するブラウズ処理を行う。なお、Ｗｅｂブラウザ２１１には、ストリーム映像の受信・表示・フィードバック等を行う機能を備えたストリームプレイヤ等の各種のソフトウェアをプラグインしてもよい。電子メーラ２１２は、所定の通信規約（例えば、ＳＭＴＰ（Ｓｉｍｐｌｅ Ｍａｉｌ Ｔｒａｎｓｆｅｒ Ｐｒｏｔｏｃｏｌ）やＰＯＰ３（Ｐｏｓｔ Ｏｆｆｉｃｅ Ｐｒｏｔｏｃｏｌ ｖｅｒｓｉｏｎ ３）等）に従って電子メールの送受信を行う。受信部２１３（本発明の結果取得手段の一例に相当）は、通信ＩＦ２８０を介して、早期腎症評価装置１００から送信された、判別値、評価結果（例えば判別結果、分類結果など）などの各種情報を受信する。要するに、クライアント装置は、判別値や評価結果などの各種情報を取得する機能を有する。送信部２１４は、通信ＩＦ２８０を介して、評価対象のアミノ酸濃度データなどの各種情報を早期腎症評価装置１００へ送信する。

[0162] 入力装置２５０はキーボードやマウスやマイク等である。なお、後述するモニタ２６１もマウスと協働してポインティングデバイス機能を実現する。出力装置２６０は、通信ＩＦ２８０を介して受信した情報を出力する出力手段であり、モニタ（家庭用テレビを含む）２６１およびプリンタ２６２を含む。この他、出力装置２６０にスピーカ等を設けてもよい。入出力ＩＦ２７０は入力装置２５０や出力装置２６０に接続する。

[0163] 通信ＩＦ２８０は、クライアント装置２００とネットワーク３００（またはルータ等の通信装置）とを通信可能に接続する。換言すると、クライアント装置２００は、モデムやＴＡやルータなどの通信装置および電話回線を介して、または専用線を介してネットワーク３００に接続される。これにより、クライアント装置２００は、所定の通信規約に従って早期腎症評価装置１００にアクセスすることができる。

[0164] ここで、プリンタ・モニタ・イメージスキャナ等の周辺装置を必要に応じ

て接続した情報処理装置（例えば、既知のパーソナルコンピュータ・ワークステーション・家庭用ゲーム装置・インターネットＴＶ・ＰＨＳ端末・携帯端末・移動体通信端末・ＰＤＡ等の情報処理端末など）に、Ｗｅｂデータのブラウジング機能や電子メール機能を実現させるソフトウェア（プログラム、データ等を含む）を実装することにより、クライアント装置２００を実現してもよい。

[0165] また、クライアント装置２００の制御部２１０は、制御部２１０で行う処理の全部または任意の一部を、ＣＰＵおよび当該ＣＰＵにて解釈して実行するプログラムで実現してもよい。ＲＯＭ２２０またはＨＤ２３０には、ＯＳ（Ｏｐｅｒａｔｉｎｇ　Ｓｙｓｔｅｍ）と協働してＣＰＵに命令を与え、各種処理を行うためのコンピュータプログラムが記録されている。当該コンピュータプログラムは、ＲＡＭ２４０にロードされることで実行され、ＣＰＵと協働して制御部２１０を構成する。また、当該コンピュータプログラムは、クライアント装置２００と任意のネットワークを介して接続されるアプリケーションプログラムサーバに記録されてもよく、クライアント装置２００は、必要に応じてその全部または一部をダウンロードしてもよい。また、制御部２１０で行う処理の全部または任意の一部を、ワイヤードロジック等によるハードウェアで実現してもよい。

[0166] つぎに、本システムのネットワーク３００について図４、図５を参照して説明する。ネットワーク３００は、早期腎症評価装置１００とクライアント装置２００とデータベース装置４００とを相互に通信可能に接続する機能を有し、例えばインターネットやイントラネットやＬＡＮ（有線／無線の双方を含む）等である。なお、ネットワーク３００は、ＶＡＮや、パソコン通信網や、公衆電話網（アナログ／デジタルの双方を含む）や、専用回線網（アナログ／デジタルの双方を含む）や、ＣＡＴＶ網や、携帯回線交換網または携帯パケット交換網（ＩＭＴ２０００方式、ＧＳＭ（登録商標）方式またはＰＤＣ／ＰＤＣ－Ｐ方式等を含む）や、無線呼出網や、Ｂｌｕｅｔｏｏｔｈ（登録商標）等の局所無線網や、ＰＨＳ網や、衛星通信網（ＣＳ、ＢＳまた

はＩＳＤＢ等を含む）等でもよい。

[0167] つぎに、本システムのデータベース装置４００の構成について図２０を参照して説明する。図２０は、本システムのデータベース装置４００の構成の一例を示すブロック図であり、該構成のうち本発明に関係する部分のみを概念的に示している。

[0168] データベース装置４００は、早期腎症評価装置１００または当該データベース装置で多変量判別式を作成する際に用いる早期腎症状態情報や、早期腎症評価装置１００で作成した多変量判別式、早期腎症評価装置１００での評価結果などを格納する機能を有する。図２０に示すように、データベース装置４００は、当該データベース装置を統括的に制御するＣＰＵ等の制御部４０２と、ルータ等の通信装置および専用線等の有線または無線の通信回路を介して当該データベース装置をネットワーク３００に通信可能に接続する通信インターフェース部４０４と、各種のデータベースやテーブルやファイル（例えばＷｅｂページ用ファイル）などを格納する記憶部４０６と、入力装置４１２や出力装置４１４に接続する入出力インターフェース部４０８と、で構成されており、これら各部は任意の通信路を介して通信可能に接続されている。

[0169] 記憶部４０６は、ストレージ手段であり、例えば、ＲＡＭ・ＲＯＭ等のメモリ装置や、ハードディスクのような固定ディスク装置や、フレキシブルディスクや、光ディスク等を用いることができる。記憶部４０６には、各種処理に用いる各種プログラム等を格納する。通信インターフェース部４０４は、データベース装置４００とネットワーク３００（またはルータ等の通信装置）との間における通信を媒介する。すなわち、通信インターフェース部４０４は、他の端末と通信回線を介してデータを通信する機能を有する。入出力インターフェース部４０８は、入力装置４１２や出力装置４１４に接続する。ここで、出力装置４１４には、モニタ（家庭用テレビを含む）の他、スピーカやプリンタを用いることができる（なお、以下で、出力装置４１４をモニタ４１４として記載する場合がある。）。また、入力装置４１２には、

キーボードやマウスやマイクの他、マウスと協働してポインティングデバイス機能を実現するモニタを用いることができる。

[0170] 制御部４０２は、ＯＳ（Ｏｐｅｒａｔｉｎｇ　Ｓｙｓｔｅｍ）等の制御プログラム・各種の処理手順等を規定したプログラム・所要データなどを格納するための内部メモリを有し、これらのプログラムに基づいて種々の情報処理を実行する。制御部４０２は、図示の如く、大別して、要求解釈部４０２ａと閲覧処理部４０２ｂと認証処理部４０２ｃと電子メール生成部４０２ｄとＷｅｂページ生成部４０２ｅと送信部４０２ｆとを備えている。

[0171] 要求解釈部４０２ａは、早期腎症評価装置１００からの要求内容を解釈し、その解釈結果に応じて制御部４０２の各部に処理を受け渡す。閲覧処理部４０２ｂは、早期腎症評価装置１００からの各種画面の閲覧要求を受けて、これら画面のＷｅｂデータの生成や送信を行う。認証処理部４０２ｃは、早期腎症評価装置１００からの認証要求を受けて、認証判断を行う。電子メール生成部４０２ｄは、各種の情報を含んだ電子メールを生成する。Ｗｅｂページ生成部４０２ｅは、利用者がクライアント装置２００で閲覧するＷｅｂページを生成する。送信部４０２ｆは、早期腎症状態情報や多変量判別式などの各種情報を、早期腎症評価装置１００へ送信する。

[0172] ［２－３．第２実施形態の具体例］

ここでは、第２実施形態の具体例について図２１を参照して説明する。図２１は、第２実施形態にかかる早期腎症評価サービス処理の一例を示すフローチャートである。

[0173] なお、本処理で用いるアミノ酸濃度データは、例えば動物やヒト（例えば糖尿病患者など）などの個体から予め採取した血液（例えば血漿、血清などを含む）を、以下の（Ａ）または（Ｂ）などの測定方法で専門業者が分析又は独自に分析して得たアミノ酸の濃度値に関するものである。ここで、アミノ酸濃度の単位は、例えばモル濃度や重量濃度、これらの濃度に任意の定数を加減乗除することで得られるものでもよい。

（Ａ）採取した血液サンプルを遠心することにより血液から血清を分離した

。全ての血清サンプルは、アミノ酸濃度の測定時まで－８０℃で凍結保存した。アミノ酸濃度測定時には、アセトニトリルを添加し除蛋白処理を行った後、標識試薬（３－アミノピリジル－Ｎ－ヒドロキシスクシンイミジルカルバメート）を用いてプレカラム誘導体化を行い、そして、液体クロマトグラフ質量分析計（ＬＣ／ＭＳ／ＭＳ）によりアミノ酸濃度を分析した（国際公開第２００３／０６９３２８号、国際公開第２００５／１１６６２９号を参照）。

（Ｂ）採取した血液サンプルを遠心することにより血液から血清を分離した。全ての血清サンプルは、アミノ酸濃度の測定時まで－８０℃で凍結保存した。アミノ酸濃度測定時には、スルホサリチル酸を添加し除蛋白処理を行った後、ニンヒドリン試薬を用いたポストカラム誘導体化法を原理としたアミノ酸分析計によりアミノ酸濃度を分析した。

[0174] まず、Ｗｅｂブラウザ２１１を表示した画面上で利用者が入力装置２５０を介して早期腎症評価装置１００が提供するＷｅｂサイトのアドレス（ＵＲＬなど）を指定すると、クライアント装置２００は早期腎症評価装置１００へアクセスする。具体的には、利用者がクライアント装置２００のＷｅｂブラウザ２１１の画面更新を指示すると、Ｗｅｂブラウザ２１１は、早期腎症評価装置１００が提供するＷｅｂサイトのアドレスを所定の通信規約で早期腎症評価装置１００へ送信することで、アミノ酸濃度データ送信画面に対応するＷｅｂページの送信要求を、当該アドレスに基づくルーティングで早期腎症評価装置１００へ行う。

[0175] つぎに、早期腎症評価装置１００は、要求解釈部１０２ａで、クライアント装置２００からの送信を受け、当該送信の内容を解析し、解析結果に応じて制御部１０２の各部に処理を移す。具体的には、送信の内容がアミノ酸濃度データ送信画面に対応するＷｅｂページの送信要求であった場合、早期腎症評価装置１００は、主として閲覧処理部１０２ｂで、記憶部１０６の所定の記憶領域に格納されている当該Ｗｅｂページを表示するためのＷｅｂデータを取得し、取得したＷｅｂデータをクライアント装置２００へ送信する。

より具体的には、利用者からアミノ酸濃度データ送信画面に対応するＷｅｂページの送信要求があった場合、早期腎症評価装置１００は、まず、制御部１０２で、利用者ＩＤや利用者パスワードの入力を利用者に対して求める。そして、利用者ＩＤやパスワードが入力されると、早期腎症評価装置１００は、認証処理部１０２ｃで、入力された利用者ＩＤやパスワードと利用者情報ファイル１０６ａに格納されている利用者ＩＤや利用者パスワードとの認証判断を行う。そして、早期腎症評価装置１００は、認証可の場合にのみ、閲覧処理部１０２ｂで、アミノ酸濃度データ送信画面に対応するＷｅｂページを表示するためのＷｅｂデータをクライアント装置２００へ送信する。なお、クライアント装置２００の特定は、クライアント装置２００から送信要求と共に送信されたＩＰアドレスで行う。

[0176] つぎに、クライアント装置２００は、早期腎症評価装置１００から送信されたＷｅｂデータ（アミノ酸濃度データ送信画面に対応するＷｅｂページを表示するためのもの）を受信部２１３で受信し、受信したＷｅｂデータをＷｅｂブラウザ２１１で解釈し、モニタ２６１にアミノ酸濃度データ送信画面を表示する。

[0177] つぎに、モニタ２６１に表示されたアミノ酸濃度データ送信画面に対し利用者が入力装置２５０を介して個体のアミノ酸濃度データなどを入力・選択すると、クライアント装置２００は、送信部２１４で、入力情報や選択事項を特定するための識別子を早期腎症評価装置１００へ送信することで、個体のアミノ酸濃度データを早期腎症評価装置１００へ送信する（ステップＳＡ２１）。なお、ステップＳＡ２１におけるアミノ酸濃度データの送信は、ＦＴＰ等の既存のファイル転送技術等により実現してもよい。

[0178] つぎに、早期腎症評価装置１００は、要求解釈部１０２ａで、クライアント装置２００から送信された識別子を解釈することによりクライアント装置２００の要求内容を解釈し、早期腎症の状態評価用の多変量判別式（具体的には、早期腎症の現在または将来の発症に関する２群判別用の多変量判別式または心血管イベントの将来の発症に関する２群判別用の多変量判別式）の

送信要求をデータベース装置４００へ行う。

[0179] つぎに、データベース装置４００は、要求解釈部４０２ａで、早期腎症評価装置１００からの送信要求を解釈し、記憶部４０６の所定の記憶領域に格納した多変量判別式（例えばアップデートされた最新のもの）を早期腎症評価装置１００へ送信する（ステップＳＡ２２）。

[0180] 具体的には、ステップＳＡ２６にて、個体が現在、早期腎症であるか否か（個体が現在、早期腎症を発症しているか否か）を判別する場合には、ステップＳＡ２２では、Ｓａｒ，Ａｌａ，β－ＡＩＢＡ，α－ＡＢＡ，Ｓｅｒ，Ｐｒｏ，Ｖａｌ，Ｈｙｐｒｏ，Ｉｌｅ，Ｌｅｕ，Ｏｒｎ，Ｌｙｓ，Ｇｌｕ，Ｍｅｔ，Ｈｉｓ，α－ＡＡＡ，Ｐｈｅ，３－ＭｅＨｉｓ，Ａｒｇ，Ｃｉｔ，Ｔｒｐ，Ｃｙｓのうち少なくとも１つを変数として含む多変量判別式を早期腎症評価装置１００へ送信する。なお、ステップＳＡ２６にて、個体が現在、早期腎症であるか否か（個体が現在、早期腎症を発症しているか否か）を判別する場合において、個体が将来、心血管イベントを発症するか否かをさらに判別するときには、ステップＳＡ２２では、β－ＡＩＢＡ，３－ＭｅＨｉｓ，Ｃｉｔ，Ｔｒｐ，Ｃｙｓ，Ｇｌｕ，Ｈｙｐｒｏ，Ｓａｒ，Ｌｅｕ，Ｈｉｓ，Ａｒｇ，Ｌｙｓ，Ｓｅｒ，Ｐｈｅ，Ａｌａ，Ｏｒｎ，Ｐｒｏ，Ｉｌｅのうち少なくとも１つを変数として含む多変量判別式を早期腎症評価装置１００へ送信する。

[0181] また、具体的には、ステップＳＡ２６にて、個体が将来、早期腎症を発症するか否かを判別する場合には、ステップＳＡ２２では、ＥｔＯＨＮＨ２，Ｓａｒ，β－ＡＩＢＡ，α－ＡＢＡ，Ｓｅｒ，Ｖａｌ，Ｔｈｒ，Ｔａｕ，Ｈｙｐｒｏ，Ｉｌｅ，Ａｓｎ，Ｏｒｎ，Ａｓｐ，Ｇｌｎ，α－ＡＡＡ，Ａｒｇ，Ｔｙｒ，Ｃｙｓ，Ｇｌｙ，Ａｌａ，Ｐｒｏ，Ｌｅｕ，Ｌｙｓ，Ｍｅｔ，Ｈｉｓ，Ｐｈｅのうち少なくとも１つを変数として含む多変量判別式を早期腎症評価装置１００へ送信する。

[0182] つぎに、早期腎症評価装置１００は、受信部１０２ｆで、クライアント装置２００から送信された個体のアミノ酸濃度データおよびデータベース装置

４００から送信された多変量判別式を受信し、受信したアミノ酸濃度データをアミノ酸濃度データファイル１０６ｂの所定の記憶領域に格納すると共に、受信した多変量判別式を多変量判別式ファイル１０６ｅ４の所定の記憶領域に格納する（ステップＳＡ２３）。

[0183] つぎに、早期腎症評価装置１００は、制御部１０２で、ステップＳＡ２３で受信した個体のアミノ酸濃度データから欠損値や外れ値などのデータを除去する（ステップＳＡ２４）。

[0184] つぎに、早期腎症評価装置１００は、判別値算出部１０２ｉで、ステップＳＡ２４で欠損値や外れ値などのデータが除去された個体のアミノ酸濃度データ、およびステップＳＡ２３で受信した多変量判別式に基づいて、判別値を算出する（ステップＳＡ２５）。

[0185] 具体的には、ステップＳＡ２３にて、Ｓａｒ，Ａｌａ，β－ＡＩＢＡ，α－ＡＢＡ，Ｓｅｒ，Ｐｒｏ，Ｖａｌ，Ｈｙｐｒｏ，Ｉｌｅ，Ｌｅｕ，Ｏｒｎ，Ｌｙｓ，Ｇｌｕ，Ｍｅｔ，Ｈｉｓ，α－ＡＡＡ，Ｐｈｅ，３－ＭｅＨｉｓ，Ａｒｇ，Ｃｉｔ，Ｔｒｐ，Ｃｙｓのうち少なくとも１つを変数として含む多変量判別式が受信された場合には、早期腎症評価装置１００は、判別値算出部１０２ｉで、アミノ酸濃度データに含まれるＳａｒ，Ａｌａ，β－ＡＩＢＡ，α－ＡＢＡ，Ｓｅｒ，Ｐｒｏ，Ｖａｌ，Ｈｙｐｒｏ，Ｉｌｅ，Ｌｅｕ，Ｏｒｎ，Ｌｙｓ，Ｇｌｕ，Ｍｅｔ，Ｈｉｓ，α－ＡＡＡ，Ｐｈｅ，３－ＭｅＨｉｓ，Ａｒｇ，Ｃｉｔ，Ｔｒｐ，Ｃｙｓのうち少なくとも１つの濃度値、およびＳａｒ，Ａｌａ，β－ＡＩＢＡ，α－ＡＢＡ，Ｓｅｒ，Ｐｒｏ，Ｖａｌ，Ｈｙｐｒｏ，Ｉｌｅ，Ｌｅｕ，Ｏｒｎ，Ｌｙｓ，Ｇｌｕ，Ｍｅｔ，Ｈｉｓ，α－ＡＡＡ，Ｐｈｅ，３－ＭｅＨｉｓ，Ａｒｇ，Ｃｉｔ，Ｔｒｐ，Ｃｙｓのうち少なくとも１つを変数として含む多変量判別式に基づいて、判別値を算出する。なお、ステップＳＡ２３にて、β－ＡＩＢＡ，３－ＭｅＨｉｓ，Ｃｉｔ，Ｔｒｐ，Ｃｙｓ，Ｇｌｕ，Ｈｙｐｒｏ，Ｓａｒ，Ｌｅｕ，Ｈｉｓ，Ａｒｇ，Ｌｙｓ，Ｓｅｒ，Ｐｈｅ，Ａｌａ，Ｏｒｎ，Ｐｒｏ，Ｉｌｅのうち少なくとも１つを変数として含む多変量判別式が受信された場合には、

早期腎症評価装置１００は、判別値算出部１０２ｉで、アミノ酸濃度データに含まれるβ－ＡＩＢＡ，３－ＭｅＨｉｓ，Ｃｉｔ，Ｔｒｐ，Ｃｙｓ，Ｇｌｕ，Ｈｙｐｒｏ，Ｓａｒ，Ｌｅｕ，Ｈｉｓ，Ａｒｇ，Ｌｙｓ，Ｓｅｒ，Ｐｈｅ，Ａｌａ，Ｏｒｎ，Ｐｒｏ，Ｉｌｅのうち少なくとも１つの濃度値、およびβ－ＡＩＢＡ，３－ＭｅＨｉｓ，Ｃｉｔ，Ｔｒｐ，Ｃｙｓ，Ｇｌｕ，Ｈｙｐｒｏ，Ｓａｒ，Ｌｅｕ，Ｈｉｓ，Ａｒｇ，Ｌｙｓ，Ｓｅｒ，Ｐｈｅ，Ａｌａ，Ｏｒｎ，Ｐｒｏ，Ｉｌｅのうち少なくとも１つを変数として含む多変量判別式に基づいて、判別値を算出する。

[0186] また、具体的には、ステップＳＡ２３にて、ＥｔＯＨＮＨ２，Ｓａｒ，β－ＡＩＢＡ，α－ＡＢＡ，Ｓｅｒ，Ｖａｌ，Ｔｈｒ，Ｔａｕ，Ｈｙｐｒｏ，Ｉｌｅ，Ａｓｎ，Ｏｒｎ，Ａｓｐ，Ｇｌｎ，α－ＡＡＡ，Ａｒｇ，Ｔｙｒ，Ｃｙｓ，Ｇｌｙ，Ａｌａ，Ｐｒｏ，Ｌｅｕ，Ｌｙｓ，Ｍｅｔ，Ｈｉｓ，Ｐｈｅのうち少なくとも１つを変数として含む多変量判別式が受信された場合には、早期腎症評価装置１００は、判別値算出部１０２ｉで、アミノ酸濃度データに含まれるＥｔＯＨＮＨ２，Ｓａｒ，β－ＡＩＢＡ，α－ＡＢＡ，Ｓｅｒ，Ｖａｌ，Ｔｈｒ，Ｔａｕ，Ｈｙｐｒｏ，Ｉｌｅ，Ａｓｎ，Ｏｒｎ，Ａｓｐ，Ｇｌｎ，α－ＡＡＡ，Ａｒｇ，Ｔｙｒ，Ｃｙｓ，Ｇｌｙ，Ａｌａ，Ｐｒｏ，Ｌｅｕ，Ｌｙｓ，Ｍｅｔ，Ｈｉｓ，Ｐｈｅのうち少なくとも１つの濃度値、およびＥｔＯＨＮＨ２，Ｓａｒ，β－ＡＩＢＡ，α－ＡＢＡ，Ｓｅｒ，Ｖａｌ，Ｔｈｒ，Ｔａｕ，Ｈｙｐｒｏ，Ｉｌｅ，Ａｓｎ，Ｏｒｎ，Ａｓｐ，Ｇｌｎ，α－ＡＡＡ，Ａｒｇ，Ｔｙｒ，Ｃｙｓ，Ｇｌｙ，Ａｌａ，Ｐｒｏ，Ｌｅｕ，Ｌｙｓ，Ｍｅｔ，Ｈｉｓ，Ｐｈｅのうち少なくとも１つを変数として含む多変量判別式に基づいて、判別値を算出する。

[0187] つぎに、早期腎症評価装置１００は、判別値基準判別部１０２ｊ１で、ステップＳＡ２５で算出した判別値に基づいて、以下に示す２１．または２２．の２群判別を実行し、その判別結果を評価結果ファイル１０６ｇの所定の記憶領域に格納する（ステップＳＡ２６）。

[0188] ２１．早期腎症の現在の発症に関する２群判別

ステップＳＡ２５で算出した判別値と予め設定された閾値（カットオフ値）とを比較することで、個体が現在、早期腎症であるか否か（個体が現在、早期腎症を発症しているか否か）を判別する。なお、当該２１．の２群判別においては、ステップＳＡ２５で算出した判別値と予め設定された閾値（カットオフ値）とを比較することで、個体が将来、心血管イベントを発症するか否かをさらに判別してもよい。

[0189] ２２．早期腎症の将来の発症に関する２群判別

ステップＳＡ２５で算出した判別値と予め設定された閾値（カットオフ値）とを比較することで、個体が将来、早期腎症を発症するか否かを判別する。

[0190] つぎに、早期腎症評価装置１００は、送信部１０２ｍで、ステップＳＡ２６で得た判別結果（ステップＳＡ２５で算出した判別値を含めてもよい）を、アミノ酸濃度データの送信元のクライアント装置２００とデータベース装置４００とへ送信する（ステップＳＡ２７）。具体的には、まず、早期腎症評価装置１００は、Ｗｅｂページ生成部１０２ｅで、判別結果を表示するためのＷｅｂページを作成し、作成したＷｅｂページに対応するＷｅｂデータを記憶部１０６の所定の記憶領域に格納する。ついで、利用者がクライアント装置２００のＷｅｂブラウザ２１１に入力装置２５０を介して所定のＵＲＬを入力し上述した認証を経た後、クライアント装置２００は、当該Ｗｅｂページの閲覧要求を早期腎症評価装置１００へ送信する。ついで、早期腎症評価装置１００は、閲覧処理部１０２ｂで、クライアント装置２００から送信された閲覧要求を解釈し、判別結果を表示するためのＷｅｂページに対応するＷｅｂデータを記憶部１０６の所定の記憶領域から読み出す。そして、早期腎症評価装置１００は、送信部１０２ｍで、読み出したＷｅｂデータをクライアント装置２００へ送信すると共に、当該Ｗｅｂデータ又は判別結果をデータベース装置４００へ送信する。

[0191] ここで、ステップＳＡ２７において、早期腎症評価装置１００は、制御部１０２で、判別結果を電子メールで利用者のクライアント装置２００へ通知

してもよい。具体的には、まず、早期腎症評価装置１００は、電子メール生成部１０２ｄで、利用者ＩＤなどを基にして利用者情報ファイル１０６ａに格納されている利用者情報を送信タイミングに従って参照し、利用者の電子メールアドレスを取得する。ついで、早期腎症評価装置１００は、電子メール生成部１０２ｄで、取得した電子メールアドレスを宛て先とし利用者の氏名および判別結果を含む電子メールに関するデータを生成する。ついで、早期腎症評価装置１００は、送信部１０２ｍで、生成した当該データを利用者のクライアント装置２００へ送信する。

[0192] また、ステップＳＡ２７において、早期腎症評価装置１００は、ＦＴＰ等の既存のファイル転送技術等で、判別結果を利用者のクライアント装置２００へ送信してもよい。

[0193] 図２１の説明に戻り、データベース装置４００は、制御部４０２で、早期腎症評価装置１００から送信された判別結果またはＷｅｂデータを受信し、受信した判別結果またはＷｅｂデータを記憶部４０６の所定の記憶領域に保存（蓄積）する（ステップＳＡ２８）。

[0194] また、クライアント装置２００は、受信部２１３で、早期腎症評価装置１００から送信されたＷｅｂデータを受信し、受信したＷｅｂデータをＷｅｂブラウザ２１１で解釈し、個体の判別結果が記されたＷｅｂページの画面をモニタ２６１に表示する（ステップＳＡ２９）。なお、判別結果が早期腎症評価装置１００から電子メールで送信された場合には、クライアント装置２００は、電子メーラ２１２の公知の機能で、早期腎症評価装置１００から送信された電子メールを任意のタイミングで受信し、受信した電子メールをモニタ２６１に表示する。

[0195] 以上により、利用者は、モニタ２６１に表示されたＷｅｂページを閲覧することで、上記２１．または２２．の２群判別に関する判別結果を確認することができる。なお、利用者は、モニタ２６１に表示されたＷｅｂページの表示内容をプリンタ２６２で印刷してもよい。

[0196] また、判別結果が早期腎症評価装置１００から電子メールで送信された場

合には、利用者は、モニタ２６１に表示された電子メールを閲覧することで、上記２１．または２２．の２群判別に関する判別結果を確認することができる。利用者は、モニタ２６１に表示された電子メールの表示内容をプリンタ２６２で印刷してもよい。

[0197] これにて、早期腎症評価サービス処理の説明を終了する。

[0198] ［２－４．他の実施形態］

本発明にかかる早期腎症評価装置、早期腎症評価方法、早期腎症評価プログラム、記録媒体、早期腎症評価システム、および情報通信端末装置は、上述した第２実施形態以外にも、特許請求の範囲に記載した技術的思想の範囲内において種々の異なる実施形態にて実施されてよいものである。

[0199] また、第２実施形態において説明した各処理のうち、自動的に行われるものとして説明した処理の全部または一部を手動的に行うこともでき、あるいは、手動的に行われるものとして説明した処理の全部または一部を公知の方法で自動的に行うこともできる。

[0200] このほか、上記文献中や図面中で示した処理手順、制御手順、具体的名称、各処理の登録データや検索条件等のパラメータを含む情報、画面例、データベース構成については、特記する場合を除いて任意に変更することができる。

[0201] また、早期腎症評価装置１００に関して、図示の各構成要素は機能概念的なものであり、必ずしも物理的に図示の如く構成されていることを要しない。

[0202] 例えば、早期腎症評価装置１００が備える処理機能、特に制御部１０２にて行われる各処理機能については、その全部または任意の一部を、ＣＰＵ（Ｃｅｎｔｒａｌ　Ｐｒｏｃｅｓｓｉｎｇ　Ｕｎｉｔ）および当該ＣＰＵにて解釈実行されるプログラムにて実現してもよく、また、ワイヤードロジックによるハードウェアとして実現してもよい。尚、プログラムは、情報処理装置に本発明にかかる早期腎症評価方法を実行させるためのプログラム化された命令を含む一時的でないコンピュータ読み取り可能な記録媒体に記録され

ており、必要に応じて早期腎症評価装置１００に機械的に読み取られる。すなわち、ＲＯＭまたはＨＤＤなどの記憶部１０６などには、ＯＳ（Ｏｐｅｒａｔｉｎｇ　Ｓｙｓｔｅｍ）と協働してＣＰＵに命令を与え、各種処理を行うためのコンピュータプログラムが記録されている。このコンピュータプログラムは、ＲＡＭにロードされることによって実行され、ＣＰＵと協働して制御部を構成する。

[0203] また、このコンピュータプログラムは、早期腎症評価装置１００に対して任意のネットワークを介して接続されたアプリケーションプログラムサーバに記憶されていてもよく、必要に応じてその全部または一部をダウンロードすることも可能である。

[0204] また、本発明にかかる早期腎症評価プログラムを、一時的でないコンピュータ読み取り可能な記録媒体に格納してもよく、また、プログラム製品として構成することもできる。ここで、この「記録媒体」とは、メモリーカード、ＵＳＢメモリ、ＳＤカード、フレキシブルディスク、光磁気ディスク、ＲＯＭ、ＥＰＲＯＭ、ＥＥＰＲＯＭ（登録商標）、ＣＤ－ＲＯＭ、ＭＯ、ＤＶＤ、および、Ｂｌｕ－ｒａｙ　Ｄｉｓｃ等の任意の「可搬用の物理媒体」を含むものとする。

[0205] また、「プログラム」とは、任意の言語または記述方法にて記述されたデータ処理方法であり、ソースコードまたはバイナリコード等の形式を問わない。なお、「プログラム」は必ずしも単一的に構成されるものに限られず、複数のモジュールやライブラリとして分散構成されるものや、ＯＳ（Ｏｐｅｒａｔｉｎｇ　Ｓｙｓｔｅｍ）に代表される別個のプログラムと協働してその機能を達成するものをも含む。なお、実施形態に示した各装置において記録媒体を読み取るための具体的な構成および読み取り手順ならびに読み取り後のインストール手順等については、周知の構成や手順を用いることができる。

[0206] 記憶部１０６に格納される各種のデータベース等は、ＲＡＭ、ＲＯＭ等のメモリ装置、ハードディスク等の固定ディスク装置、フレキシブルディスク

、および、光ディスク等のストレージ手段であり、各種処理やウェブサイト提供に用いる各種のプログラム、テーブル、データベース、および、ウェブページ用ファイル等を格納する。

[0207] また、早期腎症評価装置１００は、既知のパーソナルコンピュータまたはワークステーション等の情報処理装置として構成してもよく、また、任意の周辺装置が接続された当該情報処理装置として構成してもよい。また、早期腎症評価装置１００は、当該情報処理装置に本発明の早期腎症評価方法を実現させるソフトウェア（プログラムまたはデータ等を含む）を実装することにより実現してもよい。

[0208] 更に、装置の分散・統合の具体的形態は図示するものに限られず、その全部または一部を、各種の付加等に応じてまたは機能負荷に応じて、任意の単位で機能的または物理的に分散・統合して構成することができる。すなわち、上述した実施形態を任意に組み合わせて実施してもよく、実施形態を選択的に実施してもよい。

[0209] 最後に、早期腎症評価装置１００で行う多変量判別式作成処理の一例について図２２を参照して詳細に説明する。なお、ここで説明する処理はあくまでも一例であり、多変量判別式の作成方法はこれに限定されない。図２２は多変量判別式作成処理の一例を示すフローチャートである。なお、当該多変量判別式作成処理は、早期腎症状態情報を管理するデータベース装置４００で行ってもよい。

[0210] なお、本説明では、早期腎症評価装置１００は、データベース装置４００から事前に取得した早期腎症状態情報を、早期腎症状態情報ファイル１０６ｃの所定の記憶領域に格納しているものとする。また、早期腎症評価装置１００は、早期腎症状態情報指定部１０２ｇで事前に指定した早期腎症状態指標データおよびアミノ酸濃度データを含む早期腎症状態情報を、指定早期腎症状態情報ファイル１０６ｄの所定の記憶領域に格納しているものとする。

[0211] まず、多変量判別式作成部１０２ｈは、候補多変量判別式作成部１０２ｈ１で、指定早期腎症状態情報ファイル１０６ｄの所定の記憶領域に格納され

ている早期腎症状態情報から所定の式作成手法に基づいて候補多変量判別式を作成し、作成した候補多変量判別式を候補多変量判別式ファイル１０６ｅ１の所定の記憶領域に格納する（ステップＳＢ２１）。具体的には、まず、多変量判別式作成部１０２ｈは、候補多変量判別式作成部１０２ｈ１で、複数の異なる式作成手法（主成分分析や判別分析、サポートベクターマシン、重回帰分析、ロジスティック回帰分析、ｋ－ｍｅａｎｓ法、クラスター解析、決定木、Ｃｏｘ比例ハザードモデルなどの多変量解析に関するものを含む。）の中から所望のものを１つ選択し、選択した式作成手法に基づいて、作成する候補多変量判別式の形（式の形）を決定する。つぎに、多変量判別式作成部１０２ｈは、候補多変量判別式作成部１０２ｈ１で、早期腎症状態情報に基づいて、選択した式選択手法に対応する種々（例えば平均や分散など）の計算を実行する。つぎに、多変量判別式作成部１０２ｈは、候補多変量判別式作成部１０２ｈ１で、計算結果および決定した候補多変量判別式のパラメータを決定する。これにより、選択した式作成手法に基づいて候補多変量判別式が作成される。なお、複数の異なる式作成手法を併用して候補多変量判別式を同時並行（並列）的に作成する場合は、選択した式作成手法ごとに上記の処理を並行して実行すればよい。また、複数の異なる式作成手法を併用して候補多変量判別式を直列的に作成する場合は、例えば、主成分分析を行って作成した候補多変量判別式を利用して早期腎症状態情報を変換し、変換した早期腎症状態情報に対して判別分析を行うことで候補多変量判別式を作成してもよい。

[0212] つぎに、多変量判別式作成部１０２ｈは、候補多変量判別式検証部１０２ｈ２で、ステップＳＢ２１で作成した候補多変量判別式を所定の検証手法に基づいて検証（相互検証）し、検証結果を検証結果ファイル１０６ｅ２の所定の記憶領域に格納する（ステップＳＢ２２）。具体的には、多変量判別式作成部１０２ｈは、候補多変量判別式検証部１０２ｈ２で、指定早期腎症状態情報ファイル１０６ｄの所定の記憶領域に格納されている早期腎症状態情報に基づいて候補多変量判別式を検証する際に用いる検証用データを作成し

、作成した検証用データに基づいて候補多変量判別式を検証する。なお、ステップＳＢ２１で複数の異なる式作成手法を併用して候補多変量判別式を複数作成した場合には、多変量判別式作成部１０２ｈは、候補多変量判別式検証部１０２ｈ２で、各式作成手法に対応する候補多変量判別式ごとに所定の検証手法に基づいて検証する。ここで、ステップＳＢ２２において、ブートストラップ法やホールドアウト法、Ｎ－フォールド法、リーブワンアウト法などのうち少なくとも１つに基づいて候補多変量判別式の判別率や感度、特異度、情報量基準、ＲＯＣ＿ＡＵＣ（受信者特性曲線の曲線下面積）などのうち少なくとも１つに関して検証してもよい。これにより、早期腎症状態情報や診断条件を考慮した予測性または頑健性の高い候補指標式を選択することができる。

[0213] つぎに、多変量判別式作成部１０２ｈは、変数選択部１０２ｈ３で、所定の変数選択手法に基づいて、候補多変量判別式の変数を選択することで、候補多変量判別式を作成する際に用いる早期腎症状態情報に含まれるアミノ酸濃度データの組み合わせを選択し、選択したアミノ酸濃度データの組み合わせを含む早期腎症状態情報を選択早期腎症状態情報ファイル１０６ｅ３の所定の記憶領域に格納する（ステップＳＢ２３）。なお、ステップＳＢ２１で複数の異なる式作成手法を併用して候補多変量判別式を複数作成し、ステップＳＢ２２で各式作成手法に対応する候補多変量判別式ごとに所定の検証手法に基づいて検証した場合には、ステップＳＢ２３において、多変量判別式作成部１０２ｈは、変数選択部１０２ｈ３で、候補多変量判別式ごとに所定の変数選択手法に基づいて候補多変量判別式の変数を選択してもよい。ここで、ステップＳＢ２３において、検証結果からステップワイズ法、ベストパス法、近傍探索法、遺伝的アルゴリズムのうち少なくとも１つに基づいて候補多変量判別式の変数を選択してもよい。なお、ベストパス法とは、候補多変量判別式に含まれる変数を１つずつ順次減らしていき、候補多変量判別式が与える評価指標を最適化することで変数を選択する方法である。また、ステップＳＢ２３において、多変量判別式作成部１０２ｈは、変数選択部１０

２ｈ３で、指定早期腎症状態情報ファイル１０６ｄの所定の記憶領域に格納されている早期腎症状態情報に基づいてアミノ酸濃度データの組み合わせを選択してもよい。

[0214] つぎに、多変量判別式作成部１０２ｈは、指定早期腎症状態情報ファイル１０６ｄの所定の記憶領域に格納されている早期腎症状態情報に含まれるアミノ酸濃度データの全ての組み合わせが終了したか否かを判定し、判定結果が「終了」であった場合（ステップＳＢ２４：Ｙｅｓ）には次のステップ（ステップＳＢ２５）へ進み、判定結果が「終了」でなかった場合（ステップＳＢ２４：Ｎｏ）にはステップＳＢ２１へ戻る。なお、多変量判別式作成部１０２ｈは、予め設定した回数が終了したか否かを判定し、判定結果が「終了」であった場合には（ステップＳＢ２４：Ｙｅｓ）次のステップ（ステップＳＢ２５）へ進み、判定結果が「終了」でなかった場合（ステップＳＢ２４：Ｎｏ）にはステップＳＢ２１へ戻ってもよい。また、多変量判別式作成部１０２ｈは、ステップＳＢ２３で選択したアミノ酸濃度データの組み合わせが、指定早期腎症状態情報ファイル１０６ｄの所定の記憶領域に格納されている早期腎症状態情報に含まれるアミノ酸濃度データの組み合わせまたは前回のステップＳＢ２３で選択したアミノ酸濃度データの組み合わせと同じであるか否かを判定し、判定結果が「同じ」であった場合（ステップＳＢ２４：Ｙｅｓ）には次のステップ（ステップＳＢ２５）へ進み、判定結果が「同じ」でなかった場合（ステップＳＢ２４：Ｎｏ）にはステップＳＢ２１へ戻ってもよい。また、多変量判別式作成部１０２ｈは、検証結果が具体的には各候補多変量判別式に関する評価値である場合には、当該評価値と各式作成手法に対応する所定の閾値との比較結果に基づいて、ステップＳＢ２５へ進むかステップＳＢ２１へ戻るかを判定してもよい。

[0215] つぎに、多変量判別式作成部１０２ｈは、検証結果に基づいて、複数の候補多変量判別式の中から多変量判別式として採用する候補多変量判別式を選出することで多変量判別式を決定し、決定した多変量判別式（選出した候補多変量判別式）を多変量判別式ファイル１０６ｅ４の所定の記憶領域に格納

する（ステップＳＢ２５）。ここで、ステップＳＢ２５において、例えば、同じ式作成手法で作成した候補多変量判別式の中から最適なものを選出する場合と、すべての候補多変量判別式の中から最適なものを選出する場合とがある。

[0216] これにて、多変量判別式作成処理の説明を終了する。

実施例 1

[0217] 早期腎症の有無に関するＡＥＲ（尿中アルブミン排泄率）の測定が行われた糖尿病患者を、測定結果に基づいて正常群（ＡＥＲ＜２０μｇ／ｍｉｎ，微量アルブミン尿陰性）と早期腎症群（ＡＥＲ≧２０μｇ／ｍｉｎ，微量アルブミン尿陽性）の２群に分類した。正常群および早期腎症群はそれぞれ、２７９名および１２８名であった。当該糖尿病患者から採取された血清中のアミノ酸濃度を測定し、各アミノ酸について正常群と早期腎症群の判別能をＲＯＣ＿ＡＵＣ（受信者特性曲線の曲線下面積）で評価した。なお、アミノ酸濃度の測定は、上述した実施形態で説明した（Ａ）の測定方法で行った。

[0218] ノンパラメトリックの仮定のもとで帰無仮説を「ＲＯＣ＿ＡＵＣ＝０．５」とした場合の検定でＲＯＣ＿ＡＵＣが有意（ｐ＜０．０５）であったアミノ酸は、Ｓａｒ，Ａｌａ，β－ＡＩＢＡ，α－ＡＢＡ，Ｓｅｒ，Ｐｒｏ，Ｖａｌ，Ｈｙｐｒｏ，Ｉｌｅ，Ｌｅｕ，Ｌｙｓ，Ｇｌｕ，α－ＡＡＡ，Ｐｈｅ，３－ＭｅＨｉｓ，Ｃｙｓであった。これらのアミノ酸の内、Ｓａｒ，Ａｌａ，β－ＡＩＢＡ，α－ＡＢＡ，Ｐｒｏ，Ｖａｌ，Ｈｙｐｒｏ，Ｉｌｅ，Ｌｅｕ，Ｌｙｓ，Ｇｌｕ，α－ＡＡＡ，Ｐｈｅ，３－ＭｅＨｉｓ，Ｃｙｓは早期腎症群で有意に増加し、一方、Ｓｅｒは早期腎症群で有意に減少した。

実施例 2

[0219] 実施例１のアミノ酸濃度測定時に正常群（ＡＥＲ＜２０μｇ／ｍｉｎ，微量アルブミン尿陰性）に分類された糖尿病患者を対象として、当該アミノ酸濃度測定時から５年後に再びＡＥＲの測定を行った。当該対象を、再度測定されたＡＥＲに基づいて将来の正常群（ＡＥＲ＜２０μｇ／ｍｉｎ，微量アルブミン尿陰性）と将来の早期腎症発症群（ＡＥＲ≧２０μｇ／ｍｉｎ，微

量アルブミン尿陽性）の２群に分類した。将来の正常群および将来の早期腎症群はそれぞれ、１２４名および１５名であった。当該対象から採取された血清中のアミノ酸濃度を測定し、各アミノ酸について将来の正常群と将来の早期腎症発症群の判別能をＲＯＣ＿ＡＵＣ（受信者特性曲線の曲線下面積）で評価した。なお、アミノ酸濃度の測定は、上述した実施形態で説明した（Ａ）の測定方法で行った。

[0220] ノンパラメトリックの仮定のもとで帰無仮説を「ＲＯＣ＿ＡＵＣ＝０．５」とした場合の検定でＲＯＣ＿ＡＵＣが有意（ｐ＜０．０５）であったアミノ酸は、Ｓｅｒ，Ｏｒｎ，Ａｒｇであった。これらのアミノ酸は将来の早期腎症発症群で有意に減少した。

[0221] 実施例１のアミノ酸濃度測定時に正常群に分類された糖尿病患者を対象として、当該アミノ酸濃度測定時のＡＥＲおよび５年後に測定されたＡＥＲの差分とアミノ酸濃度との相関性を、Ｓｐｅａｒｍａｎ順位相関係数で評価した。なお、アミノ酸濃度の測定は、上述した実施形態で説明した（Ａ）の測定方法で行った。

[0222] Ｓｐｅａｒｍａｎ相関係数に関する検定で有意（ｐ＜０．０５）であったアミノ酸は、Ｓａｒ，α－ＡＢＡ，Ｓｅｒ，Ｔｈｒ，Ｔａｕ，Ｈｙｐｒｏ，Ａｓｎ，Ｏｒｎであった。これらのアミノ酸の内、Ｔａｕは有意な正相関を示し、一方、Ｓａｒ，α－ＡＢＡ，Ｓｅｒ，Ｔｈｒ，Ｈｙｐｒｏ，Ａｓｎ，Ｏｒｎは有意な負相関を示した。

実施例 3

[0223] 実施例１で測定したものと同じアミノ酸濃度データを用いて、実施例１で記述した早期腎症の診断に有効な、血清中のアミノ酸濃度を変数に持つ早期腎症を判別するための多変量判別式（多変量関数）を求めた。

[0224] まず、多変量判別式としてロジスティック回帰式を用いた。ロジスティック回帰式に含める変数の組み合わせを３１種類のアミノ酸から探索し、そしてクロスバリデーションとしてＬｅａｖｅ－Ｏｎｅ－Ｏｕｔ法を採用して、早期腎症の良好な判別能を持つロジスティック回帰式の探索を鋭意実施した

。

[0225] ここで、３１種類のアミノ酸は、ＥｔＯＨＮＨ２，Ｇｌｙ，Ｓａｒ，Ａｌａ，β－ＡＩＢＡ，α－ＡＢＡ，Ｓｅｒ，Ｐｒｏ，Ｖａｌ，Ｔｈｒ，Ｔａｕ，Ｈｙｐｒｏ，Ｉｌｅ，Ｌｅｕ，Ａｓｎ，Ｏｒｎ，Ａｓｐ，Ｇｌｎ，Ｌｙｓ，Ｇｌｕ，Ｍｅｔ，Ｈｉｓ，α－ＡＡＡ，Ｐｈｅ，１－ＭｅＨｉｓ，３－ＭｅＨｉｓ，Ａｒｇ，Ｃｉｔ，Ｔｙｒ，Ｔｒｐ，Ｃｙｓである（以下同様。）。

[0226] ＲＯＣ＿ＡＵＣで評価した判別能が同等に良好なロジスティック回帰式の一覧を、図２３から図２６に示す。ここで、図２３から図２６には、ロジスティック回帰式に含まれる変数の組み合わせ、クロスバリデーション有りでのＲＯＣ＿ＡＵＣ値、およびクロスバリデーション無しでのＲＯＣ＿ＡＵＣ値が示されている。図２３から図２６に含まれる式における変数の出現頻度を多い順に１０位まで列挙すると、Ｇｌｕ，３－ＭｅＨｉｓ，Ｃｙｓ，Ｔｒｐ，Ａｌａ，Ｏｒｎ，α－ＡＡＡ，Ｈｉｓ，Ｍｅｔ，Ｃｉｔである。

[0227] なお、判別能が同等に良好なロジスティック回帰式のうち、例えば、変数の組「Ａｌａ，Ｏｒｎ，Ｇｌｕ，３－ＭｅＨｉｓ，Ｔｒｐ，Ｃｙｓ」を持つ指標式「（－２．８１４）＋（０．００２９１７）Ａｌａ＋（－０．０１６０９）Ｏｒｎ＋（０．０２６３１）Ｇｌｕ＋（０．３７８１）３－ＭｅＨｉｓ＋（－０．０２３６０）Ｔｒｐ＋（０．０２２９２）Ｃｙｓ」の判別能は、ＲＯＣ＿ＡＵＣ＝０．７６５，感度＝０．７９７，特異度＝０．６３８と良好なものであった。なお、上記感度及び特異度は、感度と特異度の平均が最も高くなる最高判別点をカットオフ値とした場合の値である。

[0228] ロジスティック回帰式に含める変数の組み合わせを１９種類のアミノ酸から探索し、そしてクロスバリデーションとしてＬｅａｖｅ－Ｏｎｅ－Ｏｕｔ法を採用して、早期腎症の良好な判別能を持つロジスティック回帰式の探索を鋭意実施した。

[0229] ここで、１９種類のアミノ酸は、Ｇｌｙ，Ａｌａ，Ｓｅｒ，Ｐｒｏ，Ｖａｌ，Ｔｈｒ，Ｉｌｅ，Ｌｅｕ，Ａｓｎ，Ｏｒｎ，Ｇｌｎ，Ｌｙｓ，Ｍｅｔ，

Ｈｉｓ，Ｐｈｅ，Ａｒｇ，Ｃｉｔ，Ｔｙｒ，Ｔｒｐである（以下同様。）。

[0230] ＲＯＣ＿ＡＵＣで評価した判別能が同等に良好なロジスティック回帰式の一覧を、図２７から図３０に示す。ここで、図２７から図３０には、ロジスティック回帰式に含まれる変数の組み合わせ、クロスバリデーション有りでのＲＯＣ＿ＡＵＣ値、およびクロスバリデーション無しでのＲＯＣ＿ＡＵＣ値が示されている。図２７から図３０に含まれる式における変数の出現頻度を多い順に１０位まで列挙すると、Ａｌａ，Ｔｒｐ，Ｓｅｒ，Ｌｅｕ，Ｐｈｅ，Ｉｌｅ，Ｃｉｔ，Ｌｙｓ，Ｏｒｎ，Ｍｅｔである。

[0231] なお、判別能が同等に良好なロジスティック回帰式のうち、例えば、変数の組「Ａｌａ，Ｓｅｒ，Ｌｅｕ，Ｌｙｓ，Ｃｉｔ，Ｔｒｐ」を持つ指標式「（－２．３００）＋（０．００４０４８）Ａｌａ＋（－０．０１２３８）Ｓｅｒ＋（０．０１１５８）Ｌｅｕ＋（０．００４３７１）Ｌｙｓ＋（０．０１９２０）Ｃｉｔ＋（－０．０３４６４）Ｔｒｐ」の判別能は、ＲＯＣ＿ＡＵＣ＝０．６９６，感度＝０．７９７，特異度＝０．５０５と良好なものであった。なお、上記感度及び特異度は、感度と特異度の平均が最も高くなる最高判別点をカットオフ値とした場合の値である。

[0232] つぎに、多変量判別式として線形判別式を用いた。線形判別式に含める変数の組み合わせを３１種類のアミノ酸から探索し、そしてクロスバリデーションとしてブートストラップ法を採用して、早期腎症の良好な判別能を持つ線形判別式の探索を鋭意実施した。

[0233] ＲＯＣ＿ＡＵＣで評価した判別能が同等に良好な線形判別式の一覧を、図３１から図３４に示す。ここで、図３１から図３４には、線形判別式、クロスバリデーション有りでのＲＯＣ＿ＡＵＣ値の平均値、およびクロスバリデーション無しでのＲＯＣ＿ＡＵＣ値が示されている。図３１から図３４に含まれる式における変数の出現頻度を多い順に１０位まで列挙すると、Ｇｌｕ，３－ＭｅＨｉｓ，Ｃｙｓ，Ｔｒｐ，Ｏｒｎ，Ａｌａ，α－ＡＡＡ，Ａｒｇ，Ｈｉｓ，Ｍｅｔ，α－ＡＢＡの１１個である。

[0234] なお、判別能が同等に良好な線形判別式のうち、例えば、変数の組「Ａｌ

ａ，Ｇｌｕ，３－ＭｅＨｉｓ，Ｃｉｔ，Ｔｒｐ，Ｃｙｓ」を持つ指標式「（－１．１３１１）＋（０．００１０）Ａｌａ＋（０．００８７）Ｇｌｕ＋（０．１４０５）３－ＭｅＨｉｓ＋（－０．００４０）Ｃｉｔ＋（－０．００９１）Ｔｒｐ＋（０．００６７）Ｃｙｓ」の判別能は、ＲＯＣ＿ＡＵＣ＝０．７６１，感度＝０．７５０，特異度＝０．６６７と良好なものであった。なお、上記感度及び特異度は、感度と特異度の平均が最も高くなる最高判別点をカットオフ値とした場合の値である。

[0235] 線形判別式に含める変数の組み合わせを１９種類のアミノ酸から探索し、そしてクロスバリデーションとしてブートストラップ法を採用して、早期腎症の良好な判別能を持つ線形判別式の探索を鋭意実施した。

[0236] ＲＯＣ＿ＡＵＣで評価した判別能が同等に良好な線形判別式の一覧を、図３５から図３８に示す。ここで、図３５から図３８には、線形判別式、クロスバリデーション有りでのＲＯＣ＿ＡＵＣ値の平均値、およびクロスバリデーション無しでのＲＯＣ＿ＡＵＣ値が示されている。図３５から図３８に含まれる式における変数の出現頻度を多い順に１０位まで列挙すると、Ｔｒｐ，Ａｌａ，Ｌｅｕ，Ｐｈｅ，Ｉｌｅ，Ｓｅｒ，Ｌｙｓ，Ｃｉｔ，Ｐｒｏ，Ｍｅｔである。

[0237] なお、判別能が同等に良好な線形判別式のうち、例えば、変数の組「Ａｌａ，Ｓｅｒ，Ｉｌｅ，Ｌｙｓ，Ｐｈｅ，Ｔｒｐ」を持つ指標式「（－０．９５８７）＋（０．００１３）Ａｌａ＋（－０．００４９）Ｓｅｒ＋（０．００７４）Ｉｌｅ＋（０．００１４）Ｌｙｓ＋（０．０１１６）Ｐｈｅ＋（－０．０１７３）Ｔｒｐ」の判別能は、ＲＯＣ＿ＡＵＣ＝０．６９９，感度＝０．７０３，特異度＝０．５６７と良好なものであった。なお、上記感度及び特異度は、感度と特異度の平均が最も高くなる最高判別点をカットオフ値とした場合の値である。

実施例 4

[0238] 実施例２で測定したものと同じアミノ酸濃度データを用いて、実施例２で記述した５年後の早期腎症発症の診断に有効な、血清中のアミノ酸濃度を変

数に持つ将来の早期腎症発症を判別するための多変量判別式（多変量関数）を求めた。

[0239] まず、多変量判別式としてロジスティック回帰式を用いた。ロジスティック回帰式に含める変数の組み合わせを３１種類のアミノ酸から探索し、そしてクロスバリデーションとしてＬｅａｖｅ－Ｏｎｅ－Ｏｕｔ法を採用して、将来の早期腎症発症の良好な判別能を持つロジスティック回帰式の探索を鋭意実施した。

[0240] ＲＯＣ＿ＡＵＣで評価した判別能が同等に良好なロジスティック回帰式の一覧を、図３９から図４２に示す。ここで、図３９から図４２には、ロジスティック回帰式に含まれる変数の組み合わせ、クロスバリデーション有りでのＲＯＣ＿ＡＵＣ値、およびクロスバリデーション無しでのＲＯＣ＿ＡＵＣ値が示されている。図３９から図４２に含まれる式における変数の出現頻度を多い順に１０位まで列挙すると、Ａｒｇ，Ｔａｕ，Ｖａｌ，α－ＡＡＡ，Ｇｌｎ，Ｉｌｅ，ＥｔＯＨＮＨ２，Ａｓｐ，Ｃｙｓ，Ｓａｒ，Ａｓｎ，β－ＡＩＢＡの１２個である。

[0241] なお、判別能が同等に良好なロジスティック回帰式のうち、例えば、変数の組「β－ＡＩＢＡ，Ｖａｌ，Ｔａｕ，Ｉｌｅ，α－ＡＡＡ，Ａｒｇ」を持つ指標式「（０．３１０９）＋（０．３１２３）β－ＡＩＢＡ＋（－０．０３１９２）Ｖａｌ＋（０．０５０１４）Ｔａｕ＋（０．０８３７０）Ｉｌｅ＋（－１．７９５）α－ＡＡＡ＋（－０．０４２８７）Ａｒｇ」の判別能は、ＲＯＣ＿ＡＵＣ＝０．８５５，感度＝０．９３３，特異度＝０．６７７と良好なものであった。なお、上記感度及び特異度は、感度と特異度の平均が最も高くなる最高判別点をカットオフ値とした場合の値である。

[0242] ロジスティック回帰式に含める変数の組み合わせを１９種類のアミノ酸から探索し、そしてクロスバリデーションとしてＬｅａｖｅ－Ｏｎｅ－Ｏｕｔ法を採用して、将来の早期腎症発症の良好な判別能を持つロジスティック回帰式の探索を鋭意実施した。

[0243] ＲＯＣ＿ＡＵＣで評価した判別能が同等に良好なロジスティック回帰式の

一覧を、図４３から図４６に示す。ここで、図４３から図４６には、ロジスティック回帰式に含まれる変数の組み合わせ、クロスバリデーション有りでのＲＯＣ＿ＡＵＣ値、およびクロスバリデーション無しでのＲＯＣ＿ＡＵＣ値が示されている。図４３から図４６に含まれる式における変数の出現頻度を多い順に１０位まで列挙すると、Ａｒｇ，Ｖａｌ，Ｓｅｒ，Ｔｙｒ，Ｉｌｅ，Ｈｉｓ，Ｐｈｅ，Ｍｅｔ，Ｐｒｏ，Ｌｙｓである。

[0244] なお、判別能が同等に良好なロジスティック回帰式のうち、例えば、変数の組「Ｓｅｒ，Ｖａｌ，Ｍｅｔ，Ａｒｇ，Ｔｙｒ」を持つ指標式「（７．６１２）＋（－０．０３８２４）Ｓｅｒ＋（－０．０１７４２）Ｖａｌ＋（０．１３４４）Ｍｅｔ＋（－０．０２６４１）Ａｒｇ＋（－０．０２８２３）Ｔｙｒ」の判別能は、ＲＯＣ＿ＡＵＣ＝０．７７８，感度＝０．８６７，特異度＝０．６３７と良好なものであった。なお、上記感度及び特異度は、感度と特異度の平均が最も高くなる最高判別点をカットオフ値とした場合の値である。

[0245] つぎに、多変量判別式として線形判別式を用いた。線形判別式に含める変数の組み合わせを３１種類のアミノ酸から探索し、そしてクロスバリデーションとしてブートストラップ法を採用して、将来の早期腎症発症の良好な判別能を持つ線形判別式の探索を鋭意実施した。

[0246] ＲＯＣ＿ＡＵＣで評価した判別能が同等に良好な線形判別式の一覧を、図４７から図５０に示す。ここで、図４７から図５０には、線形判別式、クロスバリデーション有りでのＲＯＣ＿ＡＵＣ値の平均値、およびクロスバリデーション無しでのＲＯＣ＿ＡＵＣ値が示されている。図４７から図５０に含まれる式における変数の出現頻度を多い順に１０位まで列挙すると、Ａｒｇ，Ｔａｕ，Ｖａｌ，α－ＡＡＡ，Ｉｌｅ，Ｃｙｓ，ＥｔＯＨＮＨ２，Ｓｅｒ，Ｇｌｎ，Ｔｙｒである。

[0247] なお、判別能が同等に良好な線形判別式のうち、例えば、変数の組「Ｖａｌ，Ｔａｕ，Ｉｌｅ，α－ＡＡＡ，Ｐｈｅ，Ａｒｇ」を持つ指標式「（－０．５３２２）＋（－０．００５０）Ｖａｌ＋（０．０１０８）Ｔａｕ＋（０

．００９７）Ｉｌｅ＋（－０．１８８６）α－ＡＡＡ＋（０．００３５）Ｐｈｅ＋（－０．００５３）Ａｒｇ」の判別能は、ＲＯＣ＿ＡＵＣ＝０．８５１，感度＝１．０００，特異度＝０．６２９と良好なものであった。なお、上記感度及び特異度は、感度と特異度の平均が最も高くなる最高判別点をカットオフ値とした場合の値である。

[0248] 線形判別式に含める変数の組み合わせを１９種類のアミノ酸から探索し、そしてクロスバリデーションとしてブートストラップ法を採用して、将来の早期腎症発症の良好な判別能を持つ線形判別式の探索を鋭意実施した。

[0249] ＲＯＣ＿ＡＵＣで評価した判別能が同等に良好な線形判別式の一覧を、図５１から図５４に示す。ここで、図５１から図５４には、線形判別式、クロスバリデーション有りでのＲＯＣ＿ＡＵＣ値の平均値、およびクロスバリデーション無しでのＲＯＣ＿ＡＵＣ値が示されている。図５１から図５４に含まれる式における変数の出現頻度を多い順に１０位まで列挙すると、Ａｒｇ，Ｓｅｒ，Ｖａｌ，Ｉｌｅ，Ｌｅｕ，Ｐｒｏ，Ｐｈｅ，Ｇｌｙ，Ａｌａ，Ｌｙｓである。

[0250] なお、判別能が同等に良好な線形判別式のうち、例えば、変数の組「Ｓｅｒ，Ｐｒｏ，Ｖａｌ，Ｉｌｅ，Ｌｅｕ，Ａｒｇ」を持つ指標式「（０．７２２６）＋（－０．００４２）Ｓｅｒ＋（－０．０００３）Ｐｒｏ＋（－０．００４４）Ｖａｌ＋（０．０１１６）Ｉｌｅ＋（－０．００２４）Ｌｅｕ＋（－０．００３８）Ａｒｇ」の判別能は、ＲＯＣ＿ＡＵＣ＝０．７９９，感度＝０．８６７，特異度＝０．６４５と良好なものであった。なお、上記感度及び特異度は、感度と特異度の平均が最も高くなる最高判別点をカットオフ値とした場合の値である。

実施例 5

[0251] 糖尿病患者３９２人から採取された血清中のアミノ酸濃度の測定を、上述した実施形態で説明した（Ａ）の測定方法で行った。アミノ酸濃度を測定してから１０年以内に心血管イベントを発症した糖尿病患者を心血管イベント発症者とした。３９２人の糖尿病患者を、心血管イベント発症者と心血管イ

ベント非発症者の２群に分類した。心血管イベント発症者および心血管イベント非発症者はそれぞれ、６４名および３２８名であった。６４名の心血管イベント発症者の内訳は、心筋梗塞１１名、狭心症２９名、心不全５名、脳虚血１名、脳梗塞１２名、脳出血５名、内頚動脈狭窄症１名である。実施例３で記述した血清中のアミノ酸濃度を変数に持つ早期腎症を判別するための多変量判別式（多変量関数）を用いて、将来の心血管イベント発症の評価を行った。

[0252] 実施例３で説明した図２３から図２６に記述されたロジスティック回帰式の一覧を、図５５から図５８に示す。ここで、図５５から図５８には、ロジスティック回帰式に含まれる変数の組み合わせ、将来の心血管イベント発症者と心血管イベント非発症者に関するＲＯＣ＿ＡＵＣ値が示されている。

[0253] 実施例３で記述した変数の組「Ａｌａ，Ｏｒｎ，Ｇｌｕ，３－ＭｅＨｉｓ，Ｔｒｐ，Ｃｙｓ」を持つ指標式「（－２．８１４）＋（０．００２９１７）Ａｌａ＋（－０．０１６０９）Ｏｒｎ＋（０．０２６３１）Ｇｌｕ＋（０．３７８１）３－ＭｅＨｉｓ＋（－０．０２３６０）Ｔｒｐ＋（０．０２２９２）Ｃｙｓ」の判別能は、ＲＯＣ＿ＡＵＣ＝０．６５１，感度＝０．２９７，特異度＝０．９６３と良好なものであった。なお、上記感度及び特異度は、感度と特異度の平均が最も高くなる最高判別点をカットオフ値とした場合の値である。

[0254] 実施例３で説明した図２７から図３０に記述されたロジスティック回帰式の一覧を、図５９から図６２に示す。ここで、図５９から図６２には、ロジスティック回帰式に含まれる変数の組み合わせ、将来の心血管イベント発症者と心血管イベント非発症者に関するＲＯＣ＿ＡＵＣ値が示されている。

[0255] 実施例３で記述した変数の組「Ａｌａ，Ｓｅｒ，Ｌｅｕ，Ｌｙｓ，Ｃｉｔ，Ｔｒｐ」を持つ指標式「（－２．３００）＋（０．００４０４８）Ａｌａ＋（－０．０１２３８）Ｓｅｒ＋（０．０１１５８）Ｌｅｕ＋（０．００４３７１）Ｌｙｓ＋（０．０１９２０）Ｃｉｔ＋（－０．０３４６４）Ｔｒｐ」の判別能は、ＲＯＣ＿ＡＵＣ＝０．６１７，感度＝０．６４１，特異度＝

０．６０４と良好なものであった。なお、上記感度及び特異度は、感度と特異度の平均が最も高くなる最高判別点をカットオフ値とした場合の値である。

[0256] 実施例３で説明した図３１から図３４に記述された線形判別式の一覧を、図６３から図６６に示す。ここで、図６３から図６６には、線形判別式に含まれる変数の組み合わせ、将来の心血管イベント発症者と心血管イベント非発症者に関するＲＯＣ＿ＡＵＣ値が示されている。

[0257] 実施例３で記述した変数の組「Ａｌａ，Ｇｌｕ，３－ＭｅＨｉｓ，Ｃｉｔ，Ｔｒｐ，Ｃｙｓ」を持つ指標式「（－１．１３１１）＋（０．００１０）Ａｌａ＋（０．００８７）Ｇｌｕ＋（０．１４０５）３－ＭｅＨｉｓ＋（－０．００４０）Ｃｉｔ＋（－０．００９１）Ｔｒｐ＋（０．００６７）Ｃｙｓ」の判別能は、ＲＯＣ＿ＡＵＣ＝０．６５０，感度＝０．３２８，特異度＝０．９４５と良好なものであった。なお、上記感度及び特異度は、感度と特異度の平均が最も高くなる最高判別点をカットオフ値とした場合の値である。

[0258] 実施例３で説明した図３５から図３８に記述された線形判別式の一覧を、図６７から図７０に示す。ここで、図６７から図７０には、線形判別式に含まれる変数の組み合わせ、将来の心血管イベント発症者と心血管イベント非発症者に関するＲＯＣ＿ＡＵＣ値が示されている。

[0259] 実施例３で記述した変数の組「Ａｌａ，Ｓｅｒ，Ｉｌｅ，Ｌｙｓ，Ｐｈｅ，Ｔｒｐ」を持つ指標式「（－０．９５８７）＋（０．００１３）Ａｌａ＋（－０．００４９）Ｓｅｒ＋（０．００７４）Ｉｌｅ＋（０．００１４）Ｌｙｓ＋（０．０１１６）Ｐｈｅ＋（－０．０１７３）Ｔｒｐ」の判別能は、ＲＯＣ＿ＡＵＣ＝０．５９５，感度＝０．３２８，特異度＝０．８６６と良好なものであった。なお、上記感度及び特異度は、感度と特異度の平均が最も高くなる最高判別点をカットオフ値とした場合の値である。

実施例 6

[0260] 実施例５で測定したものと同じアミノ酸濃度データを用いて、実施例１で

有意（ｐ＜０．０５）であったアミノ酸および実施例３において各種多変量判別式と各種バリデーション法のいずれかの組み合わせで出現頻度が多い順に１０位以内となったアミノ酸について、将来の心血管イベント発症と心血管イベント非発症の判別能をＲＯＣ＿ＡＵＣ（受信者特性曲線の曲線下面積）で評価した。

[0261] ノンパラメトリックの仮定のもとで帰無仮説を「ＲＯＣ＿ＡＵＣ＝０．５」とした場合の検定でＲＯＣ＿ＡＵＣが有意（ｐ＜０．０５）であったアミノ酸は、β－ＡＩＢＡ，３－ＭｅＨｉｓ，Ｃｉｔ，Ｔｒｐ，Ｃｙｓであった。これらのアミノ酸の内、β－ＡＩＢＡ，３－ＭｅＨｉｓ，Ｃｉｔ，Ｃｙｓは将来の心血管イベント発症群で有意に増加し、一方、Ｔｒｐは将来の心血管イベント発症群で有意に減少した。

[0262] つぎに、同じアミノ酸濃度データを用いて、心血管イベント発症の有無、およびアミノ酸濃度測定時から心血管イベント発症までの年数（心血管イベント非発症者の場合はアミノ酸濃度測定時から最終観察年までの年数）をもとに、アミノ酸について将来の心血管イベント発症と心血管イベント非発症の判別能を、単変量Ｃｏｘ比例ハザードモデルで評価した。将来の心血管イベント発症予測因子として有意（ｐ＜０．０５）であったアミノ酸はβ－ＡＩＢＡ，３－ＭｅＨｉｓ，Ｃｉｔ，Ｔｒｐ，Ｃｙｓであった。

実施例 7

[0263] 実施例５で測定したものと同じアミノ酸濃度データ、実施例１で有意（ｐ＜０．０５）であったアミノ酸に関するアミノ酸濃度データ、および実施例３で各種多変量判別式と各種バリデーション法のいずれかの組み合わせで出現頻度が多い順に１０位以内となったアミノ酸に関するアミノ酸濃度データを用いて、実施例６で記述した将来の心血管イベント発症の診断に有効な、血清中のアミノ酸濃度を変数に持つ将来の心血管イベント発症を判別するための多変量判別式（多変量関数）を求めた。

[0264] まず、多変量判別式としてロジスティック回帰式を用いた。ロジスティック回帰式に含める変数の組み合わせを３１種類のアミノ酸から探索し、そし

てクロスバリデーションとしてＬｅａｖｅ－Ｏｎｅ－Ｏｕｔ法を採用して、将来の心血管イベント発症の良好な判別能を持つロジスティック回帰式の探索を鋭意実施した。

[0265] ＲＯＣ＿ＡＵＣで評価した判別能が同等に良好なロジスティック回帰式の一覧を、図７１から図７４に示す。ここで、図７１から図７４には、ロジスティック回帰式に含まれる変数の組み合わせ、クロスバリデーション有りでのＲＯＣ＿ＡＵＣ値、およびクロスバリデーション無しでのＲＯＣ＿ＡＵＣ値が示されている。図７１から図７４に含まれる式における変数の出現頻度を多い順に１０位まで列挙すると、Ｇｌｕ，３－ＭｅＨｉｓ，Ｔｒｐ，Ｈｙｐｒｏ，Ｓａｒ，Ｌｅｕ，Ｈｉｓ，Ａｒｇ，Ｌｙｓ，Ｃｙｓである。

[0266] なお、判別能が同等に良好なロジスティック回帰式のうち、例えば、変数の組「Ｈｙｐｒｏ，Ｇｌｕ，Ｈｉｓ，３－ＭｅＨｉｓ，Ａｒｇ，Ｔｒｐ」を持つ指標式「（０．２１７８）＋（－０．０３８８２）Ｈｙｐｒｏ＋（０．０１７８９）Ｇｌｕ＋（－０．０２９０４）Ｈｉｓ＋（０．３１８０）３－ＭｅＨｉｓ＋（０．００７２６３）Ａｒｇ＋（－０．０２２３６）Ｔｒｐ」の判別能は、ＲＯＣ＿ＡＵＣ＝０．７０６，感度＝０．６０９，特異度＝０．７４４と良好なものであった。なお、上記感度及び特異度は、感度と特異度の平均が最も高くなる最高判別点をカットオフ値とした場合の値である。

[0267] ロジスティック回帰式に含める変数の組み合わせを１４種類のアミノ酸から探索し、そしてクロスバリデーションとしてＬｅａｖｅ－Ｏｎｅ－Ｏｕｔ法を採用して、将来の心血管イベント発症に関して良好な判別能を持つロジスティック回帰式の探索を鋭意実施した。

[0268] ＲＯＣ＿ＡＵＣで評価した判別能が同等に良好なロジスティック回帰式の一覧を、図７５から図７８に示す。ここで、図７５から図７８には、ロジスティック回帰式に含まれる変数の組み合わせ、クロスバリデーション有りでのＲＯＣ＿ＡＵＣ値、およびクロスバリデーション無しでのＲＯＣ＿ＡＵＣ値が示されている。図７５から図７８に含まれる式における変数の出現頻度を多い順に１０位まで列挙すると、Ｔｒｐ，Ｓｅｒ，Ｈｉｓ，Ａｒｇ，Ｏｒ

ｎ，Ｌｙｓ，Ｃｉｔ，Ｐｒｏ，Ｉｌｅ，Ｐｈｅである。

[0269] なお、判別能が同等に良好なロジスティック回帰式のうち、例えば、変数の組「Ｓｅｒ，Ｏｒｎ，Ｈｉｓ，Ａｒｇ，Ｔｒｐ」を持つ指標式「（１．２１６）＋（－０．０１３６７）Ｓｅｒ＋（０．０１５６０）Ｏｒｎ＋（－０．０１７９４）Ｈｉｓ＋（０．００７９０６）Ａｒｇ＋（－０．０２９７３）Ｔｒｐ」の判別能は、ＲＯＣ＿ＡＵＣ＝０．６６１，感度＝０．５１６，特異度＝０．７６２と良好なものであった。なお、上記感度及び特異度は、感度と特異度の平均が最も高くなる最高判別点をカットオフ値とした場合の値である。

[0270] つぎに、多変量判別式として線形判別式を用いた。線形判別式に含める変数の組み合わせを３１種類のアミノ酸から探索し、そしてクロスバリデーションとしてブートストラップ法を採用して、将来の心血管イベント発症の良好な判別能を持つ線形判別式の探索を鋭意実施した。

[0271] ＲＯＣ＿ＡＵＣで評価した判別能が同等に良好な線形判別式の一覧を、図７９から図８２に示す。ここで、図７９から図８２には、線形判別式、クロスバリデーション有りでのＲＯＣ＿ＡＵＣ値の平均値、およびクロスバリデーション無しでのＲＯＣ＿ＡＵＣ値が示されている。図７９から図８２に含まれる式における変数の出現頻度を多い順に１０位まで列挙すると、Ｇｌｕ，Ｔｒｐ，３－ＭｅＨｉｓ，Ｈｉｓ，Ｓａｒ，Ａｒｇ，Ｌｅｕ，Ｃｉｔ，Ｈｙｐｒｏ，Ｓｅｒである。

[0272] なお、判別能が同等に良好な線形判別式のうち、例えば、変数の組「Ｓａｒ，Ｌｅｕ，Ｇｌｕ，３－ＭｅＨｉｓ，Ａｒｇ，Ｔｒｐ」を持つ指標式「（－０．４５３７）＋（－０．０５００）Ｓａｒ＋（－０．００１８）Ｌｅｕ＋（０．００５４）Ｇｌｕ＋（０．０９３５）３－ＭｅＨｉｓ＋（０．００１０）Ａｒｇ＋（－０．００６４）Ｔｒｐ」の判別能は、ＲＯＣ＿ＡＵＣ＝０．７００，感度＝０．６２５，特異度＝０．７３２と良好なものであった。なお、上記感度及び特異度は、感度と特異度の平均が最も高くなる最高判別点をカットオフ値とした場合の値である。

[0273] 線形判別式に含める変数の組み合わせを１４種類のアミノ酸から探索し、そしてクロスバリデーションとしてブートストラップ法を採用して、将来の心血管イベント発症の良好な判別能を持つ線形判別式の探索を鋭意実施した。

[0274] ＲＯＣ＿ＡＵＣで評価した判別能が同等に良好な線形判別式の一覧を、図８３から図８６に示す。ここで、図８３から図８６には、線形判別式、クロスバリデーション有りでのＲＯＣ＿ＡＵＣ値の平均値、およびクロスバリデーション無しでのＲＯＣ＿ＡＵＣ値が示されている。図８３から図８６に含まれる式における変数の出現頻度を多い順に１０位まで列挙すると、Ｔｒｐ，Ｓｅｒ，Ｈｉｓ，Ａｒｇ，Ｃｉｔ，Ｌｙｓ，Ｏｒｎ，Ｐｒｏ，Ｐｈｅ，Ｌｅｕである。

[0275] なお、判別能が同等に良好な線形判別式のうち、例えば、変数の組「Ｓｅｒ，Ｌｙｓ，Ｈｉｓ，Ｃｉｔ，Ｔｒｐ」を持つ指標式「（－０．１４７４）＋（－０．００２７）Ｓｅｒ＋（０．００１８）Ｌｙｓ＋（－０．００４７）Ｈｉｓ＋（０．００６７）Ｃｉｔ＋（－０．００７５）Ｔｒｐ」の判別能は、ＲＯＣ＿ＡＵＣ＝０．６６０，感度＝０．７０３，特異度＝０．５６７と良好なものであった。なお、上記感度及び特異度は、感度と特異度の平均が最も高くなる最高判別点をカットオフ値とした場合の値である。

[0276] つぎに、多変量判別式としてＣｏｘ比例ハザードモデルを用いた。Ｃｏｘ比例ハザードモデルに含める変数の組み合わせを３１種類のアミノ酸から探索し、将来の心血管イベント発症の良好な判別能を持つＣｏｘ比例ハザードモデル式の探索を鋭意実施した。

[0277] ＲＯＣ＿ＡＵＣで評価した判別能が同等に良好なＣｏｘ比例ハザードモデル式の一覧を、図８７から図９０に示す。ここで、図８７から図９０には、Ｃｏｘ比例ハザードモデル式、クロスバリデーション有りでのＲＯＣ＿ＡＵＣ値の平均値、およびクロスバリデーション無しでのＲＯＣ＿ＡＵＣ値が示されている。図８７から図９０に含まれる式における変数の出現頻度を多い順に１０位まで列挙すると、Ｇｌｕ，３－ＭｅＨｉｓ，Ｔｒｐ，Ｈｙｐｒｏ

，Ｓａｒ，Ｌｅｕ，Ｃｙｓ，β－ＡＩＢＡ，Ｐｈｅ，Ａｌａである。

[0278] なお、判別能が同等に良好なＣｏｘ比例ハザードモデル式のうち、例えば、変数の組「Ｈｙｐｒｏ，Ｇｌｕ，３－ＭｅＨｉｓ，Ｔｒｐ」を持つ指標式「（－０．０２３２）Ｈｙｐｒｏ＋（０．０１１０）Ｇｌｕ＋（０．１８５５）３－ＭｅＨｉｓ＋（－０．０２６９）Ｔｒｐ」の判別能は、ＲＯＣ＿ＡＵＣ＝０．６８６，感度＝０．５１６，特異度＝０．８３５と良好なものであった。なお、上記感度及び特異度は、感度と特異度の平均が最も高くなる最高判別点をカットオフ値とした場合の値である。

[0279] Ｃｏｘ比例ハザードモデル式に含める変数の組み合わせを１４種類のアミノ酸から探索し、将来の心血管イベント発症の良好な判別能を持つＣｏｘ比例ハザードモデル式の探索を鋭意実施した。

[0280] ＲＯＣ＿ＡＵＣで評価した判別能が同等に良好なＣｏｘ比例ハザードモデル式の一覧を、図９１から図９４に示す。ここで、図９１から図９４には、Ｃｏｘ比例ハザードモデル式、クロスバリデーション有りでのＲＯＣ＿ＡＵＣ値の平均値、およびクロスバリデーション無しでのＲＯＣ＿ＡＵＣ値が示されている。図９１から図９４に含まれる式における変数の出現頻度を多い順に１０位まで列挙すると、Ｔｒｐ，Ｓｅｒ，Ｈｉｓ，Ｌｙｓ，Ａｒｇ，Ｃｉｔ，Ｏｒｎ，Ｐｒｏ，Ａｌａ，Ｐｈｅ，Ｌｅｕ，Ｉｌｅの１２個である。

[0281] なお、判別能が同等に良好なＣｏｘ比例ハザードモデル式のうち、例えば、変数の組「Ｓｅｒ，Ｌｙｓ，Ｈｉｓ，Ｃｉｔ，Ｔｒｐ」を持つ指標式「（－０．００９０）Ｓｅｒ＋（０．００７２）Ｌｙｓ＋（－０．０２０１）Ｈｉｓ＋（０．０１５３）Ｃｉｔ＋（－０．０２６６）Ｔｒｐ」の判別能は、ＲＯＣ＿ＡＵＣ＝０．６６０，感度＝０．６０９，特異度＝０．６８９と良好なものであった。なお、上記感度及び特異度は、感度と特異度の平均が最も高くなる最高判別点をカットオフ値とした場合の値である。

産業上の利用可能性

[0282] 以上のように、本発明にかかる早期腎症の評価方法などは、産業上の多くの分野、特に医薬品や食品、医療などの分野で広く実施することができ、特

に、早期腎症の状態の進行予測や疾病リスク予測やプロテオームやメタボローム解析などを行うバイオインフォマティクス分野において極めて有用である。

符号の説明

[0283] １００　早期腎症評価装置

１０２　制御部

１０２ａ　要求解釈部

１０２ｂ　閲覧処理部

１０２ｃ　認証処理部

１０２ｄ　電子メール生成部

１０２ｅ　Ｗｅｂページ生成部

１０２ｆ　受信部

１０２ｇ　早期腎症状態情報指定部

１０２ｈ　多変量判別式作成部

１０２ｈ１　候補多変量判別式作成部

１０２ｈ２　候補多変量判別式検証部

１０２ｈ３　変数選択部

１０２ｉ　判別値算出部

１０２ｊ　判別値基準評価部

１０２ｊ１　判別値基準判別部

１０２ｋ　結果出力部

１０２ｍ　送信部

１０４　通信インターフェース部

１０６　記憶部

１０６ａ　利用者情報ファイル

１０６ｂ　アミノ酸濃度データファイル

１０６ｃ　早期腎症状態情報ファイル

１０６ｄ　指定早期腎症状態情報ファイル

１０６ｅ　多変量判別式関連情報データベース

１０６ｅ１　候補多変量判別式ファイル

１０６ｅ２　検証結果ファイル

１０６ｅ３　選択早期腎症状態情報ファイル

１０６ｅ４　多変量判別式ファイル

１０６ｆ　判別値ファイル

１０６ｇ　評価結果ファイル

１０８　入出力インターフェース部

１１２　入力装置

１１４　出力装置

２００　クライアント装置（情報通信端末装置）

３００　ネットワーク

４００　データベース装置

請求の範囲

[請求項1] 評価対象から採取した血液中のアミノ酸の濃度値に関するアミノ酸濃度データを取得する取得ステップと、

前記取得ステップで取得した前記評価対象の前記アミノ酸濃度データに含まれるＥｔＯＨＮＨ２，Ｇｌｙ，Ｓａｒ，Ａｌａ，β－ＡＩＢＡ，α－ＡＢＡ，Ｓｅｒ，Ｐｒｏ，Ｖａｌ，Ｔｈｒ，Ｔａｕ，Ｈｙｐｒｏ，Ｉｌｅ，Ｌｅｕ，Ａｓｎ，Ｏｒｎ，Ａｓｐ，Ｇｌｎ，Ｌｙｓ，Ｇｌｕ，Ｍｅｔ，Ｈｉｓ，α－ＡＡＡ，Ｐｈｅ，３－ＭｅＨｉｓ，Ａｒｇ，Ｃｉｔ，Ｔｙｒ，Ｔｒｐ，Ｃｙｓのうち少なくとも１つの前記濃度値に基づいて、前記評価対象につき早期腎症の状態を評価する濃度値基準評価ステップと

を含むことを特徴とする早期腎症の評価方法。

[請求項2] 前記濃度値基準評価ステップは、前記アミノ酸濃度データに含まれるＳａｒ，Ａｌａ，β－ＡＩＢＡ，α－ＡＢＡ，Ｓｅｒ，Ｐｒｏ，Ｖａｌ，Ｈｙｐｒｏ，Ｉｌｅ，Ｌｅｕ，Ｏｒｎ，Ｌｙｓ，Ｇｌｕ，Ｍｅｔ，Ｈｉｓ，α－ＡＡＡ，Ｐｈｅ，３－ＭｅＨｉｓ，Ａｒｇ，Ｃｉｔ，Ｔｒｐ，Ｃｙｓのうち少なくとも１つの前記濃度値に基づいて、前記評価対象が前記早期腎症を有するかを評価すること、

を特徴とする請求項１に記載の早期腎症の評価方法。

[請求項3] 前記濃度値基準評価ステップは、前記アミノ酸濃度データに含まれるβ－ＡＩＢＡ，３－ＭｅＨｉｓ，Ｃｉｔ，Ｔｒｐ，Ｃｙｓ，Ｇｌｕ，Ｈｙｐｒｏ，Ｓａｒ，Ｌｅｕ，Ｈｉｓ，Ａｒｇ，Ｌｙｓ，Ｓｅｒ，Ｐｈｅ，Ａｌａ，Ｏｒｎ，Ｐｒｏ，Ｉｌｅのうち少なくとも１つの前記濃度値に基づいて、前記評価対象が将来、心血管イベントを発症するかをさらに評価すること、

を特徴とする請求項２に記載の早期腎症の評価方法。

[請求項4] 前記濃度値基準評価ステップは、前記アミノ酸濃度データに含まれるＥｔＯＨＮＨ２，Ｓａｒ，β－ＡＩＢＡ，α－ＡＢＡ，Ｓｅｒ，Ｖ

ａｌ，Ｔｈｒ，Ｔａｕ，Ｈｙｐｒｏ，Ｉｌｅ，Ａｓｎ，Ｏｒｎ，Ａｓｐ，Ｇｌｎ，α－ＡＡＡ，Ａｒｇ，Ｔｙｒ，Ｃｙｓ，Ｇｌｙ，Ａｌａ，Ｐｒｏ，Ｌｅｕ，Ｌｙｓ，Ｍｅｔ，Ｈｉｓ，Ｐｈｅのうち少なくとも１つの前記濃度値に基づいて、前記評価対象が将来、前記早期腎症を発症するかを評価すること、

を特徴とする請求項１に記載の早期腎症の評価方法。

[請求項5] 前記濃度値基準評価ステップは、

前記アミノ酸濃度データに含まれるＥｔＯＨＮＨ２，Ｇｌｙ，Ｓａｒ，Ａｌａ，β－ＡＩＢＡ，α－ＡＢＡ，Ｓｅｒ，Ｐｒｏ，Ｖａｌ，Ｔｈｒ，Ｔａｕ，Ｈｙｐｒｏ，Ｉｌｅ，Ｌｅｕ，Ａｓｎ，Ｏｒｎ，Ａｓｐ，Ｇｌｎ，Ｌｙｓ，Ｇｌｕ，Ｍｅｔ，Ｈｉｓ，α－ＡＡＡ，Ｐｈｅ，３－ＭｅＨｉｓ，Ａｒｇ，Ｃｉｔ，Ｔｙｒ，Ｔｒｐ，Ｃｙｓのうち少なくとも１つの前記濃度値、および前記アミノ酸の濃度を変数として含みＥｔＯＨＮＨ２，Ｇｌｙ，Ｓａｒ，Ａｌａ，β－ＡＩＢＡ，α－ＡＢＡ，Ｓｅｒ，Ｐｒｏ，Ｖａｌ，Ｔｈｒ，Ｔａｕ，Ｈｙｐｒｏ，Ｉｌｅ，Ｌｅｕ，Ａｓｎ，Ｏｒｎ，Ａｓｐ，Ｇｌｎ，Ｌｙｓ，Ｇｌｕ，Ｍｅｔ，Ｈｉｓ，α－ＡＡＡ，Ｐｈｅ，３－ＭｅＨｉｓ，Ａｒｇ，Ｃｉｔ，Ｔｙｒ，Ｔｒｐ，Ｃｙｓのうち少なくとも１つを前記変数として含む予め設定された、前記早期腎症の前記状態を評価するための多変量判別式に基づいて、当該多変量判別式の値である判別値を算出する判別値算出ステップ

をさらに含むこと、

を特徴とする請求項１に記載の早期腎症の評価方法。

[請求項6] 前記多変量判別式は、ロジスティック回帰式、分数式、線形判別式、重回帰式、サポートベクターマシンで作成された式、マハラノビス距離法で作成された式、正準判別分析で作成された式、決定木で作成された式、Ｃｏｘ比例ハザードモデル式のいずれか１つであること、

を特徴とする請求項５に記載の早期腎症の評価方法。

[請求項7] 前記濃度値基準評価ステップは、

前記判別値算出ステップで算出した前記判別値に基づいて、前記評価対象につき前記早期腎症の前記状態を評価する判別値基準評価ステップ

をさらに含むこと、

を特徴とする請求項５または６に記載の早期腎症の評価方法。

[請求項8] 前記判別値算出ステップは、前記アミノ酸濃度データに含まれるＳａｒ，Ａｌａ，β－ＡＩＢＡ，α－ＡＢＡ，Ｓｅｒ，Ｐｒｏ，Ｖａｌ，Ｈｙｐｒｏ，Ｉｌｅ，Ｌｅｕ，Ｏｒｎ，Ｌｙｓ，Ｇｌｕ，Ｍｅｔ，Ｈｉｓ，α－ＡＡＡ，Ｐｈｅ，３－ＭｅＨｉｓ，Ａｒｇ，Ｃｉｔ，Ｔｒｐ，Ｃｙｓのうち少なくとも１つの前記濃度値、およびＳａｒ，Ａｌａ，β－ＡＩＢＡ，α－ＡＢＡ，Ｓｅｒ，Ｐｒｏ，Ｖａｌ，Ｈｙｐｒｏ，Ｉｌｅ，Ｌｅｕ，Ｏｒｎ，Ｌｙｓ，Ｇｌｕ，Ｍｅｔ，Ｈｉｓ，α－ＡＡＡ，Ｐｈｅ，３－ＭｅＨｉｓ，Ａｒｇ，Ｃｉｔ，Ｔｒｐ，Ｃｙｓのうち少なくとも１つを前記変数として含む前記多変量判別式に基づいて、前記判別値を算出し、

前記判別値基準評価ステップは、前記判別値に基づいて、前記評価対象が前記早期腎症を有するかを評価すること、

を特徴とする請求項７に記載の早期腎症の評価方法。

[請求項9] 前記早期腎症の前記評価で用いられる前記多変量判別式は、Ａｌａ，Ｏｒｎ，Ｇｌｕ，３－ＭｅＨｉｓ，Ｔｒｐ，Ｃｙｓを前記変数として含む前記ロジスティック回帰式、Ａｌａ，Ｓｅｒ，Ｌｅｕ，Ｌｙｓ，Ｃｉｔ，Ｔｒｐを前記変数として含む前記ロジスティック回帰式、Ａｌａ，Ｇｌｕ，３－ＭｅＨｉｓ，Ｃｉｔ，Ｔｒｐ，Ｃｙｓを前記変数として含む前記線形判別式、またはＡｌａ，Ｓｅｒ，Ｉｌｅ，Ｌｙｓ，Ｐｈｅ，Ｔｒｐを前記変数として含む前記線形判別式であること、

を特徴とする請求項８に記載の早期腎症の評価方法。

［請求項10］ 前記判別値算出ステップは、前記アミノ酸濃度データに含まれるβ－ＡＩＢＡ，３－ＭｅＨｉｓ，Ｃｉｔ，Ｔｒｐ，Ｃｙｓ，Ｇｌｕ，Ｈｙｐｒｏ，Ｓａｒ，Ｌｅｕ，Ｈｉｓ，Ａｒｇ，Ｌｙｓ，Ｓｅｒ，Ｐｈｅ，Ａｌａ，Ｏｒｎ，Ｐｒｏ，Ｉｌｅのうち少なくとも１つの前記濃度値、およびβ－ＡＩＢＡ，３－ＭｅＨｉｓ，Ｃｉｔ，Ｔｒｐ，Ｃｙｓ，Ｇｌｕ，Ｈｙｐｒｏ，Ｓａｒ，Ｌｅｕ，Ｈｉｓ，Ａｒｇ，Ｌｙｓ，Ｓｅｒ，Ｐｈｅ，Ａｌａ，Ｏｒｎ，Ｐｒｏ，Ｉｌｅのうち少なくとも１つを前記変数として含む前記多変量判別式に基づいて、前記判別値を算出し、

前記判別値基準評価ステップは、前記判別値に基づいて、前記評価対象が将来、心血管イベントを発症するかをさらに評価すること、

を特徴とする請求項８または９に記載の早期腎症の評価方法。

［請求項11］ 前記心血管イベントの前記評価で用いられる前記多変量判別式は、Ａｌａ，Ｏｒｎ，Ｇｌｕ，３－ＭｅＨｉｓ，Ｔｒｐ，Ｃｙｓを前記変数として含む前記ロジスティック回帰式、Ｈｙｐｒｏ，Ｇｌｕ，Ｈｉｓ，３－ＭｅＨｉｓ，Ａｒｇ，Ｔｒｐを前記変数として含む前記ロジスティック回帰式、Ａｌａ，Ｓｅｒ，Ｌｅｕ，Ｌｙｓ，Ｃｉｔ，Ｔｒｐを前記変数として含む前記ロジスティック回帰式、Ｓｅｒ，Ｏｒｎ，Ｈｉｓ，Ａｒｇ，Ｔｒｐを前記変数として含む前記ロジスティック回帰式、Ａｌａ，Ｇｌｕ，３－ＭｅＨｉｓ，Ｃｉｔ，Ｔｒｐ，Ｃｙｓを前記変数として含む前記線形判別式、Ｓａｒ，Ｌｅｕ，Ｇｌｕ，３－ＭｅＨｉｓ，Ａｒｇ，Ｔｒｐを前記変数として含む前記線形判別式、Ａｌａ，Ｓｅｒ，Ｉｌｅ，Ｌｙｓ，Ｐｈｅ，Ｔｒｐを前記変数として含む前記線形判別式、Ｓｅｒ，Ｌｙｓ，Ｈｉｓ，Ｃｉｔ，Ｔｒｐを前記変数として含む前記線形判別式、Ｈｙｐｒｏ，Ｇｌｕ，３－ＭｅＨｉｓ，Ｔｒｐを前記変数として含む前記Ｃｏｘ比例ハザードモデル式、またはＳｅｒ，Ｌｙｓ，Ｈｉｓ，Ｃｉｔ，Ｔｒｐを前記変数として含む前記Ｃｏｘ比例ハザードモデル式であること、

を特徴とする請求項１０に記載の早期腎症の評価方法。

[請求項12] 前記判別値算出ステップは、前記アミノ酸濃度データに含まれるＥｔＯＨＮＨ２，Ｓａｒ，β－ＡＩＢＡ，α－ＡＢＡ，Ｓｅｒ，Ｖａｌ，Ｔｈｒ，Ｔａｕ，Ｈｙｐｒｏ，Ｉｌｅ，Ａｓｎ，Ｏｒｎ，Ａｓｐ，Ｇｌｎ，α－ＡＡＡ，Ａｒｇ，Ｔｙｒ，Ｃｙｓ，Ｇｌｙ，Ａｌａ，Ｐｒｏ，Ｌｅｕ，Ｌｙｓ，Ｍｅｔ，Ｈｉｓ，Ｐｈｅのうち少なくとも１つの前記濃度値、およびＥｔＯＨＮＨ２，Ｓａｒ，β－ＡＩＢＡ，α－ＡＢＡ，Ｓｅｒ，Ｖａｌ，Ｔｈｒ，Ｔａｕ，Ｈｙｐｒｏ，Ｉｌｅ，Ａｓｎ，Ｏｒｎ，Ａｓｐ，Ｇｌｎ，α－ＡＡＡ，Ａｒｇ，Ｔｙｒ，Ｃｙｓ，Ｇｌｙ，Ａｌａ，Ｐｒｏ，Ｌｅｕ，Ｌｙｓ，Ｍｅｔ，Ｈｉｓ，Ｐｈｅのうち少なくとも１つを前記変数として含む前記多変量判別式に基づいて、前記判別値を算出し、

前記判別値基準評価ステップは、前記判別値に基づいて、前記評価対象が将来、前記早期腎症を発症するかを評価すること、

を特徴とする請求項７に記載の早期腎症の評価方法。

[請求項13] 前記多変量判別式は、β－ＡＩＢＡ，Ｖａｌ，Ｔａｕ，Ｉｌｅ，α－ＡＡＡ，Ａｒｇを前記変数として含む前記ロジスティック回帰式、Ｓｅｒ，Ｖａｌ，Ｍｅｔ，Ａｒｇ，Ｔｙｒを前記変数として含む前記ロジスティック回帰式、Ｖａｌ，Ｔａｕ，Ｉｌｅ，α－ＡＡＡ，Ｐｈｅ，Ａｒｇを前記変数として含む前記線形判別式、またはＳｅｒ，Ｐｒｏ，Ｖａｌ，Ｉｌｅ，Ｌｅｕ，Ａｒｇを前記変数として含む前記線形判別式であること、

を特徴とする請求項１２に記載の早期腎症の評価方法。

[請求項14] 制御部と記憶部とを備え、評価対象につき早期腎症の状態を評価する早期腎症評価装置であって、

前記制御部は、

アミノ酸の濃度値に関する前記評価対象のアミノ酸濃度データに含まれるＥｔＯＨＮＨ２，Ｇｌｙ，Ｓａｒ，Ａｌａ，β－ＡＩＢＡ，α

－ＡＢＡ，Ｓｅｒ，Ｐｒｏ，Ｖａｌ，Ｔｈｒ，Ｔａｕ，Ｈｙｐｒｏ，Ｉｌｅ，Ｌｅｕ，Ａｓｎ，Ｏｒｎ，Ａｓｐ，ＧＩｎ，Ｌｙｓ，Ｇｌｕ，Ｍｅｔ，Ｈｉｓ，α－ＡＡＡ，Ｐｈｅ，３－ＭｅＨｉｓ，Ａｒｇ，Ｃｉｔ，Ｔｙｒ，Ｔｒｐ，Ｃｙｓのうち少なくとも１つの前記濃度値、および前記アミノ酸の濃度を変数として含みＥｔＯＨＮＨ２，ＧＩｙ，Ｓａｒ，Ａｌａ，β－ＡＩＢＡ，α－ＡＢＡ，Ｓｅｒ，Ｐｒｏ，Ｖａｌ，Ｔｈｒ，Ｔａｕ，Ｈｙｐｒｏ，Ｉｌｅ，Ｌｅｕ，Ａｓｎ，Ｏｒｎ，Ａｓｐ，ＧＩｎ，Ｌｙｓ，Ｇｌｕ，Ｍｅｔ，Ｈｉｓ，α－ＡＡＡ，Ｐｈｅ，３－ＭｅＨｉｓ，Ａｒｇ，Ｃｉｔ，Ｔｙｒ，Ｔｒｐ，Ｃｙｓのうち少なくとも１つを前記変数として含む前記記憶部に記憶された、前記早期腎症の前記状態を評価するための多変量判別式に基づいて、当該多変量判別式の値である判別値を算出する判別値算出手段

を備えたこと、

を特徴とする早期腎症評価装置。

［請求項15］ 前記制御部は、前記判別値算出手段で算出した前記判別値に基づいて、前記評価対象につき前記早期腎症の前記状態を評価する判別値基準評価手段をさらに備えたこと、

を特徴とする請求項１４に記載の早期腎症評価装置。

［請求項16］ 制御部と記憶部とを備えた情報処理装置において実行される、評価対象につき早期腎症の状態を評価する早期腎症評価方法であって、

前記制御部において実行される、

アミノ酸の濃度値に関する前記評価対象のアミノ酸濃度データに含まれるＥｔＯＨＮＨ２，ＧＩｙ，Ｓａｒ，Ａｌａ，β－ＡＩＢＡ，α－ＡＢＡ，Ｓｅｒ，Ｐｒｏ，Ｖａｌ，Ｔｈｒ，Ｔａｕ，Ｈｙｐｒｏ，Ｉｌｅ，Ｌｅｕ，Ａｓｎ，Ｏｒｎ，Ａｓｐ，ＧＩｎ，Ｌｙｓ，Ｇｌｕ，Ｍｅｔ，Ｈｉｓ，α－ＡＡＡ，Ｐｈｅ，３－ＭｅＨｉｓ，Ａｒｇ，Ｃｉｔ，Ｔｙｒ，Ｔｒｐ，Ｃｙｓのうち少なくとも１つの前記濃度値、および前記アミノ酸の濃度を変数として含みＥｔＯＨＮＨ２，ＧＩ

ｙ，Ｓａｒ，Ａｌａ，β－ＡＩＢＡ，α－ＡＢＡ，Ｓｅｒ，Ｐｒｏ，Ｖａｌ，Ｔｈｒ，Ｔａｕ，Ｈｙｐｒｏ，Ｉｌｅ，Ｌｅｕ，Ａｓｎ，Ｏｒｎ，Ａｓｐ，ＧＩｎ，Ｌｙｓ，Ｇｌｕ，Ｍｅｔ，Ｈｉｓ，α－ＡＡＡ，Ｐｈｅ，３－ＭｅＨｉｓ，Ａｒｇ，Ｃｉｔ，Ｔｙｒ，Ｔｒｐ，Ｃｙｓのうち少なくとも１つを前記変数として含む前記記憶部に記憶された、前記早期腎症の前記状態を評価するための多変量判別式に基づいて、当該多変量判別式の値である判別値を算出する判別値算出ステップ

を含むこと、

を特徴とする早期腎症評価方法。

［請求項17］ 制御部と記憶部とを備えた情報処理装置において実行させるための、評価対象につき早期腎症の状態を評価する早期腎症評価プログラムであって、

前記制御部において実行させるための、

アミノ酸の濃度値に関する前記評価対象のアミノ酸濃度データに含まれるＥｔＯＨＮＨ２，Ｇｌｙ，Ｓａｒ，Ａｌａ，β－ＡＩＢＡ，α－ＡＢＡ，Ｓｅｒ，Ｐｒｏ，Ｖａｌ，Ｔｈｒ，Ｔａｕ，Ｈｙｐｒｏ，Ｉｌｅ，Ｌｅｕ，Ａｓｎ，Ｏｒｎ，Ａｓｐ，ＧＩｎ，Ｌｙｓ，Ｇｌｕ，Ｍｅｔ，Ｈｉｓ，α－ＡＡＡ，Ｐｈｅ，３－ＭｅＨｉｓ，Ａｒｇ，Ｃｉｔ，Ｔｙｒ，Ｔｒｐ，Ｃｙｓのうち少なくとも１つの前記濃度値、および前記アミノ酸の濃度を変数として含みＥｔＯＨＮＨ２，Ｇｌｙ，Ｓａｒ，Ａｌａ，β－ＡＩＢＡ，α－ＡＢＡ，Ｓｅｒ，Ｐｒｏ，Ｖａｌ，Ｔｈｒ，Ｔａｕ，Ｈｙｐｒｏ，Ｉｌｅ，Ｌｅｕ，Ａｓｎ，Ｏｒｎ，Ａｓｐ，ＧＩｎ，Ｌｙｓ，Ｇｌｕ，Ｍｅｔ，Ｈｉｓ，α－ＡＡＡ，Ｐｈｅ，３－ＭｅＨｉｓ，Ａｒｇ，Ｃｉｔ，Ｔｙｒ，Ｔｒｐ，Ｃｙｓのうち少なくとも１つを前記変数として含む前記記憶部に記憶された、前記早期腎症の前記状態を評価するための多変量判別式に基づいて、当該多変量判別式の値である判別値を算出する判別値算出ステ

ップ

を含むこと、

を特徴とする早期腎症評価プログラム。

［請求項18］ 制御部と記憶部とを備え、評価対象につき早期腎症の状態を評価する早期腎症評価装置と、制御部を備え、アミノ酸の濃度値に関する前記評価対象のアミノ酸濃度データを提供する情報通信端末装置とを、ネットワークを介して通信可能に接続して構成された早期腎症評価システムであって、

前記情報通信端末装置の前記制御部は、

前記評価対象の前記アミノ酸濃度データを前記早期腎症評価装置へ送信するアミノ酸濃度データ送信手段と、

前記早期腎症評価装置から送信された、多変量判別式の値である判別値を受信する結果受信手段と

を備え、

前記早期腎症評価装置の前記制御部は、

前記情報通信端末装置から送信された前記アミノ酸濃度データを受信するアミノ酸濃度データ受信手段と、

前記アミノ酸濃度データ受信手段で受信した前記アミノ酸濃度データに含まれるＥｔＯＨＮＨ２，Ｇｌｙ，Ｓａｒ，Ａｌａ，β－ＡＩＢＡ，α－ＡＢＡ，Ｓｅｒ，Ｐｒｏ，Ｖａｌ，Ｔｈｒ，Ｔａｕ，Ｈｙｐｒｏ，Ｉｌｅ，Ｌｅｕ，Ａｓｎ，Ｏｒｎ，Ａｓｐ，Ｇｌｎ，Ｌｙｓ，Ｇｌｕ，Ｍｅｔ，Ｈｉｓ，α－ＡＡＡ，Ｐｈｅ，３－ＭｅＨｉｓ，Ａｒｇ，Ｃｉｔ，Ｔｙｒ，Ｔｒｐ，Ｃｙｓのうち少なくとも１つの前記濃度値、および前記アミノ酸の濃度を変数として含みＥｔＯＨＮＨ２，Ｇｌｙ，Ｓａｒ，Ａｌａ，β－ＡＩＢＡ，α－ＡＢＡ，Ｓｅｒ，Ｐｒｏ，Ｖａｌ，Ｔｈｒ，Ｔａｕ，Ｈｙｐｒｏ，Ｉｌｅ，Ｌｅｕ，Ａｓｎ，Ｏｒｎ，Ａｓｐ，Ｇｌｎ，Ｌｙｓ，Ｇｌｕ，Ｍｅｔ，Ｈｉｓ，α－ＡＡＡ，Ｐｈｅ，３－ＭｅＨｉｓ，Ａｒｇ，Ｃｉｔ，Ｔｙｒ，Ｔｒ

ｐ，Ｃｙｓのうち少なくとも１つを前記変数として含む前記記憶部に記憶された、前記早期腎症の前記状態を評価するための前記多変量判別式に基づいて、前記判別値を算出する判別値算出手段と、

前記判別値算出手段で算出した前記判別値を前記情報通信端末装置へ送信する結果送信手段と、

を備えたこと、

を特徴とする早期腎症評価システム。

[請求項19] 前記早期腎症評価装置の前記制御部は、前記判別値算出手段で算出した前記判別値に基づいて、前記評価対象につき前記早期腎症の前記状態を評価する判別値基準評価手段をさらに備え、

前記結果送信手段は、前記判別値基準評価手段で得られた前記評価対象の評価結果を前記情報通信端末装置へ送信し、

前記結果受信手段は、前記情報通信端末装置から送信された前記評価対象の前記評価結果を受信すること、

を特徴とする請求項１８に記載の早期腎症評価システム。

[請求項20] 制御部を備え、アミノ酸の濃度値に関する評価対象のアミノ酸濃度データを提供する情報通信端末装置であって、

前記制御部は、

多変量判別式の値である判別値を取得する結果取得手段

を備え、

前記判別値は、前記評価対象の前記アミノ酸濃度データに含まれるＥｔＯＨＮＨ２，Ｇｌｙ，Ｓａｒ，Ａｌａ，β－ＡＩＢＡ，α－ＡＢＡ，Ｓｅｒ，Ｐｒｏ，Ｖａｌ，Ｔｈｒ，Ｔａｕ，Ｈｙｐｒｏ，Ｉｌｅ，Ｌｅｕ，Ａｓｎ，Ｏｒｎ，Ａｓｐ，Ｇｌｎ，Ｌｙｓ，Ｇｌｕ，Ｍｅｔ，Ｈｉｓ，α－ＡＡＡ，Ｐｈｅ，３－ＭｅＨｉｓ，Ａｒｇ，Ｃｉｔ，Ｔｙｒ，Ｔｒｐ，Ｃｙｓのうち少なくとも１つの前記濃度値、および前記アミノ酸の濃度を変数として含みＥｔＯＨＮＨ２，Ｇｌｙ，Ｓａｒ，Ａｌａ，β－ＡＩＢＡ，α－ＡＢＡ，Ｓｅｒ，Ｐｒｏ，Ｖａｌ

，Ｔｈｒ，Ｔａｕ，Ｈｙｐｒｏ，Ｉｌｅ，Ｌｅｕ，Ａｓｎ，Ｏｒｎ，Ａｓｐ，ＧＩｎ，Ｌｙｓ，ＧＩｕ，Ｍｅｔ，Ｈｉｓ，α－ＡＡＡ，Ｐｈｅ，３－ＭｅＨｉｓ，Ａｒｇ，Ｃｉｔ，Ｔｙｒ，Ｔｒｐ，Ｃｙｓのうち少なくとも１つを前記変数として含む早期腎症の状態を評価するための前記多変量判別式に基づいて算出したものであること、

を特徴とする情報通信端末装置。

［請求項21］ 前記評価対象につき前記早期腎症の前記状態を評価する早期腎症評価装置とネットワークを介して通信可能に接続されており、

前記制御部は、前記評価対象の前記アミノ酸濃度データを前記早期腎症評価装置へ送信するアミノ酸濃度データ送信手段をさらに備え、

前記結果取得手段は、前記早期腎症評価装置から送信された前記判別値を受信すること、

を特徴とする請求項２０に記載の情報通信端末装置。

［請求項22］ 前記結果取得手段は、前記早期腎症評価装置から送信された、前記評価対象の前記早期腎症の前記状態に関する評価結果を受信し、

前記評価結果は、前記判別値に基づいて前記評価対象につき前記早期腎症の前記状態を評価した結果であること、

を特徴とする請求項２１に記載の情報通信端末装置。

［請求項23］ アミノ酸の濃度値に関する評価対象のアミノ酸濃度データを提供する情報通信端末装置とネットワークを介して通信可能に接続された、制御部と記憶部とを備え、前記評価対象につき早期腎症の状態を評価する早期腎症評価装置であって、

前記制御部は、

前記情報通信端末装置から送信された前記アミノ酸濃度データを受信するアミノ酸濃度データ受信手段と、

前記アミノ酸濃度データ受信手段で受信した前記アミノ酸濃度データに含まれるＥｔＯＨＮＨ２，ＧＩｙ，Ｓａｒ，Ａｌａ，β－ＡＩＢＡ，α－ＡＢＡ，Ｓｅｒ，Ｐｒｏ，Ｖａｌ，Ｔｈｒ，Ｔａｕ，Ｈｙｐ

ｒｏ，Ｉｌｅ，Ｌｅｕ，Ａｓｎ，Ｏｒｎ，Ａｓｐ，Ｇｌｎ，Ｌｙｓ，Ｇｌｕ，Ｍｅｔ，Ｈｉｓ，α－ＡＡＡ，Ｐｈｅ，３－ＭｅＨｉｓ，Ａｒｇ，Ｃｉｔ，Ｔｙｒ，Ｔｒｐ，Ｃｙｓのうち少なくとも１つの前記濃度値、および前記アミノ酸の濃度を変数として含みＥｔＯＨＮＨ２，Ｇｌｙ，Ｓａｒ，Ａｌａ，β－ＡＩＢＡ，α－ＡＢＡ，Ｓｅｒ，Ｐｒｏ，Ｖａｌ，Ｔｈｒ，Ｔａｕ，Ｈｙｐｒｏ，Ｉｌｅ，Ｌｅｕ，Ａｓｎ，Ｏｒｎ，Ａｓｐ，Ｇｌｎ，Ｌｙｓ，Ｇｌｕ，Ｍｅｔ，Ｈｉｓ，α－ＡＡＡ，Ｐｈｅ，３－ＭｅＨｉｓ，Ａｒｇ，Ｃｉｔ，Ｔｙｒ，Ｔｒｐ，Ｃｙｓのうち少なくとも１つを前記変数として含む前記記憶部に記憶された、前記早期腎症の前記状態を評価するための多変量判別式に基づいて、当該多変量判別式の値である判別値を算出する判別値算出手段と、

前記判別値算出手段で算出した前記判別値を前記情報通信端末装置へ送信する結果送信手段と、

を備えたこと、

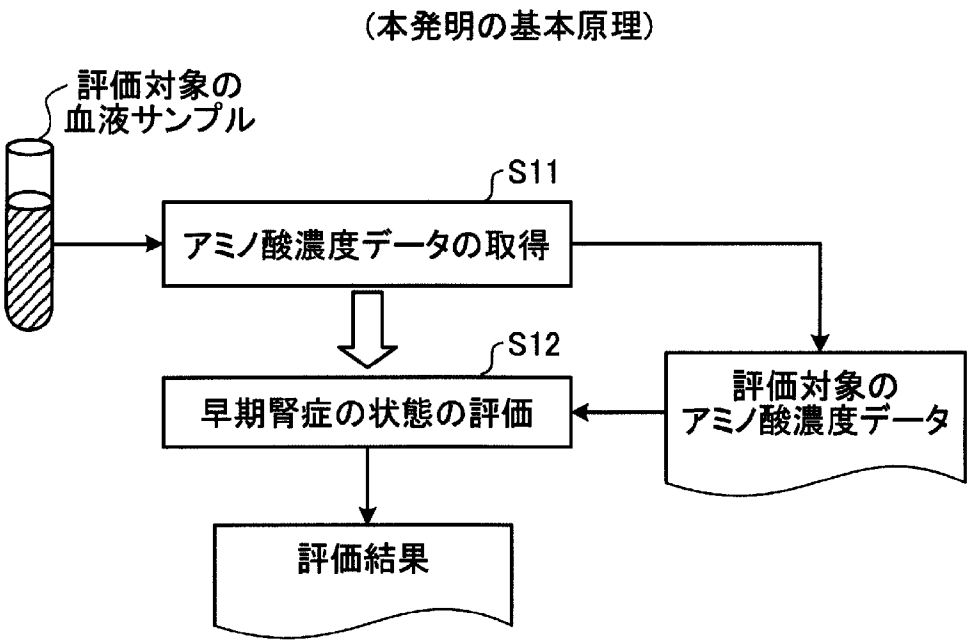
を特徴とする早期腎症評価装置。

［請求項24］ 前記制御部は、前記判別値算出手段で算出した前記判別値に基づいて、前記評価対象につき前記早期腎症の前記状態を評価する判別値基準評価手段をさらに備え、

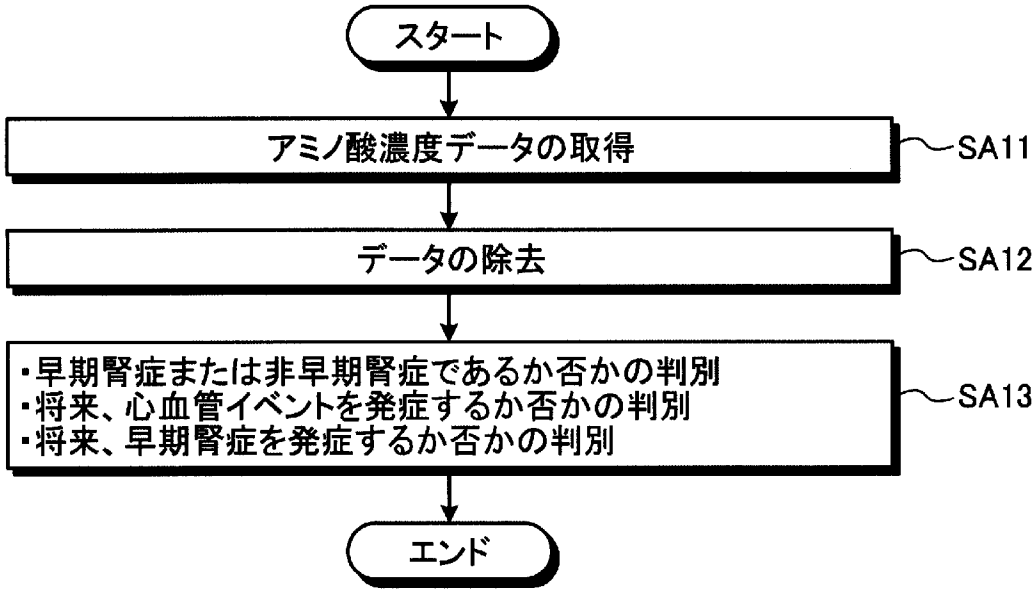
前記結果送信手段は、前記判別値基準評価手段で得られた前記評価対象の評価結果を前記情報通信端末装置へ送信すること、

を特徴とする請求項２３に記載の早期腎症評価装置。

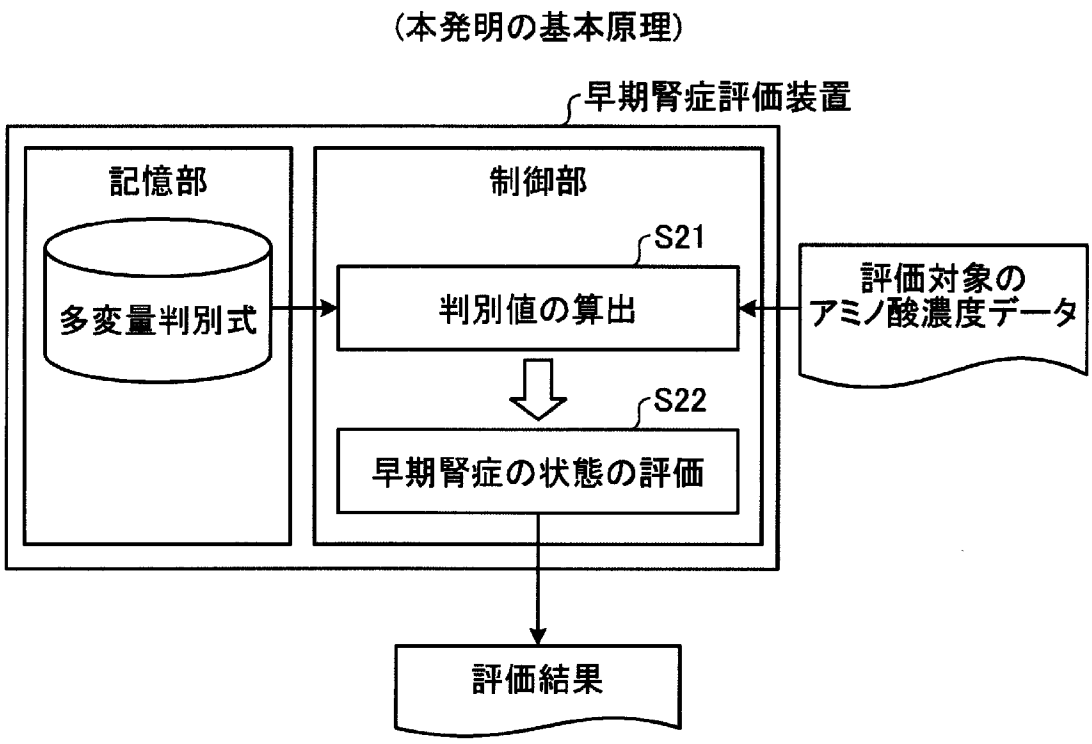
[図1]


(本発明の基本原理)
評価対象の
血液サンプル
S11
アミノ酸濃度データの取得
S12
早期腎症の状態の評価
評価対象の
アミノ酸濃度データ
評価結果

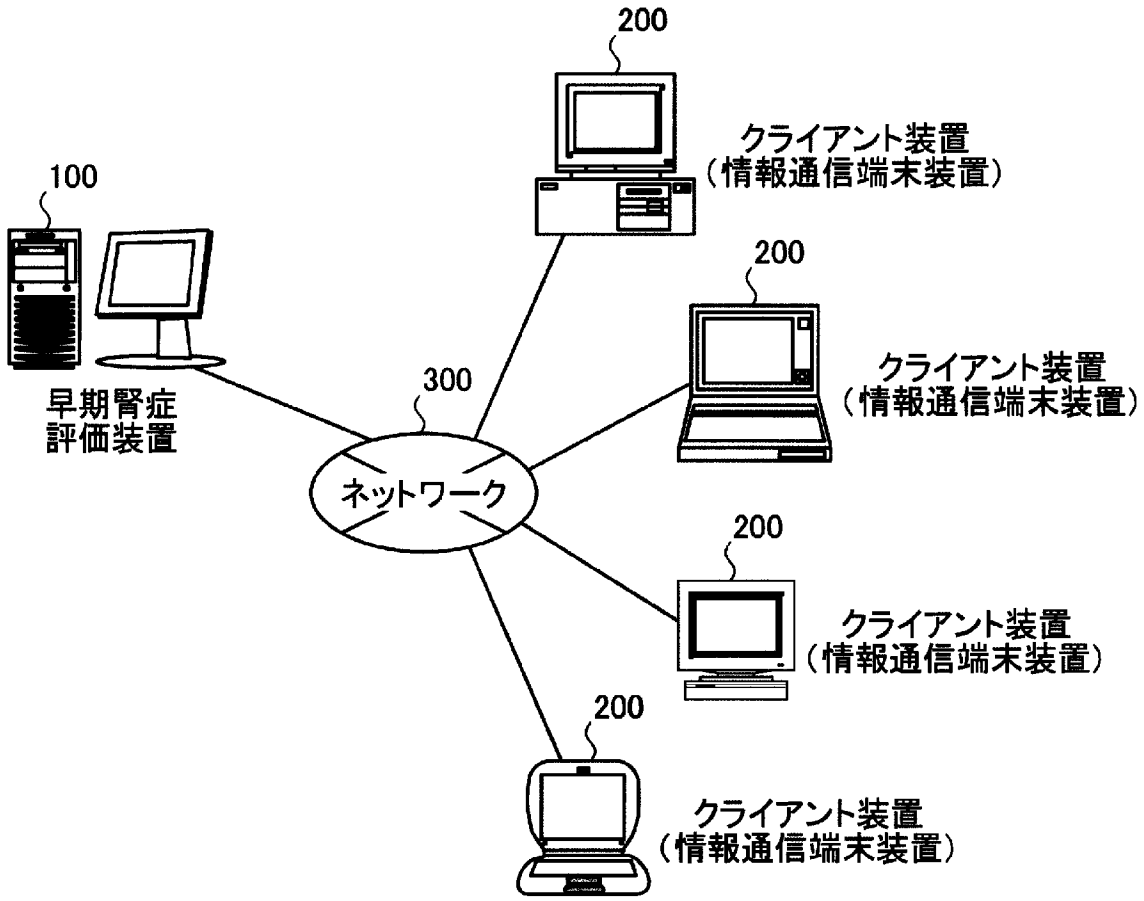
[図2]


スタート
アミノ酸濃度データの取得
SA11
データの除去
SA12
・早期腎症または非早期腎症であるか否かの判別
・将来、心血管イベントを発症するか否かの判別
・将来、早期腎症を発症するか否かの判別
SA13
エンド

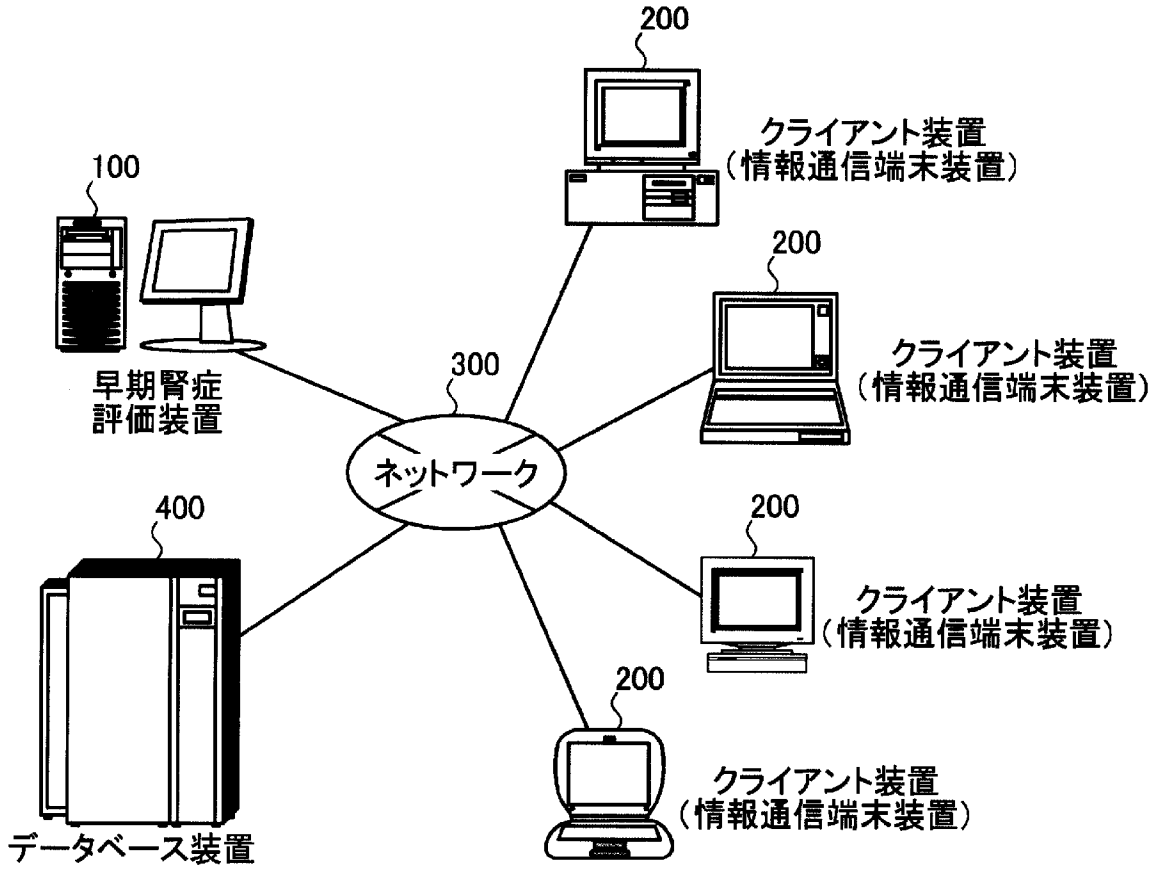
[図3]


(本発明の基本原理)
早期腎症評価装置
記憶部
制御部
S21
多変量判別式
判別値の算出
評価対象の
アミノ酸濃度データ
S22
早期腎症の状態の評価
評価結果

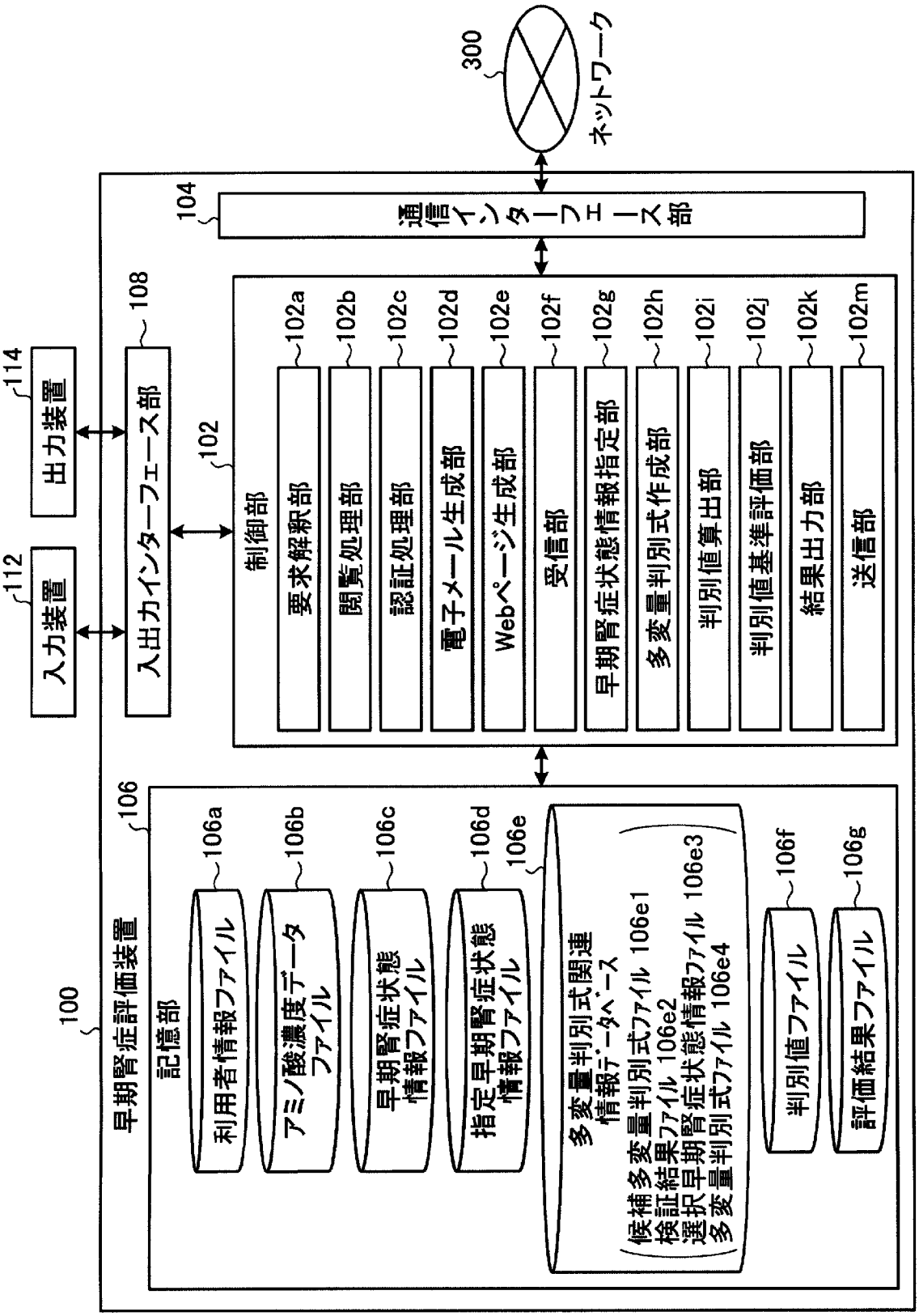
[図4]


200
クライアント装置
（情報通信端末装置）
100
200
クライアント装置
（情報通信端末装置）
早期腎症
評価装置
300
ネットワーク
200
クライアント装置
（情報通信端末装置）
200
クライアント装置
（情報通信端末装置）

[図5]


200
クライアント装置
(情報通信端末装置)
100
200
早期腎症
評価装置
300
クライアント装置
(情報通信端末装置)
ネットワーク
400
200
クライアント装置
(情報通信端末装置)
200
クライアント装置
(情報通信端末装置)
データベース装置

[図6]


300
ネットワーク
104
通信インターフェース部
108
入出力インターフェース部
114
出力装置
112
入力装置
102
制御部
102a 要求解釈部
102b 閲覧処理部
102c 認証処理部
102d 電子メール生成部
102e Webページ生成部
102f 受信部
102g 早期腎症状態情報指定部
102h 多変量判別式作成部
102i 判別値算出部
102j 判別値基準評価部
102k 結果出力部
102m 送信部
100
早期腎症評価装置
106
記憶部
106a 利用者情報ファイル
106b アミノ酸濃度データファイル
106c 早期腎症状態情報ファイル
106d 指定早期腎症状態情報ファイル
106e 多変量判別式関連情報データベース
候補多変量判別式ファイル 106e1
検証結果ファイル 106e2
選択早期腎症状態情報ファイル 106e3
多変量判別式ファイル 106e4
106f 判別値ファイル
106g 評価結果ファイル

[図7]

106a

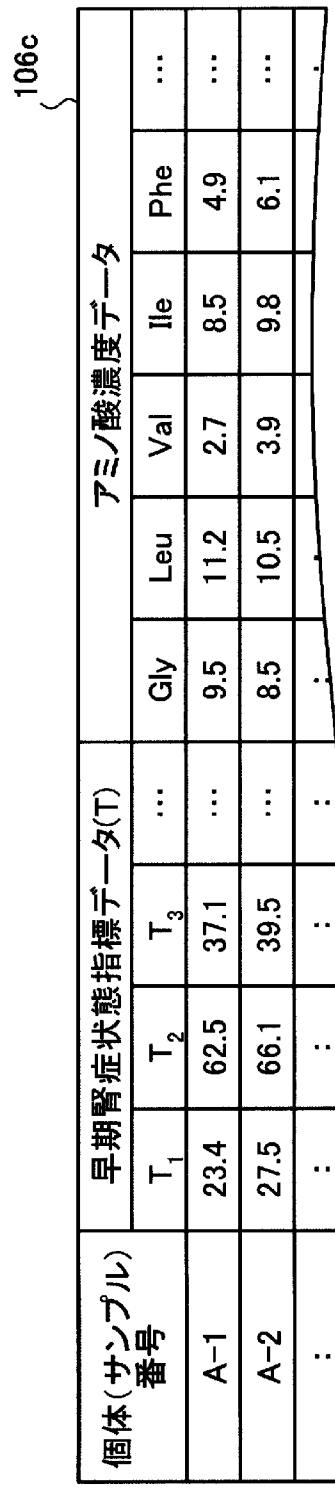
利用者ID	利用者パスワード	氏名	所属先ID	部門ID	部門名	電子メールアドレス	・・・
・	・	・	・	・	・	・	・
・	・	・	・	・	・	・	・
・	・	・	・	・	・	・	・

[図8]

106b

個体(サンプル)番号	アミノ酸濃度データ					
	Gly	Leu	Val	Ile	Phe	・・・
U-1	9.5	11.2	2.7	8.5	4.9	・・・
U-2	8.5	10.5	3.9	9.8	6.1	・・・
・	・	・	・	・	・	・
・	・	・	・	・	・	・
・	・	・	・	・	・	・

[図9]


106c
個体(サンプル)番号
早期腎症状態指標データ(T)
T_1
T_2
T_3
…
アミノ酸濃度データ
Gly
Leu
Val
Ile
Phe
…
A-1
23.4
62.5
37.1
…
9.5
11.2
2.7
8.5
4.9
…
A-2
27.5
66.1
39.5
…
8.5
10.5
3.9
9.8
6.1
…

[図10]

106d

個体(サンプル)番号	早期腎症状態指標データ(T)	アミノ酸濃度データ			
	T_2	Gly	Leu	Phe	…
A-1	62.5	9.5	11.2	4.9	…
A-2	66.1	8.5	10.5	6.1	…
⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮

[図11]

106e1

ランク	候補多変量判別式
1	F_1(Gly,Leu,Phe,…)
2	F_2(Gly,Leu,Phe,…)
3	F_3(Gly,Leu,Phe,…)
⋮	⋮

[図12]

106e2

ランク	候補多変量判別式	検証結果
1	F_k(Gly,Leu,Phe,…)	1.22
2	F_m(Gly,Leu,Phe,…)	2.28
3	F_l(Gly,Leu,Phe,…)	2.95
⋮	⋮	⋮

[図13]

106e3

個体(サンプル)番号	早期腎症状態指標データ(T)	アミノ酸濃度データ		
	T_2	Leu	Phe	…
A-1	62.5	11.2	4.9	…
A-2	66.1	10.5	6.1	…
⋮	⋮	⋮	⋮	⋮

[図14]

106e4

ランク	多変量判別式	閾値	検証結果
1	F_p(Phe,…)	0.23	0.62
2	F_p(Gly,Leu,Phe)	−2.12	1.02
3	F_k(Gly,Leu,Phe,…)	1.23	1.22
⋮	⋮	⋮	⋮

[図15]

106f

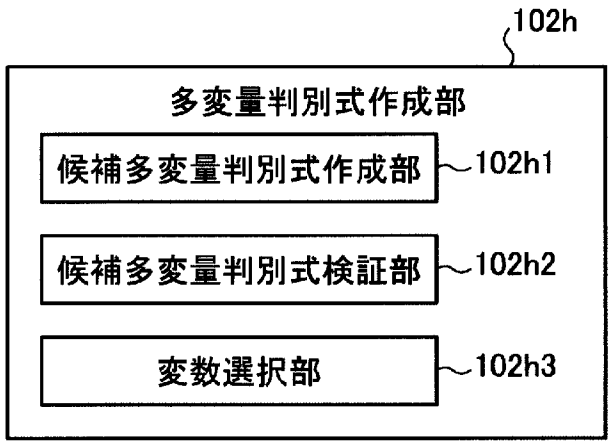
個体(サンプル)番号	ランク	判別値
U−1	1	1.13
⋮	⋮	⋮

[図16]

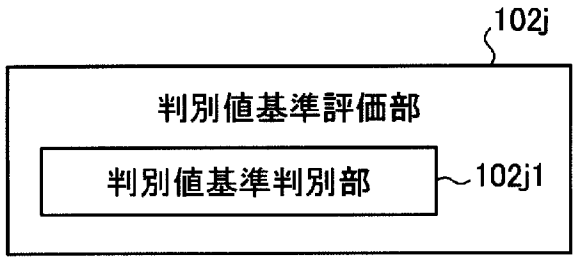
106g

個体(サンプル)番号	アミノ酸濃度データ				判別値	評価結果
	Gly	Leu	Phe	…		
U-1	9.5	11.2	4.9	…		
U-2	8.5	10.5	6.1	…		
⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮

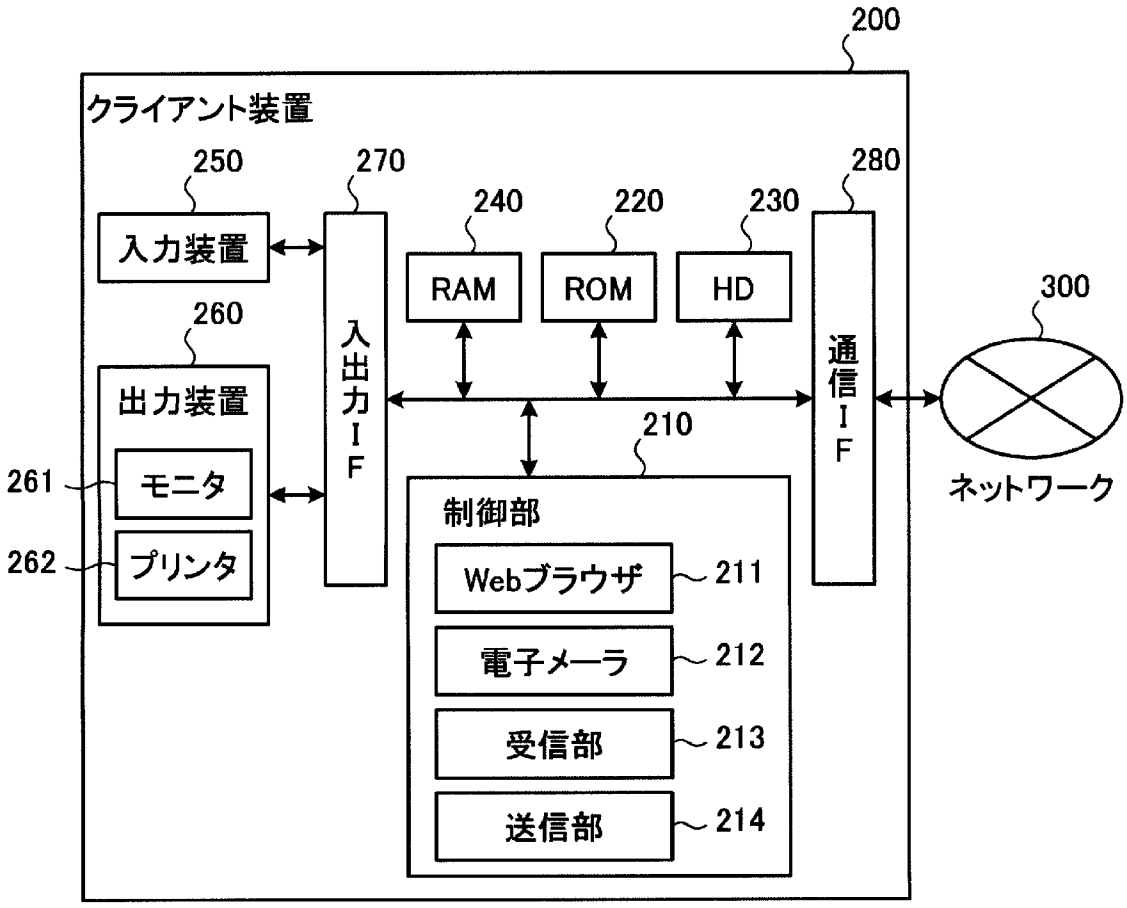
[図17]



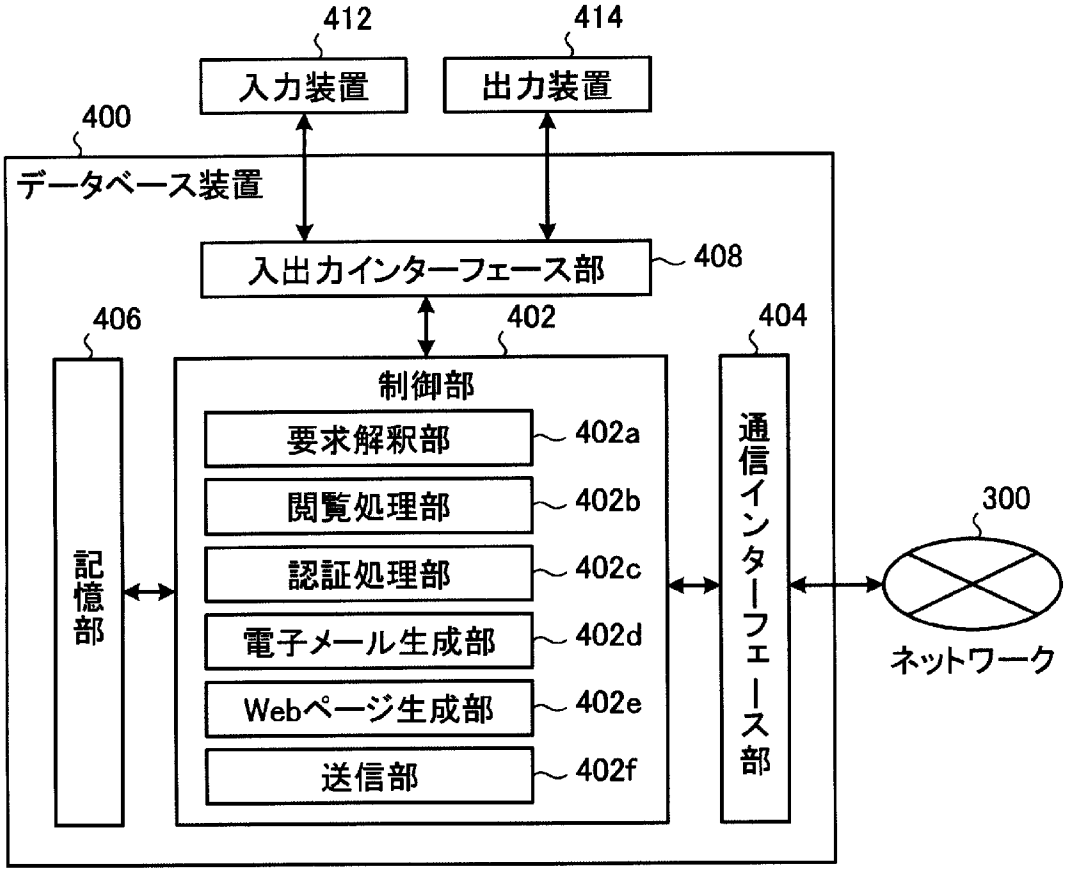
[図18]


102j
判別値基準評価部
判別値基準判別部
102j1

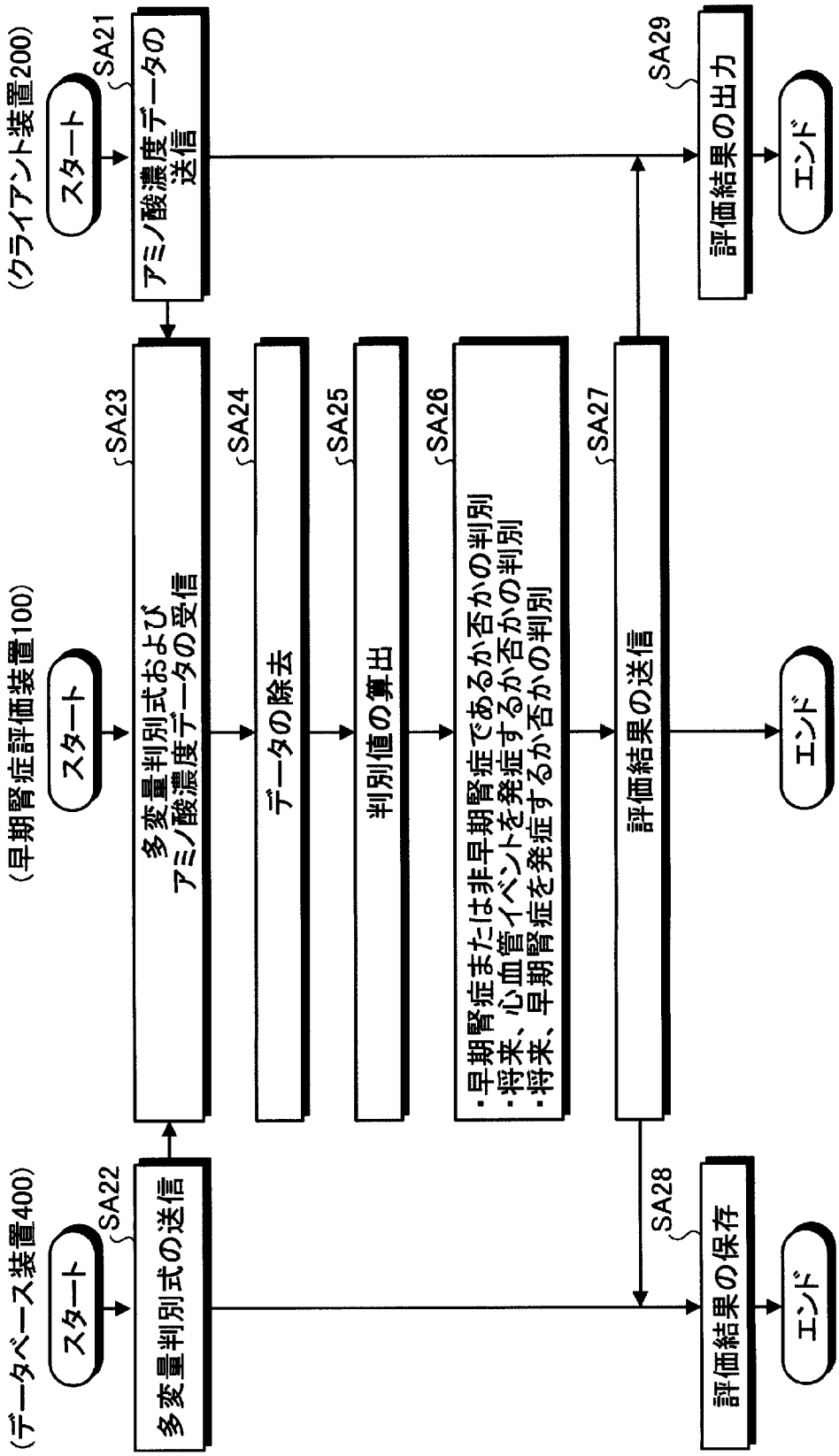
[図19]


200
クライアント装置
250
入力装置
260
出力装置
261
モニタ
262
プリンタ
270
入出力IF
240
RAM
220
ROM
230
HD
280
通信IF
210
制御部
Webブラウザ
211
電子メーラ
212
受信部
213
送信部
214
300
ネットワーク

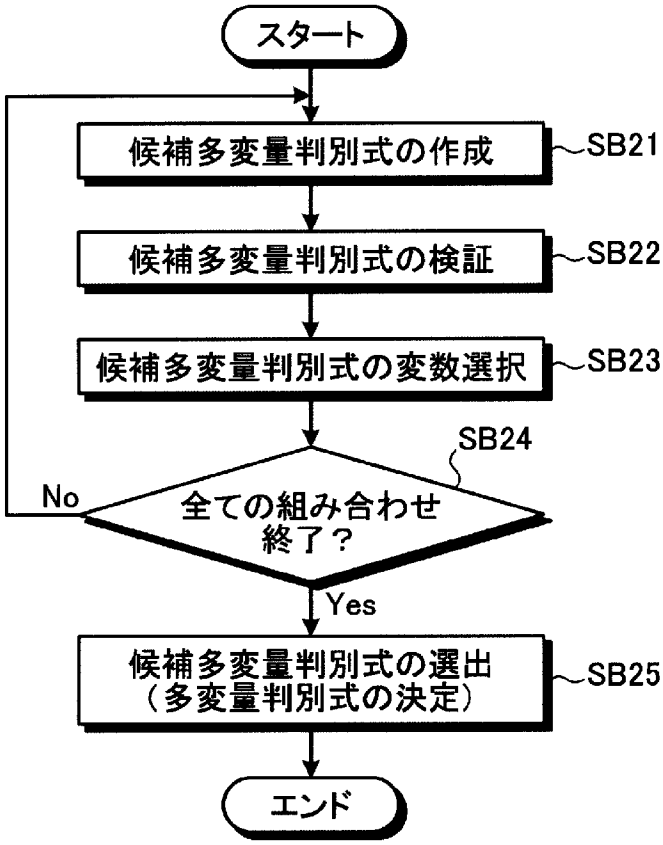
[図20]


412
414
入力装置
出力装置
400
データベース装置
入出力インターフェース部
408
406
402
404
制御部
要求解釈部
402a
閲覧処理部
402b
認証処理部
402c
電子メール生成部
402d
Webページ生成部
402e
送信部
402f
記憶部
通信インターフェース部
300
ネットワーク

[図21]


(クライアント装置200)
スタート
SA21
アミノ酸濃度データの送信
SA29
評価結果の出力
エンド
(早期腎症評価装置100)
スタート
SA23
多変量判別式およびアミノ酸濃度データの受信
SA24
データの除去
SA25
判別値の算出
SA26
・早期腎症または非早期腎症であるか否かの判別
・将来、心血管イベントを発症するか否かの判別
・将来、早期腎症を発症するか否かの判別
SA27
評価結果の送信
エンド
(データベース装置400)
スタート
SA22
多変量判別式の送信
SA28
評価結果の保存
エンド

[図22]


スタート
候補多変量判別式の作成
SB21
候補多変量判別式の検証
SB22
候補多変量判別式の変数選択
SB23
SB24
No
全ての組み合わせ
終了？
Yes
候補多変量判別式の選出
（多変量判別式の決定）
SB25
エンド

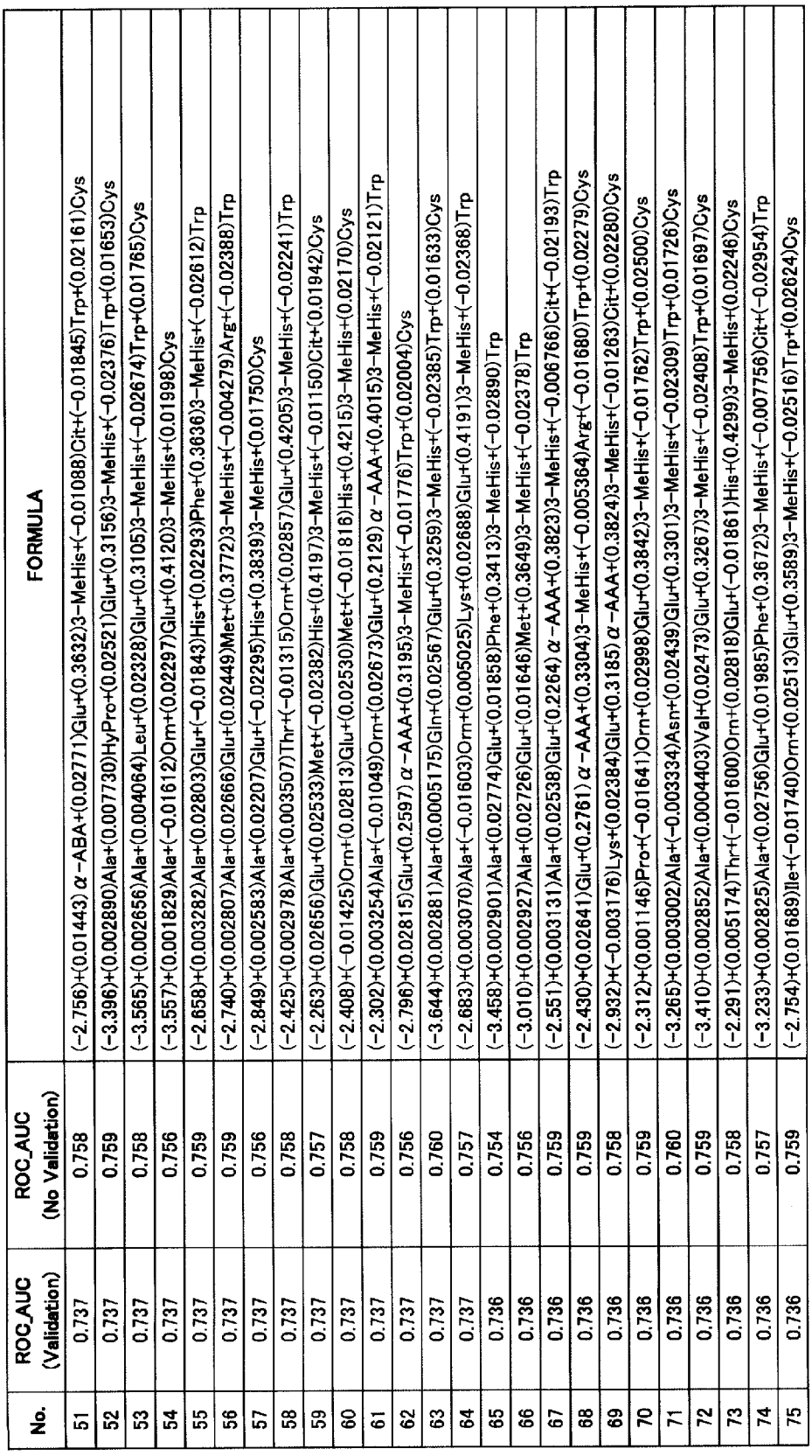
[図23]

No.	ROC_AUC (Validation)	ROC_AUC (No Validation)	FORMULA
1	0.743	0.765	(-2.814)+(0.002917)Ala+(-0.01609)Orn+(0.02631)Glu+(0.3781)3-MeHis+(-0.02360)Trp+(0.02292)Cys
2	0.743	0.764	(-3.358)+(0.002835)Ala+(0.02449)Glu+(0.2388) α -AAA+(0.3088)3-MeHis+(-0.02416)Trp+(0.01768)Cys
3	0.741	0.761	(-3.094)+(0.002826)Ala+(0.02445)Glu+(0.3597)3-MeHis+(-0.009814)Cit+(-0.02399)Trp+(0.01879)Cys
4	0.741	0.759	(-3.364)+(0.002915)Ala+(0.02498)Glu+(0.3285)3-MeHis+(-0.02360)Trp+(0.01688)Cys
5	0.741	0.762	(-2.251)+(-0.01620)Orn+(0.02941)Glu+(0.2659) α -AAA+(0.3673)3-MeHis+(-0.01750)Trp+(0.02612)Cys
6	0.741	0.763	(-2.538)+(-0.01803)Orn+(0.03194)Glu+(0.02937)Met+(0.3867)3-MeHis+(-0.02187)Trp+(0.02288)Cys
7	0.741	0.763	(-2.540)+(0.003297)Ala+(0.02475)Glu+(-0.01717)His+(0.3504)3-MeHis+(-0.01967)Trp+(0.01897)Cys
8	0.740	0.762	(-2.537)+(0.002839)Ala+(-0.01267)Orn+(0.02929)Glu+(0.02594)Met+(0.4122)3-MeHis+(-0.02452)Trp
9	0.740	0.763	(-2.475)+(0.02725)Glu+(0.2867) α -AAA+(0.3559)3-MeHis+(-0.01262)Cit+(-0.01848)Trp+(0.02243)Cys
10	0.740	0.761	(-3.036)+(0.002898)Ala+(0.02348)Glu+(0.3404)3-MeHis+(-0.004686)Arg+(-0.02273)Trp+(0.01922)Cys
11	0.739	0.756	(-3.037)+(-0.01638)Orn+(0.02550)Glu+(0.2449) α -AAA+(0.3935)3-MeHis+(0.02300)Cys
12	0.739	0.762	(-2.441)+(0.004692)Thr+(-0.01924)Orn+(0.03143)Glu+(0.3961)3-MeHis+(-0.01977)Trp+(0.02384)Cys
13	0.739	0.761	(-2.994)+(0.002898)Ala+(-0.01334)Orn+(0.02967)Glu+(0.02307)Phe+(0.3876)3-MeHis+(-0.02997)Trp
14	0.739	0.762	(-2.159)+(0.003135)Ala+(0.02826)Glu+(0.03036)Met+(-0.01945)His+(0.3887)3-MeHis+(-0.02118)Trp
15	0.739	0.761	(-3.019)+(-0.001525)Gly+(0.002962)Ala+(0.02359)Glu+(0.3284)3-MeHis+(-0.02406)Trp+(0.01783)Cys
16	0.739	0.761	(-2.548)+(0.01981) α -ABA+(-0.01725)Orn+(0.02965)Glu+(0.3784)3-MeHis+(-0.01798)Trp+(0.02620)Cys
17	0.739	0.760	(-2.732)+(0.009079)Leu+(-0.01864)Orn+(0.02569)Glu+(0.3558)3-MeHis+(-0.02496)Trp+(0.02759)Cys
18	0.739	0.759	(-2.818)+(-0.01766)Orn+(0.03208)Glu+(0.02054)Phe+(0.3698)3-MeHis+(-0.02527)Trp+(0.02134)Cys
19	0.739	0.759	(-3.555)+(0.001744)Ala+(-0.01641)Orn+(0.02236)Glu+(0.2288) α -AAA+(0.3931)3-MeHis+(0.02076)Cys
20	0.739	0.760	(-2.862)+(0.002490)Ala+(0.02151)Glu+(-0.02283)His+(0.2107) α -AAA+(0.3661)3-MeHis+(0.01812)Cys
21	0.739	0.756	(-2.251)+(-0.01602)Orn+(0.03012)Glu+(0.3907)3-MeHis+(-0.01682)Trp+(0.02534)Cys
22	0.739	0.760	(-2.174)+(0.02464)Glu+(-0.01783)His+(0.2620) α -AAA+(0.3971)3-MeHis+(-0.01187)Cit+(0.02244)Cys
23	0.738	0.759	(-2.322)+(-0.01391)Orn+(0.02628)Glu+(-0.01233)His+(0.2444) α -AAA+(0.3971)3-MeHis+(0.02451)Cys
24	0.738	0.760	(-3.741)+(0.002721)Ala+(0.02640)Glu+(0.01359)Phe+(0.3122)3-MeHis+(-0.02877)Trp+(0.01408)Cys
25	0.738	0.757	(-2.557)+(0.01827) α -ABA+(-0.01459)Orn+(0.02653)Glu+(-0.01336)His+(0.4094)3-MeHis+(0.02447)Cys

[図24]

No.	ROC_AUC (Validation)	ROC_AUC (No Validation)	FORMULA
26	0.738	0.759	(-2.690)+(0.002422)Ala+(-0.012261)Orn+(0.02301)Glu+(-0.01798)His+(0.4179)3-MeHis+(0.02145)Cys
27	0.738	0.760	(-3.493)+(0.002785)Ala+(0.009034) α-ABA+(0.02491)Glu+(0.3217)3-MeHis+(-0.02388)Trp+(0.01721)Cys
28	0.738	0.757	(-2.959)+(-0.01507)Orn+(0.02496)Glu+(0.2571) α-AAA+(0.4059)3-MeHis+(-0.005499)Cit+(0.02351)Cys
29	0.738	0.759	(-3.319)+(0.002930)Ala+(-0.0004853)Lys+(0.02502)Glu+(0.3295)3-MeHis+(-0.02335)Trp+(0.01734)Cys
30	0.738	0.760	(-2.779)+(0.002951)Ala+(-0.004926)Ser+(0.02342)Glu+(0.3204)3-MeHis+(-0.02359)Trp+(0.01762)Cys
31	0.738	0.757	(-3.856)+(0.001627)Ala+(0.02043)Glu+(0.2410) α-AAA+(0.3767)3-MeHis+(-0.01041)Cit+(0.01671)Cys
32	0.738	0.759	(-2.611)+(0.002485)Ala+(0.02158)Glu+(-0.02299)His+(0.4134)3-MeHis+(-0.009023)Cit+(0.01922)Cys
33	0.738	0.758	(-3.249)+(0.01248) α-ABA+(-0.01717)Orn+(0.02518)Glu+(0.2095) α-AAA+(0.3907)3-MeHis+(0.02326)Cys
34	0.738	0.759	(-3.344)+(0.002901)Ala+(-0.01456)Asp+(0.02541)Glu+(0.3280)3-MeHis+(-0.02351)Trp+(0.01689)Cys
35	0.738	0.760	(-3.442)+(0.002771)Ala+(0.02567)Glu+(0.008547)Met+(0.3259)3-MeHis+(-0.02475)Trp+(0.01612)Cys
36	0.737	0.760	(-2.280)+(0.002768)Ala+(-0.007149)Ser+(0.02602)Glu+(0.02917)Met+(0.3493)3-MeHis+(-0.02551)Trp
37	0.737	0.755	(-2.333)+(0.003315)Ala+(-0.01046)Orn+(0.02713)Glu+(0.4172)3-MeHis+(-0.02082)Trp
38	0.737	0.759	(-2.665)+(0.02827)Glu+(0.03075)Met+(0.3480)3-MeHis+(-0.007260)Arg+(-0.02093)Trp+(0.01957)Cys
39	0.737	0.760	(-3.341)+(0.002904)Ala+(0.02455)Glu+(-0.01415)1-MeHis+(0.3436)3-MeHis+(-0.02324)Trp+(0.01683)Cys
40	0.737	0.758	(-3.202)+(0.002404)Thr+(-0.01806)Orn+(0.02580)Glu+(0.2488) α-AAA+(0.3981)3-MeHis+(0.02198)Cys
41	0.737	0.755	(-3.343)+(0.02325)Glu+(0.2593) α-AAA+(0.3798)3-MeHis+(-0.01144)Cit+(0.01895)Cys
42	0.737	0.757	(-2.784)+(0.003175)Ala+(0.02566)Glu+(0.2126) α-AAA+(0.3588)3-MeHis+(-0.02180)Trp
43	0.737	0.758	(-3.115)+(0.08527)Sar+(-0.01796)Orn+(0.02594)Glu+(0.2316) α-AAA+(0.3801)3-MeHis+(0.02346)Cys
44	0.737	0.760	(-2.565)+(0.01090)Asn+(-0.01784)Orn+(0.03184)Glu+(0.3905)3-MeHis+(-0.01910)Trp+(0.02445)Cys
45	0.737	0.760	(-3.398)+(0.03517)Sar+(0.002893)Ala+(0.02515)Glu+(0.3205)3-MeHis+(-0.02388)Trp+(0.01691)Cys
46	0.737	0.758	(-2.206)+(0.03109)Glu+(0.03347)Met+(-0.01896)His+(0.3545)3-MeHis+(-0.01738)Trp+(0.01829)Cys
47	0.737	0.756	(-3.079)+(-0.01634)Orn+(0.02821)Asp+(0.02457)Glu+(0.2710) α-AAA+(0.3928)3-MeHis+(0.02300)Cys
48	0.737	0.754	(-3.301)+(0.01656) α-ABA+(-0.01719)Orn+(0.02574)Glu+(0.4063)3-MeHis+(0.02281)Cys
49	0.737	0.760	(-2.318)+(0.1283)Sar+(-0.01832)Orn+(0.03093)Glu+(0.3664)3-MeHis+(-0.01791)Trp+(0.02619)Cys
50	0.737	0.758	(-3.642)+(0.001780)Ala+(0.01920)Glu+(0.2382) α-AAA+(0.3575)3-MeHis+(-0.006420)Arg+(0.01803)Cys

[図25]



No.	ROC_AUC (Validation)	ROC_AUC (No Validation)	FORMULA
51	0.737	0.758	(-2.756)+(0.01443) α-ABA+(0.02771)Glu+(0.3632)3-MeHis+(-0.01088)Cit+(-0.01845)Trp+(0.02161)Cys
52	0.737	0.759	(-3.396)+(0.002890)Ala+(0.007730)HyPro+(0.02521)Glu+(0.3156)3-MeHis+(-0.02376)Trp+(0.01653)Cys
53	0.737	0.758	(-3.565)+(0.002656)Ala+(0.004064)Leu+(0.02328)Glu+(0.3105)3-MeHis+(-0.02674)Trp+(0.01765)Cys
54	0.737	0.756	(-3.557)+(0.001829)Ala+(-0.01612)Orn+(0.02297)Glu+(0.4120)3-MeHis+(0.01998)Cys
55	0.737	0.759	(-2.658)+(0.003282)Ala+(0.02803)Glu+(-0.01843)His+(0.02293)Phe+(0.3636)3-MeHis+(-0.02612)Trp
56	0.737	0.759	(-2.740)+(0.002807)Ala+(0.02666)Glu+(0.02449)Met+(0.3772)3-MeHis+(-0.004279)Arg+(-0.02388)Trp
57	0.737	0.756	(-2.849)+(0.002583)Ala+(0.02207)Glu+(-0.02295)His+(0.3839)3-MeHis+(0.01750)Cys
58	0.737	0.758	(-2.425)+(0.002978)Ala+(0.003507)Thr+(-0.01315)Orn+(0.02857)Glu+(0.4205)3-MeHis+(-0.02241)Trp
59	0.737	0.757	(-2.263)+(0.02656)Glu+(0.02533)Met+(-0.02382)His+(0.4197)3-MeHis+(-0.01150)Cit+(0.01942)Cys
60	0.737	0.758	(-2.408)+(-0.01425)Orn+(0.02813)Glu+(0.02530)Met+(-0.01816)His+(0.4215)3-MeHis+(0.02170)Cys
61	0.737	0.759	(-2.302)+(0.003254)Ala+(-0.01049)Orn+(0.02673)Glu+(0.2129) α-AAA+(0.4015)3-MeHis+(-0.02121)Trp
62	0.737	0.756	(-2.796)+(0.02815)Glu+(0.2597) α-AAA+(0.3195)3-MeHis+(-0.01776)Trp+(0.02004)Cys
63	0.737	0.760	(-3.644)+(0.002881)Ala+(0.0005175)Gln+(0.02567)Glu+(0.3259)3-MeHis+(-0.02385)Trp+(0.01633)Cys
64	0.737	0.757	(-2.683)+(0.003070)Ala+(-0.01603)Orn+(0.005025)Lys+(0.02688)Glu+(0.4191)3-MeHis+(-0.02368)Trp
65	0.736	0.754	(-3.458)+(0.002901)Ala+(0.02774)Glu+(0.01858)Phe+(0.3413)3-MeHis+(-0.02890)Trp
66	0.736	0.756	(-3.010)+(0.002927)Ala+(0.02726)Glu+(0.01646)Met+(0.3649)3-MeHis+(-0.02378)Trp
67	0.736	0.759	(-2.551)+(0.003131)Ala+(0.02538)Glu+(0.2264) α-AAA+(0.3823)3-MeHis+(-0.006766)Cit+(-0.02193)Trp
68	0.736	0.759	(-2.430)+(0.02641)Glu+(0.2761) α-AAA+(0.3304)3-MeHis+(-0.005364)Arg+(-0.01680)Trp+(0.02279)Cys
69	0.736	0.758	(-2.932)+(-0.003176)Lys+(0.02384)Glu+(0.3185) α-AAA+(0.3824)3-MeHis+(-0.01263)Cit+(0.02280)Cys
70	0.736	0.759	(-2.312)+(0.001146)Pro+(-0.01641)Orn+(0.02998)Glu+(0.3842)3-MeHis+(-0.01762)Trp+(0.02500)Cys
71	0.736	0.760	(-3.265)+(0.003002)Ala+(-0.003334)Asn+(0.02439)Glu+(0.3301)3-MeHis+(-0.02309)Trp+(0.01726)Cys
72	0.736	0.759	(-3.410)+(0.002852)Ala+(0.0004403)Val+(0.02473)Glu+(0.3267)3-MeHis+(-0.02408)Trp+(0.01697)Cys
73	0.736	0.758	(-2.291)+(0.005174)Thr+(-0.01600)Orn+(0.02818)Glu+(-0.01861)His+(0.4299)3-MeHis+(0.02246)Cys
74	0.736	0.757	(-3.233)+(0.002825)Ala+(0.02756)Glu+(0.01985)Phe+(0.3672)3-MeHis+(-0.007756)Cit+(-0.02954)Trp
75	0.736	0.759	(-2.754)+(0.01689)Ile+(-0.01740)Orn+(0.02513)Glu+(0.3589)3-MeHis+(-0.02516)Trp+(0.02624)Cys

[図26]

No.	ROC_AUC (Validation)	ROC_AUC (No Validation)	FORMULA
76	0.736	0.757	(−3.714)+(0.001635)Ala+(0.01237) α−ABA+(−0.01692)Orn+(0.02288)Glu+(0.4065)3−MeHis+(0.02058)Cys
77	0.736	0.757	(−3.609)+(0.08373)Sar+(0.001750)Ala+(−0.01770)Orn+(0.02347)Glu+(0.3974)3−MeHis+(0.02058)Cys
78	0.736	0.754	(−4.123)+(0.001749)Ala+(0.02106)Glu+(0.2162) α−AAA+(0.3450)3−MeHis+(0.01463)Cys
79	0.736	0.757	(−2.890)+(−0.001409)Ser+(−0.01572)Orn+(0.02502)Glu+(0.2472) α−AAA+(0.3887)3−MeHis+(0.02301)Cys
80	0.736	0.757	(−2.181)+(−0.01716)Orn+(0.02952)Glu+(−0.02144)1−MeHis+(0.4165)3−MeHis+(−0.01638)Trp+(0.02578)Cys
81	0.736	0.758	(−2.969)+(0.002437)Ala+(0.009560) α−ABA+(0.02198)Glu+(−0.02333)His+(0.3780)3−MeHis+(0.01781)Cys
82	0.736	0.756	(−2.875)+(0.002383)Ala+(0.02291)Glu+(0.01227)Met+(−0.02548)His+(0.3845)3−MeHis+(0.01660)Cys
83	0.736	0.757	(−2.483)+(−0.01931)Orn+(0.003569)Lys+(0.02983)Glu+(0.3946)3−MeHis+(−0.01875)Trp+(0.02281)Cys
84	0.736	0.759	(−2.869)+(0.003215)Ala+(0.06952)Asp+(0.02352)Glu+(0.2785) α−AAA+(0.3568)3−MeHis+(−0.02238)Trp
85	0.736	0.756	(−3.093)+(−0.01698)Orn+(0.0006395)Lys+(0.02540)Glu+(0.2343) α−AAA+(0.3956)3−MeHis+(0.02248)Cys
86	0.736	0.757	(−3.168)+(−0.01661)Orn+(0.02554)Glu+(0.2321) α−AAA+(0.002882)Phe+(0.3930)3−MeHis+(0.02220)Cys
87	0.736	0.757	(−2.206)+(−0.01609)Orn+(−0.03735)Asp+(0.03118)Glu+(0.3891)3−MeHis+(−0.01666)Trp+(0.02540)Cys
88	0.736	0.753	(−2.816)+(0.003239)Ala+(0.02602)Glu+(0.3739)3−MeHis+(−0.02136)Trp
89	0.736	0.760	(−2.093)+(0.003502)Ala+(0.02561)Glu+(−0.01329)His+(0.2029) α−AAA+(0.3807)3−MeHis+(−0.01856)Trp
90	0.736	0.757	(−3.143)+(−0.01680)Orn+(0.02570)Glu+(0.006060)Met+(0.2315) α−AAA+(0.3950)3−MeHis+(0.02230)Cys
91	0.736	0.758	(−2.749)+(0.02927)Glu+(0.02266)Met+(0.3705)3−MeHis+(−0.01220)Cit+(−0.02158)Trp+(0.01910)Cys
92	0.736	0.757	(−2.853)+(−0.01472)Orn+(0.02451)Glu+(0.2556) α−AAA+(0.3947)3−MeHis+(−0.003193)Arg+(0.02410)Cys
93	0.736	0.756	(−3.095)+(0.01515)Hypro+(−0.01729)Orn+(0.02586)Glu+(0.2526) α−AAA+(0.3707)3−MeHis+(0.02246)Cys
94	0.736	0.757	(−2.849)+(0.003112)Ala+(0.01250)Hypro+(0.02605)Glu+(0.2189) α−AAA+(0.3361)3−MeHis+(−0.02217)Trp
95	0.736	0.754	(−3.672)+(0.001875)Ala+(0.01996)Glu+(0.3763)3−MeHis+(−0.005895)Arg+(0.01703)Cys
96	0.736	0.759	(−2.796)+(0.002831)Ala+(0.02718)Glu+(0.01920)Met+(0.3892)3−MeHis+(−0.007116)Cit+(−0.02431)Trp
97	0.736	0.757	(−2.106)+(−0.0006710)Gly+(−0.01575)Orn+(0.02953)Glu+(0.3895)3−MeHis+(−0.01695)Trp+(0.02570)Cys
98	0.736	0.756	(−3.343)+(0.08108)Sar+(0.01480) α−ABA+(−0.01861)Orn+(0.02615)Glu+(0.3928)3−MeHis+(0.02324)Cys
99	0.736	0.754	(−3.102)+(0.09929)Sar+(−0.01798)Orn+(0.02676)Glu+(0.3966)3−MeHis+(0.02290)Cys
100	0.736	0.756	(−1.966)+(−0.01476)Orn+(0.03012)Glu+(−0.006299)His+(0.3951)3−MeHis+(−0.01502)Trp+(0.02576)Cys

[図27]

No.	ROC_AUC (Validation)	ROC_AUC (No Validation)	FORMULA
1	0.669	0.696	(−2.300)+(0.004048)Ala+(−0.01238)Ser+(0.01158)Leu+(0.004371)Lys+(0.01920)Cit+(−0.03464)Trp
2	0.668	0.697	(−2.253)+(0.003398)Ala+(−0.01310)Ser+(0.01877)Ile+(0.003908)Lys+(0.02963)Phe+(−0.04630)Trp
3	0.668	0.692	(−2.037)+(0.003503)Ala+(−0.01185)Ser+(0.02072)Ile+(0.03228)Phe+(−0.04551)Trp
4	0.668	0.692	(−2.071)+(0.004181)Ala+(−0.01078)Ser+(0.01381)Leu+(0.02003)Cit+(−0.03363)Trp
5	0.668	0.697	(−2.131)+(0.003470)Ala+(−0.01313)Ser+(0.01967)Ile+(0.006715)Orn+(0.02954)Phe+(−0.04428)Trp
6	0.667	0.697	(−1.953)+(0.003767)Ala+(−0.01374)Ser+(0.01288)Leu+(0.02985)Met+(0.01768)Cit+(−0.03696)Trp
7	0.666	0.694	(−2.233)+(0.003805)Ala+(−0.01235)Ser+(0.01937)Ile+(0.005100)Lys+(0.01847)Cit+(−0.03412)Trp
8	0.666	0.691	(−3.885)+(0.003918)Ala+(0.01260)Leu+(0.02194)Phe+(0.01558)Cit+(−0.04145)Trp
9	0.666	0.696	(−2.554)+(0.003875)Ala+(−0.01208)Ser+(0.01157)Leu+(0.02525)Phe+(0.01549)Cit+(−0.04141)Trp
10	0.666	0.692	(−1.404)+(0.004132)Ala+(−0.01252)Ser+(0.01272)Leu+(0.009558)Orn+(−0.03602)Trp
11	0.666	0.691	(−2.048)+(0.003796)Ala+(−0.01210)Ser+(0.01175)Leu+(0.03088)Phe+(−0.04593)Trp
12	0.665	0.686	(−3.343)+(0.003503)Ala+(0.02252)Ile+(0.02939)Phe+(−0.04556)Trp
13	0.665	0.695	(−2.214)+(0.003730)Ala+(−0.01327)Ser+(0.01007)Leu+(0.003542)Lys+(0.02893)Phe+(−0.04615)Trp
14	0.665	0.694	(−2.004)+(0.004020)Ala+(−0.01219)Ser+(0.002265)Thr+(0.01329)Leu+(0.01930)Cit+(−0.03407)Trp
15	0.665	0.690	(−3.556)+(0.003436)Ala+(0.02140)Ile+(0.002378)Lys+(0.02763)Phe+(−0.04600)Trp
16	0.664	0.693	(−1.961)+(0.003401)Ala+(−0.01281)Ser+(0.02036)Ile+(0.01035)Met+(0.02992)Phe+(−0.04584)Trp
17	0.664	0.686	(−3.376)+(0.003823)Ala+(0.01277)Leu+(0.02777)Phe+(−0.04603)Trp
18	0.664	0.693	(−2.498)+(0.003624)Ala+(−0.01186)Ser+(0.01983)Ile+(0.02716)Phe+(0.01457)Cit+(−0.04126)Trp
19	0.664	0.693	(−2.130)+(0.0007252)Gly+(0.003480)Ala+(−0.01259)Ser+(0.02090)Ile+(0.03209)Phe+(−0.04512)Trp
20	0.664	0.693	(−2.065)+(0.004173)Ala+(−0.01104)Ser+(0.01356)Leu+(0.001312)Orn+(0.01929)Cit+(−0.03355)Trp
21	0.664	0.690	(−3.343)+(0.003974)Ala+(0.02120)Ile+(0.03558)Phe+(−0.008827)Tyr+(−0.04266)Trp
22	0.664	0.692	(−2.004)+(0.003522)Ala+(−0.01176)Ser+(0.02076)Ile+(−0.0009505)His+(0.03253)Phe+(−0.04542)Trp
23	0.664	0.695	(−2.126)+(0.003832)Ala+(−0.01103)Ser+(0.01991)Ile+(0.03636)Phe+(−0.006115)Tyr+(−0.04354)Trp
24	0.664	0.695	(−1.356)+(0.003628)Ala+(−0.01595)Ser+(0.01181)Leu+(0.007879)Orn+(0.03772)Met+(−0.04005)Trp
25	0.664	0.689	(−1.520)+(0.004047)Ala+(−0.01236)Ser+(0.01221)Leu+(0.005006)Lys+(−0.03864)Trp

[図28]

No.	ROC_AUC (Validation)	ROC_AUC (No Validation)	FORMULA
26	0.664	0.694	(−2.175)+(0.003512)Ala+(−0.01244)Ser+(0.02048)Ile+(0.0004707)Gln+(0.03058)Phe+(−0.04483)Trp
27	0.664	0.693	(−2.039)+(0.003498)Ala+(−0.01189)Ser+(0.02070)Ile+(0.0002667)Asn+(0.03221)Phe+(−0.04551)Trp
28	0.664	0.692	(−1.883)+(0.003868)Ala+(−0.01154)Ser+(0.01235)Leu+(−0.005380)His+(0.03207)Phe+(−0.04571)Trp
29	0.664	0.692	(−2.093)+(0.0002007)Gly+(0.004170)Ala+(−0.01098)Ser+(0.01388)Leu+(0.01988)Cit+(−0.03359)Trp
30	0.664	0.692	(−2.062)+(0.004176)Ala+(−0.01001)Ser+(0.01408)Leu+(−0.002296)Arg+(0.02225)Cit+(−0.03331)Trp
31	0.664	0.695	(−3.551)+(0.004268)Ala+(0.01263)Leu+(−0.01978)Asn+(0.02610)Phe+(0.01990)Cit+(−0.04003)Trp
32	0.664	0.693	(−2.100)+(0.003793)Ala+(−0.01318)Ser+(0.01079)Leu+(0.005490)Orn+(0.02887)Phe+(−0.04455)Trp
33	0.663	0.686	(−3.339)+(0.004201)Ala+(0.01445)Leu+(0.01970)Cit+(−0.03462)Trp
34	0.663	0.693	(−1.932)+(0.004369)Ala+(−0.01085)Ser+(−0.002522)Val+(0.01668)Leu+(0.01970)Cit+(−0.03298)Trp
35	0.663	0.693	(−2.247)+(0.003781)Ala+(−0.01287)Ser+(0.01182)Leu+(0.0006424)Gln+(0.02844)Phe+(−0.04510)Trp
36	0.663	0.693	(−2.068)+(0.003237)Ala+(−0.01225)Ser+(0.002195)Pro+(0.01892)Ile+(0.03136)Phe+(−0.04462)Trp
37	0.663	0.694	(−2.089)+(0.003476)Ala+(−0.01180)Ser+(0.01622)Ile+(0.003657)Leu+(0.03148)Phe+(−0.04632)Trp
38	0.663	0.693	(−2.072)+(0.003886)Ala+(−0.01111)Ser+(0.002108)Pro+(0.01288)Leu+(0.01882)Cit+(−0.03335)Trp
39	0.663	0.691	(−2.084)+(0.003522)Ala+(−0.01239)Ser+(0.02039)Ile+(0.03133)Phe+(0.001650)Arg+(−0.04519)Trp
40	0.663	0.690	(−1.192)+(0.003615)Ala+(−0.01470)Ser+(0.01335)Leu+(0.04178)Met+(−0.04172)Trp
41	0.663	0.694	(−3.552)+(0.003907)Ala+(0.02010)Ile+(0.002349)Lys+(0.03376)Phe+(−0.008799)Tyr+(−0.04309)Trp
42	0.663	0.688	(−3.589)+(0.004121)Ala+(0.01310)Leu+(0.002663)Lys+(0.01917)Cit+(−0.03528)Trp
43	0.663	0.694	(−1.585)+(0.003371)Ala+(−0.01286)Ser+(0.003088)Pro+(0.01817)Ile+(0.005661)Lys+(−0.03702)Trp
44	0.663	0.694	(−1.982)+(0.003308)Ala+(−0.01365)Ser+(0.002962)Thr+(0.01989)Ile+(0.03137)Phe+(−0.04587)Trp
45	0.663	0.692	(−3.630)+(0.003891)Ala+(0.01313)Leu+(0.02446)Phe+(−0.007509)Arg+(0.02237)Cit+(−0.04104)Trp
46	0.663	0.692	(−2.316)+(0.004137)Ala+(−0.01180)Ser+(0.01369)Leu+(0.0007681)Gln+(0.01820)Cit+(−0.03382)Trp
47	0.663	0.694	(−1.626)+(0.003538)Ala+(−0.01297)Ser+(0.003661)Pro+(0.01045)Leu+(0.005057)Lys+(−0.03760)Trp
48	0.663	0.694	(−3.377)+(0.004103)Ala+(0.01395)Leu+(−0.01317)His+(0.02496)Phe+(0.01670)Cit+(−0.04070)Trp
49	0.663	0.692	(−1.962)+(0.004234)Ala+(−0.01042)Ser+(0.01426)Leu+(−0.003358)His+(0.02042)Cit+(−0.03326)Trp
50	0.663	0.689	(−3.808)+(0.003643)Ala+(0.02164)Ile+(0.02414)Phe+(0.01459)Cit+(−0.04128)Trp

[図29]

No.	ROC_AUC (Validation)	ROC_AUC (No Validation)	FORMULA
51	0.663	0.693	(-1.932)+(0.003612)Ala+(-0.01187)Ser+(-0.001512)Val+(0.02326)Ile+(0.03200)Phe+(-0.04462)Trp
52	0.663	0.694	(-1.436)+(0.003601)Ala+(-0.01548)Ser+(0.01157)Leu+(0.003841)Lys+(0.03564)Met+(-0.04193)Trp
53	0.663	0.691	(-1.571)+(0.003731)Ala+(-0.01320)Ser+(0.02038)Ile+(0.007247)Orn+(0.004025)Lys+(-0.03671)Trp
54	0.663	0.693	(-1.940)+(0.003988)Ala+(-0.01361)Ser+(0.01227)Leu+(0.001097)Gln+(0.004305)Lys+(-0.03813)Trp
55	0.662	0.692	(-3.471)+(0.003991)Ala+(0.02170)Ile+(-0.01977)Asn+(0.02821)Phe+(0.01891)Cit+(-0.03981)Trp
56	0.662	0.693	(-1.415)+(0.003395)Ala+(-0.01517)Ser+(0.01951)Ile+(0.004634)Lys+(0.03213)Met+(-0.04077)Trp
57	0.662	0.692	(-2.061)+(0.004236)Ala+(-0.01037)Ser+(0.01388)Leu+(-0.002563)Asn+(0.02067)Cit+(-0.03331)Trp
58	0.662	0.688	(-3.108)+(0.003666)Ala+(0.02270)Ile+(-0.009941)Asn+(0.03224)Phe+(-0.04551)Trp
59	0.662	0.693	(-1.342)+(0.004329)Ala+(-0.01258)Ser+(-0.003920)Val+(0.01652)Leu+(0.005265)Lys+(-0.03762)Trp
60	0.662	0.692	(-1.844)+(0.003739)Ala+(-0.01343)Ser+(0.02043)Ile+(0.0009411)Gln+(0.005145)Lys+(-0.03732)Trp
61	0.662	0.688	(-1.373)+(0.003841)Ala+(-0.01257)Ser+(0.02176)Ile+(0.01125)Orn+(-0.03481)Trp
62	0.662	0.692	(-1.321)+(0.003426)Ala+(-0.01574)Ser+(0.01992)Ile+(0.009658)Orn+(0.03459)Met+(-0.03841)Trp
63	0.662	0.692	(-3.279)+(-0.002446)Gly+(0.003734)Ala+(0.02048)Ile+(0.02483)Phe+(0.01635)Cit+(-0.04200)Trp
64	0.662	0.688	(-3.529)+(0.003788)Ala+(0.01191)Leu+(0.001860)Lys+(0.02662)Phe+(-0.04613)Trp
65	0.662	0.692	(-1.239)+(0.004376)Ala+(-0.01264)Ser+(-0.003295)Val+(0.01648)Leu+(0.009532)Orn+(-0.03514)Trp
66	0.662	0.692	(-2.191)+(0.001057)Gly+(0.003750)Ala+(-0.01317)Ser+(0.01207)Leu+(0.03051)Phe+(-0.04544)Trp
67	0.662	0.691	(-1.956)+(0.003914)Ala+(-0.01211)Ser+(-0.001526)Val+(0.01355)Leu+(0.03025)Phe+(-0.04532)Trp
68	0.662	0.688	(-1.498)+(0.003748)Ala+(-0.01232)Ser+(0.02101)Ile+(0.005673)Lys+(-0.03796)Trp
69	0.662	0.691	(-3.424)+(0.003383)Ala+(0.02150)Ile+(0.003131)Lys+(0.02920)Phe+(-0.003131)Arg+(-0.04682)Trp
70	0.662	0.692	(-1.566)+(0.004050)Ala+(-0.01316)Ser+(0.01154)Leu+(0.006189)Orn+(0.003687)Lys+(-0.03732)Trp
71	0.662	0.692	(-2.072)+(0.004136)Ala+(-0.01089)Ser+(0.01384)Leu+(0.01996)Cit+(0.0007241)Tyr+(-0.03403)Trp
72	0.662	0.691	(-1.788)+(0.003645)Ala+(-0.01342)Ser+(0.02045)Ile+(0.02866)Met+(0.01724)Cit+(-0.03515)Trp
73	0.662	0.691	(-2.093)+(0.003409)Ala+(-0.01256)Ser+(0.002810)Pro+(0.01062)Leu+(0.02975)Phe+(-0.04487)Trp
74	0.662	0.692	(-1.983)+(0.003613)Ala+(-0.01382)Ser+(0.002800)Thr+(0.01113)Leu+(0.03014)Phe+(-0.04614)Trp
75	0.662	0.692	(-3.325)+(0.003621)Ala+(0.02133)Ile+(-0.01230)Asn+(0.003016)Lys+(0.03071)Phe+(-0.04608)Trp

[図30]

No.	ROC_AUC (Validation)	ROC_AUC (No Validation)	FORMULA
76	0.662	0.691	(−1.825)+(0.004070)Ala+(−0.01365)Ser+(0.01284)Leu+(0.007789)Orn+(0.001087)Gln+(−0.03606)Trp
77	0.662	0.684	(−2.799)+(0.004097)Ala+(0.01368)Leu+(0.003309)Lys+(−0.03915)Trp
78	0.662	0.686	(−1.893)+(0.004022)Ala+(−0.01052)Ser+(0.02204)Ile+(0.01944)Cit+(−0.03195)Trp
79	0.662	0.687	(−2.932)+(0.003961)Ala+(0.01388)Leu+(−0.01066)His+(0.03047)Phe+(−0.04562)Trp
80	0.661	0.688	(−3.093)+(0.003613)Ala+(0.02269)Ile+(−0.005577)His+(0.03102)Phe+(−0.04503)Trp
81	0.661	0.686	(−3.428)+(0.003492)Ala+(0.02220)Ile+(0.002439)Orn+(0.02825)Phe+(−0.04507)Trp
82	0.661	0.691	(−1.944)+(0.003626)Ala+(−0.01347)Ser+(0.01161)Leu+(0.01518)Met+(0.02739)Phe+(−0.04650)Trp
83	0.661	0.689	(−2.891)+(−0.001931)Gly+(0.004295)Ala+(0.01372)Leu+(0.02118)Cit+(−0.03476)Trp
84	0.661	0.693	(−1.470)+(0.003714)Ala+(−0.01281)Ser+(0.003065)Pro+(0.01154)Leu+(0.008478)Orn+(−0.03534)Trp
85	0.661	0.687	(−3.095)+(0.004198)Ala+(0.01502)Leu+(−0.005756)Arg+(0.02531)Cit+(−0.03370)Trp
86	0.661	0.693	(−3.210)+(0.003600)Ala+(0.02118)Ile+(0.003482)Lys+(−0.009970)His+(0.02973)Phe+(−0.04526)Trp
87	0.661	0.692	(−1.340)+(0.003965)Ala+(−0.01388)Ser+(0.002534)Thr+(0.01236)Leu+(0.008354)Orn+(−0.03657)Trp
88	0.661	0.692	(−4.010)+(0.003884)Ala+(0.01186)Leu+(0.001622)Lys+(0.02095)Phe+(0.01542)Cit+(−0.04156)Trp
89	0.661	0.688	(−1.315)+(0.003684)Ala+(−0.01108)Ser+(0.003585)Pro+(0.01312)Leu+(−0.03657)Trp
90	0.661	0.688	(−3.449)+(0.003534)Ala+(0.002158)Pro+(0.01195)Leu+(0.02674)Phe+(−0.04526)Trp
91	0.661	0.689	(−3.361)+(0.004287)Ala+(0.01173)Leu+(0.03394)Phe+(−0.008510)Tyr+(−0.04305)Trp
92	0.661	0.692	(−3.865)+(0.004367)Ala+(0.01159)Leu+(0.02803)Phe+(0.01539)Cit+(−0.008284)Tyr+(−0.03858)Trp
93	0.661	0.692	(−3.901)+(0.003760)Ala+(0.001165)Pro+(0.01216)Leu+(0.02164)Phe+(0.01492)Cit+(−0.04127)Trp
94	0.661	0.684	(−1.212)+(0.004187)Ala+(−0.01051)Ser+(0.01480)Leu+(−0.03762)Trp
95	0.661	0.687	(−3.404)+(0.003823)Ala+(0.01262)Leu+(0.0008992)Orn+(0.02738)Phe+(−0.04579)Trp
96	0.661	0.693	(−1.603)+(0.003636)Ala+(−0.01541)Ser+(0.01329)Leu+(0.0009647)Gln+(0.03551)Met+(−0.04075)Trp
97	0.661	0.691	(−1.364)+(0.004106)Ala+(−0.01204)Ser+(0.01263)Leu+(0.005506)Lys+(−0.004908)His+(−0.03828)Trp
98	0.661	0.691	(−3.048)+(0.003945)Ala+(0.01273)Leu+(0.003276)Lys+(−0.01434)His+(0.02939)Phe+(−0.04563)Trp
99	0.661	0.686	(−2.960)+(−0.001592)Gly+(0.003552)Ala+(0.02185)Ile+(0.03023)Phe+(−0.04638)Trp
100	0.661	0.686	(−3.295)+(0.003932)Ala+(−0.001411)Val+(0.01444)Leu+(0.02719)Phe+(−0.04546)Trp

[図31]

No.	ROC_AUC (Validation)	ROC_AUC (No Validation)	FORMULA
1	0.747	0.761	(−1.1311)+(0.0010)Ala+(0.0087)Glu+(0.1405)3−MeHis+(−0.0040)Cit+(−0.0091)Trp+(0.0067)Cys
2	0.747	0.762	(−0.9546)+(0.0012)Ala+(0.0086)Glu+(−0.0061)His+(0.1334)3−MeHis+(−0.0074)Trp+(0.0068)Cys
3	0.746	0.759	(−1.0526)+(0.0036)Leu+(−0.0065)Orn+(0.0092)Glu+(0.1318)3−MeHis+(−0.0097)Trp+(0.0099)Cys
4	0.745	0.760	(−1.1064)+(0.0011)Ala+(−0.0045)Orn+(0.0102)Glu+(0.0073)Phe+(0.1444)3−MeHis+(−0.0105)Trp
5	0.744	0.755	(−1.1573)+(−0.0057)Orn+(0.0089)Glu+(0.0934) α−AAA+(0.1465)3−MeHis+(0.0083)Cys
6	0.743	0.759	(−1.0363)+(0.0010)Ala+(0.0097)Glu+(0.0102)Met+(0.1452)3−MeHis+(−0.0019)Arg+(−0.0091)Trp
7	0.743	0.755	(−0.9298)+(0.0103)Glu+(0.1462)3−MeHis+(−0.0047)Cit+(−0.0070)Trp+(0.0078)Cys
8	0.743	0.758	(−0.8842)+(−0.0047)Orn+(0.0092)Glu+(−0.0048)His+(0.0923) α−AAA+(0.1478)3−MeHis+(0.0088)Cys
9	0.743	0.758	(−1.3307)+(0.0006)Ala+(−0.0057)Orn+(0.0077)Glu+(0.0864) α−AAA+(0.1469)3−MeHis+(0.0074)Cys
10	0.743	0.758	(−1.2341)+(0.0011)Ala+(−0.0003)Thr+(0.0087)Glu+(0.1265)3−MeHis+(−0.0088)Trp+(0.0062)Cys
11	0.743	0.756	(−1.1064)+(−0.0012)Lys+(0.0083)Glu+(0.1191) α−AAA+(0.1493)3−MeHis+(−0.0051)Cit+(0.0083)Cys
12	0.742	0.757	(−1.2602)+(0.0010)Ala+(0.0036)Hypro+(0.0090)Glu+(0.1208)3−MeHis+(−0.0090)Trp+(0.0058)Cys
13	0.742	0.757	(−1.0302)+(0.0057) α−ABA+(0.0101)Glu+(0.1422)3−MeHis+(−0.0046)Cit+(−0.0073)Trp+(0.0080)Cys
14	0.742	0.756	(−1.3577)+(0.0008)Ala+(0.0046)Ile+(0.0079)Glu+(0.1189)3−MeHis+(−0.0105)Trp+(0.0062)Cys
15	0.742	0.755	(−0.9131)+(0.0009)Ala+(−0.0030)Tau+(0.0078)Glu+(−0.0086)His+(0.1485)3−MeHis+(0.0068)Cys
16	0.742	0.758	(−1.1848)+(0.0316)Sar+(−0.0063)Orn+(0.0091)Glu+(0.0861) α−AAA+(0.1423)3−MeHis+(0.0084)Cys
17	0.742	0.758	(−1.1845)+(0.0011)Ala+(−0.0022)Asn+(0.0085)Glu+(0.1278)3−MeHis+(−0.0086)Trp+(0.0063)Cys
18	0.742	0.757	(−1.3520)+(0.0006)Ala+(0.0066)Glu+(0.0912) α−AAA+(0.1384)3−MeHis+(−0.0026)Arg+(0.0066)Cys
19	0.741	0.756	(−1.2238)+(−0.0060)Orn+(0.0001)Gln+(0.0091)Glu+(0.0793) α−AAA+(0.1472)3−MeHis+(0.0082)Cys
20	0.741	0.758	(−1.2217)+(0.0012)Ala+(−0.0006)Pro+(0.0088)Glu+(0.1304)3−MeHis+(−0.0087)Trp+(0.0062)Cys
21	0.741	0.757	(−1.2450)+(0.0050) α−ABA+(−0.0061)Orn+(0.0088)Glu+(0.0794) α−AAA+(0.1454)3−MeHis+(0.0084)Cys
22	0.741	0.757	(−1.2322)+(0.0011)Ala+(0.0094)Glu+(0.0548) α−AAA+(0.0051)Phe+(0.1292)3−MeHis+(−0.0100)Trp
23	0.741	0.755	(−1.3046)+(0.0006)Ala+(−0.0057)Orn+(−0.0273)Asp+(0.0090)Glu+(0.1526)3−MeHis+(0.0072)Cys
24	0.741	0.756	(−0.9436)+(0.0012)Thr+(0.0092)Glu+(−0.0081)His+(0.0876) α−AAA+(0.1400)3−MeHis+(0.0068)Cys
25	0.741	0.752	(−1.1212)+(−0.0057)Orn+(−0.0295)Asp+(0.0104)Glu+(0.1527)3−MeHis+(0.0081)Cys

[図32]

No.	ROC_AUC (Validation)	ROC_AUC (No Validation)	FORMULA
26	0.741	0.755	(−0.7662)+(0.0013)Ala+(−0.0027)Orn+(0.0095)Glu+(−0.0035)His+(0.1576)3−MeHis+(−0.0069)Trp
27	0.741	0.756	(−1.0689)+(0.0012)Ala+(0.0061)Asp+(0.0088)Glu+(0.0785) α −AAA+(0.1372)3−MeHis+(−0.0082)Trp
28	0.741	0.757	(−1.3402)+(0.0009)Ala+(0.0018)Leu+(0.0082)Glu+(0.1199)3−MeHis+(−0.0102)Trp+(0.0063)Cys
29	0.741	0.756	(−0.9266)+(0.0012)Ala+(0.0070)Hypro+(−0.0039)Orn+(0.0099)Glu+(0.1444)3−MeHis+(−0.0080)Trp
30	0.741	0.755	(−0.8670)+(0.0018)Thr+(0.0092)Glu+(−0.0075)His+(0.1516)3−MeHis+(−0.0023)Arg+(0.0074)Cys
31	0.741	0.755	(−1.0831)+(0.0106)Glu+(0.0055)Phe+(0.1400)3−MeHis+(−0.0050)Cit+(−0.0092)Trp+(0.0066)Cys
32	0.741	0.754	(−1.3761)+(0.0006)Ala+(0.0006)Leu+(−0.0058)Orn+(0.0078)Glu+(0.1527)3−MeHis+(0.0072)Cys
33	0.740	0.755	(−1.2333)+(0.0057) α −ABA+(−0.0060)Orn+(−0.0180)Asp+(0.0098)Glu+(0.1507)3−MeHis+(0.0083)Cys
34	0.740	0.755	(−0.8434)+(−0.0018)Ser+(0.0096)Glu+(0.0968) α −AAA+(0.1182)3−MeHis+(−0.0068)Trp+(0.0076)Cys
35	0.740	0.757	(−1.1246)+(0.0011)Ala+(0.0095)Glu+(0.0053)Met+(0.0639) α −AAA+(0.1355)3−MeHis+(−0.0089)Trp
36	0.740	0.755	(−0.8018)+(−0.0049)Orn+(0.0123)Glu+(0.0154)Met+(−0.0080)1−MeHis+(0.1667)3−MeHis+(−0.0077)Trp
37	0.740	0.756	(−0.8189)+(−0.0004)Ser+(−0.0053)Orn+(0.0107)Glu+(0.1419)3−MeHis+(−0.0066)Trp+(0.0091)Cys
38	0.740	0.755	(−1.0502)+(0.0009)Ala+(0.0075)Glu+(−0.0084)His+(−0.0068)1−MeHis+(0.1539)3−MeHis+(0.0062)Cys
39	0.740	0.755	(−1.1923)+(0.0160)Sar+(0.0080)Glu+(0.0946) α −AAA+(0.1353)3−MeHis+(−0.0027)Arg+(0.0075)Cys
40	0.740	0.756	(−0.9820)+(0.0011)Ala+(0.0019)Leu+(−0.0039)Orn+(0.0090)Glu+(0.1503)3−MeHis+(−0.0091)Trp
41	0.740	0.755	(−1.3504)+(0.0006)Ala+(0.0050)Hypro+(−0.0059)Orn+(0.0082)Glu+(0.1467)3−MeHis+(0.0069)Cys
42	0.740	0.755	(−1.0770)+(0.0011)Ala+(−0.0031)Asn+(0.0096)Glu+(0.0090)Met+(0.1415)3−MeHis+(−0.0089)Trp
43	0.740	0.755	(−1.1164)+(0.0423)Sar+(−0.0055)Orn+(0.0092)Glu+(0.1485)3−MeHis+(−0.0014)Arg+(0.0086)Cys
44	0.740	0.755	(−1.2022)+(0.0064) α −ABA+(−0.0053)Orn+(0.0088)Glu+(0.1519)3−MeHis+(−0.0012)Arg+(0.0086)Cys
45	0.740	0.755	(−1.1584)+(0.0011)Ala+(0.0040)Hypro+(0.0099)Glu+(0.0055)Met+(0.1333)3−MeHis+(−0.0090)Trp
46	0.740	0.756	(−0.9544)+(0.0242)Sar+(0.0104)Glu+(0.1414)3−MeHis+(−0.0047)Cit+(−0.0072)Trp+(0.0078)Cys
47	0.740	0.755	(−1.1559)+(0.0366)Sar+(−0.0063)Orn+(−0.0271)Asp+(0.0104)Glu+(0.1473)3−MeHis+(0.0082)Cys
48	0.740	0.756	(−1.0505)+(0.0011)Ala+(0.0078)Glu+(−0.0076)His+(0.1433)3−MeHis+(−0.0020)Tyr+(0.0067)Cys
49	0.740	0.756	(−1.1072)+(−0.0002)Gly+(−0.0057)Orn+(0.0087)Glu+(0.0934) α −AAA+(0.1464)3−MeHis+(0.0084)Cys
50	0.740	0.755	(−1.2902)+(0.0060) α −ABA+(0.0004)Thr+(−0.0063)Orn+(0.0092)Glu+(0.1521)3−MeHis+(0.0080)Cys

[図33]

No.	ROC_AUC (Validation)	ROC_AUC (No Validation)	FORMULA
51	0.740	0.754	(−1.2891)+(0.0336)Sar+(0.0011)Leu+(−0.0065)Orn+(0.0088)Glu+(0.1468)3−MeHis+(0.0082)Cys
52	0.740	0.755	(−0.8738)+(−0.0003)Gly+(0.0101)Glu+(0.1456)3−MeHis+(−0.0045)Cit+(−0.0070)Trp+(0.0080)Cys
53	0.740	0.757	(−0.9672)+(0.0012)Ala+(0.0088)Glu+(0.0774) α−AAA+(0.1416)3−MeHis+(−0.0012)Arg+(−0.0078)Trp
54	0.740	0.755	(−1.0033)+(0.0010)Ala+(0.0047)Ile+(−0.0038)Orn+(0.0088)Glu+(0.1490)3−MeHis+(−0.0094)Trp
55	0.740	0.755	(−0.9066)+(0.0066) α−ABA+(0.0104)Glu+(−0.0051)His+(0.1318)3−MeHis+(−0.0056)Trp+(0.0080)Cys
56	0.740	0.755	(−1.0700)+(0.0009)Ala+(−0.0001)Val+(0.0077)Glu+(−0.0083)His+(0.1469)3−MeHis+(0.0062)Cys
57	0.739	0.755	(−0.9893)+(0.0009)Ala+(−0.0009)Ser+(0.0074)Glu+(−0.0079)His+(0.1445)3−MeHis+(0.0063)Cys
58	0.739	0.754	(−1.1710)+(0.0408)Sar+(−0.0002)Pro+(−0.0062)Orn+(0.0096)Glu+(0.1490)3−MeHis+(0.0082)Cys
59	0.739	0.756	(−0.7193)+(−0.0350)EtOHNH2+(−0.0045)Orn+(0.0122)Glu+(0.0194)Met+(0.1639)3−MeHis+(−0.0078)Trp
60	0.739	0.754	(−1.3370)+(0.0007)Ala+(−0.0263)Asp+(0.0080)Glu+(0.1444)3−MeHis+(−0.0025)Arg+(0.0064)Cys
61	0.739	0.754	(−1.2456)+(0.0067) α−ABA+(−0.0008)Asn+(−0.0059)Orn+(0.0091)Glu+(0.1509)3−MeHis+(0.0083)Cys
62	0.739	0.753	(−0.7357)+(0.0013)Ala+(−0.0009)Ser+(0.0090)Glu+(−0.0044)His+(0.1481)3−MeHis+(−0.0069)Trp
63	0.739	0.753	(−1.2510)+(0.0068) α−ABA+(−0.0003)Pro+(−0.0060)Orn+(0.0092)Glu+(0.1523)3−MeHis+(0.0083)Cys
64	0.739	0.755	(−0.9362)+(0.0002)Pro+(0.0099)Glu+(0.1332)3−MeHis+(−0.0021)Arg+(−0.0065)Trp+(0.0081)Cys
65	0.739	0.754	(−1.3229)+(0.0055) α−ABA+(0.0008)Leu+(−0.0062)Orn+(0.0087)Glu+(0.1501)3−MeHis+(0.0082)Cys
66	0.739	0.754	(−0.8685)+(−0.0028)Ser+(0.0104)Glu+(0.0125)Met+(0.1205)3−MeHis+(−0.0087)Trp+(0.0062)Cys
67	0.739	0.752	(−1.0887)+(−0.0049)Orn+(0.0091)Glu+(0.1548)3−MeHis+(−0.0013)Arg+(0.0084)Cys
68	0.739	0.755	(−1.3174)+(0.0064) α−ABA+(−0.0061)Orn+(0.0091)Glu+(0.0012)Phe+(0.1505)3−MeHis+(0.0079)Cys
69	0.739	0.753	(−1.2115)+(−0.0002)Val+(0.0084)Glu+(0.0991) α−AAA+(0.1498)3−MeHis+(−0.0048)Cit+(0.0069)Cys
70	0.739	0.755	(−0.9739)+(0.0022)Asn+(0.0102)Glu+(0.1340)3−MeHis+(−0.0023)Arg+(−0.0067)Trp+(0.0080)Cys
71	0.739	0.756	(−0.9353)+(−0.0062)Orn+(0.0017)Lys+(0.0122)Glu+(0.0123)Met+(0.1574)3−MeHis+(−0.0085)Trp
72	0.739	0.754	(−1.3828)+(0.0006)Ala+(0.0071)Glu+(0.0016)Met+(0.1457)3−MeHis+(−0.0026)Arg+(0.0062)Cys
73	0.739	0.756	(−0.9968)+(−0.0241)EtOHNH2+(0.0010)Ala+(0.0072)Glu+(−0.0076)His+(0.1519)3−MeHis+(0.0060)Cys
74	0.739	0.754	(−0.9106)+(0.0088)Glu+(−0.0067)His+(0.0888) α−AAA+(−0.0070)1−MeHis+(0.1456)3−MeHis+(0.0074)Cys
75	0.739	0.752	(−1.2077)+(0.0008)Thr+(−0.0062)Orn+(0.0095)Glu+(0.1554)3−MeHis+(0.0076)Cys

[図34]

No.	ROC_AUC (Validation)	ROC_AUC (No Validation)	FORMULA
76	0.739	0.754	(−1.0714)+(0.0011)Ala+(0.0011)Lys+(0.0088)Glu+(0.1451)3−MeHis+(−0.0017)Arg+(−0.0084)Trp
77	0.739	0.754	(−0.9145)+(−0.0043)Tau+(−0.0066)Orn+(0.0091)Glu+(0.1047) α −AAA+(0.1496)3−MeHis+(0.0094)Cys
78	0.739	0.755	(−1.2717)+(0.0007)Ala+(−0.0048)Orn+(0.0076)Glu+(0.1546)3−MeHis+(−0.0013)Arg+(0.0075)Cys
79	0.739	0.754	(−1.3149)+(0.0008)Ala+(−0.0006)Pro+(−0.0054)Orn+(0.0080)Glu+(0.1570)3−MeHis+(0.0072)Cys
80	0.739	0.755	(−1.1131)+(0.0011)Ala+(0.0004)Lys+(0.0090)Glu+(0.0672) α −AAA+(0.1363)3−MeHis+(−0.0084)Trp
81	0.739	0.753	(−0.8657)+(0.0027)Asn+(0.0094)Glu+(−0.0075)His+(0.1633)3−MeHis+(−0.0051)Cit+(0.0077)Cys
82	0.739	0.754	(−0.9434)+(0.0155) β −AIBA+(0.0104)Glu+(0.1406)3−MeHis+(−0.0049)Cit+(−0.0068)Trp+(0.0077)Cys
83	0.739	0.754	(−1.3411)+(0.0007)Ala+(−0.0056)Orn+(0.0080)Glu+(0.0000)Phe+(0.1537)3−MeHis+(0.0071)Cys
84	0.739	0.754	(−1.2097)+(0.0024)Leu+(0.0090)Glu+(0.0794) α −AAA+(0.1139)3−MeHis+(−0.0089)Trp+(0.0075)Cys
85	0.739	0.754	(−1.2395)+(0.0033) α −ABA+(0.0079)Glu+(0.0889) α −AAA+(0.1367)3−MeHis+(−0.0026)Arg+(0.0075)Cys
86	0.739	0.755	(−0.8051)+(−0.0116)EtOHNH2+(−0.0053)Orn+(0.0107)Glu+(0.1459)3−MeHis+(−0.0063)Trp+(0.0091)Cys
87	0.739	0.754	(−1.2922)+(0.0066) α −ABA+(0.0060)Hypro+(−0.0064)Orn+(0.0093)Glu+(0.1426)3−MeHis+(0.0080)Cys
88	0.739	0.755	(−0.8169)+(0.0101)Glu+(−0.0046)His+(0.0916) α −AAA+(0.1279)3−MeHis+(−0.0055)Trp+(0.0080)Cys
89	0.739	0.754	(−1.1671)+(0.0138) β −AIBA+(−0.0057)Orn+(0.0091)Glu+(0.0906) α −AAA+(0.1403)3−MeHis+(0.0081)Cys
90	0.739	0.755	(−1.2004)+(0.0010)Ala+(0.0013)Leu+(0.0093)Glu+(0.0059)Met+(0.1361)3−MeHis+(−0.0098)Trp
91	0.739	0.753	(−1.0792)+(−0.0002)Gly+(−0.0056)Orn+(−0.0288)Asp+(0.0102)Glu+(0.1526)3−MeHis+(0.0082)Cys
92	0.739	0.755	(−0.8234)+(0.0326)Sar+(0.0107)Glu+(−0.0051)His+(0.1296)3−MeHis+(−0.0055)Trp+(0.0078)Cys
93	0.739	0.753	(−1.3975)+(0.0046) α −ABA+(0.0032)Ile+(−0.0062)Orn+(0.0080)Glu+(0.1492)3−MeHis+(0.0080)Cys
94	0.739	0.754	(−1.3456)+(0.0006)Ala+(0.0001)Thr+(−0.0057)Orn+(0.0081)Glu+(0.1540)3−MeHis+(0.0070)Cys
95	0.738	0.754	(−0.8118)+(−0.0046)Orn+(−0.0132)Asp+(0.0130)Glu+(0.0147)Met+(0.1572)3−MeHis+(−0.0077)Trp
96	0.738	0.753	(−1.2032)+(0.0338)Sar+(0.0049)Hypro+(−0.0065)Orn+(0.0096)Glu+(0.1418)3−MeHis+(0.0079)Cys
97	0.738	0.754	(−0.8135)+(−0.0003)Gly+(0.0114)Glu+(0.0161)Met+(0.1496)3−MeHis+(−0.0021)Arg+(−0.0078)Trp
98	0.738	0.754	(−1.0886)+(0.0012)Ala+(0.0051)Hypro+(0.0093)Glu+(−0.0057)1−MeHis+(0.1400)3−MeHis+(−0.0082)Trp
99	0.738	0.751	(−0.8713)+(0.0116)Glu+(0.0156)Met+(0.1498)3−MeHis+(−0.0023)Arg+(−0.0077)Trp
100	0.738	0.753	(−0.8383)+(0.0012)Ala+(−0.0013)Ser+(0.0089)Glu+(0.1505)3−MeHis+(−0.0024)Cit+(−0.0081)Trp

[図35]

No.	ROC_AUC (Validation)	ROC_AUC (No Validation)	FORMULA
1	0.678	0.699	(−0.9587)+(0.0013)Ala+(−0.0049)Ser+(0.0074)Ile+(0.0014)Lys+(0.0116)Phe+(−0.0173)Trp
2	0.677	0.698	(−0.9143)+(0.0014)Ala+(−0.0050)Ser+(0.0077)Ile+(0.0025)Orn+(0.0115)Phe+(−0.0166)Trp
3	0.675	0.695	(−0.8985)+(0.0014)Ala+(−0.0045)Ser+(0.0067)Ile+(0.0012)Leu+(0.0124)Phe+(−0.0173)Trp
4	0.675	0.696	(−0.9871)+(0.0016)Ala+(−0.0047)Ser+(0.0045)Leu+(0.0017)Lys+(0.0081)Cit+(−0.0133)Trp
5	0.674	0.695	(−0.7084)+(0.0013)Ala+(−0.0049)Ser+(0.0013)Pro+(0.0073)Ile+(0.0021)Lys+(−0.0141)Trp
6	0.674	0.695	(−1.0657)+(0.0015)Ala+(−0.0046)Ser+(0.0044)Leu+(0.0096)Phe+(0.0065)Cit+(−0.0156)Trp
7	0.673	0.693	(−0.8227)+(0.0015)Ala+(−0.0044)Ser+(0.0048)Leu+(−0.0022)His+(0.0127)Phe+(−0.0171)Trp
8	0.673	0.694	(−0.6425)+(0.0013)Ala+(−0.0057)Ser+(0.0079)Ile+(0.0017)Lys+(0.0122)Met+(−0.0154)Trp
9	0.672	0.693	(−0.8939)+(0.0013)Ala+(−0.0049)Ser+(0.0012)Pro+(0.0041)Leu+(0.0117)Phe+(−0.0169)Trp
10	0.672	0.693	(−0.6288)+(0.0016)Ala+(−0.0053)Ser+(0.0010)Thr+(0.0049)Leu+(0.0035)Orn+(−0.0140)Trp
11	0.672	0.693	(−0.8513)+(0.0014)Ala+(−0.0051)Ser+(0.0045)Leu+(0.0052)Met+(0.0110)Phe+(−0.0175)Trp
12	0.672	0.692	(−0.8931)+(0.0017)Ala+(−0.0043)Ser+(0.0053)Leu+(0.0004)Orn+(0.0082)Cit+(−0.0129)Trp
13	0.671	0.694	(−0.7172)+(0.0016)Ala+(−0.0050)Ser+(0.0045)Leu+(0.0027)Orn+(0.0013)Lys+(−0.0141)Trp
14	0.671	0.693	(−0.6680)+(0.0015)Ala+(−0.0050)Ser+(0.0013)Pro+(0.0045)Leu+(0.0034)Orn+(−0.0135)Trp
15	0.671	0.690	(−0.7854)+(0.0014)Ala+(−0.0052)Ser+(0.0082)Ile+(0.0106)Met+(0.0074)Cit+(−0.0134)Trp
16	0.671	0.693	(−0.8679)+(0.0015)Ala+(−0.0048)Ser+(0.0068)Ile+(0.0016)Leu+(0.0042)Orn+(−0.0137)Trp
17	0.671	0.693	(−0.8593)+(0.0014)Ala+(−0.0053)Ser+(0.0011)Thr+(0.0043)Leu+(0.0119)Phe+(−0.0174)Trp
18	0.671	0.693	(−1.3820)+(0.0014)Ala+(0.0085)Ile+(−0.0047)Asn+(0.0011)Lys+(0.0121)Phe+(−0.0175)Trp
19	0.671	0.692	(−0.7008)+(0.0016)Ala+(−0.0047)Ser+(0.0049)Leu+(0.0019)Lys+(0.0005)Tyr+(−0.0149)Trp
20	0.671	0.691	(−0.8919)+(0.0015)Ala+(−0.0047)Ser+(0.0045)Leu+(0.0005)Asn+(0.0121)Phe+(−0.0173)Trp
21	0.671	0.693	(−1.3373)+(0.0014)Ala+(0.0084)Ile+(0.0013)Lys+(−0.0040)His+(0.0118)Phe+(−0.0171)Trp
22	0.670	0.692	(−0.5818)+(0.0013)Ala+(−0.0057)Ser+(0.0012)Pro+(0.0048)Leu+(0.0142)Met+(−0.0154)Trp
23	0.670	0.688	(−0.6566)+(0.0017)Ala+(−0.0047)Ser+(0.0055)Leu+(0.0020)Arg+(−0.0143)Trp+(−0.0024)Tyr
24	0.670	0.691	(−1.5798)+(0.0017)Ala+(0.0045)Leu+(0.0111)Phe+(0.0065)Cit+(−0.0036)Tyr+(−0.0147)Trp
25	0.669	0.692	(−1.3576)+(0.0016)Ala+(0.0085)Ile+(0.0147)Phe+(−0.0006)Arg+(−0.0038)Tyr+(−0.0163)Trp

[図36]

No.	ROC_AUC (Validation)	ROC_AUC (No Validation)	FORMULA
26	0.669	0.691	(−0.5758)+(0.0014)Ala+(−0.0058)Ser+(0.0053)Leu+(0.0011)Asn+(0.0153)Met+(−0.0158)Trp
27	0.669	0.692	(−1.4261)+(0.0013)Ala+(0.0085)Ile+(0.0012)Lys+(0.0115)Phe+(−0.0012)Arg+(−0.0177)Trp
28	0.669	0.692	(−0.6830)+(0.0016)Ala+(−0.0052)Ser+(0.0050)Leu+(0.0026)Asn+(0.0036)Orn+(−0.0139)Trp
29	0.669	0.691	(−0.5653)+(0.0014)Ala+(−0.0055)Ser+(0.0053)Ile+(0.0027)Leu+(0.0151)Met+(−0.0157)Trp
30	0.669	0.690	(−0.7118)+(0.0015)Ala+(−0.0050)Ser+(0.0083)Ile+(0.0026)Asn+(0.0020)Lys+(−0.0145)Trp
31	0.669	0.691	(−1.5508)+(0.0016)Ala+(0.0080)Ile+(0.0119)Phe+(0.0060)Cit+(−0.0038)Tyr+(−0.0146)Trp
32	0.669	0.691	(−0.6588)+(0.0015)Ala+(−0.0050)Ser+(0.0008)Thr+(0.0083)Ile+(0.0019)Lys+(−0.0145)Trp
33	0.669	0.692	(−0.6487)+(0.0017)Ala+(−0.0045)Ser+(0.0050)Leu+(0.0021)Lys+(−0.0017)His+(−0.0145)Trp
34	0.669	0.691	(−1.4771)+(0.0014)Ala+(0.0085)Ile+(0.0000)Gln+(0.0009)Lys+(0.0109)Phe+(−0.0175)Trp
35	0.669	0.691	(−0.5489)+(0.0014)Ala+(−0.0059)Ser+(0.0007)Thr+(0.0052)Leu+(0.0149)Met+(−0.0158)Trp
36	0.669	0.689	(−1.1554)+(−0.0008)Gly+(0.0018)Ala+(−0.0013)Val+(0.0069)Leu+(0.0087)Cit+(−0.0130)Trp
37	0.668	0.692	(−1.2870)+(0.0016)Ala+(0.0050)Leu+(0.0013)Lys+(−0.0057)His+(0.0117)Phe+(−0.0172)Trp
38	0.668	0.690	(−0.7989)+(0.0015)Ala+(−0.0048)Ser+(0.0011)Thr+(0.0085)Ile+(0.0079)Cit+(−0.0126)Trp
39	0.668	0.690	(−0.5762)+(0.0014)Ala+(−0.0052)Ser+(0.0014)Pro+(0.0013)Thr+(0.0049)Leu+(−0.0143)Trp
40	0.668	0.690	(−1.4704)+(0.0014)Ala+(0.0086)Ile+(0.0011)Lys+(−0.0084)Met+(0.0129)Phe+(−0.0173)Trp
41	0.668	0.690	(−1.5562)+(0.0016)Ala+(0.0053)Leu+(−0.0024)Orn+(0.0091)Phe+(0.0077)Cit+(−0.0161)Trp
42	0.668	0.690	(−1.4353)+(0.0015)Ala+(0.0047)Leu+(0.0009)Lys+(0.0111)Phe+(−0.0009)Arg+(−0.0177)Trp
43	0.668	0.690	(−1.3800)+(0.0017)Ala+(0.0046)Leu+(0.0140)Phe+(−0.0004)Arg+(−0.0036)Tyr+(−0.0164)Trp
44	0.668	0.691	(−0.6444)+(0.0014)Ala+(−0.0049)Ser+(0.0014)Pro+(0.0051)Leu+(0.0033)Asn+(−0.0143)Trp
45	0.668	0.689	(−1.5296)+(0.0014)Ala+(0.0087)Ile+(−0.0014)Orn+(0.0098)Phe+(0.0068)Cit+(−0.0158)Trp
46	0.668	0.689	(−1.2912)+(0.0017)Ala+(0.0057)Leu+(−0.0076)Asn+(0.0073)Met+(0.0098)Cit+(−0.0133)Trp
47	0.668	0.689	(−0.4900)+(0.0017)Ala+(−0.0040)Ser+(−0.0020)Val+(0.0074)Ile+(0.0045)Leu+(−0.0138)Trp
48	0.668	0.690	(−0.6587)+(0.0014)Ala+(−0.0057)Ser+(0.0085)Ile+(0.0004)Gln+(0.0129)Met+(−0.0148)Trp
49	0.668	0.691	(−1.4500)+(0.0014)Ala+(−0.0013)Thr+(0.0085)Ile+(0.0013)Lys+(0.0113)Phe+(−0.0173)Trp
50	0.667	0.690	(−1.2995)+(0.0013)Ala+(0.0007)Pro+(0.0085)Ile+(−0.0026)His+(0.0121)Phe+(−0.0169)Trp

[図37]

No.	ROC_AUC (Validation)	ROC_AUC (No Validation)	FORMULA
51	0.667	0.690	(−1.4761)+(0.0014)Ala+(0.0073)Ile+(0.0010)Leu+(0.0008)Lys+(0.0108)Phe+(−0.0177)Trp
52	0.667	0.686	(−0.7190)+(0.0016)Ala+(−0.0046)Ser+(0.0093)Ile+(0.0005)Gln+(−0.0135)Trp+(0.0004)Arg
53	0.667	0.689	(−1.3117)+(0.0014)Ala+(0.0088)Ile+(0.0016)Orn+(−0.0032)His+(0.0118)Phe+(−0.0167)Trp
54	0.667	0.690	(−0.4932)+(0.0014)Ala+(−0.0055)Ser+(0.0085)Ile+(0.0181)Met+(−0.0018)Tyr+(−0.0145)Trp
55	0.667	0.689	(−1.4138)+(0.0016)Ala+(0.0051)Leu+(−0.0046)Asn+(0.0002)Gln+(0.0115)Phe+(−0.0172)Trp
56	0.667	0.687	(−0.4417)+(0.0014)Ala+(−0.0055)Ser+(−0.0009)Val+(0.0104)Ile+(0.0151)Met+(−0.0146)Trp
57	0.667	0.688	(−0.7917)+(0.0017)Ala+(−0.0047)Ser+(0.0058)Leu+(0.0006)Gln+(−0.0006)His+(−0.0141)Trp
58	0.667	0.690	(−1.3133)+(0.0014)Ala+(0.0008)Pro+(0.0084)Ile+(−0.0044)Asn+(0.0125)Phe+(−0.0171)Trp
59	0.667	0.686	(−0.8214)+(0.0015)Ala+(−0.0043)Ser+(0.0007)Pro+(0.0082)Ile+(0.0078)Cit+(−0.0123)Trp
60	0.667	0.689	(−1.2854)+(0.0014)Ala+(0.0090)Ile+(−0.0021)His+(0.0126)Phe+(−0.0003)Arg+(−0.0172)Trp
61	0.667	0.688	(−1.2589)+(0.0016)Ala+(0.0007)Pro+(0.0059)Leu+(−0.0034)His+(0.0082)Cit+(−0.0129)Trp
62	0.667	0.690	(−1.3576)+(0.0015)Ala+(0.0090)Ile+(−0.0046)Asn+(0.0002)Gln+(0.0124)Phe+(−0.0171)Trp
63	0.667	0.686	(−0.8629)+(0.0016)Ala+(−0.0043)Ser+(0.0087)Ile+(0.0010)His+(0.0081)Cit+(−0.0125)Trp
64	0.667	0.689	(−1.3964)+(0.0014)Ala+(0.0008)Pro+(0.0085)Ile+(−0.0078)Met+(0.0132)Phe+(−0.0169)Trp
65	0.667	0.689	(−0.5086)+(0.0017)Ala+(−0.0043)Ser+(−0.0016)Val+(0.0078)Leu+(0.0011)Tyr+(−0.0144)Trp
66	0.667	0.689	(−1.2592)+(0.0016)Ala+(0.0053)Leu+(0.0014)Orn+(−0.0049)His+(0.0118)Phe+(−0.0169)Trp
67	0.666	0.689	(−1.4934)+(0.0014)Ala+(0.0009)Pro+(0.0043)Leu+(0.0007)Lys+(0.0102)Phe+(−0.0173)Trp
68	0.666	0.687	(−1.2251)+(0.0018)Ala+(0.0060)Leu+(−0.0045)Asn+(−0.0019)Arg+(0.0113)Cit+(−0.0125)Trp
69	0.666	0.689	(−1.5591)+(0.0014)Ala+(0.0002)Pro+(0.0083)Ile+(0.0093)Phe+(0.0059)Cit+(−0.0157)Trp
70	0.666	0.689	(−1.4871)+(0.0016)Ala+(0.0054)Leu+(−0.0035)Orn+(0.0018)Lys+(0.0098)Cit+(−0.0141)Trp
71	0.666	0.689	(−1.2495)+(0.0015)Ala+(−0.0008)Val+(0.0104)Ile+(−0.0041)Asn+(0.0127)Phe+(−0.0169)Trp
72	0.666	0.688	(−1.2506)+(0.0016)Ala+(0.0054)Leu+(−0.0023)Met+(−0.0040)His+(0.0127)Phe+(−0.0172)Trp
73	0.666	0.690	(−1.3891)+(0.0016)Ala+(0.0046)Leu+(−0.0042)Asn+(0.0009)Lys+(0.0117)Phe+(−0.0175)Trp
74	0.666	0.689	(−1.4446)+(0.0014)Ala+(0.0070)Ile+(0.0015)Leu+(0.0001)Gln+(0.0111)Phe+(−0.0176)Trp
75	0.666	0.688	(−1.1783)+(−0.0007)Gly+(0.0015)Ala+(−0.0010)Val+(0.0103)Ile+(0.0119)Phe+(−0.0171)Trp

[図38]

No.	ROC_AUC (Validation)	ROC_AUC (No Validation)	FORMULA
76	0.666	0.689	(-1.4302)+(0.0016)Ala+(-0.0008)Val+(0.0057)Leu+(0.0008)Lys+(0.0103)Phe+(-0.0173)Trp
77	0.666	0.688	(-0.5957)+(0.0015)Ala+(-0.0054)Ser+(0.0013)Thr+(0.0054)Leu+(0.0033)Asn+(-0.0148)Trp
78	0.665	0.688	(-1.3757)+(0.0014)Ala+(0.0007)Pro+(-0.0009)Thr+(0.0085)Ile+(0.0117)Phe+(-0.0170)Trp
79	0.665	0.688	(-1.2000)+(0.0015)Ala+(0.0013)Pro+(0.0049)Leu+(-0.0021)Asn+(0.0014)Lys+(-0.0147)Trp
80	0.665	0.688	(-1.2941)+(-0.0006)Gly+(0.0014)Ala+(0.0086)Ile+(0.0001)Gln+(0.0117)Phe+(-0.0174)Trp
81	0.665	0.688	(-1.3086)+(0.0014)Ala+(-0.0007)Val+(0.0103)Ile+(0.0120)Phe+(-0.0006)Arg+(-0.0171)Trp
82	0.665	0.686	(-1.2381)+(0.0018)Ala+(-0.0012)Val+(0.0073)Leu+(-0.0025)Arg+(0.0105)Cit+(-0.0127)Trp
83	0.665	0.688	(-1.1279)+(0.0016)Ala+(-0.0020)Val+(0.0082)Ile+(0.0036)Leu+(0.0016)Lys+(-0.0146)Trp
84	0.665	0.689	(-1.4407)+(0.0014)Ala+(0.0009)Pro+(0.0047)Leu+(0.0001)Orn+(0.0106)Phe+(-0.0173)Trp
85	0.665	0.688	(-1.5104)+(0.0015)Ala+(0.0047)Leu+(0.0001)Gln+(0.0006)Lys+(0.0103)Phe+(-0.0175)Trp
86	0.665	0.683	(-1.2917)+(0.0015)Ala+(0.0010)Pro+(0.0057)Leu+(0.0003)Gln+(-0.0146)Trp+(0.0057)Cit
87	0.665	0.688	(-0.5314)+(0.0018)Ala+(-0.0042)Ser+(-0.0015)Val+(0.0075)Leu+(0.0007)His+(-0.0140)Trp
88	0.665	0.687	(-1.3882)+(0.0017)Ala+(0.0059)Leu+(0.0002)Gln+(-0.0026)Arg+(0.0102)Cit+(-0.0131)Trp
89	0.665	0.688	(-1.3126)+(0.0015)Ala+(0.0091)Ile+(-0.0056)Met+(-0.0016)His+(0.0136)Phe+(-0.0170)Trp
90	0.665	0.687	(-1.4302)+(0.0016)Ala+(-0.0007)Val+(0.0058)Leu+(0.0001)Gln+(0.0104)Phe+(-0.0172)Trp
91	0.665	0.688	(-1.4679)+(0.0016)Ala+(0.0046)Leu+(0.0009)Lys+(-0.0063)Met+(0.0121)Phe+(-0.0174)Trp
92	0.665	0.687	(-1.3700)+(0.0014)Ala+(0.0091)Ile+(-0.0063)Met+(0.0134)Phe+(-0.0002)Arg+(-0.0172)Trp
93	0.665	0.688	(-1.1067)+(0.0018)Ala+(-0.0015)Val+(0.0072)Leu+(-0.0015)Asn+(0.0015)Lys+(-0.0146)Trp
94	0.665	0.688	(-1.3899)+(0.0014)Ala+(-0.0008)Thr+(0.0091)Ile+(0.0001)Gln+(0.0118)Phe+(-0.0172)Trp
95	0.665	0.688	(-1.2472)+(0.0016)Ala+(0.0054)Leu+(-0.0043)His+(0.0122)Phe+(0.0001)Arg+(-0.0172)Trp
96	0.664	0.686	(-0.8522)+(0.0015)Ala+(-0.0058)Ser+(0.0016)Pro+(0.0020)Lys+(0.0118)Phe+(-0.0153)Trp
97	0.664	0.688	(-0.7137)+(0.0005)Gly+(0.0017)Ala+(-0.0052)Ser+(0.0057)Leu+(0.0018)Arg+(-0.0142)Trp
98	0.664	0.689	(-1.3827)+(0.0014)Ala+(-0.0008)Thr+(0.0071)Ile+(0.0016)Leu+(0.0117)Phe+(-0.0175)Trp
99	0.664	0.685	(-1.2054)+(0.0017)Ala+(0.0055)Leu+(0.0013)Lys+(0.0001)Arg+(-0.0151)Trp+(-0.0015)Tyr
100	0.664	0.687	(-0.8091)+(0.0017)Ala+(-0.0048)Ser+(0.0057)Leu+(0.0005)Gln+(0.0001)Tyr+(-0.0143)Trp

[図39]

No.	ROC_AUC (Validation)	ROC_AUC (No Validation)	FORMULA
1	0.771	0.855	(0.3109)+(0.3123)β-AIBA+(-0.03192)Val+(0.05014)Tau+(0.08370)Ile+(-1.795)α-AAA+(-0.04287)Arg
2	0.767	0.847	(1.871)+(-0.2788)EtOHNH2+(-0.01502)Val+(0.04823)Tau+(0.08599)Met+(-1.595)α-AAA+(-0.03721)Arg
3	0.767	0.860	(1.608)+(-0.1662)EtOHNH2+(-0.02870)Val+(0.05223)Tau+(0.06594)Ile+(-1.476)α-AAA+(-0.03656)Arg
4	0.764	0.856	(3.092)+(-0.03029)Val+(0.05751)Tau+(0.07095)Ile+(-0.004781)Gln+(-1.362)α-AAA+(-0.03744)Arg
5	0.764	0.829	(3.304)+(-0.2510)EtOHNH2+(0.06477)Tau+(-0.5566)Asp+(-0.005909)Gln+(-1.543)α-AAA+(-0.02888)Arg
6	0.761	0.849	(4.005)+(-0.1837)EtOHNH2+(-0.02959)Val+(0.05788)Tau+(0.07027)Ile+(-0.005173)Gln+(-0.03564)Arg
7	0.761	0.851	(0.7104)+(-0.2943)EtOHNH2+(-0.01715)Val+(0.04981)Tau+(-1.599)α-AAA+(0.06091)Phe+(-0.03843)Arg
8	0.760	0.855	(1.236)+(-0.02807)Val+(0.05437)Tau+(0.06590)Ile+(-0.2765)Asp+(-1.747)α-AAA+(-0.03990)Arg
9	0.759	0.852	(0.8757)+(-0.02998)Val+(0.05164)Tau+(0.06952)Ile+(-1.601)α-AAA+(-0.03931)Arg
10	0.759	0.848	(3.153)+(0.3201)β-AIBA+(-0.03416)Val+(0.05729)Tau+(0.09349)Ile+(-0.006213)Gln+(-0.04384)Arg
11	0.756	0.851	(0.9201)+(-0.02976)Val+(-0.005409)Thr+(0.05202)Tau+(0.07331)Ile+(-1.653)α-AAA+(-0.03649)Arg
12	0.755	0.825	(2.220)+(0.06434)Tau+(-0.5488)Asp+(-0.006424)Gln+(-1.731)α-AAA+(-0.03135)Arg
13	0.755	0.853	(0.5896)+(-0.03056)Val+(0.04926)Tau+(0.06663)Ile+(-1.526)α-AAA+(-0.04233)Arg+(0.01878)Cys
14	0.754	0.857	(2.897)+(-0.01980)Ser+(-0.03027)Val+(0.04997)Tau+(0.06692)Ile+(-1.602)α-AAA+(-0.03310)Arg
15	0.751	0.832	(3.678)+(-0.1692)EtOHNH2+(-0.01058)Val+(0.05409)Tau+(-0.004486)Gln+(-1.406)α-AAA+(-0.02758)Arg
16	0.751	0.856	(0.6503)+(-0.03187)Val+(0.05140)Tau+(0.06856)Ile+(0.005621)Lys+(-1.637)α-AAA+(-0.04258)Arg
17	0.751	0.832	(2.546)+(0.3852)β-AIBA+(-0.03201)Val+(0.07233)Ile+(-1.581)α-AAA+(-0.04312)Arg+(0.02948)Cys
18	0.751	0.851	(1.165)+(-0.02952)Val+(0.05127)Tau+(0.07070)Ile+(-1.602)α-AAA+(-0.03877)Arg+(-0.006667)Tyr
19	0.751	0.846	(0.8496)+(-0.03258)Val+(0.05247)Tau+(0.07593)Ile+(-1.716)α-AAA+(0.1813)3-MeHis+(-0.04172)Arg
20	0.750	0.841	(3.281)+(-0.03067)Val+(0.05792)Tau+(0.07408)Ile+(-0.005591)Gln+(-0.03831)Arg
21	0.750	0.849	(0.7496)+(-0.03028)Val+(0.05160)Tau+(0.06803)Ile+(0.01823)Met+(-1.611)α-AAA+(-0.04116)Arg
22	0.749	0.848	(-0.4799)+(-0.03369)Val+(0.05715)Tau+(0.07514)Ile+(0.04750)Asn+(-1.861)α-AAA+(-0.04841)Arg
23	0.749	0.829	(0.5638)+(-0.2331)EtOHNH2+(-0.01330)Val+(0.05367)Tau+(0.05283)Asn+(-1.802)α-AAA+(-0.03799)Arg
24	0.749	0.849	(0.7011)+(-0.03120)Val+(0.05180)Tau+(0.06913)Ile+(-1.614)α-AAA+(-0.04048)Arg+(0.009832)Trp
25	0.749	0.830	(2.237)+(0.2032)β-AIBA+(0.06004)Tau+(-0.5132)Asp+(-0.006329)Gln+(-1.901)α-AAA+(-0.03308)Arg

[図40]

No.	ROC_AUC (Validation)	ROC_AUC (No Validation)	FORMULA
26	0.748	0.818	(1.806)+(−0.1942)EtOHNH2+(−0.01084)Val+(0.04865)Tau+(−1.545) α -AAA+(−0.02935)Arg
27	0.748	0.851	(0.8733)+(0.009411)Sar+(−0.02999)Val+(0.05166)Tau+(0.06940)Ile+(−1.599) α -AAA+(−0.03940)Arg
28	0.748	0.843	(6.124)+(0.4174) β -AIBA+(−0.02690)Ser+(−0.03168)Val+(0.07137)Ile+(−1.541) α -AAA+(−0.03202)Arg
29	0.747	0.825	(2.641)+(0.06361)Tau+(−0.5267)Asp+(−0.006358)Gln+(−1.735) α -AAA+(−0.03038)Arg+(−0.007274)Tyr
30	0.747	0.854	(−0.08941)+(−0.03141)Val+(0.05232)Tau+(0.06796)Ile+(−1.663) α -AAA+(0.02812)Phe+(−0.04451)Arg
31	0.747	0.822	(2.216)+(0.06339)Tau+(−0.7384)Asp+(−0.007300)Gln+(0.03544)Glu+(−1.967) α -AAA+(−0.03215)Arg
32	0.746	0.849	(0.9196)+(−0.02757)Val+(0.05133)Tau+(0.08012)Ile+(−0.01067)Leu+(−1.597) α -AAA+(−0.03903)Arg
33	0.746	0.834	(2.877)+(−0.02720) α -ABA+(0.06212)Tau+(−0.5623)Asp+(−0.006329)Gln+(−1.663) α -AAA+(−0.03125)Arg
34	0.746	0.842	(3.380)+(0.1376)Sar+(−0.03126)Val+(0.05818)Tau+(0.07427)Ile+(−0.005816)Gln+(−0.03953)Arg
35	0.746	0.847	(3.739)+(−0.02887)Val+(0.06013)Tau+(0.07170)Ile+(−0.2185)Asp+(−0.006028)Gln+(−0.03920)Arg
36	0.746	0.823	(2.211)+(0.02231)Sar+(0.06438)Tau+(−0.5465)Asp+(−0.006464)Gln+(−1.730) α -AAA+(−0.03153)Arg
37	0.745	0.846	(3.276)+(−0.03227)Val+(0.05877)Tau+(0.07100)Ile+(−0.006340)Gln+(0.007389)Lys+(−0.04281)Arg
38	0.745	0.847	(2.978)+(−0.03073)Val+(0.05652)Tau+(0.06972)Ile+(−0.005868)Gln+(−0.04174)Arg+(0.02136)Cys
39	0.745	0.848	(0.9645)+(−0.001177)Ala+(−0.02868)Val+(0.05292)Tau+(0.07059)Ile+(−1.608) α -AAA+(−0.04008)Arg
40	0.745	0.848	(0.4063)+(−0.03140)Val+(0.05127)Tau+(0.06971)Ile+(0.01181)His+(−1.555) α -AAA+(−0.04077)Arg
41	0.745	0.826	(1.004)+(−0.2794)EtOHNH2+(−0.02144) α -ABA+(0.05485)Tau+(−0.4358)Asp+(−1.581) α -AAA+(−0.03090)Arg
42	0.745	0.831	(0.2816)+(−0.2794)EtOHNH2+(0.06722)Tau+(0.05289)Asn+(−0.006433)Gln+(−1.519) α -AAA+(−0.03538)Arg
43	0.745	0.842	(3.383)+(−0.02002) α -ABA+(−0.02983)Val+(0.05725)Tau+(0.07516)Ile+(−0.005415)Gln+(−0.03862)Arg
44	0.745	0.823	(1.590)+(0.06513)Tau+(−0.6088)Asp+(−0.007140)Gln+(0.01639)His+(−1.709) α -AAA+(−0.03318)Arg
45	0.745	0.823	(2.133)+(0.0007220)Gly+(0.06432)Tau+(−0.5466)Asp+(−0.006510)Gln+(−1.745) α -AAA+(−0.03164)Arg
46	0.745	0.822	(2.215)+(0.06437)Tau+(−0.5574)Asp+(−0.006456)Gln+(−1.777) α -AAA+(0.05403)3-MeHis+(−0.03201)Arg
47	0.744	0.837	(2.031)+(−0.2432)EtOHNH2+(−0.02919)Val+(0.05043)Tau+(0.06804)Ile+(−0.03737)Arg
48	0.744	0.853	(1.022)+(−0.01353) α -ABA+(−0.02952)Val+(0.05110)Tau+(0.07075)Ile+(−1.557) α -AAA+(−0.03975)Arg
49	0.744	0.827	(2.392)+(−0.01255)Val+(0.06063)Tau+(0.05237)Asn+(−0.006579)Gln+(−1.618) α -AAA+(−0.03937)Arg
50	0.744	0.842	(2.942)+(−0.03293)Val+(0.06331)Tau+(0.07511)Ile+(0.04093)Asn+(−0.007065)Gln+(−0.04595)Arg

[図41]

No.	ROC_AUC (Validation)	ROC_AUC (No Validation)	FORMULA
51	0.744	0.849	(3.516)+(−0.03335)Val+(0.05756)Tau+(0.08101)Ile+(−0.005942)Gln+(0.04934)1−MeHis+(−0.03902)Arg
52	0.744	0.840	(2.434)+(−0.03339)Val+(0.05938)Tau+(0.07554)Ile+(−0.006409)Gln+(0.02521)His+(−0.04088)Arg
53	0.744	0.849	(1.449)+(−0.002210)Gly+(−0.03061)Val+(0.05162)Tau+(0.06922)Ile+(−1.613) α −AAA+(−0.03826)Arg
54	0.744	0.818	(1.342)+(−0.2285)EtOHNH2+(0.05943)Tau+(−0.004725)Gln+(−1.326) α −AAA+(−0.02788)Arg
55	0.744	0.846	(0.3327)+(−0.03026)Val+(0.05362)Tau+(0.07301)Ile+(−1.681) α −AAA+(−0.04250)Arg+(0.01502)Cit
56	0.744	0.850	(0.8689)+(−0.006280)Pro+(−0.02873)Val+(0.05370)Tau+(0.07610)Ile+(−1.664) α −AAA+(−0.03916)Arg
57	0.742	0.831	(4.091)+(−0.008712)Val+(0.06025)Tau+(−0.4742)Asp+(−0.005895)Gln+(−1.850) α −AAA+(−0.03131)Arg
58	0.742	0.844	(3.406)+(−0.001792)Ala+(−0.02906)Val+(0.05954)Tau+(0.07715)Ile+(−0.005551)Gln+(−0.03949)Arg
59	0.742	0.845	(1.703)+(−0.2400)EtOHNH2+(−0.03027)Val+(0.04759)Tau+(0.06377)Ile+(−0.04062)Arg+(0.02413)Cys
60	0.742	0.818	(3.026)+(−0.01076)Val+(0.05391)Tau+(−0.004791)Gln+(−1.529) α −AAA+(−0.02990)Arg
61	0.742	0.840	(3.326)+(−0.03266)Val+(0.05831)Tau+(0.07954)Ile+(−0.005881)Gln+(0.1204)3−MeHis+(−0.04029)Arg
62	0.741	0.840	(3.525)+(−0.03022)Val+(0.05736)Tau+(0.07605)Ile+(−0.005502)Gln+(−0.03766)Arg+(−0.007429)Tyr
63	0.741	0.817	(3.521)+(−0.3066)EtOHNH2+(0.06189)Tau+(−0.4126)Asp+(−0.006274)Gln+(−0.02924)Arg
64	0.741	0.839	(1.402)+(−0.1759)EtOHNH2+(−0.01336)Val+(0.04482)Tau+(−1.466) α −AAA+(−0.03457)Arg+(0.02885)Cys
65	0.741	0.833	(1.768)+(0.06318)Tau+(−0.6004)Asp+(−0.007014)Gln+(−1.710) α −AAA+(−0.03688)Arg+(0.02705)Cys
66	0.740	0.842	(3.158)+(−0.006085)Pro+(−0.02934)Val+(0.05983)Tau+(0.08032)Ile+(−0.005409)Gln+(−0.03826)Arg
67	0.740	0.825	(3.780)+(−0.2602)EtOHNH2+(−0.01174)Val+(0.05969)Tau+(0.04946)Asn+(−0.007092)Gln+(−0.03533)Arg
68	0.740	0.834	(3.186)+(−0.03423)Val+(0.05940)Tau+(0.07582)Ile+(−0.006060)Gln+(−0.04039)Arg+(0.01979)Trp
69	0.740	0.835	(0.4207)+(0.06612)Tau+(0.05984)Asn+(−0.006847)Gln+(−1.665) α −AAA+(−0.03673)Arg+(−0.02423)Tyr
70	0.740	0.842	(2.748)+(−0.3457)EtOHNH2+(−0.01585)Val+(0.05863)Tau+(−0.005898)Gln+(0.06655)Phe+(−0.03568)Arg
71	0.740	0.821	(2.009)+(−0.2407)EtOHNH2+(0.2414)Sar+(−0.01169)Val+(0.04943)Tau+(−1.540) α −AAA+(−0.03154)Arg
72	0.740	0.838	(2.106)+(−0.2509)EtOHNH2+(0.08325)Sar+(−0.02947)Val+(0.05039)Tau+(0.06766)Ile+(−0.03828)Arg
73	0.740	0.832	(5.289)+(0.3083) β −AIBA+(−0.02688)Ser+(−0.01495)Val+(−1.424) α −AAA+(−0.02845)Arg+(0.03165)Cys
74	0.739	0.840	(1.516)+(−0.2372)EtOHNH2+(0.2160) β −AIBA+(−0.02951)Val+(0.04923)Tau+(0.07526)Ile+(−0.03960)Arg
75	0.739	0.827	(1.524)+(−0.1952)EtOHNH2+(−0.01287)Val+(0.04840)Tau+(0.006070)Lys+(−1.567) α −AAA+(−0.03316)Arg

[図42]

No.	ROC_AUC (Validation)	ROC_AUC (No Validation)	FORMULA
76	0.738	0.840	(4.456)+(−0.01351)Ser+(−0.03134)Val+(0.05514)Tau+(0.07233)Ile+(−0.004777)Gln+(−0.03477)Arg
77	0.738	0.841	(3.293)+(−0.03071)Val+(0.0006814)Thr+(0.05799)Tau+(0.07370)Ile+(−0.005640)Gln+(−0.03864)Arg
78	0.738	0.820	(3.209)+(0.2152)Sar+(−0.01153)Val+(0.05461)Tau+(−0.005199)Gln+(−1.555) α−AAA+(−0.03215)Arg
79	0.738	0.833	(3.564)+(−0.2049)EtOHNH2+(−0.01208)Val+(0.05107)Tau+(−0.005531)Gln+(−0.03314)Arg+(0.03247)Cys
80	0.738	0.838	(3.667)+(−0.1992)EtOHNH2+(−0.01742)Ser+(−0.02969)Val+(0.04811)Tau+(0.06637)Ile+(−0.03273)Arg
81	0.738	0.830	(2.767)+(−0.008822)Ser+(0.06224)Tau+(−0.5532)Asp+(−0.005830)Gln+(−1.737) α−AAA+(−0.02868)Arg
82	0.738	0.838	(2.096)+(−0.2128)EtOHNH2+(−0.02068) α−ABA+(−0.02848)Val+(0.04968)Tau+(0.06917)Ile+(−0.03777)Arg
83	0.738	0.828	(2.731)+(−0.01183)Val+(0.05198)Tau+(−0.005283)Gln+(−1.440) α−AAA+(−0.03519)Arg+(0.02577)Cys
84	0.738	0.845	(2.198)+(−0.03125)Val+(0.06068)Tau+(0.07064)Ile+(−0.005997)Gln+(0.02923)Phe+(−0.04268)Arg
85	0.738	0.819	(1.167)+(−0.2355)EtOHNH2+(0.001916)Gly+(0.05952)Tau+(−0.004984)Gln+(−1.327) α−AAA+(−0.02859)Arg
86	0.737	0.831	(3.008)+(−0.01450)Val+(0.05518)Tau+(−0.005870)Gln+(0.01092)Lys+(−1.512) α−AAA+(−0.03649)Arg
87	0.737	0.824	(1.233)+(−0.2152)EtOHNH2+(−0.01393)Val+(0.04752)Tau+(0.02135)His+(−1.496) α−AAA+(−0.03142)Arg
88	0.737	0.824	(1.686)+(−0.2034)EtOHNH2+(−0.01257)Val+(0.04824)Tau+(−1.543) α−AAA+(−0.03038)Arg+(0.01194)Trp
89	0.737	0.832	(2.259)+(−0.2257)EtOHNH2+(−0.008929)Val+(0.05306)Tau+(−0.3449)Asp+(−1.699) α−AAA+(−0.03084)Arg
90	0.737	0.826	(4.105)+(−0.2652)EtOHNH2+(−0.02152)Val+(0.05515)Tau+(0.02378)Leu+(−0.004992)Gln+(−0.03041)Arg
91	0.737	0.837	(3.285)+(−0.02817)Val+(0.05792)Tau+(0.08340)Ile+(−0.01002)Leu+(−0.005574)Gln+(−0.03801)Arg
92	0.737	0.835	(1.814)+(−0.2214)EtOHNH2+(−0.02127)Val+(0.05045)Tau+(0.02157)Leu+(−1.470) α−AAA+(−0.03222)Arg
93	0.737	0.822	(2.057)+(0.06913)Tau+(−0.6199)Asp+(−0.007180)Gln+(−1.917) α−AAA+(−0.03815)Arg+(0.03136)Cit
94	0.737	0.827	(1.952)+(0.06484)Tau+(−0.5477)Asp+(−0.006707)Gln+(0.002979)Lys+(−1.727) α−AAA+(−0.03312)Arg
95	0.737	0.826	(1.498)+(−0.2670)EtOHNH2+(0.2083)Sar+(0.06054)Tau+(−0.005078)Gln+(−1.383) α−AAA+(−0.02959)Arg
96	0.737	0.822	(1.889)+(0.06517)Tau+(−0.5791)Asp+(−0.006567)Gln+(−1.751) α−AAA+(−0.03200)Arg+(0.008329)Trp
97	0.737	0.822	(2.937)+(−0.2746)EtOHNH2+(−0.005301)Ala+(0.06761)Tau+(0.06378)Asn+(−0.007616)Gln+(−0.04178)Arg
98	0.736	0.835	(2.171)+(−0.2588)EtOHNH2+(−0.03170)Val+(0.05054)Tau+(0.07379)Ile+(0.1744)3−MeHis+(−0.03963)Arg
99	0.736	0.819	(1.298)+(−0.1947)EtOHNH2+(0.2269) β−AIBA+(0.05456)Tau+(−0.004684)Gln+(−1.494) α−AAA+(−0.02997)Arg
100	0.736	0.820	(0.5831)+(−0.3166)EtOHNH2+(0.05688)Sar+(0.05687)Tau+(−0.4235)Asp+(−1.629) α−AAA+(−0.03126)Arg

[図43]

No.	ROC_AUC (Validation)	ROC_AUC (No Validation)	FORMULA
1	0.694	0.778	(7.612)+(−0.03824)Ser+(−0.01742)Val+(0.1344)Met+(−0.02641)Arg+(−0.02823)Tyr
2	0.688	0.775	(5.856)+(−0.03143)Ser+(−0.01816)Val+(0.02525)His+(−0.02085)Arg
3	0.682	0.767	(6.530)+(−0.02915)Ser+(−0.01476)Val+(−0.01785)Arg
4	0.680	0.781	(7.030)+(−0.03844)Ser+(−0.01917)Val+(0.1211)Met+(0.01856)His+(−0.02745)Arg+(−0.02847)Tyr
5	0.679	0.776	(6.546)+(−0.02838)Ser+(−0.01827)Val+(−0.001988)Gln+(0.02758)His+(−0.02097)Arg
6	0.679	0.778	(7.603)+(−0.03818)Ser+(−0.0002734)Pro+(−0.01732)Val+(0.1350)Met+(−0.02641)Arg+(−0.02821)Tyr
7	0.678	0.769	(6.308)+(−0.02970)Ser+(−0.01645)Val+(0.005365)Lys+(−0.02138)Arg
8	0.676	0.777	(2.085)+(0.07984)Ile+(−0.05762)Leu+(0.06507)Phe+(−0.04016)Arg+(−0.03682)Tyr
9	0.676	0.777	(7.514)+(0.0008078)Ala+(−0.03782)Ser+(−0.01827)Val+(0.1304)Met+(−0.02590)Arg+(−0.02849)Tyr
10	0.676	0.776	(3.425)+(−0.02190)Val+(0.09599)Ile+(−0.03429)Leu+(0.05894)Phe+(−0.04198)Arg+(−0.03312)Tyr
11	0.676	0.767	(7.142)+(−0.02649)Ser+(−0.01468)Val+(−0.001583)Gln+(−0.01774)Arg
12	0.676	0.775	(5.801)+(−0.03146)Ser+(−0.01874)Val+(0.002770)Lys+(0.02289)His+(−0.02233)Arg
13	0.675	0.767	(6.262)+(−0.02888)Ser+(−0.01687)Val+(−0.01910)Arg+(0.01438)Trp
14	0.675	0.770	(6.692)+(−0.03557)Ser+(−0.01759)Val+(0.06343)Met+(−0.02243)Arg
15	0.674	0.780	(5.957)+(−0.03060)Ser+(−0.01758)Val+(0.02878)His+(−0.02075)Arg+(−0.008169)Tyr
16	0.674	0.774	(5.888)+(−0.03168)Ser+(0.0004165)Pro+(−0.01833)Val+(0.02499)His+(−0.02088)Arg
17	0.674	0.763	(3.465)+(−0.02982)Val+(0.06194)Ile+(0.05134)Phe+(−0.04035)Arg+(−0.03086)Tyr
18	0.673	0.769	(5.775)+(−0.03101)Ser+(−0.01893)Val+(0.02232)His+(−0.02125)Arg+(0.008207)Trp
19	0.672	0.777	(7.066)+(−0.02599)Ser+(−0.01696)Val+(−0.002231)Gln+(0.007369)Lys+(−0.02254)Arg
20	0.671	0.778	(7.658)+(−0.0003166)Gly+(−0.03784)Ser+(−0.01753)Val+(0.1354)Met+(−0.02645)Arg+(−0.02842)Tyr
21	0.671	0.767	(3.436)+(−0.03038)Val+(0.06122)Ile+(0.04911)Phe+(−0.04040)Arg+(−0.03177)Tyr+(0.007331)Trp
22	0.670	0.782	(7.501)+(−0.03820)Ser+(−0.01802)Val+(0.003113)Lys+(0.1297)Met+(−0.02810)Arg+(−0.02900)Tyr
23	0.670	0.777	(7.394)+(−0.03716)Ser+(−0.01833)Val+(0.1265)Met+(−0.02663)Arg+(−0.02976)Tyr+(0.01104)Trp
24	0.670	0.780	(6.565)+(−0.02776)Ser+(−0.01932)Val+(−0.002355)Gln+(0.004746)Lys+(0.02407)His+(−0.02353)Arg
25	0.670	0.792	(4.498)+(−0.02504)Ser+(0.07176)Ile+(−0.05754)Leu+(0.06307)Phe+(−0.03092)Arg+(−0.03354)Tyr

[図44]

No.	ROC_AUC (Validation)	ROC_AUC (No Validation)	FORMULA
26	0.669	0.791	(5.892)+(−0.02827)Ser+(−0.03127)Val+(0.05198)Ile+(0.02096)His+(−0.02741)Arg
27	0.669	0.770	(5.599)+(0.001959)Gly+(−0.03416)Ser+(−0.01756)Val+(0.02509)His+(−0.02093)Arg
28	0.669	0.801	(5.829)+(−0.02897)Ser+(−0.02597)Val+(0.07444)Ile+(−0.02327)Leu+(0.02480)His+(−0.02745)Arg
29	0.668	0.768	(6.250)+(0.002112)Gly+(−0.03220)Ser+(−0.01413)Val+(−0.01789)Arg
30	0.668	0.774	(5.828)+(0.0007924)Ala+(−0.03147)Ser+(−0.01903)Val+(0.02371)His+(−0.02044)Arg
31	0.668	0.779	(7.523)+(−0.03917)Ser+(−0.01759)Val+(0.01047)Asn+(0.1274)Met+(−0.02711)Arg+(−0.02871)Tyr
32	0.667	0.783	(8.205)+(−0.03533)Ser+(−0.01756)Val+(−0.001734)Gln+(0.1371)Met+(−0.02626)Arg+(−0.02740)Tyr
33	0.667	0.766	(4.067)+(−0.002353)Gly+(−0.03045)Val+(0.06060)Ile+(0.05208)Phe+(−0.03916)Arg+(−0.03066)Tyr
34	0.667	0.763	(6.619)+(−0.03005)Ser+(0.001608)Pro+(−0.01557)Val+(−0.01813)Arg
35	0.667	0.764	(3.454)+(−0.001469)Pro+(−0.02940)Val+(0.06299)Ile+(0.05096)Phe+(−0.04018)Arg+(−0.03012)Tyr
36	0.666	0.787	(6.589)+(−0.02681)Ser+(−0.02941)Val+(0.05438)Ile+(−0.02531)Arg
37	0.666	0.774	(6.180)+(−0.03580)Ser+(−0.01903)Val+(0.04859)Met+(0.01699)His+(−0.02338)Arg
38	0.666	0.777	(7.435)+(−0.03560)Ser+(−0.01628)Val+(−0.01040)Orn+(0.1290)Met+(−0.02437)Arg+(−0.02571)Tyr
39	0.666	0.776	(2.070)+(0.08020)Ile+(−0.05858)Leu+(0.06354)Phe+(−0.04026)Arg+(−0.03790)Tyr+(0.005124)Trp
40	0.665	0.772	(6.974)+(−0.02573)Ser+(−0.01727)Val+(−0.001895)Gln+(−0.01908)Arg+(0.01700)Trp
41	0.665	0.791	(6.482)+(−0.02800)Ser+(−0.02508)Val+(0.07521)Ile+(−0.02323)Leu+(0.005216)Lys+(−0.02799)Arg
42	0.665	0.776	(8.642)+(−0.02894)Ser+(0.0009868)Pro+(−0.01869)Val+(−0.002027)Gln+(0.02700)His+(−0.02104)Arg
43	0.665	0.780	(5.923)+(−0.03076)Ser+(−0.01822)Val+(0.003435)Lys+(0.02605)His+(−0.02252)Arg+(−0.009034)Tyr
44	0.665	0.766	(3.391)+(0.001678)Ala+(−0.03174)Val+(0.06143)Ile+(0.05070)Phe+(−0.03935)Arg+(−0.03314)Tyr
45	0.664	0.767	(6.618)+(−0.02875)Ser+(−0.01418)Val+(−0.01764)Arg+(−0.003802)Tyr
46	0.664	0.775	(4.456)+(−0.02667)Ser+(0.06222)Ile+(−0.04975)Leu+(0.02897)His+(−0.02397)Arg+(−0.01878)Tyr
47	0.663	0.775	(5.886)+(−0.03085)Ser+(−0.02072)Val+(0.005378)Leu+(0.02378)His+(−0.02155)Arg
48	0.663	0.792	(6.448)+(−0.02705)Ser+(−0.02993)Val+(0.05280)Ile+(0.003026)Lys+(−0.02711)Arg
49	0.663	0.773	(6.628)+(−0.03508)Ser+(−0.001510)Pro+(−0.01711)Val+(0.06813)Met+(−0.02254)Arg
50	0.663	0.777	(2.161)+(0.07974)Ile+(−0.05736)Leu+(−0.004970)Asn+(0.06582)Phe+(−0.03945)Arg+(−0.03643)Tyr

[図45]

No.	ROC_AUC (Validation)	ROC_AUC (No Validation)	FORMULA
51	0.663	0.773	(2.678)+(−0.002584)Gly+(0.07995)Ile+(−0.05982)Leu+(0.06691)Phe+(−0.03859)Arg+(−0.03680)Tyr
52	0.662	0.767	(6.382)+(0.001815)Ala+(−0.02953)Ser+(−0.01726)Val+(−0.01744)Arg
53	0.662	0.775	(5.622)+(−0.03095)Ser+(−0.01733)Val+(0.03247)Phe+(−0.02247)Arg
54	0.662	0.763	(6.608)+(−0.03228)Ser+(−0.01612)Val+(−0.01583)Orn+(0.06702)Met+(−0.01998)Arg
55	0.662	0.772	(7.197)+(−0.02620)Ser+(−0.01421)Val+(−0.001547)Gln+(−0.01756)Arg+(−0.003115)Tyr
56	0.662	0.769	(6.116)+(−0.02927)Ser+(−0.01784)Val+(0.004224)Lys+(−0.02163)Arg+(0.01199)Trp
57	0.662	0.777	(6.505)+(−0.02771)Ser+(−0.01932)Val+(−0.002105)Gln+(0.02397)His+(−0.02138)Arg+(0.01028)Trp
58	0.662	0.771	(5.049)+(−0.03064)Val+(0.06295)Ile+(−0.003268)Gln+(0.05262)Phe+(−0.03783)Arg+(−0.02855)Tyr
59	0.662	0.761	(3.441)+(−0.02994)Val+(0.06209)Ile+(0.002370)Asn+(0.05098)Phe+(−0.04070)Arg+(−0.03111)Tyr
60	0.662	0.773	(6.095)+(−0.03264)Ser+(−0.01867)Val+(0.003218)Thr+(0.02207)His+(−0.02205)Arg
61	0.662	0.796	(6.705)+(−0.02744)Ser+(−0.02519)Val+(0.07308)Ile+(−0.01875)Leu+(−0.02481)Arg
62	0.662	0.767	(6.376)+(−0.03030)Ser+(0.001162)Pro+(−0.01700)Val+(0.005210)Lys+(−0.02146)Arg
63	0.662	0.771	(5.582)+(−0.02802)Ser+(−0.01624)Val+(0.05395)Phe+(−0.02497)Arg+(−0.02287)Tyr
64	0.662	0.781	(6.615)+(−0.02755)Ser+(−0.01777)Val+(−0.001947)Gln+(0.03096)His+(−0.02088)Arg+(−0.007662)Tyr
65	0.661	0.766	(6.364)+(−0.03276)Ser+(−0.01586)Val+(0.02194)Asn+(−0.02059)Arg
66	0.661	0.761	(6.344)+(−0.02966)Ser+(0.001366)Pro+(−0.01752)Val+(−0.01933)Arg+(0.01413)Trp
67	0.661	0.792	(7.484)+(−0.02311)Ser+(−0.03055)Val+(0.05786)Ile+(−0.002168)Gln+(−0.02531)Arg
68	0.661	0.773	(6.542)+(0.001142)Gly+(−0.03707)Ser+(−0.01723)Val+(0.06225)Met+(−0.02239)Arg
69	0.661	0.790	(5.890)+(−0.02467)Ser+(−0.02995)Val+(0.05480)Ile+(0.04859)Phe+(−0.03185)Arg+(−0.02699)Tyr
70	0.661	0.791	(6.925)+(−0.02598)Ser+(−0.02909)Val+(0.05906)Ile+(−0.02544)Arg+(−0.01094)Tyr
71	0.661	0.790	(6.391)+(−0.02631)Ser+(−0.03002)Val+(0.05242)Ile+(−0.02589)Arg+(0.008106)Trp
72	0.661	0.775	(6.288)+(0.001838)Gly+(−0.03099)Ser+(−0.01769)Val+(−0.001955)Gln+(0.02746)His+(−0.02108)Arg
73	0.660	0.792	(6.491)+(−0.02689)Ser+(−0.02565)Val+(0.07272)Ile+(−0.02064)Leu+(−0.02565)Arg+(0.01029)Trp
74	0.660	0.791	(5.785)+(−0.02742)Ser+(−0.001345)Pro+(−0.03087)Val+(0.05304)Ile+(0.02159)His+(−0.02755)Arg
75	0.660	0.791	(5.884)+(−0.02829)Ser+(−0.03133)Val+(0.05172)Ile+(0.0005840)Lys+(0.02046)His+(−0.02769)Arg

[図46]

No.	ROC_AUC (Validation)	ROC_AUC (No Validation)	FORMULA
76	0.660	0.780	(1.982)+(0.08288)Ile+(−0.06088)Leu+(0.003594)Lys+(0.06350)Phe+(−0.04236)Arg+(−0.03768)Tyr
77	0.660	0.775	(7.700)+(−0.03794)Ser+(−0.01751)Val+(0.1307)Met+(−0.02505)Arg+(−0.005616)Cit+(−0.02727)Tyr
78	0.660	0.787	(6.166)+(−0.02707)Ser+(−0.03126)Val+(0.05680)Ile+(0.02502)His+(−0.02779)Arg+(−0.01377)Tyr
79	0.660	0.763	(3.465)+(−0.02982)Val+(0.06193)Ile+(3.551e−06)Lys+(0.05134)Phe+(−0.04035)Arg+(−0.03086)Tyr
80	0.660	0.762	(3.473)+(−0.02976)Val+(0.06165)Ile+(0.005094)Met+(0.05048)Phe+(−0.04061)Arg+(−0.03153)Tyr
81	0.659	0.788	(6.555)+(−0.02647)Ser+(−0.0005786)Pro+(−0.02922)Val+(0.05487)Ile+(−0.02533)Arg
82	0.659	0.770	(6.665)+(0.0002300)Ala+(−0.03547)Ser+(−0.01783)Val+(0.06207)Met+(−0.02228)Arg
83	0.659	0.776	(6.083)+(−0.03520)Ser+(−0.001821)Pro+(−0.01848)Val+(0.05415)Met+(0.01739)His+(−0.02358)Arg
84	0.659	0.763	(5.426)+(−0.02676)Ser+(−0.01567)Val+(−0.01913)Orn+(0.03590)Phe+(−0.01966)Arg
85	0.659	0.762	(2.911)+(−0.004956)Pro+(−0.02804)Val+(0.05879)Ile+(0.02726)Phe+(−0.03692)Arg
86	0.659	0.777	(7.679)+(−0.03864)Ser+(−0.01772)Val+(0.001660)Thr+(0.1304)Met+(−0.02697)Arg+(−0.02813)Tyr
87	0.659	0.776	(6.080)+(−0.03133)Ser+(0.001557)Pro+(−0.01823)Val+(0.02838)His+(−0.02088)Arg+(−0.009063)Tyr
88	0.659	0.774	(5.827)+(−0.03166)Ser+(0.0003501)Pro+(−0.01888)Val+(0.002754)Lys+(0.02269)His+(−0.02235)Arg
89	0.659	0.769	(5.605)+(0.001951)Gly+(−0.03418)Ser+(6.911e−05)Pro+(−0.01759)Val+(0.02505)His+(−0.02094)Arg
90	0.659	0.771	(5.882)+(−0.02981)Ser+(−0.01854)Val+(0.02548)His+(−0.02130)Arg+(−0.01172)Tyr+(0.01342)Trp
91	0.659	0.773	(5.732)+(−0.03106)Ser+(−0.01933)Val+(0.002311)Lys+(0.02065)His+(−0.02244)Arg+(0.007394)Trp
92	0.659	0.762	(4.278)+(−0.02523)Val+(0.08690)Ile+(−0.02258)Leu+(−0.03414)Arg+(−0.01979)Tyr+(0.02064)Trp
93	0.658	0.773	(6.549)+(−0.03513)Ser+(−0.01817)Val+(0.002629)Lys+(0.05853)Met+(−0.02389)Arg
94	0.658	0.774	(4.010)+(−0.02775)Ser+(0.05291)Ile+(−0.04802)Leu+(0.02334)His+(−0.02375)Arg
95	0.658	0.768	(6.916)+(−0.03289)Ser+(−0.01699)Val+(0.007594)Thr+(−0.02157)Arg
96	0.658	0.767	(6.533)+(−0.03269)Ser+(−0.01497)Val+(0.02639)Asn+(−0.02063)Arg+(−0.007966)Tyr
97	0.658	0.775	(6.514)+(0.002414)Ala+(−0.02881)Ser+(−0.01700)Val+(−0.01689)Arg+(−0.007494)Tyr
98	0.658	0.794	(5.748)+(−0.02761)Ser+(−0.02985)Val+(0.04860)Ile+(0.02630)Phe+(−0.02843)Arg
99	0.658	0.770	(5.801)+(−0.03121)Ser+(0.0003409)Pro+(−0.01906)Val+(0.02211)His+(−0.02127)Arg+(0.008176)Trp
100	0.658	0.765	(3.186)+(−0.03089)Val+(0.06186)Ile+(0.01037)His+(0.04833)Phe+(−0.04098)Arg+(−0.03127)Tyr

[図47]

No.	ROC_AUC (Validation)	ROC_AUC (No Validation)	FORMULA
1	0.791	0.851	(−0.5322)+(−0.0050)Val+(0.0108)Tau+(0.0097)Ile+(−0.1886) α−AAA+(0.0035)Phe+(−0.0053)Arg
2	0.789	0.841	(−0.3962)+(−0.0047)Val+(0.0109)Tau+(0.0106)Ile+(−0.0006)Leu+(−0.1838) α−AAA+(−0.0051)Arg
3	0.788	0.844	(−0.4349)+(−0.0048)Val+(0.0105)Tau+(0.0098)Ile+(−0.1842) α−AAA+(−0.0053)Arg+(0.0018)Cys
4	0.787	0.838	(−0.3986)+(−0.0049)Val+(0.0110)Tau+(0.0102)Ile+(−0.0001)Lys+(−0.1828) α−AAA+(−0.0051)Arg
5	0.784	0.842	(−0.5742)+(−0.0049)Val+(0.0114)Tau+(0.0098)Ile+(0.0048)Asn+(−0.2156) α−AAA+(−0.0056)Arg
6	0.782	0.840	(−0.4016)+(−0.0049)Val+(0.0109)Tau+(0.0102)Ile+(−0.0002)Met+(−0.1836) α−AAA+(−0.0051)Arg
7	0.782	0.846	(−0.0641)+(−0.0051)Val+(0.0113)Tau+(0.0105)Ile+(−0.0010)Gln+(0.0040)Phe+(−0.0053)Arg
8	0.782	0.834	(0.0667)+(−0.0047)Val+(0.0114)Tau+(0.0115)Ile+(−0.0006)Leu+(−0.0010)Gln+(−0.0050)Arg
9	0.780	0.838	(−0.0359)+(−0.0049)Val+(0.0119)Tau+(0.0108)Ile+(0.0041)Asn+(−0.0011)Gln+(−0.0055)Arg
10	0.779	0.813	(−0.0884)+(−0.0224)EtOHNH2+(0.0137)Tau+(−0.1027)Asp+(−0.0010)Gln+(−0.1951) α−AAA+(−0.0044)Arg
11	0.779	0.835	(0.0292)+(−0.0049)Val+(0.0110)Tau+(0.0106)Ile+(−0.0010)Gln+(−0.0052)Arg+(0.0017)Cys
12	0.776	0.838	(−0.2477)+(−0.0288)EtOHNH2+(−0.0048)Val+(0.0100)Tau+(0.0103)Ile+(0.0082)1−MeHis+(−0.0051)Arg
13	0.776	0.828	(−0.2515)+(−0.0246)EtOHNH2+(−0.0045)Val+(0.0102)Tau+(0.0094)Ile+(−0.0052)Arg
14	0.770	0.828	(−0.2510)+(−0.0240)EtOHNH2+(−0.0045)Val+(0.0102)Tau+(0.0094)Ile+(−0.0052)Arg+(−0.0001)Tyr
15	0.769	0.816	(−0.2787)+(0.0131)Tau+(−0.1118)Asp+(−0.0011)Gln+(−0.1977) α−AAA+(−0.0049)Arg+(0.0034)Cys
16	0.768	0.822	(−0.3948)+(0.0139)Tau+(−0.1148)Asp+(−0.0011)Gln+(−0.2010) α−AAA+(0.0044)Phe+(−0.0048)Arg
17	0.767	0.819	(0.4222)+(−0.0300)EtOHNH2+(0.0685) β−AIBA+(−0.0050)Val+(0.0105)Ile+(−0.1713) α−AAA+(−0.0055)Arg
18	0.767	0.799	(−0.4377)+(−0.0230)EtOHNH2+(0.0122)Tau+(−0.0007)Gln+(−0.1342) α−AAA+(−0.0043)Arg
19	0.767	0.828	(0.3347)+(−0.0035)Ser+(−0.0033)Leu+(−0.1278) α−AAA+(−0.0038)Arg+(−0.0030)Tyr+(0.0077)Cys
20	0.765	0.809	(−0.0762)+(−0.0019)Ser+(0.0133)Tau+(−0.1035)Asp+(−0.0009)Gln+(−0.1965) α−AAA+(−0.0040)Arg
21	0.765	0.825	(−0.0138)+(−0.0031)Ser+(−0.0046)Val+(0.0097)Tau+(0.0097)Ile+(−0.0044)Arg+(−0.0011)Tyr
22	0.764	0.808	(−0.2270)+(0.0138)Tau+(−0.1045)Asp+(−0.0011)Gln+(0.0002)Lys+(−0.1964) α−AAA+(−0.0045)Arg
23	0.764	0.816	(0.5756)+(−0.0268)EtOHNH2+(−0.0035)Ser+(−0.0027)Val+(−0.0042)Arg+(0.0066)Cys
24	0.763	0.826	(−0.2681)+(−0.0245)EtOHNH2+(−0.0045)Val+(0.0103)Tau+(0.0095)Ile+(−0.0053)Arg+(0.0006)Cit
25	0.762	0.827	(−0.2541)+(−0.0275)EtOHNH2+(−0.0045)Val+(0.0101)Tau+(0.0091)Ile+(0.0028)Met+(−0.0053)Arg

[図48]

No.	ROC_AUC (Validation)	ROC_AUC (No Validation)	FORMULA
26	0.762	0.825	(−0.1605)+(0.0647) β −AIBA+(−0.0061)Orn+(−0.1178) α −AAA+(−0.0045)Arg+(−0.0046)Tyr+(0.0098)Cys
27	0.761	0.811	(−0.4311)+(−0.0046)Val+(0.0102)Tau+(0.0100)Ile+(−0.0053)Arg
28	0.761	0.822	(0.5586)+(−0.0231)EtOHNH2+(−0.0034)Ser+(−0.0026)Val+(−0.0043)Arg+(−0.0009)Tyr+(0.0071)Cys
29	0.760	0.822	(−0.2552)+(−0.0241)EtOHNH2+(−0.0047)Val+(0.0101)Tau+(0.0095)Ile+(0.0010)Glu+(−0.0051)Arg
30	0.760	0.820	(0.3501)+(−0.0247)EtOHNH2+(−0.0035)Ser+(−0.0036)Leu+(−0.0040)Arg+(0.0064)Cys
31	0.760	0.808	(−0.2416)+(0.0138)Tau+(−0.1065)Asp+(−0.0011)Gln+(0.0029)Met+(−0.1987) α −AAA+(−0.0046)Arg
32	0.760	0.806	(−0.0735)+(−0.0022)Val+(0.0114)Tau+(−0.0007)Gln+(0.0020)Glu+(−0.1613) α −AAA+(−0.0041)Arg
33	0.760	0.821	(−0.0900)+(−0.0396)EtOHNH2+(−0.0030)Ser+(−0.0028)Val+(0.0093)Tau+(0.0078)Phe+(−0.0044)Arg
34	0.759	0.819	(−0.0359)+(−0.0033)Ser+(−0.0048)Val+(0.0096)Tau+(0.0095)Ile+(−0.0044)Arg+(0.0003)Trp
35	0.759	0.818	(0.1625)+(−0.0340)EtOHNH2+(−0.0023)Val+(0.0110)Tau+(−0.0009)Gln+(0.0098)Met+(−0.0050)Arg
36	0.758	0.823	(−0.2184)+(−0.0226)EtOHNH2+(−0.0043)Val+(0.0101)Tau+(0.0091)Ile+(−0.0016)Orn+(−0.0048)Arg
37	0.758	0.819	(0.3039)+(−0.0035)Ser+(−0.0030)Leu+(−0.0040)Arg+(−0.0034)Tyr+(0.0077)Cys
38	0.757	0.826	(−0.4604)+(−0.0044)Val+(−0.0010)Thr+(0.0097)Tau+(0.0097)Ile+(−0.0050)Arg+(0.0023)Cys
39	0.757	0.820	(0.4999)+(−0.0041)Ser+(−0.0027)Val+(−0.0063)Hypro+(−0.1450) α −AAA+(−0.0037)Arg+(0.0069)Cys
40	0.757	0.815	(0.5036)+(−0.0042)Ser+(−0.0029)Val+(0.0007)His+(−0.1463) α −AAA+(−0.0039)Arg+(0.0059)Cys
41	0.757	0.817	(0.7584)+(−0.0042)Ser+(−0.0002)Pro+(−0.0052)Val+(0.0096)Ile+(−0.1407) α −AAA+(−0.0037)Arg
42	0.757	0.812	(0.1464)+(−0.0277)EtOHNH2+(−0.0019)Val+(0.0111)Tau+(−0.0008)Gln+(0.0060)1−MeHis+(−0.0042)Arg
43	0.756	0.818	(−0.5955)+(−0.0020)Val+(0.0116)Tau+(−0.0597)Asp+(−0.2264) α −AAA+(0.0047)Phe+(−0.0049)Arg
44	0.756	0.828	(−0.5432)+(−0.0047)Val+(0.0102)Tau+(0.0097)Ile+(0.0035)Phe+(−0.0055)Arg+(−0.0010)Trp
45	0.756	0.819	(0.7194)+(−0.0223)EtOHNH2+(0.0589) β −AIBA+(−0.0037)Ser+(−0.0049)Val+(0.0098)Ile+(−0.0046)Arg
46	0.756	0.821	(−0.5901)+(−0.0024)Val+(0.0104)Tau+(−0.1868) α −AAA+(0.0036)Phe+(−0.0049)Arg+(0.0016)Cys
47	0.755	0.815	(0.5626)+(−0.0270)EtOHNH2+(−0.0035)Ser+(−0.0028)Val+(−0.0042)Arg+(0.0010)Trp+(0.0064)Cys
48	0.755	0.806	(−0.0033)+(−0.0035)Ser+(−0.0022)Val+(0.0103)Tau+(−0.1792) α −AAA+(−0.0036)Arg+(−0.0002)Tyr
49	0.755	0.809	(−0.2154)+(−0.0349)EtOHNH2+(−0.0046)Ser+(−0.0030)Val+(0.0095)Tau+(−0.2018) α −AAA+(0.0064)Phe
50	0.755	0.823	(−0.4705)+(−0.0014)Pro+(−0.0043)Val+(0.0099)Tau+(0.0105)Ile+(−0.0054)Arg+(0.0032)Cys

[図49]

No.	ROC_AUC (Validation)	ROC_AUC (No Validation)	FORMULA
51	0.755	0.826	(−0.5568)+(−0.0046)Val+(−0.0011)Thr+(0.0101)Tau+(0.0097)Ile+(0.0037)Phe+(−0.0049)Arg
52	0.755	0.784	(−0.5653)+(0.0122)Tau+(−0.0008)Gln+(−0.1322) α −AAA+(−0.0043)Arg
53	0.754	0.818	(−0.3970)+(−0.0040)Val+(−0.0017)Thr+(0.0115)Tau+(0.0087)Ile+(−0.0008)Gln+(−0.1585) α −AAA
54	0.754	0.804	(−0.4334)+(−0.0259)EtOHNH2+(0.0120)Tau+(−0.0007)Gln+(−0.1311) α −AAA+(0.0053)1−MeHis+(−0.0042)Arg
55	0.753	0.816	(−0.5207)+(−0.0049)Val+(0.0102)Tau+(0.0109)Ile+(0.0038)His+(−0.0056)Arg+(−0.0023)Tyr
56	0.752	0.812	(−0.5671)+(−0.0050)Val+(0.0102)Tau+(0.0106)Ile+(0.0032)His+(−0.0056)Arg+(−0.0005)Trp
57	0.752	0.797	(−0.3214)+(−0.0005)Ala+(0.0125)Tau+(−0.0008)Gln+(−0.1203) α −AAA+(−0.0158)3−MeHis+(−0.0041)Arg
58	0.752	0.815	(0.0228)+(−0.0069) α −ABA+(−0.0023)Ser+(−0.0912) α −AAA+(−0.0042)Arg+(−0.0042)Tyr+(0.0076)Cys
59	0.752	0.819	(0.0995)+(−0.0031)Ser+(−0.0029)Ile+(−0.1176) α −AAA+(−0.0040)Arg+(−0.0035)Tyr+(0.0077)Cys
60	0.751	0.813	(−0.4539)+(−0.0046)Val+(0.0103)Tau+(0.0100)Ile+(0.0006)Asn+(−0.0053)Arg
61	0.751	0.828	(0.3151)+(−0.0046) α −ABA+(−0.0031)Ser+(−0.0026)Leu+(−0.0040)Arg+(−0.0036)Tyr+(0.0077)Cys
62	0.751	0.799	(0.1030)+(−0.0022)Val+(−0.1347) α −AAA+(−0.0050)Arg+(−0.0031)Tyr+(0.0084)Cys
63	0.751	0.810	(−0.4259)+(−0.0012)Pro+(−0.0045)Val+(0.0105)Tau+(0.0109)Ile+(−0.0051)Arg+(0.0005)Trp
64	0.751	0.818	(−0.4169)+(−0.0447)EtOHNH2+(−0.0034)Val+(0.0100)Tau+(0.0017)Leu+(0.0074)Phe+(−0.0052)Arg
65	0.751	0.813	(0.7288)+(−0.0041)Ser+(−0.0029)Val+(−0.0581)Asp+(0.0064)Glu+(−0.2082) α −AAA+(−0.0029)Arg
66	0.751	0.805	(0.0350)+(−0.0064) α −ABA+(0.0123)Tau+(−0.0781)Asp+(−0.0011)Gln+(−0.0043)Arg+(−0.0014)Tyr
67	0.751	0.791	(−0.5325)+(0.0124)Tau+(−0.0008)Gln+(−0.1207) α −AAA+(−0.0172)3−MeHis+(−0.0042)Arg
68	0.751	0.813	(−0.5868)+(−0.0033)Val+(0.0110)Tau+(0.0020)Leu+(−0.1874) α −AAA+(0.0037)Phe+(−0.0049)Arg
69	0.750	0.818	(0.2996)+(−0.0049)Sar+(−0.0034)Ser+(−0.0030)Leu+(−0.0040)Arg+(−0.0034)Tyr+(0.0078)Cys
70	0.750	0.815	(0.1826)+(0.0609) β −AIBA+(−0.0054)Val+(0.0118)Ile+(−0.1652) α −AAA+(0.0059)1−MeHis+(−0.0054)Arg
71	0.750	0.831	(−0.5451)+(−0.0047)Val+(0.0099)Tau+(0.0095)Ile+(0.0027)Phe+(−0.0055)Arg+(0.0008)Cys
72	0.750	0.818	(−0.4082)+(−0.0037) α −ABA+(−0.0045)Val+(0.0101)Tau+(0.0100)Ile+(0.0009)Asn+(−0.0053)Arg
73	0.750	0.804	(−0.6474)+(−0.0034)Val+(0.0117)Tau+(0.0025)Leu+(0.0055)Asn+(−0.2183) α −AAA+(−0.0052)Arg
74	0.750	0.798	(−0.3251)+(−0.0017)Ser+(0.0117)Tau+(−0.0006)Gln+(−0.1299) α −AAA+(−0.0038)Arg+(−0.0018)Tyr
75	0.750	0.807	(−0.4797)+(−0.0020)Val+(−0.0007)Thr+(0.0101)Tau+(−0.1792) α −AAA+(−0.0044)Arg+(0.0033)Cys

[図50]

No.	ROC_AUC (Validation)	ROC_AUC (No Validation)	FORMULA
76	0.750	0.804	(−0.1633)+(−0.0049)Ser+(−0.0044)Val+(0.0099)Tau+(0.0072)Ile+(−0.1934) α −AAA+(−0.0006)Cys
77	0.749	0.809	(−0.0692)+(−0.0032)Val+(0.0110)Tau+(0.0026)Leu+(−0.0009)Gln+(−0.0049)Arg+(0.0025)Cys
78	0.749	0.810	(0.7894)+(−0.0218)EtOHNH2+(0.0006)Gly+(−0.0048)Ser+(−0.0025)Val+(−0.1459) α −AAA+(−0.0032)Arg
79	0.749	0.819	(0.5490)+(−0.0256)EtOHNH2+(−0.0035)Ser+(−0.0026)Val+(−0.0055)Hypro+(−0.0041)Arg+(0.0073)Cys
80	0.749	0.805	(−0.4973)+(−0.0033)Val+(0.0105)Tau+(0.0024)Leu+(−0.1829) α −AAA+(−0.0049)Arg+(0.0026)Cys
81	0.749	0.800	(−0.2220)+(−0.0309)EtOHNH2+(−0.0021)Val+(0.0108)Tau+(−0.1793) α −AAA+(0.0051)1−MeHis+(−0.0043)Arg
82	0.749	0.796	(−0.2795)+(−0.0281)EtOHNH2+(−0.0020)Val+(0.0111)Tau+(−0.1933) α −AAA+(−0.0048)Arg+(0.0022)Cit
83	0.749	0.811	(−0.4305)+(−0.0047)Val+(0.0102)Tau+(0.0101)Ile+(0.0020)3−MeHis+(−0.0053)Arg
84	0.749	0.789	(−0.1156)+(0.0127)Tau+(−0.0723)Asp+(−0.0011)Gln+(−0.0044)Arg+(−0.0014)Tyr
85	0.749	0.814	(0.0699)+(0.0554) β −AIBA+(−0.0044)Val+(0.0099)Ile+(−0.0062)Arg+(−0.0040)Tyr+(0.0070)Cys
86	0.749	0.812	(−0.4376)+(−0.0045)Val+(0.0103)Tau+(0.0097)Ile+(−0.0099)Asp+(−0.0053)Arg+(0.0004)Trp
87	0.749	0.808	(−0.0546)+(0.0643) β −AIBA+(−0.0028)Ser+(−0.1373) α −AAA+(−0.0048)Arg+(−0.0043)Tyr+(0.0070)Cys
88	0.748	0.798	(−0.2815)+(0.0130)Tau+(−0.0888)Asp+(−0.0012)Gln+(0.0043)His+(−0.0049)Arg+(−0.0020)Tyr
89	0.748	0.805	(0.1587)+(−0.0049) α −ABA+(−0.0020)Val+(−0.1202) α −AAA+(−0.0049)Arg+(−0.0033)Tyr+(0.0083)Cys
90	0.748	0.787	(−0.6971)+(0.0122)Tau+(−0.0703)Asp+(−0.2078) α −AAA+(−0.0045)Arg+(−0.0016)Tyr
91	0.748	0.815	(−0.1516)+(−0.0032)Val+(0.0114)Tau+(0.0022)Leu+(−0.0010)Gln+(0.0042)Phe+(−0.0048)Arg
92	0.748	0.803	(0.1401)+(−0.0243)EtOHNH2+(−0.0019)Val+(0.0112)Tau+(−0.0008)Gln+(0.0003)Glu+(−0.0043)Arg
93	0.748	0.803	(−0.1337)+(−0.0033)Val+(0.0121)Tau+(0.0028)Leu+(0.0046)Asn+(−0.0010)Gln+(−0.0051)Arg
94	0.747	0.813	(−0.3593)+(−0.0482)EtOHNH2+(−0.0023)Val+(0.0102)Tau+(−0.0012)Lys+(0.0090)Phe+(−0.0046)Arg
95	0.747	0.809	(−0.5881)+(−0.0023)Val+(0.0108)Tau+(−0.1897) α −AAA+(0.0048)Phe+(−0.0047)Arg+(−0.0011)Trp
96	0.747	0.818	(0.3993)+(−0.0251)EtOHNH2+(−0.0036)Ser+(−0.0034)Leu+(−0.0325)Asp+(−0.0041)Arg+(0.0070)Cys
97	0.747	0.813	(−0.5942)+(−0.0023)Val+(0.0108)Tau+(−0.0048)Met+(−0.1804) α −AAA+(0.0055)Phe+(−0.0045)Arg
98	0.747	0.799	(−0.4989)+(−0.0232)EtOHNH2+(0.0125)Tau+(−0.0007)Gln+(−0.1501) α −AAA+(−0.0049)Arg+(0.0029)Cit
99	0.747	0.803	(0.0668)+(−0.0052)Val+(0.0090)Ile+(0.0009)His+(−0.1466) α −AAA+(−0.0055)Arg+(0.0055)Cys
100	0.747	0.794	(−0.0536)+(−0.0211)EtOHNH2+(0.0056)Sar+(−0.0045)Ser+(−0.0025)Val+(0.0098)Tau+(−0.1931) α −AAA

[図51]

No.	ROC_AUC (Validation)	ROC_AUC (No Validation)	FORMULA
1	0.734	0.799	(0.7226)+(−0.0042)Ser+(−0.0003)Pro+(−0.0044)Val+(0.0116)Ile+(−0.0024)Leu+(−0.0038)Arg
2	0.731	0.789	(0.6990)+(−0.0041)Ser+(−0.0004)Pro+(−0.0050)Val+(0.0096)Ile+(−0.0038)Arg
3	0.729	0.801	(0.6452)+(0.0004)Gly+(−0.0046)Ser+(−0.0005)Pro+(−0.0049)Val+(0.0097)Ile+(−0.0039)Arg
4	0.724	0.798	(0.5490)+(−0.0046)Ser+(−0.0044)Val+(0.0113)Ile+(−0.0032)Leu+(0.0052)Phe+(−0.0041)Arg
5	0.718	0.776	(0.6910)+(0.0004)Ala+(−0.0044)Ser+(−0.0029)Val+(−0.0032)Arg+(−0.0011)Tyr
6	0.717	0.790	(0.5739)+(−0.0044)Ser+(−0.0056)Val+(0.0097)Ile+(0.0039)His+(−0.0039)Arg+(−0.0016)Cit
7	0.717	0.795	(0.6728)+(−0.0045)Ser+(−0.0006)Pro+(−0.0050)Val+(0.0091)Ile+(0.0073)Met+(−0.0042)Arg
8	0.715	0.777	(0.6463)+(0.0004)Ala+(−0.0046)Ser+(−0.0030)Val+(0.0004)Lys+(−0.0034)Arg
9	0.715	0.769	(0.6750)+(0.0004)Ala+(−0.0046)Ser+(−0.0029)Val+(−0.0032)Arg
10	0.715	0.792	(0.6693)+(−0.0043)Ser+(−0.0004)Pro+(−0.0050)Val+(0.0095)Ile+(0.0015)Asn+(−0.0040)Arg
11	0.714	0.791	(0.8815)+(−0.0035)Ser+(−0.0049)Val+(0.0094)Ile+(−0.0018)Orn+(−0.0004)Gln+(−0.0036)Arg
12	0.714	0.795	(0.7407)+(−0.0038)Ser+(−0.0054)Val+(0.0092)Ile+(−0.0005)Gln+(0.0050)Phe+(−0.0042)Arg
13	0.714	0.790	(0.3919)+(0.0005)Gly+(−0.0050)Ser+(0.0061)Ile+(−0.0059)Leu+(−0.0033)Arg
14	0.713	0.772	(0.6481)+(0.0004)Gly+(−0.0050)Ser+(−0.0024)Val+(−0.0033)Arg
15	0.712	0.788	(0.7292)+(0.0001)Ala+(−0.0048)Ser+(−0.0053)Val+(0.0008)Thr+(0.0089)Ile+(−0.0042)Arg
16	0.712	0.777	(0.5116)+(−0.0047)Ser+(−0.0029)Val+(0.0052)Phe+(−0.0036)Arg+(0.0001)Trp
17	0.711	0.789	(0.7192)+(0.0002)Ala+(−0.0043)Ser+(−0.0052)Val+(0.0089)Ile+(−0.0035)Arg+(−0.0015)Cit
18	0.711	0.777	(0.5614)+(−0.0046)Ser+(−0.0002)Pro+(−0.0027)Val+(0.0002)Lys+(0.0029)His+(−0.0036)Arg
19	0.709	0.774	(0.5056)+(−0.0046)Ser+(−0.0003)Pro+(−0.0028)Val+(0.0054)Phe+(−0.0036)Arg
20	0.706	0.779	(0.4691)+(−0.0001)Ala+(−0.0043)Ser+(0.0065)Ile+(−0.0060)Leu+(−0.0032)Arg
21	0.705	0.773	(0.6579)+(0.0004)Gly+(−0.0049)Ser+(−0.0023)Val+(−0.0033)Arg+(−0.0005)Tyr
22	0.705	0.773	(0.6310)+(−0.0045)Ser+(−0.0001)Pro+(−0.0027)Val+(0.0004)Lys+(−0.0034)Arg+(0.0018)Trp
23	0.705	0.777	(0.5694)+(−0.0045)Ser+(−0.0002)Pro+(−0.0029)Val+(0.0005)Leu+(0.0030)His+(−0.0035)Arg
24	0.704	0.751	(0.2065)+(−0.0050)Val+(0.0097)Ile+(−0.0050)Arg+(0.0013)Trp
25	0.704	0.788	(0.7151)+(−0.0047)Ser+(−0.0051)Val+(0.0085)Ile+(0.0061)Met+(−0.0038)Arg+(−0.0017)Cit

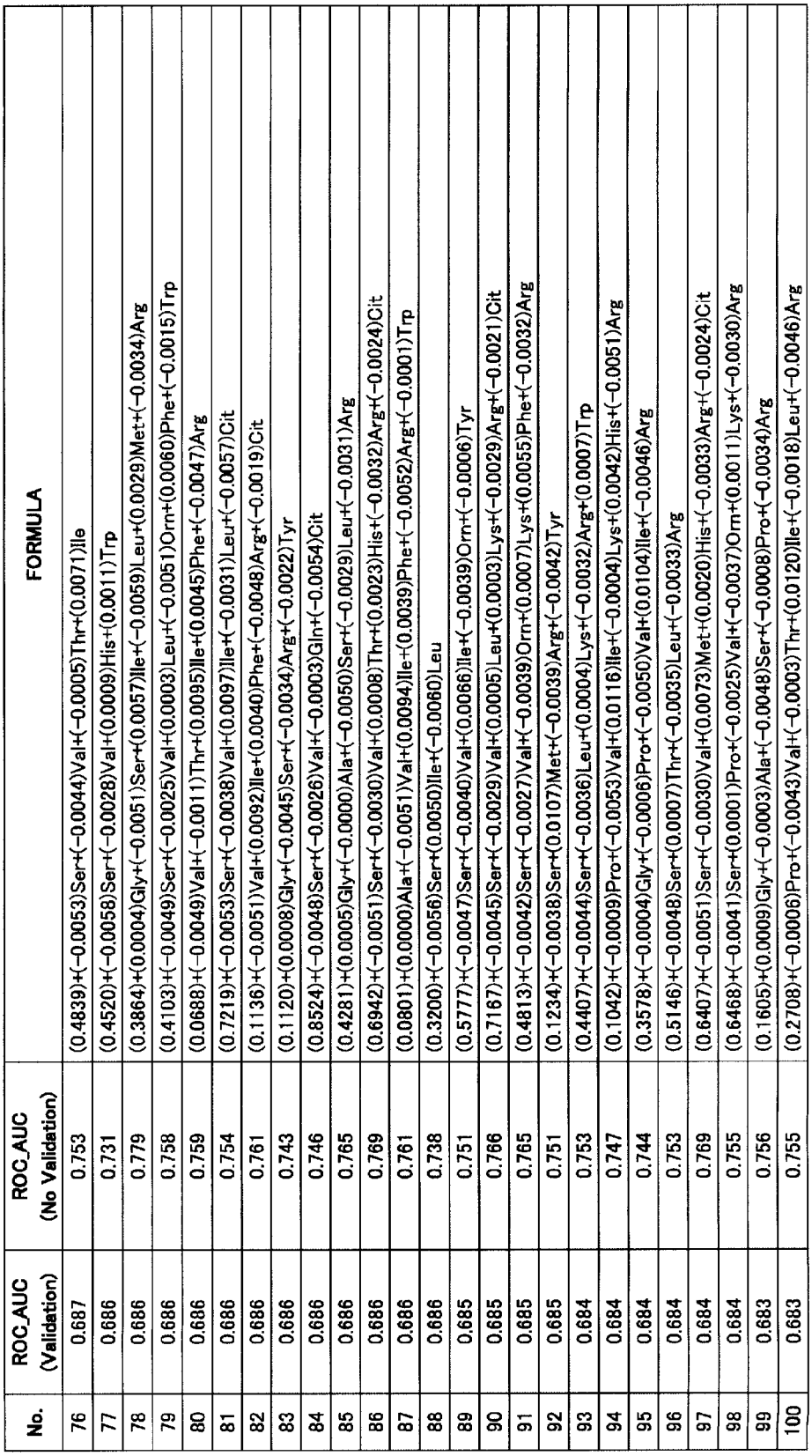
[図52]

No.	ROC_AUC (Validation)	ROC_AUC (No Validation)	FORMULA
26	0.704	0.759	(0.4004)+(−0.0050)Ser+(−0.0025)Val+(−0.0048)Orn+(0.0052)Phe
27	0.704	0.785	(0.6712)+(0.0002)Ala+(−0.0042)Ser+(−0.0031)Val+(−0.0004)Gln+(0.0054)Phe+(−0.0036)Arg
28	0.704	0.784	(0.7805)+(−0.0048)Ser+(−0.0052)Val+(0.0009)Thr+(0.0088)Ile+(−0.0038)Arg+(−0.0017)Cit
29	0.703	0.788	(0.4109)+(0.0005)Gly+(−0.0002)Ala+(−0.0049)Ser+(0.0066)Ile+(−0.0058)Leu+(−0.0034)Arg
30	0.702	0.762	(0.6818)+(−0.0041)Ser+(−0.0024)Val+(−0.0026)Orn+(−0.0028)Arg+(0.0015)Trp
31	0.702	0.773	(0.6452)+(−0.0044)Ser+(−0.0001)Pro+(−0.0031)Val+(0.0009)Leu+(−0.0034)Arg+(0.0019)Trp
32	0.702	0.777	(0.8239)+(−0.0040)Ser+(−0.0029)Val+(0.0006)Leu+(−0.0004)Gln+(0.0007)Lys+(−0.0036)Arg
33	0.701	0.773	(0.9570)+(−0.0048)Ser+(−0.0028)Val+(0.0015)Thr+(−0.0004)Gln+(−0.0038)Arg
34	0.701	0.780	(0.6558)+(0.0003)Gly+(0.0004)Ala+(−0.0048)Ser+(−0.0027)Val+(−0.0032)Arg+(−0.0011)Tyr
35	0.700	0.781	(0.5860)+(−0.0039)Ser+(0.0066)Ile+(−0.0068)Leu+(−0.0005)Gln+(0.0009)Lys+(−0.0036)Arg
36	0.700	0.772	(0.6155)+(0.0004)Gly+(−0.0050)Ser+(−0.0025)Val+(0.0005)Lys+(−0.0035)Arg
37	0.699	0.786	(0.7082)+(−0.0045)Ser+(−0.0051)Val+(0.0089)Ile+(0.0019)Asn+(−0.0036)Arg+(−0.0021)Cit
38	0.699	0.745	(0.0889)+(−0.0054)Val+(0.0104)Ile+(0.0031)His+(−0.0053)Arg
39	0.698	0.758	(0.3226)+(−0.0041)Val+(0.0121)Ile+(−0.0023)Leu+(−0.0048)Arg+(−0.0019)Tyr
40	0.697	0.787	(0.7652)+(−0.0046)Ser+(−0.0031)Val+(0.0010)Thr+(−0.0005)Gln+(0.0051)Phe+(−0.0040)Arg
41	0.697	0.762	(0.3104)+(−0.0046)Ser+(−0.0040)Leu+(0.0052)Phe+(−0.0033)Arg
42	0.697	0.776	(0.7166)+(−0.0046)Ser+(−0.0024)Val+(−0.0026)Orn+(0.0153)Met+(−0.0035)Arg+(−0.0028)Tyr
43	0.696	0.774	(0.4285)+(−0.0045)Ser+(0.0060)Ile+(−0.0062)Leu+(0.0012)Asn+(−0.0033)Arg
44	0.696	0.771	(0.8494)+(−0.0039)Ser+(−0.0029)Val+(0.0010)Leu+(−0.0004)Gln+(−0.0033)Arg+(−0.0004)Tyr
45	0.696	0.777	(0.6612)+(−0.0035)Ser+(0.0073)Ile+(−0.0063)Leu+(−0.0004)Gln+(−0.0032)Arg+(−0.0019)Tyr
46	0.696	0.778	(0.6097)+(0.0003)Gly+(0.0003)Ala+(−0.0050)Ser+(−0.0029)Val+(0.0004)Lys+(−0.0034)Arg
47	0.696	0.773	(0.4319)+(−0.0046)Ser+(0.0056)Ile+(−0.0061)Leu+(0.0040)Met+(−0.0034)Arg
48	0.695	0.764	(0.4096)+(0.0005)Gly+(−0.0050)Ser+(−0.0031)Leu+(−0.0031)Arg+(0.0006)Trp
49	0.695	0.774	(0.6215)+(−0.0046)Ser+(−0.0028)Val+(0.0001)Lys+(0.0030)His+(−0.0030)Arg+(−0.0024)Cit
50	0.695	0.778	(0.6591)+(−0.0050)Ser+(−0.0003)Pro+(−0.0027)Val+(0.0003)Asn+(0.0095)Met+(−0.0037)Arg

[図53]

No.	ROC_AUC (Validation)	ROC_AUC (No Validation)	FORMULA
51	0.694	0.775	(0.4793)+(0.0003)Gly+(−0.0050)Ser+(−0.0028)Val+(0.0051)Phe+(−0.0036)Arg+(−0.0000)Trp
52	0.694	0.766	(0.3291)+(0.0005)Gly+(−0.0051)Ser+(−0.0035)Leu+(0.0026)His+(−0.0033)Arg
53	0.694	0.772	(0.8241)+(−0.0042)Ser+(−0.0024)Val+(0.0035)Asn+(−0.0004)Gln+(−0.0035)Arg+(−0.0008)Tyr
54	0.693	0.773	(0.4840)+(−0.0043)Ser+(0.0000)Pro+(−0.0026)Val+(0.0076)Phe+(−0.0037)Arg+(−0.0029)Tyr
55	0.693	0.782	(0.3786)+(0.0005)Gly+(−0.0050)Ser+(0.0060)Ile+(−0.0059)Leu+(0.0008)Asn+(−0.0034)Arg
56	0.693	0.775	(0.4679)+(0.0003)Gly+(−0.0050)Ser+(−0.0003)Pro+(−0.0027)Val+(0.0053)Phe+(−0.0036)Arg
57	0.692	0.770	(0.7963)+(−0.0043)Ser+(−0.0027)Val+(0.0028)Asn+(−0.0005)Gln+(0.0008)Lys+(−0.0038)Arg
58	0.692	0.766	(0.3231)+(−0.0042)Ser+(−0.0038)Leu+(0.0087)Phe+(−0.0034)Arg+(−0.0040)Tyr
59	0.691	0.775	(0.8687)+(−0.0040)Ser+(−0.0027)Val+(−0.0004)Gln+(0.0007)Lys+(−0.0031)Arg+(−0.0019)Cit
60	0.691	0.750	(0.5308)+(−0.0041)Ser+(−0.0026)Val+(−0.0039)Orn+(0.0047)His+(−0.0030)Arg
61	0.691	0.753	(0.0548)+(−0.0009)Pro+(−0.0046)Val+(0.0141)Ile+(−0.0032)Leu+(0.0049)His+(−0.0053)Arg
62	0.691	0.761	(0.0255)+(−0.0053)Val+(0.0098)Ile+(0.0019)His+(0.0031)Phe+(−0.0054)Arg
63	0.691	0.752	(0.2372)+(0.0002)Ala+(−0.0009)Pro+(−0.0050)Val+(0.0103)Ile+(−0.0048)Arg
64	0.690	0.760	(0.3812)+(−0.0000)Ala+(−0.0045)Ser+(−0.0036)Leu+(0.0028)His+(−0.0032)Arg
65	0.690	0.768	(0.6169)+(0.0003)Ala+(−0.0047)Ser+(−0.0031)Val+(0.0027)His+(−0.0030)Arg+(−0.0022)Cit
66	0.690	0.761	(0.3679)+(−0.0046)Ser+(−0.0038)Leu+(0.0003)Lys+(0.0025)His+(−0.0033)Arg
67	0.689	0.749	(0.2977)+(−0.0048)Val+(0.0101)Ile+(0.0000)Lys+(−0.0049)Arg+(−0.0017)Tyr
68	0.689	0.741	(0.2410)+(−0.0003)Ala+(−0.0035)Ser+(−0.0033)Arg+(−0.0018)Tyr
69	0.688	0.767	(0.4071)+(−0.0051)Ser+(−0.0036)Val+(0.0075)Ile+(−0.0022)Leu+(−0.0042)Orn+(0.0048)Phe
70	0.688	0.755	(0.7187)+(−0.0041)Ser+(0.0001)Pro+(−0.0023)Val+(−0.0029)Orn+(−0.0027)Arg
71	0.688	0.773	(0.9148)+(0.0003)Gly+(−0.0051)Ser+(−0.0027)Val+(0.0014)Thr+(−0.0004)Gln+(−0.0038)Arg
72	0.687	0.765	(0.7043)+(−0.0043)Ser+(−0.0026)Val+(−0.0029)Arg+(−0.0018)Cit+(−0.0009)Tyr+(0.0021)Trp
73	0.687	0.746	(0.4471)+(−0.0023)Val+(−0.0006)Gln+(0.0035)His+(−0.0044)Arg+(−0.0016)Tyr
74	0.687	0.750	(0.2348)+(−0.0044)Val+(0.0116)Ile+(−0.0021)Leu+(0.0002)Lys+(−0.0050)Arg
75	0.687	0.776	(0.5416)+(0.0002)Ala+(−0.0050)Ser+(−0.0032)Val+(0.0005)Thr+(0.0047)Phe+(−0.0037)Arg

[図54]



No.	ROC_AUC (Validation)	ROC_AUC (No Validation)	FORMULA
76	0.687	0.753	(0.4839)+(−0.0053)Ser+(−0.0044)Val+(−0.0005)Thr+(0.0071)Ile
77	0.686	0.731	(0.4520)+(−0.0058)Ser+(−0.0028)Val+(0.0009)His+(0.0011)Trp
78	0.686	0.779	(0.3864)+(0.0004)Gly+(−0.0051)Ser+(0.0057)Ile+(−0.0059)Leu+(0.0029)Met+(−0.0034)Arg
79	0.686	0.758	(0.4103)+(−0.0049)Ser+(−0.0025)Val+(0.0003)Leu+(−0.0051)Orn+(0.0060)Phe+(−0.0015)Trp
80	0.686	0.759	(0.0688)+(−0.0049)Val+(−0.0011)Thr+(0.0095)Ile+(0.0045)Phe+(−0.0047)Arg
81	0.686	0.754	(0.7219)+(−0.0053)Ser+(−0.0038)Val+(0.0097)Ile+(−0.0031)Leu+(−0.0057)Cit
82	0.686	0.761	(0.1136)+(−0.0051)Val+(0.0092)Ile+(0.0040)Phe+(−0.0048)Arg+(−0.0019)Cit
83	0.686	0.743	(0.1120)+(0.0008)Gly+(−0.0045)Ser+(−0.0034)Arg+(−0.0022)Tyr
84	0.686	0.746	(0.8524)+(−0.0048)Ser+(−0.0026)Val+(−0.0003)Gln+(−0.0054)Cit
85	0.686	0.765	(0.4281)+(0.0005)Gly+(−0.0000)Ala+(−0.0050)Ser+(−0.0029)Leu+(−0.0031)Arg
86	0.686	0.769	(0.6942)+(−0.0051)Ser+(−0.0030)Val+(0.0008)Thr+(0.0023)His+(−0.0032)Arg+(−0.0024)Cit
87	0.686	0.761	(0.0801)+(0.0000)Ala+(−0.0051)Val+(0.0094)Ile+(0.0039)Phe+(−0.0052)Arg+(−0.0001)Trp
88	0.686	0.738	(0.3200)+(−0.0056)Ser+(0.0050)Ile+(−0.0060)Leu
89	0.685	0.751	(0.5777)+(−0.0047)Ser+(−0.0040)Val+(0.0066)Ile+(−0.0039)Orn+(−0.0006)Tyr
90	0.685	0.766	(0.7167)+(−0.0045)Ser+(−0.0029)Val+(0.0005)Leu+(0.0003)Lys+(−0.0029)Arg+(−0.0021)Cit
91	0.685	0.765	(0.4813)+(−0.0042)Ser+(−0.0027)Val+(−0.0039)Orn+(0.0007)Lys+(0.0055)Phe+(−0.0032)Arg
92	0.685	0.751	(0.1234)+(−0.0038)Ser+(0.0107)Met+(−0.0039)Arg+(−0.0042)Tyr
93	0.684	0.753	(0.4407)+(−0.0044)Ser+(−0.0036)Leu+(0.0004)Lys+(−0.0032)Arg+(0.0007)Trp
94	0.684	0.747	(0.1042)+(−0.0009)Pro+(−0.0053)Val+(0.0116)Ile+(−0.0004)Lys+(0.0042)His+(−0.0051)Arg
95	0.684	0.744	(0.3578)+(−0.0004)Gly+(−0.0006)Pro+(−0.0050)Val+(0.0104)Ile+(−0.0046)Arg
96	0.684	0.753	(0.5146)+(−0.0048)Ser+(0.0007)Thr+(−0.0035)Leu+(−0.0033)Arg
97	0.684	0.769	(0.6407)+(−0.0051)Ser+(−0.0030)Val+(0.0073)Met+(0.0020)His+(−0.0033)Arg+(−0.0024)Cit
98	0.684	0.755	(0.6468)+(−0.0041)Ser+(0.0001)Pro+(−0.0025)Val+(−0.0037)Orn+(0.0011)Lys+(−0.0030)Arg
99	0.683	0.756	(0.1605)+(0.0009)Gly+(−0.0003)Ala+(−0.0048)Ser+(−0.0008)Pro+(−0.0034)Arg
100	0.683	0.755	(0.2708)+(−0.0006)Pro+(−0.0043)Val+(−0.0003)Thr+(0.0120)Ile+(−0.0018)Leu+(−0.0046)Arg

[図55]

No.	ROC_AUC	FORMULA
1	0.651	(−2.814)+(0.002917)Ala+(−0.01609)Orn+(0.02631)Glu+(0.3781)3−MeHis+(−0.02360)Trp+(0.02292)Cys
2	0.658	(−3.358)+(0.002835)Ala+(0.02449)Glu+(0.2388) α −AAA+(0.3088)3−MeHis+(−0.02416)Trp+(0.01768)Cys
3	0.651	(−3.094)+(0.002826)Ala+(0.02445)Glu+(0.3597)3−MeHis+(−0.009814)Cit+(−0.02399)Trp+(0.01879)Cys
4	0.655	(−3.364)+(0.002915)Ala+(0.02498)Glu+(0.3285)3−MeHis+(−0.02360)Trp+(0.01688)Cys
5	0.667	(−2.251)+(−0.01620)Orn+(0.02941)Glu+(0.2659) α −AAA+(0.3673)3−MeHis+(−0.01750)Trp+(0.02612)Cys
6	0.657	(−2.538)+(−0.01803)Orn+(0.03194)Glu+(0.02937)Met+(0.3867)3−MeHis+(−0.02187)Trp+(0.02288)Cys
7	0.660	(−2.540)+(0.003297)Ala+(0.02475)Glu+(−0.01717)His+(0.3504)3−MeHis+(−0.01967)Trp+(0.01897)Cys
8	0.646	(−2.537)+(0.002839)Ala+(−0.01267)Orn+(0.02929)Glu+(0.02594)Met+(0.4122)3−MeHis+(−0.02452)Trp
9	0.664	(−2.475)+(0.02725)Glu+(0.2867) α −AAA+(0.3559)3−MeHis+(−0.01262)Cit+(−0.01848)Trp+(0.02243)Cys
10	0.650	(−3.036)+(0.002898)Ala+(0.02348)Glu+(0.3404)3−MeHis+(−0.004686)Arg+(−0.02273)Trp+(0.01922)Cys
11	0.651	(−3.037)+(−0.01638)Orn+(0.02550)Glu+(0.2449) α −AAA+(0.3935)3−MeHis+(0.02300)Cys
12	0.654	(−2.441)+(0.004692)Thr+(−0.01924)Orn+(0.03143)Glu+(0.3961)3−MeHis+(−0.01977)Trp+(0.02384)Cys
13	0.646	(−2.994)+(0.002898)Ala+(−0.01334)Orn+(0.02967)Glu+(0.02307)Phe+(0.3876)3−MeHis+(−0.02997)Trp
14	0.659	(−2.159)+(0.003135)Ala+(0.02826)Glu+(0.03036)Met+(−0.01945)His+(0.3887)3−MeHis+(−0.02118)Trp
15	0.655	(−3.019)+(−0.001525)Gly+(0.002962)Ala+(0.02359)Glu+(0.3284)3−MeHis+(−0.02406)Trp+(0.01783)Cys
16	0.660	(−2.548)+(0.01981) α −ABA+(−0.01725)Orn+(0.02965)Glu+(0.3784)3−MeHis+(−0.01798)Trp+(0.02620)Cys
17	0.649	(−2.732)+(0.009079)Leu+(−0.01864)Orn+(0.02569)Glu+(0.3558)3−MeHis+(−0.02496)Trp+(0.02759)Cys
18	0.656	(−2.818)+(−0.01766)Orn+(0.03208)Glu+(0.02054)Phe+(0.3698)3−MeHis+(−0.02527)Trp+(0.02134)Cys
19	0.642	(−3.555)+(0.001744)Ala+(−0.01641)Orn+(0.02236)Glu+(0.2288) α −AAA+(0.3931)3−MeHis+(0.02076)Cys
20	0.657	(−2.862)+(0.002490)Ala+(0.02151)Glu+(−0.02283)His+(0.2107) α −AAA+(0.3661)3−MeHis+(0.01812)Cys
21	0.660	(−2.251)+(−0.01602)Orn+(0.03012)Glu+(0.3907)3−MeHis+(−0.01682)Trp+(0.02534)Cys
22	0.665	(−2.174)+(0.02464)Glu+(−0.01783)His+(0.2620) α −AAA+(0.3971)3−MeHis+(−0.01187)Cit+(0.02244)Cys
23	0.661	(−2.322)+(−0.01391)Orn+(0.02628)Glu+(−0.01233)His+(0.2444) α −AAA+(0.3971)3−MeHis+(0.02451)Cys
24	0.650	(−3.741)+(0.002721)Ala+(0.02640)Glu+(0.01359)Phe+(0.3122)3−MeHis+(−0.02877)Trp+(0.01408)Cys
25	0.657	(−2.557)+(0.01827) α −ABA+(−0.01459)Orn+(0.02653)Glu+(−0.01336)His+(0.4094)3−MeHis+(0.02447)Cys

[図56]

No.	ROC_AUC	FORMULA
26	0.648	(−2.690)+(0.002422)Ala+(−0.01261)Orn+(0.02301)Glu+(−0.01798)His+(0.4179)3−MeHis+(0.02145)Cys
27	0.654	(−3.493)+(0.002785)Ala+(0.009034) α −ABA+(0.02491)Glu+(0.3217)3−MeHis+(−0.02388)Trp+(0.01721)Cys
28	0.650	(−2.959)+(−0.01507)Orn+(0.02496)Glu+(0.2571) α −AAA+(0.4059)3−MeHis+(−0.005499)Cit+(0.02351)Cys
29	0.655	(−3.319)+(0.002930)Ala+(−0.0004853)Lys+(0.02502)Glu+(0.3295)3−MeHis+(−0.02335)Trp+(0.01734)Cys
30	0.651	(−2.779)+(0.002951)Ala+(−0.004926)Ser+(0.02342)Glu+(0.3204)3−MeHis+(−0.02359)Trp+(0.01762)Cys
31	0.641	(−3.856)+(0.001627)Ala+(0.02043)Glu+(0.2410) α −AAA+(0.3767)3−MeHis+(−0.01041)Cit+(0.01671)Cys
32	0.649	(−2.611)+(0.002485)Ala+(0.02158)Glu+(−0.02299)His+(0.4134)3−MeHis+(−0.009023)Cit+(0.01922)Cys
33	0.649	(−3.249)+(0.01248) α −ABA+(−0.01717)Orn+(0.02518)Glu+(0.2095) α −AAA+(0.3907)3−MeHis+(0.02326)Cys
34	0.654	(−3.344)+(0.002901)Ala+(−0.01456)Asp+(0.02541)Glu+(0.3280)3−MeHis+(−0.02351)Trp+(0.01689)Cys
35	0.653	(−3.442)+(0.002771)Ala+(0.02567)Glu+(0.008547)Met+(0.3259)3−MeHis+(−0.02475)Trp+(0.01612)Cys
36	0.647	(−2.280)+(0.002768)Ala+(−0.007149)Ser+(0.02602)Glu+(0.02917)Met+(0.3493)3−MeHis+(−0.02551)Trp
37	0.647	(−2.333)+(0.003315)Ala+(−0.01046)Orn+(0.02713)Glu+(0.4172)3−MeHis+(−0.02082)Trp
38	0.655	(−2.665)+(0.02827)Glu+(0.03075)Met+(0.3480)3−MeHis+(−0.007260)Arg+(−0.02093)Trp+(0.01957)Cys
39	0.655	(−3.341)+(0.002904)Ala+(0.02455)Glu+(−0.01415)1−MeHis+(0.3436)3−MeHis+(−0.02324)Trp+(0.01683)Cys
40	0.646	(−3.202)+(0.002404)Thr+(−0.01806)Orn+(0.02580)Glu+(0.2488) α −AAA+(0.3981)3−MeHis+(0.02198)Cys
41	0.648	(−3.343)+(0.02325)Glu+(0.2593) α −AAA+(0.3798)3−MeHis+(−0.01144)Cit+(0.01895)Cys
42	0.654	(−2.784)+(0.003175)Ala+(0.02566)Glu+(0.2126) α −AAA+(0.3588)3−MeHis+(−0.02180)Trp
43	0.647	(−3.115)+(0.08527)Sar+(−0.01796)Orn+(0.02594)Glu+(0.2316) α −AAA+(0.3801)3−MeHis+(0.02346)Cys
44	0.661	(−2.565)+(0.01090)Asn+(−0.01784)Orn+(0.03184)Glu+(0.3905)3−MeHis+(−0.01910)Trp+(0.02445)Cys
45	0.654	(−3.398)+(0.03517)Sar+(0.002893)Ala+(0.02515)Glu+(0.3205)3−MeHis+(−0.02388)Trp+(0.01691)Cys
46	0.670	(−2.206)+(0.03109)Glu+(0.03347)Met+(−0.01896)His+(0.3545)3−MeHis+(−0.01738)Trp+(0.01829)Cys
47	0.652	(−3.079)+(−0.01634)Orn+(0.02821)Asp+(0.02457)Glu+(0.2710) α −AAA+(0.3928)3−MeHis+(0.02300)Cys
48	0.647	(−3.301)+(0.01656) α −ABA+(−0.01719)Orn+(0.02574)Glu+(0.4063)3−MeHis+(0.02281)Cys
49	0.657	(−2.318)+(0.1283)Sar+(−0.01832)Orn+(0.03093)Glu+(0.3664)3−MeHis+(−0.01791)Trp+(0.02619)Cys
50	0.640	(−3.642)+(0.001780)Ala+(0.01920)Glu+(0.2382) α −AAA+(0.3575)3−MeHis+(−0.006420)Arg+(0.01803)Cys

[図57]

No.	ROC_AUC	FORMULA
51	0.660	(−2.756)+(0.01443)α−ABA+(0.02771)Glu+(0.3632)3−MeHis+(−0.01088)Cit+(−0.01845)Trp+(0.02161)Cys
52	0.654	(−3.396)+(0.002890)Ala+(0.007730)Hypro+(0.02521)Glu+(0.3156)3−MeHis+(−0.02376)Trp+(0.01653)Cys
53	0.649	(−3.565)+(0.002656)Ala+(0.004064)Leu+(0.02328)Glu+(0.3105)3−MeHis+(−0.02674)Trp+(0.01765)Cys
54	0.637	(−3.557)+(0.001829)Ala+(−0.01612)Orn+(0.02297)Glu+(0.4120)3−MeHis+(0.01998)Cys
55	0.658	(−2.658)+(0.003282)Ala+(0.02803)Glu+(−0.01843)His+(0.02293)Phe+(0.3636)3−MeHis+(−0.02612)Trp
56	0.644	(−2.740)+(0.002807)Ala+(0.02666)Glu+(0.02449)Met+(0.3772)3−MeHis+(−0.004279)Arg+(−0.02388)Trp
57	0.652	(−2.849)+(0.002583)Ala+(0.02207)Glu+(−0.02295)His+(0.3839)3−MeHis+(0.01750)Cys
58	0.642	(−2.425)+(0.002978)Ala+(0.003507)Thr+(−0.01315)Orn+(0.02857)Glu+(0.4205)3−MeHis+(−0.02241)Trp
59	0.658	(−2.263)+(0.02656)Glu+(0.02533)Met+(−0.02382)His+(0.4197)3−MeHis+(−0.01150)Cit+(0.01942)Cys
60	0.653	(−2.408)+(−0.01425)Orn+(0.02813)Glu+(0.02530)Met+(−0.01816)His+(0.4215)3−MeHis+(0.02170)Cys
61	0.650	(−2.302)+(0.003254)Ala+(−0.01049)Orn+(0.02673)Glu+(0.2129)α−AAA+(0.4015)3−MeHis+(−0.02121)Trp
62	0.667	(−2.796)+(0.02815)Glu+(0.2597)α−AAA+(0.3195)3−MeHis+(−0.01776)Trp+(0.02004)Cys
63	0.656	(−3.644)+(0.002881)Ala+(0.0005175)Gln+(0.02567)Glu+(0.3259)3−MeHis+(−0.02385)Trp+(0.01633)Cys
64	0.646	(−2.683)+(0.003070)Ala+(−0.01603)Orn+(0.005025)Lys+(0.02688)Glu+(0.4191)3−MeHis+(−0.02368)Trp
65	0.647	(−3.458)+(0.002901)Ala+(0.02774)Glu+(0.01858)Phe+(0.3413)3−MeHis+(−0.02890)Trp
66	0.650	(−3.010)+(0.002927)Ala+(0.02726)Glu+(0.01646)Met+(0.3649)3−MeHis+(−0.02378)Trp
67	0.650	(−2.551)+(0.003131)Ala+(0.02538)Glu+(0.2264)α−AAA+(0.3823)3−MeHis+(−0.006766)Cit+(−0.02193)Trp
68	0.662	(−2.430)+(0.02641)Glu+(0.2761)α−AAA+(0.3304)3−MeHis+(−0.005364)Arg+(−0.01680)Trp+(0.02279)Cys
69	0.651	(−2.932)+(−0.003176)Lys+(0.02384)Glu+(0.3185)α−AAA+(0.3824)3−MeHis+(−0.01263)Cit+(0.02280)Cys
70	0.661	(−2.312)+(0.001146)Pro+(−0.01641)Orn+(0.02998)Glu+(0.3842)3−MeHis+(−0.01762)Trp+(0.02500)Cys
71	0.654	(−3.265)+(0.003002)Ala+(−0.003334)Asn+(0.02439)Glu+(0.3301)3−MeHis+(−0.02309)Trp+(0.01726)Cys
72	0.655	(−3.410)+(0.002852)Ala+(0.0004403)Val+(0.02473)Glu+(0.3267)3−MeHis+(−0.02408)Trp+(0.01697)Cys
73	0.650	(−2.291)+(0.005174)Thr+(−0.01600)Orn+(0.02818)Glu+(−0.01861)His+(0.4299)3−MeHis+(0.02246)Cys
74	0.646	(−3.233)+(0.002825)Ala+(0.02756)Glu+(0.01985)Phe+(0.3672)3−MeHis+(−0.007756)Cit+(−0.02954)Trp
75	0.649	(−2.754)+(0.01689)Ile+(−0.01740)Orn+(0.02513)Glu+(0.3589)3−MeHis+(−0.02516)Trp+(0.02624)Cys

[図58]

No.	ROC_AUC	FORMULA
76	0.637	(−3.714)+(0.001635)Ala+(0.01237) α −ABA+(−0.01692)Orn+(0.02288)Glu+(0.4065)3−MeHis+(0.02058)Cys
77	0.635	(−3.609)+(0.08373)Sar+(0.001750)Ala+(−0.01770)Orn+(0.02347)Glu+(0.3974)3−MeHis+(0.02058)Cys
78	0.643	(−4.123)+(0.001749)Ala+(0.02106)Glu+(0.2162) α −AAA+(0.3450)3−MeHis+(0.01463)Cys
79	0.650	(−2.890)+(−0.001409)Ser+(−0.01572)Orn+(0.02502)Glu+(0.2472) α −AAA+(0.3887)3−MeHis+(0.02301)Cys
80	0.664	(−2.181)+(−0.01716)Orn+(0.02952)Glu+(−0.02144)1−MeHis+(0.4165)3−MeHis+(−0.01638)Trp+(0.02578)Cys
81	0.654	(−2.969)+(0.002437)Ala+(0.009560) α −ABA+(0.02198)Glu+(−0.02333)His+(0.3780)3−MeHis+(0.01781)Cys
82	0.652	(−2.875)+(0.002383)Ala+(0.02291)Glu+(0.01227)Met+(−0.02548)His+(0.3845)3−MeHis+(0.01660)Cys
83	0.659	(−2.483)+(−0.01931)Orn+(0.003569)Lys+(0.02983)Glu+(0.3946)3−MeHis+(−0.01875)Trp+(0.02281)Cys
84	0.656	(−2.869)+(0.003215)Ala+(0.06952)Asp+(0.02352)Glu+(0.2785) α −AAA+(0.3568)3−MeHis+(−0.02238)Trp
85	0.649	(−3.093)+(−0.01698)Orn+(0.0006395)Lys+(0.02540)Glu+(0.2343) α −AAA+(0.3956)3−MeHis+(0.02248)Cys
86	0.650	(−3.168)+(−0.01661)Orn+(0.02554)Glu+(0.2321) α −AAA+(0.002882)Phe+(0.3930)3−MeHis+(0.02220)Cys
87	0.661	(−2.206)+(−0.01609)Orn+(−0.03735)Asp+(0.03118)Glu+(0.3891)3−MeHis+(−0.01666)Trp+(0.02540)Cys
88	0.652	(−2.816)+(0.003239)Ala+(0.02602)Glu+(0.3739)3−MeHis+(−0.02136)Trp
89	0.662	(−2.093)+(0.003502)Ala+(0.02561)Glu+(−0.01329)His+(0.2029) α −AAA+(0.3807)3−MeHis+(−0.01856)Trp
90	0.649	(−3.143)+(−0.01680)Orn+(0.02570)Glu+(0.006060)Met+(0.2315) α −AAA+(0.3950)3−MeHis+(0.02230)Cys
91	0.656	(−2.749)+(0.02927)Glu+(0.02266)Met+(0.3705)3−MeHis+(−0.01220)Cit+(−0.02158)Trp+(0.01910)Cys
92	0.650	(−2.853)+(−0.01472)Orn+(0.02451)Glu+(0.2556) α −AAA+(0.3947)3−MeHis+(−0.003193)Arg+(0.02410)Cys
93	0.646	(−3.095)+(0.01515)Hypro+(−0.01729)Orn+(0.02586)Glu+(0.2526) α −AAA+(0.3707)3−MeHis+(0.02246)Cys
94	0.651	(−2.849)+(0.003112)Ala+(0.01250)Hypro+(0.02605)Glu+(0.2189) α −AAA+(0.3361)3−MeHis+(−0.02217)Trp
95	0.634	(−3.672)+(0.001875)Ala+(0.01996)Glu+(0.3763)3−MeHis+(−0.005895)Arg+(0.01703)Cys
96	0.647	(−2.796)+(0.002831)Ala+(0.02718)Glu+(0.01920)Met+(0.3892)3−MeHis+(−0.007116)Cit+(−0.02431)Trp
97	0.660	(−2.106)+(−0.0006710)Gly+(−0.01575)Orn+(0.02953)Glu+(0.3895)3−MeHis+(−0.01695)Trp+(0.02570)Cys
98	0.643	(−3.343)+(0.08108)Sar+(0.01480) α −ABA+(−0.01861)Orn+(0.02615)Glu+(0.3928)3−MeHis+(0.02324)Cys
99	0.642	(−3.102)+(0.09929)Sar+(−0.01798)Orn+(0.02676)Glu+(0.3966)3−MeHis+(0.02290)Cys
100	0.664	(−1.966)+(−0.01476)Orn+(0.03012)Glu+(−0.006299)His+(0.3951)3−MeHis+(−0.01502)Trp+(0.02576)Cys

[図59]

No.	ROC_AUC	FORMULA
1	0.617	(−2.300)+(0.004048)Ala+(−0.01238)Ser+(0.01158)Leu+(0.004371)Lys+(0.01920)Cit+(−0.03464)Trp
2	0.596	(−2.253)+(0.003398)Ala+(−0.01310)Ser+(0.01877)Ile+(0.003908)Lys+(0.02963)Phe+(−0.04630)Trp
3	0.591	(−2.037)+(0.003503)Ala+(−0.01185)Ser+(0.02072)Ile+(0.03228)Phe+(−0.04551)Trp
4	0.612	(−2.071)+(0.004181)Ala+(−0.01078)Ser+(0.01381)Leu+(0.02003)Cit+(−0.03363)Trp
5	0.599	(−2.131)+(0.003470)Ala+(−0.01313)Ser+(0.01967)Ile+(0.006715)Orn+(0.02954)Phe+(−0.04428)Trp
6	0.608	(−1.953)+(0.003767)Ala+(−0.01374)Ser+(0.01288)Leu+(0.02985)Met+(0.01768)Cit+(−0.03696)Trp
7	0.618	(−2.233)+(0.003805)Ala+(−0.01235)Ser+(0.01937)Ile+(0.005100)Lys+(0.01847)Cit+(−0.03412)Trp
8	0.589	(−3.885)+(0.003918)Ala+(0.01260)Leu+(0.02194)Phe+(0.01558)Cit+(−0.04145)Trp
9	0.600	(−2.554)+(0.003875)Ala+(−0.01208)Ser+(0.01157)Leu+(0.02525)Phe+(0.01549)Cit+(−0.04141)Trp
10	0.608	(−1.404)+(0.004132)Ala+(−0.01252)Ser+(0.01272)Leu+(0.009558)Orn+(−0.03602)Trp
11	0.590	(−2.048)+(0.003796)Ala+(−0.01210)Ser+(0.01175)Leu+(0.03088)Phe+(−0.04593)Trp
12	0.579	(−3.343)+(0.003503)Ala+(0.02252)Ile+(0.02939)Phe+(−0.04556)Trp
13	0.597	(−2.214)+(0.003730)Ala+(−0.01327)Ser+(0.01007)Leu+(0.003542)Lys+(0.02893)Phe+(−0.04615)Trp
14	0.608	(−2.004)+(0.004020)Ala+(−0.01219)Ser+(0.002265)Thr+(0.01329)Leu+(0.01930)Cit+(−0.03407)Trp
15	0.582	(−3.556)+(0.003436)Ala+(0.02140)Ile+(0.002378)Lys+(0.02763)Phe+(−0.04600)Trp
16	0.592	(−1.961)+(0.003401)Ala+(−0.01281)Ser+(0.02036)Ile+(0.01035)Met+(0.02992)Phe+(−0.04584)Trp
17	0.577	(−3.376)+(0.003823)Ala+(0.01277)Leu+(0.02777)Phe+(−0.04603)Trp
18	0.604	(−2.498)+(0.003624)Ala+(−0.01186)Ser+(0.01983)Ile+(0.02716)Phe+(0.01457)Cit+(−0.04126)Trp
19	0.591	(−2.130)+(0.0007252)Gly+(0.003480)Ala+(−0.01259)Ser+(0.02090)Ile+(0.03209)Phe+(−0.04512)Trp
20	0.613	(−2.065)+(0.004173)Ala+(−0.01104)Ser+(0.01356)Leu+(0.001312)Orn+(0.01929)Cit+(−0.03355)Trp
21	0.579	(−3.343)+(0.003974)Ala+(0.02120)Ile+(0.03558)Phe+(−0.008827)Tyr+(−0.04266)Trp
22	0.592	(−2.004)+(0.003522)Ala+(−0.01176)Ser+(0.02076)Ile+(−0.0009505)His+(0.03253)Phe+(−0.04542)Trp
23	0.590	(−2.126)+(0.003832)Ala+(−0.01103)Ser+(0.01991)Ile+(0.03636)Phe+(−0.006115)Tyr+(−0.04354)Trp
24	0.598	(−1.356)+(0.003628)Ala+(−0.01595)Ser+(0.01181)Leu+(0.007879)Orn+(0.03772)Met+(−0.04005)Trp
25	0.605	(−1.520)+(0.004047)Ala+(−0.01236)Ser+(0.01221)Leu+(0.005006)Lys+(−0.03864)Trp

[図60]

No.	ROC_AUC	FORMULA
26	0.594	(-2.175)+(0.003512)Ala+(-0.01244)Ser+(0.02048)Ile+(0.0004707)Gln+(0.03058)Phe+(-0.04483)Trp
27	0.592	(-2.039)+(0.003498)Ala+(-0.01189)Ser+(0.02070)Ile+(0.0002667)Asn+(0.03221)Phe+(-0.04551)Trp
28	0.591	(-1.883)+(0.003868)Ala+(-0.01154)Ser+(0.01235)Leu+(-0.005380)His+(0.03207)Phe+(-0.04571)Trp
29	0.612	(-2.093)+(0.0002007)Gly+(0.004170)Ala+(-0.01098)Ser+(0.01388)Leu+(0.01988)Cit+(-0.03359)Trp
30	0.611	(-2.062)+(0.004176)Ala+(-0.01001)Ser+(0.01408)Leu+(-0.002296)Arg+(0.02225)Cit+(-0.03331)Trp
31	0.595	(-3.551)+(0.004268)Ala+(0.01263)Leu+(-0.01978)Asn+(0.02610)Phe+(0.01990)Cit+(-0.04003)Trp
32	0.596	(-2.100)+(0.003793)Ala+(-0.01318)Ser+(0.01079)Leu+(0.005490)Orn+(0.02887)Phe+(-0.04455)Trp
33	0.599	(-3.339)+(0.004201)Ala+(0.01445)Leu+(0.01970)Cit+(-0.03462)Trp
34	0.611	(-1.932)+(0.004369)Ala+(-0.01085)Ser+(-0.002522)Val+(0.01668)Leu+(0.01970)Cit+(-0.03298)Trp
35	0.591	(-2.247)+(0.003781)Ala+(-0.01287)Ser+(0.01182)Leu+(0.0006424)Gln+(0.02844)Phe+(-0.04510)Trp
36	0.594	(-2.068)+(0.003237)Ala+(-0.01225)Ser+(0.002195)Pro+(0.01892)Ile+(0.03136)Phe+(-0.04462)Trp
37	0.591	(-2.089)+(0.003476)Ala+(-0.01180)Ser+(0.01622)Ile+(0.003657)Leu+(0.03148)Phe+(-0.04632)Trp
38	0.616	(-2.072)+(0.003886)Ala+(-0.01111)Ser+(0.002108)Pro+(0.01288)Leu+(0.01882)Cit+(-0.03335)Trp
39	0.593	(-2.084)+(0.003522)Ala+(-0.01239)Ser+(0.02039)Ile+(0.03133)Phe+(0.001650)Arg+(-0.04519)Trp
40	0.590	(-1.192)+(0.003615)Ala+(-0.01470)Ser+(0.01335)Leu+(0.04178)Met+(-0.04172)Trp
41	0.581	(-3.552)+(0.003907)Ala+(0.02010)Ile+(0.002349)Lys+(0.03376)Phe+(-0.008799)Tyr+(-0.04309)Trp
42	0.603	(-3.589)+(0.004121)Ala+(0.01310)Leu+(0.002663)Lys+(0.01917)Cit+(-0.03528)Trp
43	0.611	(-1.585)+(0.003371)Ala+(-0.01286)Ser+(0.003088)Pro+(0.01817)Ile+(0.005661)Lys+(-0.03702)Trp
44	0.588	(-1.982)+(0.003308)Ala+(-0.01365)Ser+(0.002962)Thr+(0.01989)Ile+(0.03137)Phe+(-0.04587)Trp
45	0.586	(-3.630)+(0.003891)Ala+(0.01313)Leu+(0.02446)Phe+(-0.007509)Arg+(0.02237)Cit+(-0.04104)Trp
46	0.613	(-2.316)+(0.004137)Ala+(-0.01180)Ser+(0.01369)Leu+(0.0007681)Gln+(0.01820)Cit+(-0.03382)Trp
47	0.611	(-1.626)+(0.003538)Ala+(-0.01297)Ser+(0.003661)Pro+(0.01045)Leu+(0.005057)Lys+(-0.03760)Trp
48	0.595	(-3.377)+(0.004103)Ala+(0.01395)Leu+(-0.01317)His+(0.02496)Phe+(0.01670)Cit+(-0.04070)Trp
49	0.613	(-1.962)+(0.004234)Ala+(-0.01042)Ser+(0.01426)Leu+(-0.003358)His+(0.02042)Cit+(-0.03326)Trp
50	0.592	(-3.808)+(0.003643)Ala+(0.02164)Ile+(0.02414)Phe+(0.01459)Cit+(-0.04128)Trp

[図61]

No.	ROC_AUC	FORMULA
51	0.592	(−1.932)+(0.003612)Ala+(−0.01187)Ser+(−0.001512)Val+(0.02326)Ile+(0.03200)Phe+(−0.04462)Trp
52	0.596	(−1.436)+(0.003601)Ala+(−0.01548)Ser+(0.01157)Leu+(0.003841)Lys+(0.03564)Met+(−0.04193)Trp
53	0.610	(−1.571)+(0.003731)Ala+(−0.01320)Ser+(0.02038)Ile+(0.007247)Orn+(0.004025)Lys+(−0.03671)Trp
54	0.604	(−1.940)+(0.003988)Ala+(−0.01361)Ser+(0.01227)Leu+(0.001097)Gln+(0.004305)Lys+(−0.03813)Trp
55	0.595	(−3.471)+(0.003991)Ala+(0.02170)Ile+(−0.01977)Asn+(0.02821)Phe+(0.01891)Cit+(−0.03981)Trp
56	0.597	(−1.415)+(0.003395)Ala+(−0.01517)Ser+(0.01951)Ile+(0.004634)Lys+(0.03213)Met+(−0.04077)Trp
57	0.612	(−2.061)+(0.004236)Ala+(−0.01037)Ser+(0.01388)Leu+(−0.002563)Asn+(0.02067)Cit+(−0.03331)Trp
58	0.579	(−3.108)+(0.003666)Ala+(0.02270)Ile+(−0.009941)Asn+(0.03224)Phe+(−0.04551)Trp
59	0.607	(−1.342)+(0.004329)Ala+(−0.01258)Ser+(−0.003920)Val+(0.01652)Leu+(0.005265)Lys+(−0.03762)Trp
60	0.606	(−1.844)+(0.003739)Ala+(−0.01343)Ser+(0.02043)Ile+(0.0009411)Gln+(0.005145)Lys+(−0.03732)Trp
61	0.611	(−1.373)+(0.003841)Ala+(−0.01257)Ser+(0.02176)Ile+(0.01125)Orn+(−0.03481)Trp
62	0.602	(−1.321)+(0.003426)Ala+(−0.01574)Ser+(0.01992)Ile+(0.009658)Orn+(0.03459)Met+(−0.03841)Trp
63	0.597	(−3.279)+(−0.002446)Gly+(0.003734)Ala+(0.02048)Ile+(0.02483)Phe+(0.01635)Cit+(−0.04200)Trp
64	0.580	(−3.529)+(0.003788)Ala+(0.01191)Leu+(0.001860)Lys+(0.02662)Phe+(−0.04613)Trp
65	0.604	(−1.239)+(0.004376)Ala+(−0.01264)Ser+(−0.003295)Val+(0.01648)Leu+(0.009532)Orn+(−0.03514)Trp
66	0.590	(−2.191)+(0.001057)Gly+(0.003750)Ala+(−0.01317)Ser+(0.01207)Leu+(0.03051)Phe+(−0.04544)Trp
67	0.591	(−1.956)+(0.003914)Ala+(−0.01211)Ser+(−0.001526)Val+(0.01355)Leu+(0.03025)Phe+(−0.04532)Trp
68	0.606	(−1.498)+(0.003748)Ala+(−0.01232)Ser+(0.02101)Ile+(0.005673)Lys+(−0.03796)Trp
69	0.581	(−3.424)+(0.003383)Ala+(0.02150)Ile+(0.003131)Lys+(0.02920)Phe+(−0.003131)Arg+(−0.04682)Trp
70	0.608	(−1.566)+(0.004050)Ala+(−0.01316)Ser+(0.01154)Leu+(0.006189)Orn+(0.003687)Lys+(−0.03732)Trp
71	0.612	(−2.072)+(0.004136)Ala+(−0.01089)Ser+(0.01384)Leu+(0.01996)Cit+(0.0007241)Tyr+(−0.03403)Trp
72	0.612	(−1.788)+(0.003645)Ala+(−0.01342)Ser+(0.02045)Ile+(0.02866)Met+(0.01724)Cit+(−0.03515)Trp
73	0.594	(−2.093)+(0.003409)Ala+(−0.01256)Ser+(0.002810)Pro+(0.01062)Leu+(0.02975)Phe+(−0.04487)Trp
74	0.588	(−1.983)+(0.003613)Ala+(−0.01382)Ser+(0.002800)Thr+(0.01113)Leu+(0.03014)Phe+(−0.04614)Trp
75	0.582	(−3.325)+(0.003621)Ala+(0.02133)Ile+(−0.01230)Asn+(0.003016)Lys+(0.03071)Phe+(−0.04608)Trp

[図62]

No.	ROC_AUC	FORMULA
76	0.606	(−1.825)+(0.004070)Ala+(−0.01365)Ser+(0.01284)Leu+(0.007789)Orn+(0.001087)Gln+(−0.03606)Trp
77	0.590	(−2.799)+(0.004097)Ala+(0.01368)Leu+(0.003309)Lys+(−0.03915)Trp
78	0.616	(−1.893)+(0.004022)Ala+(−0.01052)Ser+(0.02204)Ile+(0.01944)Cit+(−0.03195)Trp
79	0.580	(−2.932)+(0.003961)Ala+(0.01388)Leu+(−0.01066)His+(0.03047)Phe+(−0.04562)Trp
80	0.581	(−3.093)+(0.003613)Ala+(0.02269)Ile+(−0.005577)His+(0.03102)Phe+(−0.04503)Trp
81	0.581	(−3.428)+(0.003492)Ala+(0.02220)Ile+(0.002439)Orn+(0.02825)Phe+(−0.04507)Trp
82	0.589	(−1.944)+(0.003626)Ala+(−0.01347)Ser+(0.01161)Leu+(0.01518)Met+(0.02739)Phe+(−0.04650)Trp
83	0.605	(−2.891)+(−0.001931)Gly+(0.004295)Ala+(0.01372)Leu+(0.02118)Cit+(−0.03476)Trp
84	0.612	(−1.470)+(0.003714)Ala+(−0.01281)Ser+(0.003065)Pro+(0.01154)Leu+(0.008478)Orn+(−0.03534)Trp
85	0.595	(−3.095)+(0.004198)Ala+(0.01502)Leu+(−0.005756)Arg+(0.02531)Cit+(−0.03370)Trp
86	0.585	(−3.210)+(0.003600)Ala+(0.02118)Ile+(0.003482)Lys+(−0.009970)His+(0.02973)Phe+(−0.04526)Trp
87	0.598	(−1.340)+(0.003965)Ala+(−0.01388)Ser+(0.002534)Thr+(0.01236)Leu+(0.008354)Orn+(−0.03657)Trp
88	0.591	(−4.010)+(0.003884)Ala+(0.01186)Leu+(0.001622)Lys+(0.02095)Phe+(0.01542)Cit+(−0.04156)Trp
89	0.605	(−1.315)+(0.003684)Ala+(−0.01108)Ser+(0.003585)Pro+(0.01312)Leu+(−0.03657)Trp
90	0.580	(−3.449)+(0.003534)Ala+(0.002158)Pro+(0.01195)Leu+(0.02674)Phe+(−0.04526)Trp
91	0.576	(−3.361)+(0.004287)Ala+(0.01173)Leu+(0.03394)Phe+(−0.008510)Tyr+(−0.04305)Trp
92	0.586	(−3.865)+(0.004367)Ala+(0.01159)Leu+(0.02803)Phe+(0.01539)Cit+(−0.008284)Tyr+(−0.03858)Trp
93	0.589	(−3.901)+(0.003760)Ala+(0.001165)Pro+(0.01216)Leu+(0.02164)Phe+(0.01492)Cit+(−0.04127)Trp
94	0.597	(−1.212)+(0.004187)Ala+(−0.010051)Ser+(0.01480)Leu+(−0.03762)Trp
95	0.579	(−3.404)+(0.003823)Ala+(0.01262)Leu+(0.0008992)Orn+(0.02738)Phe+(−0.04579)Trp
96	0.594	(−1.603)+(0.003636)Ala+(−0.01541)Ser+(0.01329)Leu+(0.0009647)Gln+(0.03551)Met+(−0.04075)Trp
97	0.606	(−1.364)+(0.004106)Ala+(−0.01204)Ser+(0.01263)Leu+(0.005506)Lys+(−0.004908)His+(−0.03828)Trp
98	0.587	(−3.048)+(0.003945)Ala+(0.01273)Leu+(0.003276)Lys+(−0.01434)His+(0.02939)Phe+(−0.04563)Trp
99	0.581	(−2.960)+(−0.001592)Gly+(0.003552)Ala+(0.02185)Ile+(0.03023)Phe+(−0.04638)Trp
100	0.579	(−3.295)+(0.003932)Ala+(−0.001411)Val+(0.01444)Leu+(0.02719)Phe+(−0.04546)Trp

[図63]

No.	ROC_AUC	FORMULA
1	0.650	(−1.1311)+(0.0010)Ala+(0.0087)Glu+(0.1405)3−MeHis+(−0.0040)Cit+(−0.0091)Trp+(0.0067)Cys
2	0.660	(−0.9546)+(0.0012)Ala+(0.0086)Glu+(−0.0061)His+(0.1334)3−MeHis+(−0.0074)Trp+(0.0068)Cys
3	0.648	(−1.0526)+(0.0036)Leu+(−0.0065)Orn+(0.0092)Glu+(0.1318)3−MeHis+(−0.0097)Trp+(0.0099)Cys
4	0.646	(−1.1064)+(0.0011)Ala+(−0.0045)Orn+(0.0102)Glu+(0.0073)Phe+(0.1444)3−MeHis+(−0.0105)Trp
5	0.650	(−1.1573)+(−0.0057)Orn+(0.0089)Glu+(0.0934) α−AAA+(0.1465)3−MeHis+(0.0083)Cys
6	0.644	(−1.0363)+(0.0010)Ala+(0.0097)Glu+(0.0102)Met+(0.1452)3−MeHis+(−0.0019)Arg+(−0.0091)Trp
7	0.661	(−0.9298)+(0.0103)Glu+(0.1462)3−MeHis+(−0.0047)Cit+(−0.0070)Trp+(0.0078)Cys
8	0.661	(−0.8842)+(−0.0047)Orn+(0.0092)Glu+(−0.0048)His+(0.0923) α−AAA+(0.1478)3−MeHis+(0.0088)Cys
9	0.642	(−1.3307)+(0.0006)Ala+(−0.0057)Orn+(0.0077)Glu+(0.0864) α−AAA+(0.1469)3−MeHis+(0.0074)Cys
10	0.656	(−1.2341)+(0.0011)Ala+(−0.0003)Thr+(0.0087)Glu+(0.1265)3−MeHis+(−0.0088)Trp+(0.0062)Cys
11	0.650	(−1.1064)+(−0.0012)Lys+(0.0083)Glu+(0.1191) α−AAA+(0.1493)3−MeHis+(−0.0051)Cit+(0.0083)Cys
12	0.652	(−1.2602)+(0.0010)Ala+(0.0036)Hypro+(0.0090)Glu+(0.1208)3−MeHis+(−0.0090)Trp+(0.0058)Cys
13	0.660	(−1.0302)+(0.0057) α−ABA+(0.0101)Glu+(0.1422)3−MeHis+(−0.0046)Cit+(−0.0073)Trp+(0.0080)Cys
14	0.648	(−1.3577)+(0.0008)Ala+(0.0046)Ile+(0.0079)Glu+(0.1189)3−MeHis+(−0.0105)Trp+(0.0062)Cys
15	0.651	(−0.9131)+(0.0009)Ala+(−0.0030)Tau+(0.0078)Glu+(−0.0086)His+(0.1485)3−MeHis+(0.0068)Cys
16	0.647	(−1.1848)+(0.0316)Sar+(−0.0063)Orn+(0.0091)Glu+(0.0861) α−AAA+(0.1423)3−MeHis+(0.0084)Cys
17	0.654	(−1.1845)+(0.0011)Ala+(−0.0022)Asn+(0.0085)Glu+(0.1278)3−MeHis+(−0.0086)Trp+(0.0063)Cys
18	0.639	(−1.3520)+(0.0006)Ala+(0.0066)Glu+(0.0912) α−AAA+(0.1384)3−MeHis+(−0.0026)Arg+(0.0066)Cys
19	0.651	(−1.2238)+(−0.0060)Orn+(0.0001)Gln+(0.0091)Glu+(0.0793) α−AAA+(0.1472)3−MeHis+(0.0082)Cys
20	0.655	(−1.2217)+(0.0012)Ala+(−0.0006)Pro+(0.0088)Glu+(0.1304)3−MeHis+(−0.0087)Trp+(0.0062)Cys
21	0.649	(−1.2450)+(0.0050) α−ABA+(−0.0061)Orn+(0.0088)Glu+(0.0794) α−AAA+(0.1454)3−MeHis+(0.0084)Cys
22	0.650	(−1.2322)+(0.0011)Ala+(0.0094)Glu+(0.0548) α−AAA+(0.0051)Phe+(0.1292)3−MeHis+(−0.0100)Trp
23	0.639	(−1.3046)+(0.0006)Ala+(−0.0057)Orn+(−0.0273)Asp+(0.0090)Glu+(0.1526)3−MeHis+(0.0072)Cys
24	0.663	(−0.9436)+(0.0012)Thr+(0.0092)Glu+(−0.0081)His+(0.0876) α−AAA+(0.1400)3−MeHis+(0.0068)Cys
25	0.646	(−1.1212)+(−0.0057)Orn+(−0.0295)Asp+(0.0104)Glu+(0.1527)3−MeHis+(0.0081)Cys

[図64]

No.	ROC_AUC	FORMULA
26	0.653	(-0.7662)+(0.0013)Ala+(-0.0027)Orn+(0.0095)Glu+(-0.0035)His+(0.1576)3-MeHis+(-0.0069)Trp
27	0.653	(-1.0689)+(0.0012)Ala+(0.0061)Asp+(0.0088)Glu+(0.0785) α -AAA+(0.1372)3-MeHis+(-0.0082)Trp
28	0.648	(-1.3402)+(0.0009)Ala+(0.0018)Leu+(0.0082)Glu+(0.1199)3-MeHis+(-0.0102)Trp+(0.0063)Cys
29	0.643	(-0.9266)+(0.0012)Ala+(0.0070)Hypro+(-0.0039)Orn+(0.0099)Glu+(0.1444)3-MeHis+(-0.0080)Trp
30	0.650	(-0.8670)+(0.0018)Thr+(0.0092)Glu+(-0.0075)His+(0.1516)3-MeHis+(-0.0023)Arg+(0.0074)Cys
31	0.654	(-1.0831)+(0.0106)Glu+(0.0055)Phe+(0.1400)3-MeHis+(-0.0050)Cit+(-0.0092)Trp+(0.0066)Cys
32	0.635	(-1.3761)+(0.0006)Ala+(0.0006)Leu+(-0.0058)Orn+(0.0078)Glu+(0.1527)3-MeHis+(0.0072)Cys
33	0.647	(-1.2333)+(0.0057) α -ABA+(-0.0060)Orn+(-0.0180)Asp+(0.0098)Glu+(0.1507)3-MeHis+(0.0083)Cys
34	0.665	(-0.8434)+(-0.0018)Ser+(0.0096)Glu+(0.0968) α -AAA+(0.1182)3-MeHis+(-0.0068)Trp+(0.0076)Cys
35	0.652	(-1.1246)+(0.0011)Ala+(0.0095)Glu+(0.0053)Met+(0.0639) α -AAA+(0.1355)3-MeHis+(-0.0089)Trp
36	0.655	(-0.8018)+(-0.0049)Orn+(0.0123)Glu+(0.0154)Met+(-0.0080)1-MeHis+(0.1667)3-MeHis+(-0.0077)Trp
37	0.661	(-0.8189)+(-0.0004)Ser+(-0.0053)Orn+(0.0107)Glu+(0.1419)3-MeHis+(-0.0066)Trp+(0.0091)Cys
38	0.655	(-1.0502)+(0.0009)Ala+(0.0075)Glu+(-0.0084)His+(-0.0068)1-MeHis+(0.1539)3-MeHis+(0.0062)Cys
39	0.647	(-1.1923)+(0.0160)Sar+(0.0080)Glu+(0.0946) α -AAA+(0.1353)3-MeHis+(-0.0027)Arg+(0.0075)Cys
40	0.641	(-0.9820)+(0.0011)Ala+(0.0019)Leu+(-0.0039)Orn+(0.0090)Glu+(0.1503)3-MeHis+(-0.0091)Trp
41	0.632	(-1.3504)+(0.0006)Ala+(0.0050)Hypro+(-0.0059)Orn+(0.0082)Glu+(0.1467)3-MeHis+(0.0069)Cys
42	0.648	(-1.0770)+(0.0011)Ala+(-0.0031)Asn+(0.0096)Glu+(0.0090)Met+(0.1415)3-MeHis+(-0.0089)Trp
43	0.638	(-1.1164)+(0.0423)Sar+(-0.0055)Orn+(0.0092)Glu+(0.1485)3-MeHis+(-0.0014)Arg+(0.0086)Cys
44	0.644	(-1.2022)+(0.0064) α -ABA+(-0.0053)Orn+(0.0088)Glu+(0.1519)3-MeHis+(-0.0012)Arg+(0.0086)Cys
45	0.647	(-1.1584)+(0.0011)Ala+(0.0040)Hypro+(0.0099)Glu+(0.0055)Met+(0.1333)3-MeHis+(-0.0090)Trp
46	0.658	(-0.9544)+(0.0242)Sar+(0.0104)Glu+(0.1414)3-MeHis+(-0.0047)Cit+(-0.0072)Trp+(0.0078)Cys
47	0.643	(-1.1559)+(0.0366)Sar+(-0.0063)Orn+(-0.0271)Asp+(0.0104)Glu+(0.1473)3-MeHis+(0.0082)Cys
48	0.648	(-1.0505)+(0.0011)Ala+(0.0078)Glu+(-0.0076)His+(0.1433)3-MeHis+(-0.0020)Tyr+(0.0067)Cys
49	0.650	(-1.1072)+(-0.0002)Gly+(-0.0057)Orn+(0.0087)Glu+(0.0934) α -AAA+(0.1464)3-MeHis+(0.0084)Cys
50	0.643	(-1.2902)+(0.0060) α -ABA+(0.0004)Thr+(-0.0063)Orn+(0.0092)Glu+(0.1521)3-MeHis+(0.0080)Cys

[図65]

No.	ROC_AUC	FORMULA
51	0.637	(−1.2891)+(0.0336)Sar+(0.0011)Leu+(−0.0065)Orn+(0.0088)Glu+(0.1468)3−MeHis+(0.0082)Cys
52	0.661	(−0.8738)+(−0.0003)Gly+(0.0101)Glu+(0.1456)3−MeHis+(−0.0045)Cit+(−0.0070)Trp+(0.0080)Cys
53	0.650	(−0.9672)+(0.0012)Ala+(0.0088)Glu+(0.0774) α −AAA+(0.1416)3−MeHis+(−0.0012)Arg+(−0.0078)Trp
54	0.640	(−1.0033)+(0.0010)Ala+(0.0047)Ile+(−0.0038)Orn+(0.0088)Glu+(0.1490)3−MeHis+(−0.0094)Trp
55	0.670	(−0.9066)+(0.0066) α −ABA+(0.0104)Glu+(−0.0051)His+(0.1318)3−MeHis+(−0.0056)Trp+(0.0080)Cys
56	0.653	(−1.0700)+(0.0009)Ala+(−0.0001)Val+(0.0077)Glu+(−0.0083)His+(0.1469)3−MeHis+(0.0062)Cys
57	0.649	(−0.9893)+(0.0009)Ala+(−0.0009)Ser+(0.0074)Glu+(−0.0079)His+(0.1445)3−MeHis+(0.0063)Cys
58	0.642	(−1.1710)+(0.0408)Sar+(−0.0002)Pro+(−0.0062)Orn+(0.0096)Glu+(0.1490)3−MeHis+(0.0082)Cys
59	0.665	(−0.7193)+(−0.0350)EtOHNH2+(−0.0045)Orn+(0.0122)Glu+(0.0194)Met+(0.1639)3−MeHis+(−0.0078)Trp
60	0.634	(−1.3370)+(0.0007)Ala+(−0.0263)Asp+(0.0080)Glu+(0.1444)3−MeHis+(−0.0025)Arg+(0.0064)Cys
61	0.646	(−1.2456)+(0.0067) α −ABA+(−0.0008)Asn+(−0.0059)Orn+(0.0091)Glu+(0.1509)3−MeHis+(0.0083)Cys
62	0.656	(−0.7357)+(0.0013)Ala+(−0.0009)Ser+(0.0090)Glu+(−0.0044)His+(0.1481)3−MeHis+(−0.0069)Trp
63	0.646	(−1.2510)+(0.0068) α −ABA+(−0.0003)Pro+(−0.0060)Orn+(0.0092)Glu+(0.1523)3−MeHis+(0.0083)Cys
64	0.662	(−0.9362)+(0.0002)Pro+(0.0099)Glu+(0.1332)3−MeHis+(−0.0021)Arg+(−0.0065)Trp+(0.0081)Cys
65	0.642	(−1.3229)+(0.0055) α −ABA+(0.0008)Leu+(−0.0062)Orn+(0.0087)Glu+(0.1501)3−MeHis+(0.0082)Cys
66	0.655	(−0.8685)+(−0.0028)Ser+(0.0104)Glu+(0.0125)Met+(0.1205)3−MeHis+(−0.0087)Trp+(0.0062)Cys
67	0.644	(−1.0887)+(−0.0049)Orn+(0.0091)Glu+(0.1548)3−MeHis+(−0.0013)Arg+(0.0084)Cys
68	0.645	(−1.3174)+(0.0064) α −ABA+(−0.0061)Orn+(0.0091)Glu+(0.0012)Phe+(0.1505)3−MeHis+(0.0079)Cys
69	0.648	(−1.2115)+(−0.0002)Val+(0.0084)Glu+(0.0991) α −AAA+(0.1498)3−MeHis+(−0.0048)Cit+(0.0069)Cys
70	0.661	(−0.9739)+(0.0022)Asn+(0.0102)Glu+(0.1340)3−MeHis+(−0.0023)Arg+(−0.0067)Trp+(0.0080)Cys
71	0.650	(−0.9353)+(−0.0062)Orn+(0.0017)Lys+(0.0122)Glu+(0.0123)Met+(0.1574)3−MeHis+(−0.0085)Trp
72	0.633	(−1.3828)+(0.0006)Ala+(0.0071)Glu+(0.0016)Met+(0.1457)3−MeHis+(−0.0026)Arg+(0.0062)Cys
73	0.659	(−0.9968)+(−0.0241)EtOHNH2+(0.0010)Ala+(0.0072)Glu+(−0.0076)His+(0.1519)3−MeHis+(0.0060)Cys
74	0.672	(−0.9106)+(0.0088)Glu+(−0.0067)His+(0.0888) α −AAA+(−0.0070)1−MeHis+(0.1456)3−MeHis+(0.0074)Cys
75	0.641	(−1.2077)+(0.0008)Thr+(−0.0062)Orn+(0.0095)Glu+(0.1554)3−MeHis+(0.0076)Cys

[図66]

No.	ROC_AUC	FORMULA
76	0.646	(−1.0714)+(0.0011)Ala+(0.0011)Lys+(0.0088)Glu+(0.1451)3−MeHis+(−0.0017)Arg+(−0.0084)Trp
77	0.649	(−0.9145)+(−0.0043)Tau+(−0.0066)Orn+(0.0091)Glu+(0.1047) α −AAA+(0.1496)3−MeHis+(0.0094)Cys
78	0.633	(−1.2717)+(0.0007)Ala+(−0.0048)Orn+(0.0076)Glu+(0.1546)3−MeHis+(−0.0013)Arg+(0.0075)Cys
79	0.637	(−1.3149)+(0.0008)Ala+(−0.0006)Pro+(−0.0054)Orn+(0.0080)Glu+(0.1570)3−MeHis+(0.0072)Cys
80	0.653	(−1.1131)+(0.0011)Ala+(0.0004)Lys+(0.0090)Glu+(0.0672) α −AAA+(0.1363)3−MeHis+(−0.0084)Trp
81	0.660	(−0.8657)+(0.0027)Asn+(0.0094)Glu+(−0.0075)His+(0.1633)3−MeHis+(−0.0051)Cit+(0.0077)Cys
82	0.661	(−0.9434)+(0.0155) β −AIBA+(0.0104)Glu+(0.1406)3−MeHis+(−0.0049)Cit+(−0.0068)Trp+(0.0077)Cys
83	0.637	(−1.3411)+(0.0007)Ala+(−0.0056)Orn+(0.0080)Glu+(0.0000)Phe+(0.1537)3−MeHis+(0.0071)Cys
84	0.657	(−1.2097)+(0.0024)Leu+(0.0090)Glu+(0.0794) α −AAA+(0.1139)3−MeHis+(−0.0089)Trp+(0.0075)Cys
85	0.648	(−1.2395)+(0.0033) α −ABA+(0.0079)Glu+(0.0889) α −AAA+(0.1367)3−MeHis+(−0.0026)Arg+(0.0075)Cys
86	0.666	(−0.8051)+(−0.0116)EtOHNH2+(−0.0053)Orn+(0.0107)Glu+(0.1459)3−MeHis+(−0.0063)Trp+(0.0091)Cys
87	0.640	(−1.2922)+(0.0066) α −ABA+(0.0060)Hypro+(−0.0064)Orn+(0.0093)Glu+(0.1426)3−MeHis+(0.0080)Cys
88	0.673	(−0.8169)+(0.0101)Glu+(−0.0046)His+(0.0916) α −AAA+(0.1279)3−MeHis+(−0.0055)Trp+(0.0080)Cys
89	0.653	(−1.1671)+(0.0138) β −AIBA+(−0.0057)Orn+(0.0091)Glu+(0.0906) α −AAA+(0.1403)3−MeHis+(0.0081)Cys
90	0.647	(−1.2004)+(0.0010)Ala+(0.0013)Leu+(0.0093)Glu+(0.0059)Met+(0.1361)3−MeHis+(−0.0098)Trp
91	0.646	(−1.0792)+(−0.0002)Gly+(−0.0056)Orn+(−0.0288)Asp+(0.0102)Glu+(0.1526)3−MeHis+(0.0082)Cys
92	0.672	(−0.8234)+(0.0326)Sar+(0.0107)Glu+(−0.0051)His+(0.1296)3−MeHis+(−0.0055)Trp+(0.0078)Cys
93	0.636	(−1.3975)+(0.0046) α −ABA+(0.0032)Ile+(−0.0062)Orn+(0.0080)Glu+(0.1492)3−MeHis+(0.0080)Cys
94	0.636	(−1.3456)+(0.0006)Ala+(0.0001)Thr+(−0.0057)Orn+(0.0081)Glu+(0.1540)3−MeHis+(0.0070)Cys
95	0.652	(−0.8118)+(−0.0046)Orn+(−0.0132)Asp+(0.0130)Glu+(0.0147)Met+(0.1572)3−MeHis+(−0.0077)Trp
96	0.638	(−1.2032)+(0.0338)Sar+(0.0049)Hypro+(−0.0065)Orn+(0.0096)Glu+(0.1418)3−MeHis+(0.0079)Cys
97	0.647	(−0.8135)+(−0.0003)Gly+(0.0114)Glu+(0.0161)Met+(0.1496)3−MeHis+(−0.0021)Arg+(−0.0078)Trp
98	0.651	(−1.0886)+(0.0012)Ala+(0.0051)Hypro+(0.0093)Glu+(−0.0057)1−MeHis+(0.1400)3−MeHis+(−0.0082)Trp
99	0.648	(−0.8713)+(0.0116)Glu+(0.0156)Met+(0.1498)3−MeHis+(−0.0023)Arg+(−0.0077)Trp
100	0.646	(−0.8383)+(0.0012)Ala+(−0.0013)Ser+(0.0089)Glu+(0.1505)3−MeHis+(−0.0024)Cit+(−0.0081)Trp

[図67]

No.	ROC_AUC	FORMULA
1	0.595	(−0.9587)+(0.0013)Ala+(−0.0049)Ser+(0.0074)Ile+(0.0014)Lys+(0.0116)Phe+(−0.0173)Trp
2	0.597	(−0.9143)+(0.0014)Ala+(−0.0050)Ser+(0.0077)Ile+(0.0025)Orn+(0.0115)Phe+(−0.0166)Trp
3	0.589	(−0.8985)+(0.0014)Ala+(−0.0045)Ser+(0.0067)Ile+(0.0012)Leu+(0.0124)Phe+(−0.0173)Trp
4	0.616	(−0.9871)+(0.0016)Ala+(−0.0047)Ser+(0.0045)Leu+(0.0017)Lys+(0.0081)Cit+(−0.0133)Trp
5	0.610	(−0.7084)+(0.0013)Ala+(−0.0049)Ser+(0.0013)Pro+(0.0073)Ile+(0.0021)Lys+(−0.0141)Trp
6	0.599	(−1.0657)+(0.0015)Ala+(−0.0046)Ser+(0.0044)Leu+(0.0096)Phe+(0.0065)Cit+(−0.0156)Trp
7	0.588	(−0.8227)+(0.0015)Ala+(−0.0044)Ser+(0.0048)Leu+(−0.0022)His+(0.0127)Phe+(−0.0171)Trp
8	0.595	(−0.6425)+(0.0013)Ala+(−0.0057)Ser+(0.0079)Ile+(0.0017)Lys+(0.0122)Met+(−0.0154)Trp
9	0.592	(−0.8939)+(0.0013)Ala+(−0.0049)Ser+(0.0012)Pro+(0.0041)Leu+(0.0117)Phe+(−0.0169)Trp
10	0.597	(−0.6288)+(0.0016)Ala+(−0.0053)Ser+(0.0010)Thr+(0.0049)Leu+(0.0035)Orn+(−0.0140)Trp
11	0.585	(−0.8513)+(0.0014)Ala+(−0.0051)Ser+(0.0045)Leu+(0.0052)Met+(0.0110)Phe+(−0.0175)Trp
12	0.612	(−0.8931)+(0.0017)Ala+(−0.0043)Ser+(0.0053)Leu+(0.0004)Orn+(0.0082)Cit+(−0.0129)Trp
13	0.606	(−0.7172)+(0.0016)Ala+(−0.0050)Ser+(0.0045)Leu+(0.0027)Orn+(0.0013)Lys+(−0.0141)Trp
14	0.611	(−0.6680)+(0.0015)Ala+(−0.0050)Ser+(0.0013)Pro+(0.0045)Leu+(0.0034)Orn+(−0.0135)Trp
15	0.611	(−0.7854)+(0.0014)Ala+(−0.0052)Ser+(0.0082)Ile+(0.0106)Met+(0.0074)Cit+(−0.0134)Trp
16	0.607	(−0.6679)+(0.0015)Ala+(−0.0048)Ser+(0.0068)Ile+(0.0016)Leu+(0.0042)Orn+(−0.0137)Trp
17	0.585	(−0.8593)+(0.0014)Ala+(−0.0053)Ser+(0.0011)Thr+(0.0043)Leu+(0.0119)Phe+(−0.0174)Trp
18	0.580	(−1.3820)+(0.0014)Ala+(0.0085)Ile+(−0.0047)Asn+(0.0011)Lys+(0.0121)Phe+(−0.0175)Trp
19	0.602	(−0.7008)+(0.0016)Ala+(−0.0047)Ser+(0.0049)Leu+(0.0019)Lys+(0.0005)Tyr+(−0.0149)Trp
20	0.588	(−0.8919)+(0.0015)Ala+(−0.0047)Ser+(0.0045)Leu+(0.0005)Asn+(0.0121)Phe+(−0.0173)Trp
21	0.583	(−1.3373)+(0.0014)Ala+(0.0084)Ile+(0.0013)Lys+(−0.0040)His+(0.0118)Phe+(−0.0171)Trp
22	0.594	(−0.5818)+(0.0013)Ala+(−0.0057)Ser+(0.0012)Pro+(0.0048)Leu+(0.0142)Met+(−0.0154)Trp
23	0.603	(−0.6566)+(0.0017)Ala+(−0.0047)Ser+(0.0055)Leu+(0.0020)Arg+(−0.0143)Trp+(−0.0024)Tyr
24	0.586	(−1.5798)+(0.0017)Ala+(0.0045)Leu+(0.0111)Phe+(0.0065)Cit+(−0.0036)Tyr+(−0.0147)Trp
25	0.576	(−1.3576)+(0.0016)Ala+(0.0085)Ile+(0.0147)Phe+(−0.0006)Arg+(−0.0038)Tyr+(−0.0163)Trp

[図68]

No.	ROC_AUC	FORMULA
26	0.589	(-0.5758)+(0.0014)Ala+(-0.0058)Ser+(0.0053)Leu+(0.0011)Asn+(0.0153)Met+(-0.0158)Trp
27	0.576	(-1.4261)+(0.0013)Ala+(0.0085)Ile+(0.0012)Lys+(0.0115)Phe+(-0.0012)Arg+(-0.0177)Trp
28	0.604	(-0.6830)+(0.0016)Ala+(-0.0052)Ser+(0.0050)Leu+(0.0026)Asn+(0.0036)Orn+(-0.0139)Trp
29	0.590	(-0.5653)+(0.0014)Ala+(-0.0055)Ser+(0.0053)Ile+(0.0027)Leu+(0.0151)Met+(-0.0157)Trp
30	0.603	(-0.7118)+(0.0015)Ala+(-0.0050)Ser+(0.0083)Ile+(0.0026)Asn+(0.0020)Lys+(-0.0145)Trp
31	0.588	(-1.5508)+(0.0016)Ala+(0.0080)Ile+(0.0119)Phe+(0.0060)Cit+(-0.0038)Tyr+(-0.0146)Trp
32	0.598	(-0.6588)+(0.0015)Ala+(-0.0050)Ser+(0.0008)Thr+(0.0083)Ile+(0.0019)Lys+(-0.0145)Trp
33	0.603	(-0.6487)+(0.0017)Ala+(-0.0045)Ser+(0.0050)Leu+(0.0021)Lys+(-0.0017)His+(-0.0145)Trp
34	0.579	(-1.4771)+(0.0014)Ala+(0.0085)Ile+(0.0000)Gln+(0.0009)Lys+(0.0109)Phe+(-0.0175)Trp
35	0.586	(-0.5489)+(0.0014)Ala+(-0.0059)Ser+(0.0007)Thr+(0.0052)Leu+(0.0149)Met+(-0.0158)Trp
36	0.600	(-1.1554)+(-0.0008)Gly+(0.0018)Ala+(-0.0013)Val+(0.0069)Leu+(0.0087)Cit+(-0.0130)Trp
37	0.584	(-1.2870)+(0.0016)Ala+(0.0050)Leu+(0.0013)Lys+(-0.0057)His+(0.0117)Phe+(-0.0172)Trp
38	0.611	(-0.7989)+(0.0015)Ala+(-0.0048)Ser+(0.0011)Thr+(0.0085)Ile+(0.0079)Cit+(-0.0126)Trp
39	0.596	(-0.5762)+(0.0014)Ala+(-0.0052)Ser+(0.0014)Pro+(0.0013)Thr+(0.0049)Leu+(-0.0143)Trp
40	0.585	(-1.4704)+(0.0014)Ala+(0.0086)Ile+(0.0011)Lys+(-0.0084)Met+(0.0129)Phe+(-0.0173)Trp
41	0.585	(-1.5562)+(0.0016)Ala+(0.0053)Leu+(-0.0024)Orn+(0.0091)Phe+(0.0077)Cit+(-0.0161)Trp
42	0.574	(-1.4353)+(0.0015)Ala+(0.0047)Leu+(0.0009)Lys+(0.0111)Phe+(-0.0009)Arg+(-0.0177)Trp
43	0.572	(-1.3800)+(0.0017)Ala+(0.0046)Leu+(0.0140)Phe+(-0.0004)Arg+(-0.0036)Tyr+(-0.0164)Trp
44	0.603	(-0.6444)+(0.0014)Ala+(-0.0049)Ser+(0.0014)Pro+(0.0051)Leu+(0.0033)Asn+(-0.0143)Trp
45	0.589	(-1.5296)+(0.0014)Ala+(0.0087)Ile+(-0.0014)Orn+(0.0098)Phe+(0.0068)Cit+(-0.0158)Trp
46	0.600	(-1.2912)+(0.0017)Ala+(0.0057)Leu+(-0.0076)Asn+(0.0073)Met+(0.0098)Cit+(-0.0133)Trp
47	0.597	(-0.4900)+(0.0017)Ala+(-0.0040)Ser+(-0.0020)Val+(0.0074)Ile+(0.0045)Leu+(-0.0138)Trp
48	0.593	(-0.6587)+(0.0014)Ala+(-0.0057)Ser+(0.0085)Ile+(0.0004)Gln+(0.0129)Met+(-0.0148)Trp
49	0.588	(-1.4500)+(0.0014)Ala+(-0.0013)Thr+(0.0085)Ile+(0.0013)Lys+(0.0113)Phe+(-0.0173)Trp
50	0.580	(-1.2995)+(0.0013)Ala+(0.0007)Pro+(0.0085)Ile+(-0.0026)His+(0.0121)Phe+(-0.0169)Trp

[図69]

No.	ROC_AUC	FORMULA
51	0.577	(-1.4761)+(0.0014)Ala+(0.0073)Ile+(0.0010)Leu+(0.0008)Lys+(0.0108)Phe+(-0.0177)Trp
52	0.601	(-0.7190)+(0.0016)Ala+(-0.0046)Ser+(0.0093)Ile+(0.0005)Gln+(-0.0135)Trp+(0.0004)Arg
53	0.583	(-1.3117)+(0.0014)Ala+(0.0088)Ile+(0.0016)Orn+(-0.0032)His+(0.0118)Phe+(-0.0167)Trp
54	0.589	(-0.4932)+(0.0014)Ala+(-0.0055)Ser+(0.0085)Ile+(0.0181)Met+(-0.0018)Tyr+(-0.0145)Trp
55	0.576	(-1.4138)+(0.0016)Ala+(0.0051)Leu+(-0.0046)Asn+(0.0002)Gln+(0.0115)Phe+(-0.0172)Trp
56	0.592	(-0.4417)+(0.0014)Ala+(-0.0055)Ser+(-0.0009)Val+(0.0104)Ile+(0.0151)Met+(-0.0146)Trp
57	0.597	(-0.7917)+(0.0017)Ala+(-0.0047)Ser+(0.0058)Leu+(0.0006)Gln+(-0.0006)His+(-0.0141)Trp
58	0.579	(-1.3133)+(0.0014)Ala+(0.0008)Pro+(0.0084)Ile+(-0.0044)Asn+(0.0125)Phe+(-0.0171)Trp
59	0.618	(-0.8214)+(0.0015)Ala+(-0.0043)Ser+(0.0007)Pro+(0.0082)Ile+(0.0078)Cit+(-0.0123)Trp
60	0.577	(-1.2854)+(0.0014)Ala+(0.0090)Ile+(-0.0021)His+(0.0126)Phe+(-0.0003)Arg+(-0.0172)Trp
61	0.603	(-1.2589)+(0.0016)Ala+(0.0007)Pro+(0.0059)Leu+(-0.0034)His+(0.0082)Cit+(-0.0129)Trp
62	0.576	(-1.3576)+(0.0015)Ala+(0.0090)Ile+(-0.0046)Asn+(0.0002)Gln+(0.0124)Phe+(-0.0171)Trp
63	0.617	(-0.8629)+(0.0016)Ala+(-0.0043)Ser+(0.0087)Ile+(0.0010)His+(0.0081)Cit+(-0.0125)Trp
64	0.583	(-1.3964)+(0.0014)Ala+(0.0008)Pro+(0.0085)Ile+(-0.0078)Met+(0.0132)Phe+(-0.0169)Trp
65	0.595	(-0.5086)+(0.0017)Ala+(-0.0043)Ser+(-0.0016)Val+(0.0078)Leu+(0.0011)Tyr+(-0.0144)Trp
66	0.582	(-1.2592)+(0.0016)Ala+(0.0053)Leu+(0.0014)Orn+(-0.0049)His+(0.0118)Phe+(-0.0169)Trp
67	0.580	(-1.4934)+(0.0014)Ala+(0.0009)Pro+(0.0043)Leu+(0.0007)Lys+(0.0102)Phe+(-0.0173)Trp
68	0.600	(-1.2251)+(0.0018)Ala+(0.0060)Leu+(-0.0045)Asn+(-0.0019)Arg+(0.0113)Cit+(-0.0125)Trp
69	0.590	(-1.5591)+(0.0014)Ala+(0.0002)Pro+(0.0083)Ile+(0.0093)Phe+(0.0059)Cit+(-0.0157)Trp
70	0.600	(-1.4871)+(0.0016)Ala+(0.0054)Leu+(-0.0035)Orn+(0.0018)Lys+(0.0098)Cit+(-0.0141)Trp
71	0.577	(-1.2495)+(0.0015)Ala+(-0.0008)Val+(0.0104)Ile+(-0.0041)Asn+(0.0127)Phe+(-0.0169)Trp
72	0.578	(-1.2506)+(0.0016)Ala+(0.0054)Leu+(-0.0023)Met+(-0.0040)His+(0.0127)Phe+(-0.0172)Trp
73	0.577	(-1.3891)+(0.0016)Ala+(0.0046)Leu+(-0.0042)Asn+(0.0009)Lys+(0.0117)Phe+(-0.0175)Trp
74	0.576	(-1.4446)+(0.0014)Ala+(0.0070)Ile+(0.0015)Leu+(0.0001)Gln+(0.0111)Phe+(-0.0176)Trp
75	0.580	(-1.1783)+(-0.0007)Gly+(0.0015)Ala+(-0.0010)Val+(0.0103)Ile+(0.0119)Phe+(-0.0171)Trp

[図70]

No.	ROC_AUC	FORMULA
76	0.577	(−1.4302)+(0.0016)Ala+(−0.0008)Val+(0.0057)Leu+(0.0008)Lys+(0.0103)Phe+(−0.0173)Trp
77	0.588	(−0.5957)+(0.0015)Ala+(−0.0054)Ser+(0.0013)Thr+(0.0054)Leu+(0.0033)Asn+(−0.0148)Trp
78	0.581	(−1.3757)+(0.0014)Ala+(0.0007)Pro+(−0.0009)Thr+(0.0085)Ile+(0.0117)Phe+(−0.0170)Trp
79	0.592	(−1.2000)+(0.0015)Ala+(0.0013)Pro+(0.0049)Leu+(−0.0021)Asn+(0.0014)Lys+(−0.0147)Trp
80	0.579	(−1.2941)+(−0.0006)Gly+(0.0014)Ala+(0.0086)Ile+(0.0001)Gln+(0.0117)Phe+(−0.0174)Trp
81	0.577	(−1.3086)+(0.0014)Ala+(−0.0007)Val+(0.0103)Ile+(0.0120)Phe+(−0.0006)Arg+(−0.0171)Trp
82	0.590	(−1.2381)+(0.0018)Ala+(−0.0012)Val+(0.0073)Leu+(−0.0025)Arg+(0.0105)Cit+(−0.0127)Trp
83	0.585	(−1.1279)+(0.0016)Ala+(−0.0020)Val+(0.0082)Ile+(0.0036)Leu+(0.0016)Lys+(−0.0146)Trp
84	0.579	(−1.4407)+(0.0014)Ala+(0.0009)Pro+(0.0047)Leu+(0.0001)Orn+(0.0106)Phe+(−0.0173)Trp
85	0.577	(−1.5104)+(0.0015)Ala+(0.0047)Leu+(0.0001)Gln+(0.0006)Lys+(0.0103)Phe+(−0.0175)Trp
86	0.586	(−1.2917)+(0.0015)Ala+(0.0010)Pro+(0.0057)Leu+(0.0003)Gln+(−0.0146)Trp+(0.0057)Cit
87	0.596	(−0.5314)+(0.0018)Ala+(−0.0042)Ser+(−0.0015)Val+(0.0075)Leu+(0.0007)His+(−0.0140)Trp
88	0.593	(−1.3882)+(0.0017)Ala+(0.0059)Leu+(0.0002)Gln+(−0.0026)Arg+(0.0102)Cit+(−0.0131)Trp
89	0.581	(−1.3126)+(0.0015)Ala+(0.0091)Ile+(−0.0056)Met+(−0.0016)His+(0.0136)Phe+(−0.0170)Trp
90	0.576	(−1.4302)+(0.0016)Ala+(−0.0007)Val+(0.0058)Leu+(0.0001)Gln+(0.0104)Phe+(−0.0172)Trp
91	0.580	(−1.4679)+(0.0016)Ala+(0.0046)Leu+(0.0009)Lys+(−0.0063)Met+(0.0121)Phe+(−0.0174)Trp
92	0.580	(−1.3700)+(0.0014)Ala+(0.0091)Ile+(−0.0063)Met+(0.0134)Phe+(−0.0002)Arg+(−0.0172)Trp
93	0.587	(−1.1067)+(0.0018)Ala+(−0.0015)Val+(0.0072)Leu+(−0.0015)Asn+(0.0015)Lys+(−0.0146)Trp
94	0.579	(−1.3899)+(0.0014)Ala+(−0.0008)Thr+(0.0091)Ile+(0.0001)Gln+(0.0118)Phe+(−0.0172)Trp
95	0.577	(−1.2472)+(0.0016)Ala+(0.0054)Leu+(−0.0043)His+(0.0122)Phe+(0.0001)Arg+(−0.0172)Trp
96	0.602	(−0.8522)+(0.0015)Ala+(−0.0058)Ser+(0.0016)Pro+(0.0020)Lys+(0.0118)Phe+(−0.0153)Trp
97	0.602	(−0.7137)+(0.0005)Gly+(0.0017)Ala+(−0.0052)Ser+(0.0057)Leu+(0.0018)Arg+(−0.0142)Trp
98	0.579	(−1.3827)+(0.0014)Ala+(−0.0008)Thr+(0.0071)Ile+(0.0016)Leu+(0.0117)Phe+(−0.0175)Trp
99	0.587	(−1.2054)+(0.0017)Ala+(0.0055)Leu+(0.0013)Lys+(0.0001)Arg+(−0.0151)Trp+(−0.0015)Tyr
100	0.596	(−0.8091)+(0.0017)Ala+(−0.0048)Ser+(0.0057)Leu+(0.0005)Gln+(0.0001)Tyr+(−0.0143)Trp

[図71]

No.	ROC_AUC (Validation)	ROC_AUC (No Validation)	FORMULA
1	0.663	0.706	(0.2178)+(−0.03882)Hypro+(0.01789)Glu+(−0.02904)His+(0.3180)3−MeHis+(0.007263)Arg+(−0.02236)Trp
2	0.662	0.710	(0.05501)+(−0.1688)Sar+(0.01719)Glu+(−0.02749)His+(0.2916)3−MeHis+(0.007168)Arg+(−0.02219)Trp
3	0.660	0.704	(−1.025)+(−0.1650)Sar+(−0.03368)Hypro+(0.01685)Glu+(0.3047)3−MeHis+(0.004332)Arg+(−0.02977)Trp
4	0.659	0.692	(−0.5405)+(−0.03539)Hypro+(−0.005269)Leu+(0.01841)Glu+(0.3083)3−MeHis+(−0.02460)Trp
5	0.659	0.697	(−0.4878)+(−0.1275)Sar+(−0.03076)Hypro+(−0.004274)Leu+(0.01764)Glu+(0.3245)3−MeHis+(−0.02457)Trp
6	0.659	0.686	(−0.7856)+(−0.03760)Hypro+(0.01629)Glu+(0.2910)3−MeHis+(−0.03023)Trp
7	0.659	0.692	(−0.6733)+(−0.1453)Sar+(−0.03189)Hypro+(0.01586)Glu+(0.3130)3−MeHis+(−0.02896)Trp
8	0.659	0.699	(0.1922)+(−0.1625)Sar+(0.004474)Lys+(0.01463)Glu+(−0.02875)His+(0.2953)3−MeHis+(−0.02419)Trp
9	0.658	0.695	(−0.6173)+(−0.1665)Sar+(−0.004830)Leu+(0.01760)Glu+(0.2862)3−MeHis+(−0.02443)Trp
10	0.658	0.700	(−1.144)+(−0.2069)Sar+(0.01637)Glu+(0.2627)3−MeHis+(0.003649)Arg+(−0.02999)Trp
11	0.658	0.687	(−0.7197)+(−0.006267)Leu+(0.01865)Glu+(0.2567)3−MeHis+(−0.02449)Trp
12	0.658	0.692	(0.5292)+(−0.03496)Hypro+(0.01611)Glu+(−0.02360)His+(0.3285)3−MeHis+(−0.02251)Trp
13	0.657	0.705	(−0.9354)+(−0.1857)Sar+(−0.005152)Leu+(0.01870)Glu+(0.2773)3−MeHis+(0.003973)Arg+(−0.02487)Trp
14	0.657	0.699	(0.3564)+(−0.03752)Hypro+(0.004436)Lys+(0.01536)Glu+(−0.03023)His+(0.3213)3−MeHis+(−0.02426)Trp
15	0.657	0.689	(−0.8364)+(−0.1883)Sar+(0.01552)Glu+(0.2716)3−MeHis+(−0.02932)Trp
16	0.657	0.693	(−0.5026)+(−0.1386)Sar+(−0.001597)Val+(−0.02990)Hypro+(0.01677)Glu+(0.3162)3−MeHis+(−0.02642)Trp
17	0.656	0.701	(−0.8357)+(−0.03752)Hypro+(−0.005686)Leu+(0.01945)Glu+(0.3001)3−MeHis+(0.003730)Arg+(−0.02498)Trp
18	0.656	0.696	(0.5225)+(−0.1041)Sar+(−0.03108)Hypro+(0.01584)Glu+(−0.02211)His+(0.3422)3−MeHis+(−0.02203)Trp
19	0.656	0.695	(−0.9553)+(−0.1447)Sar+(−0.03358)Hypro+(0.01478)Glu+(0.2901)3−MeHis+(−0.03042)Trp+(0.008469)Cys
20	0.656	0.698	(−0.8333)+(−0.1792)Sar+(−0.005797)Leu+(0.002221)Lys+(0.01761)Glu+(0.2816)3−MeHis+(−0.02539)Trp
21	0.655	0.696	(0.2601)+(−0.03712)Hypro+(0.01478)Glu+(−0.02577)His+(0.3004)3−MeHis+(−0.02362)Trp+(0.011145)Cys
22	0.655	0.692	(−1.060)+(−0.03951)Hypro+(0.01701)Glu+(0.2828)3−MeHis+(0.003225)Arg+(−0.03091)Trp
23	0.655	0.691	(−0.5624)+(−0.1739)Sar+(−0.002406)Val+(0.01695)Glu+(0.2804)3−MeHis+(−0.02552)Trp
24	0.655	0.695	(−0.8589)+(−0.1555)Sar+(−0.03249)Hypro+(0.001605)Lys+(0.01556)Glu+(0.3082)3−MeHis+(−0.03037)Trp
25	0.655	0.696	(0.08724)+(0.01715)Glu+(−0.02938)His+(0.2635)3−MeHis+(0.006140)Arg+(−0.02297)Trp

[図72]

No.	ROC_AUC (Validation)	ROC_AUC (No Validation)	FORMULA
26	0.655	0.702	(-1.078)+(-0.2006)Sar+(-0.002807)Ile+(0.01708)Glu+(0.2673)3-MeHis+(0.003789)Arg+(-0.02857)Trp
27	0.655	0.686	(-0.7578)+(-0.03695)Hypro+(-0.001111)Ile+(0.01654)Glu+(0.2925)3-MeHis+(-0.02962)Trp
28	0.654	0.688	(-0.7369)+(-0.0002540)Ala+(-0.03723)Hypro+(0.01666)Glu+(0.2924)3-MeHis+(-0.02957)Trp
29	0.654	0.696	(0.1402)+(-0.1409)Sar+(0.01429)Glu+(-0.02437)His+(0.2749)3-MeHis+(-0.02353)Trp+(0.01003)Cys
30	0.654	0.692	(-0.6808)+(-0.1459)Sar+(-0.03205)Hypro+(0.0003138)Ile+(0.01579)Glu+(0.3127)3-MeHis+(-0.02913)Trp
31	0.654	0.693	(-0.7914)+(-0.1550)Sar+(0.001672)Pro+(-0.03538)Hypro+(0.01539)Glu+(0.3082)3-MeHis+(-0.02970)Trp
32	0.654	0.692	(-0.5560)+(0.0002847)Val+(-0.03566)Hypro+(-0.005604)Leu+(0.01839)Glu+(0.3087)3-MeHis+(-0.02471)Trp
33	0.654	0.687	(-1.074)+(-0.03934)Hypro+(0.01519)Glu+(0.2684)3-MeHis+(-0.03164)Trp+(0.008570)Cys
34	0.654	0.693	(-0.7319)+(-0.03639)Hypro+(-0.006156)Leu+(0.001932)Lys+(0.01843)Glu+(0.3038)3-MeHis+(-0.02542)Trp
35	0.654	0.692	(-0.6871)+(-0.1448)Sar+(0.008242) β -AIBA+(-0.03210)Hypro+(0.01596)Glu+(0.3092)3-MeHis+(-0.02885)Trp
36	0.654	0.692	(-0.7819)+(-0.1610)Sar+(-0.03280)Hypro+(0.002906)Orn+(0.01539)Glu+(0.3079)3-MeHis+(-0.02920)Trp
37	0.654	0.693	(-0.6376)+(-0.1446)Sar+(-0.0001917)Ala+(-0.03164)Hypro+(0.01615)Glu+(0.3140)3-MeHis+(-0.02846)Trp
38	0.654	0.686	(-0.8654)+(0.001083)Pro+(-0.04006)Hypro+(0.01600)Glu+(0.2867)3-MeHis+(-0.03079)Trp
39	0.654	0.692	(-0.5586)+(0.01167) β -AIBA+(-0.03564)Hypro+(-0.005295)Leu+(0.01857)Glu+(0.3032)3-MeHis+(-0.02441)Trp
40	0.654	0.692	(-0.5492)+(5.757e-05)Ala+(-0.03546)Hypro+(-0.005320)Leu+(0.01835)Glu+(0.3082)3-MeHis+(-0.02470)Trp
41	0.654	0.695	(-0.8259)+(-0.03725)Hypro+(-0.005011)Leu+(0.01727)Glu+(0.2861)3-MeHis+(-0.02618)Trp+(0.008105)Cys
42	0.654	0.702	(-1.071)+(-0.2052)Sar+(-0.0003987)Ala+(0.01700)Glu+(0.2652)3-MeHis+(0.003707)Arg+(-0.02896)Trp
43	0.654	0.694	(-0.6467)+(0.001921)Pro+(-0.03952)Hypro+(-0.006047)Leu+(0.01820)Glu+(0.3037)3-MeHis+(-0.02473)Trp
44	0.654	0.692	(-0.5254)+(-0.03516)Hypro+(-0.005207)Leu+(0.01835)Glu+(-0.001266)Met+(0.3084)3-MeHis+(-0.02443)Trp
45	0.654	0.692	(0.3851)+(-0.1429)Sar+(0.01541)Glu+(-0.02245)His+(0.3029)3-MeHis+(-0.02237)Trp
46	0.654	0.687	(-0.7023)+(-0.03641)Hypro+(0.01607)Glu+(-0.005866)Met+(0.2922)3-MeHis+(-0.02911)Trp
47	0.654	0.686	(-0.5684)+(-0.001981)Val+(-0.03478)Hypro+(0.01741)Glu+(0.2962)3-MeHis+(-0.02700)Trp
48	0.654	0.695	(0.5602)+(-0.03411)Hypro+(-0.002200)Leu+(0.01705)Glu+(-0.02238)His+(0.3338)3-MeHis+(-0.02053)Trp
49	0.654	0.686	(-0.8026)+(0.01042) β -AIBA+(-0.03783)Hypro+(0.01642)Glu+(0.2864)3-MeHis+(-0.03008)Trp
50	0.653	0.692	(0.5132)+(0.01595) β -AIBA+(-0.03530)Hypro+(0.01632)Glu+(-0.02378)His+(0.3215)3-MeHis+(-0.02223)Trp

[図73]

No.	ROC_AUC (Validation)	ROC_AUC (No Validation)	FORMULA
51	0.653	0.697	(−0.7082)+(−0.1812)Sar+(−0.005115)Leu+(0.002656)Orn+(0.01728)Glu+(0.2813)3−MeHis+(−0.02434)Trp
52	0.653	0.686	(−0.9048)+(−0.03828)Hypro+(0.0009867)Lys+(0.01612)Glu+(0.2873)3−MeHis+(−0.03114)Trp
53	0.653	0.691	(−0.7671)+(−0.1864)Sar+(−0.0003560)Ala+(0.01607)Glu+(0.2740)3−MeHis+(−0.02840)Trp
54	0.653	0.690	(−0.7755)+(−0.1825)Sar+(−0.002237)Ile+(0.01606)Glu+(0.2756)3−MeHis+(−0.02816)Trp
55	0.653	0.691	(−0.7040)+(−0.1493)Sar+(−0.03220)Hypro+(0.01593)Glu+(0.002373)Met+(0.3131)3−MeHis+(−0.02938)Trp
56	0.653	0.695	(−0.6245)+(−0.1663)Sar+(0.004107) β −AIBA+(−0.004844)Leu+(0.01766)Glu+(0.2842)3−MeHis+(−0.02436)Trp
57	0.653	0.701	(−1.066)+(−0.1911)Sar+(0.01623)Glu+(−0.01053)Met+(0.2618)3−MeHis+(0.004447)Arg+(−0.02829)Trp
58	0.653	0.693	(−0.5954)+(−0.03616)Hypro+(−0.005490)Leu+(0.001574)Orn+(0.01827)Glu+(0.3050)3−MeHis+(−0.02455)Trp
59	0.653	0.687	(−0.7302)+(0.006008) β −AIBA+(−0.006284)Leu+(0.01873)Glu+(0.2540)3−MeHis+(−0.02438)Trp
60	0.653	0.696	(−0.2291)+(−0.1584)Sar+(−0.006597)Leu+(0.01717)Glu+(−0.03079)His+(0.3397)3−MeHis+(0.007191)Arg
61	0.653	0.692	(0.5432)+(−0.0002425)Val+(−0.03464)Hypro+(0.01626)Glu+(−0.02339)His+(0.3289)3−MeHis+(−0.02218)Trp
62	0.653	0.685	(0.3719)+(0.01568)Glu+(−0.02471)His+(0.2770)3−MeHis+(−0.02309)Trp
63	0.653	0.700	(0.1398)+(−0.003227)Leu+(0.01865)Glu+(−0.02762)His+(0.2727)3−MeHis+(0.006188)Arg+(−0.02013)Trp
64	0.653	0.692	(0.4976)+(0.0003080)Ala+(−0.03535)Hypro+(0.01566)Glu+(−0.02407)His+(0.3275)3−MeHis+(−0.02318)Trp
65	0.653	0.692	(0.4376)+(0.001865)Pro+(−0.03909)Hypro+(0.01560)Glu+(−0.02432)His+(0.3222)3−MeHis+(−0.02333)Trp
66	0.653	0.694	(−0.5599)+(−0.04053)Hypro+(0.01356)Ile+(−0.01212)Leu+(0.01808)Glu+(0.3121)3−MeHis+(−0.02473)Trp
67	0.653	0.685	(−0.7663)+(−0.03752)Hypro+(0.01628)Glu+(0.2931)3−MeHis+(−0.0005768)Cit+(−0.03028)Trp
68	0.653	0.692	(0.5183)+(−0.03532)Hypro+(0.0006390)Ile+(0.01595)Glu+(−0.02367)His+(0.3277)3−MeHis+(−0.02284)Trp
69	0.653	0.699	(−0.8678)+(−0.1919)Sar+(−0.002364)Val+(0.01776)Glu+(0.2712)3−MeHis+(0.003581)Arg+(−0.02626)Trp
70	0.653	0.700	(−0.3364)+(−0.1430)Sar+(−0.03582)Hypro+(0.01361)Glu+(−0.03624)His+(0.3775)3−MeHis+(0.007971)Arg
71	0.653	0.692	(0.5259)+(−0.03498)Hypro+(0.01611)Glu+(−0.02360)His+(0.3281)3−MeHis+(0.0001059)Cit+(−0.02250)Trp
72	0.653	0.692	(−0.6718)+(−0.1453)Sar+(−0.03188)Hypro+(0.01586)Glu+(0.3132)3−MeHis+(−4.394e−05)Cit+(−0.02897)Trp
73	0.653	0.693	(0.4527)+(−0.03787)Hypro+(0.005659)Orn+(0.01533)Glu+(−0.02647)His+(0.3184)3−MeHis+(−0.02223)Trp
74	0.652	0.686	(−0.7988)+(−0.03777)Hypro+(0.0003200)Orn+(0.01624)Glu+(0.2902)3−MeHis+(−0.03027)Trp
75	0.652	0.695	(0.2833)+(−0.1746)Sar+(0.006299)Orn+(0.01442)Glu+(−0.02520)His+(0.2928)3−MeHis+(−0.02196)Trp

[図74]

No.	ROC_AUC (Validation)	ROC_AUC (No Validation)	FORMULA
76	0.652	0.692	(−1.090)+(−0.1901)Sar+(0.01464)Glu+(0.2499)3−MeHis+(−0.03065)Trp+(0.007376)Cys
77	0.652	0.691	(−0.9978)+(−0.1983)Sar+(0.001374)Lys+(0.01528)Glu+(0.2670)3−MeHis+(−0.03053)Trp
78	0.652	0.692	(−0.4968)+(−0.03519)Hypro+(−0.005317)Leu+(0.01842)Glu+(0.3131)3−MeHis+(−0.001255)Cit+(−0.02466)Trp
79	0.652	0.692	(−0.3812)+(−0.001284)Ser+(−0.03447)Hypro+(−0.005286)Leu+(0.01812)Glu+(0.3044)3−MeHis+(−0.02460)Trp
80	0.652	0.691	(0.1195)+(0.01455)Glu+(−0.02669)His+(0.2495)3−MeHis+(−0.02418)Trp+(0.01023)Cys
81	0.652	0.688	(−0.8763)+(−0.006977)Leu+(0.001525)Lys+(0.01870)Glu+(0.2520)3−MeHis+(−0.02515)Trp
82	0.652	0.694	(−0.6471)+(−0.1558)Sar+(−0.03155)Hypro+(0.01553)Glu+(0.08620) α−AAA+(0.3084)3−MeHis+(−0.02925)Trp
83	0.652	0.700	(−1.142)+(−0.2070)Sar+(−0.001025) β−AIBA+(0.01636)Glu+(0.2632)3−MeHis+(0.003656)Arg+(−0.03000)Trp
84	0.652	0.695	(−0.6058)+(−0.1664)Sar+(−7.473e−05)Ala+(−0.004762)Leu+(0.01769)Glu+(0.2865)3−MeHis+(−0.02431)Trp
85	0.652	0.692	(−0.6454)+(−0.1445)Sar+(−0.0002300)Ser+(−0.03176)Hypro+(0.01581)Glu+(0.3122)3−MeHis+(−0.02898)Trp
86	0.652	0.695	(0.2539)+(−0.004429)Leu+(0.004422)Lys+(0.01690)Glu+(−0.02881)His+(0.2789)3−MeHis+(−0.02097)Trp
87	0.652	0.689	(−0.8410)+(−0.1882)Sar+(0.002442) β−AIBA+(0.01555)Glu+(0.2704)3−MeHis+(−0.02928)Trp
88	0.652	0.693	(−0.7505)+(−0.1860)Sar+(−0.002944)Val+(0.002128)Lys+(0.01688)Glu+(0.2750)3−MeHis+(−0.02655)Trp
89	0.652	0.689	(−0.9042)+(−0.1987)Sar+(0.001733)Orn+(0.01523)Glu+(0.2680)3−MeHis+(−0.02945)Trp
90	0.652	0.697	(0.02363)+(0.002866)Lys+(0.01631)Glu+(−0.03258)His+(0.2596)3−MeHis+(0.004776)Arg+(−0.02416)Trp
91	0.652	0.687	(−0.7022)+(−0.0001092)Ala+(−0.006170)Leu+(0.01878)Glu+(0.2572)3−MeHis+(−0.02431)Trp
92	0.652	0.699	(−0.8293)+(−0.1981)Sar+(−0.003094)Ser+(0.01589)Glu+(0.2517)3−MeHis+(0.004494)Arg+(−0.03031)Trp
93	0.651	0.691	(0.2010)+(0.003933)Lys+(0.01501)Glu+(−0.03056)His+(0.2675)3−MeHis+(−0.02471)Trp
94	0.651	0.697	(−0.8680)+(−0.1695)Sar+(−0.004610)Leu+(0.01667)Glu+(0.2649)3−MeHis+(−0.02588)Trp+(0.006971)Cys
95	0.651	0.692	(−0.5538)+(−0.03540)Hypro+(−0.005313)Leu+(0.01844)Glu+(0.0004352)Phe+(0.3077)3−MeHis+(−0.02476)Trp
96	0.651	0.695	(−0.5598)+(−0.1659)Sar+(−0.0009686)Val+(−0.003672)Leu+(0.01768)Glu+(0.2863)3−MeHis+(−0.02408)Trp
97	0.651	0.696	(−0.9597)+(−0.03738)Hypro+(0.01679)Glu+(−0.01413)Met+(0.2825)3−MeHis+(0.004420)Arg+(−0.02849)Trp
98	0.651	0.688	(−0.9665)+(−0.006065)Leu+(0.01778)Glu+(0.2364)3−MeHis+(−0.02584)Trp+(0.006662)Cys
99	0.651	0.686	(−0.6331)+(−0.001232)Ser+(−0.03673)Hypro+(0.01600)Glu+(0.2872)3−MeHis+(−0.03025)Trp
100	0.651	0.687	(−0.6985)+(−0.03746)Hypro+(0.01622)Glu+(−0.002478)Phe+(0.2952)3−MeHis+(−0.02906)Trp

[図75]

No.	ROC_AUC (Validation)	ROC_AUC (No Validation)	FORMULA
1	0.618	0.661	(1.216)+(−0.01367)Ser+(0.01560)Orn+(−0.01794)His+(0.007906)Arg+(−0.02973)Trp
2	0.617	0.660	(1.154)+(−0.01297)Ser+(0.005817)Lys+(−0.01803)His+(0.008931)Arg+(−0.03362)Trp
3	0.617	0.660	(0.5635)+(−0.01023)Ser+(0.006781)Lys+(−0.01883)His+(0.02089)Cit+(−0.02947)Trp
4	0.616	0.665	(1.165)+(−0.01369)Ser+(0.01288)Orn+(0.003437)Lys+(−0.02088)His+(0.006964)Arg+(−0.03172)Trp
5	0.615	0.657	(1.264)+(−0.01234)Ser+(0.01506)Orn+(0.004434)Lys+(−0.01846)His+(−0.03290)Trp
6	0.614	0.664	(0.3697)+(−0.01006)Ser+(0.004152)Pro+(0.006471)Lys+(−0.02175)His+(0.01858)Cit+(−0.03075)Trp
7	0.614	0.669	(0.8464)+(−0.01271)Ser+(0.005239)Lys+(−0.01980)His+(0.01276)Phe+(0.008190)Arg+(−0.03781)Trp
8	0.613	0.663	(0.9921)+(−0.01212)Ser+(0.004928)Leu+(0.005060)Lys+(−0.02097)His+(0.008953)Arg+(−0.03747)Trp
9	0.613	0.663	(1.072)+(−0.01284)Ser+(0.004228)Leu+(0.01418)Orn+(−0.02071)His+(0.007957)Arg+(−0.03344)Trp
10	0.613	0.652	(0.5089)+(−0.01399)Ser+(0.01234)Orn+(0.005998)Arg+(−0.03449)Trp
11	0.613	0.657	(0.8908)+(−0.01238)Ser+(−0.01405)His+(0.01525)Phe+(0.01033)Arg+(−0.03589)Trp
12	0.612	0.660	(0.6730)+(−0.01106)Ser+(0.007642)Orn+(0.005274)Lys+(−0.02020)His+(0.01741)Cit+(−0.02913)Trp
13	0.612	0.663	(0.9786)+(−0.01266)Ser+(0.008126)Ile+(0.01446)Orn+(−0.01953)His+(0.007416)Arg+(−0.03387)Trp
14	0.612	0.662	(0.9384)+(−0.01322)Ser+(0.004389)Pro+(0.01367)Orn+(−0.02076)His+(0.007599)Arg+(−0.03074)Trp
15	0.612	0.662	(1.039)+(−0.01318)Ser+(0.002022)Val+(0.01477)Orn+(−0.02027)His+(0.008183)Arg+(−0.03260)Trp
16	0.611	0.655	(1.031)+(−0.01150)Ser+(0.006651)Leu+(−0.01640)His+(0.01111)Arg+(−0.03623)Trp
17	0.611	0.649	(−0.09870)+(−0.01106)Ser+(0.004430)Lys+(0.01898)Cit+(−0.03304)Trp
18	0.611	0.659	(0.4353)+(−0.009518)Ser+(0.003988)Leu+(0.006181)Lys+(−0.02103)His+(0.02052)Cit+(−0.03268)Trp
19	0.611	0.661	(0.4305)+(−0.009803)Ser+(0.001507)Val+(0.006388)Lys+(−0.02017)His+(0.02100)Cit+(−0.03135)Trp
20	0.610	0.657	(0.9778)+(−0.01196)Ser+(0.004468)Pro+(0.01288)Orn+(0.004450)Lys+(−0.02149)His+(−0.03386)Trp
21	0.610	0.666	(0.9458)+(−0.01338)Ser+(0.01427)Orn+(−0.01942)His+(0.01093)Phe+(0.007327)Arg+(−0.03363)Trp
22	0.610	0.657	(0.3873)+(−0.009506)Ser+(0.007106)Ile+(0.006188)Lys+(−0.01998)His+(0.01997)Cit+(−0.03291)Trp
23	0.610	0.660	(0.9956)+(−0.01253)Ser+(0.001884)Val+(0.005268)Lys+(−0.01996)His+(0.009279)Arg+(−0.03590)Trp
24	0.610	0.659	(0.5500)+(−0.01006)Ser+(0.006872)Lys+(−0.002774)Met+(−0.01850)His+(0.02101)Cit+(−0.02914)Trp
25	0.610	0.663	(0.4025)+(−0.01018)Ser+(0.006333)Lys+(−0.01994)His+(0.008384)Phe+(0.01953)Cit+(−0.03246)Trp

[図76]

No.	ROC_AUC (Validation)	ROC_AUC (No Validation)	FORMULA
26	0.610	0.658	(0.8904)+(−0.01077)Ser+(0.006820)Lys+(−0.01666)His+(0.01532)Phe+(−0.04044)Trp
27	0.610	0.659	(0.8932)+(0.001637)Ala+(−0.01233)Ser+(0.005330)Lys+(−0.02094)His+(0.009135)Arg+(−0.03717)Trp
28	0.610	0.659	(0.9146)+(−0.01202)Ser+(0.008523)Ile+(0.005157)Lys+(−0.01946)His+(0.008487)Arg+(−0.03749)Trp
29	0.609	0.660	(0.8393)+(−0.01262)Ser+(0.005003)Pro+(0.005506)Lys+(−0.02179)His+(0.008153)Arg+(−0.03445)Trp
30	0.609	0.661	(0.9691)+(−0.01211)Ser+(0.01376)Orn+(0.004053)Lys+(−0.02008)His+(0.01179)Phe+(−0.03682)Trp
31	0.609	0.647	(1.351)+(−0.01211)Ser+(0.01906)Orn+(−0.01398)His+(−0.03046)Trp
32	0.609	0.656	(0.9244)+(−0.01218)Ser+(0.005222)Pro+(−0.01525)His+(0.01048)Arg+(−0.03166)Trp
33	0.609	0.662	(0.7668)+(−0.01151)Ser+(0.005250)Leu+(−0.01765)His+(0.01255)Phe+(0.01019)Arg+(−0.03946)Trp
34	0.609	0.647	(1.268)+(−0.01089)Ser+(0.007683)Lys+(−0.01405)His+(−0.03558)Trp
35	0.609	0.654	(0.9576)+(−0.01144)Ser+(0.01040)Ile+(−0.01385)His+(0.01061)Arg+(−0.03570)Trp
36	0.609	0.656	(1.184)+(−0.01208)Ser+(0.0009487)Val+(0.01493)Orn+(0.004214)Lys+(−0.01924)His+(−0.03412)Trp
37	0.609	0.656	(1.037)+(−0.01148)Ser+(0.007939)Ile+(0.01427)Orn+(0.003905)Lys+(−0.01974)His+(−0.03658)Trp
38	0.609	0.648	(1.273)+(−0.01263)Ser+(−0.01113)His+(0.01151)Arg+(−0.03052)Trp
39	0.609	0.647	(0.4990)+(−0.01332)Ser+(0.003895)Lys+(0.007278)Arg+(−0.03700)Trp
40	0.608	0.657	(1.159)+(−0.01170)Ser+(0.003231)Leu+(0.01430)Orn+(0.004108)Lys+(−0.02019)His+(−0.03555)Trp
41	0.608	0.645	(0.5812)+(−0.01292)Ser+(0.01275)Orn+(0.002573)Lys+(−0.03643)Trp
42	0.608	0.647	(0.4165)+(−0.01203)Ser+(0.008637)Ile+(0.008597)Arg+(−0.03841)Trp
43	0.608	0.646	(0.4979)+(−0.01238)Ser+(0.003990)Leu+(0.008949)Arg+(−0.03784)Trp
44	0.608	0.660	(1.145)+(−0.01286)Ser+(0.005867)Lys+(−0.002034)Met+(−0.01780)His+(0.009023)Arg+(−0.03339)Trp
45	0.608	0.659	(1.235)+(−0.01395)Ser+(0.01561)Orn+(0.005246)Met+(−0.01868)His+(0.007610)Arg+(−0.03040)Trp
46	0.608	0.656	(0.3402)+(0.001410)Ala+(−0.009552)Ser+(0.006392)Lys+(−0.02109)His+(0.02054)Cit+(−0.03267)Trp
47	0.608	0.663	(0.5927)+(−0.01080)Ser+(0.006381)Lys+(−0.01943)His+(0.002280)Arg+(0.01909)Cit+(−0.02949)Trp
48	0.607	0.658	(0.9556)+(0.001600)Ala+(−0.01298)Ser+(0.01466)Orn+(−0.02097)His+(0.008087)Arg+(−0.03345)Trp
49	0.607	0.651	(1.059)+(−0.01166)Ser+(0.004455)Pro+(0.01685)Orn+(−0.01691)His+(−0.03147)Trp
50	0.607	0.644	(0.1811)+(−0.01151)Ser+(0.009595)Orn+(0.01562)Cit+(−0.03061)Trp

[図77]

No.	ROC_AUC (Validation)	ROC_AUC (No Validation)	FORMULA
51	0.607	0.651	(0.8124)+(−0.01088)Ser+(0.01298)Orn+(−0.01467)His+(0.01603)Cit+(−0.02670)Trp
52	0.607	0.651	(1.211)+(−0.01129)Ser+(0.004075)Leu+(0.01772)Orn+(−0.01661)His+(−0.03404)Trp
53	0.607	0.652	(1.001)+(−0.01193)Ser+(0.003065)Val+(−0.01535)His+(0.01166)Arg+(−0.03477)Trp
54	0.607	0.661	(0.6920)+(−0.01140)Ser+(0.008692)Ile+(−0.01583)His+(0.012271)Phe+(0.009728)Arg+(−0.03930)Trp
55	0.606	0.662	(0.6434)+(−0.01200)Ser+(0.004841)Pro+(−0.01731)His+(0.01233)Phe+(0.009541)Arg+(−0.03587)Trp
56	0.606	0.647	(0.3174)+(−0.01268)Ser+(0.004503)Pro+(0.008256)Arg+(−0.03539)Trp
57	0.606	0.651	(−0.3417)+(−0.01099)Ser+(0.003344)Pro+(0.003854)Lys+(0.01687)Cit+(−0.03438)Trp
58	0.606	0.642	(−0.4107)+(0.006118)Lys+(−0.02113)His+(0.02167)Cit+(−0.02800)Trp
59	0.606	0.658	(0.8245)+(−0.01157)Ser+(0.004600)Pro+(0.003779)Leu+(−0.01771)His+(0.01039)Arg+(−0.03485)Trp
60	0.606	0.645	(−0.05757)+(−0.009785)Ser+(0.003865)Pro+(0.01841)Cit+(−0.03088)Trp
61	0.606	0.651	(0.1732)+(−0.01363)Ser+(0.003666)Pro+(0.01026)Orn+(0.005485)Arg+(−0.03578)Trp
62	0.606	0.660	(0.6748)+(−0.01178)Ser+(0.002677)Val+(−0.01750)His+(0.01435)Phe+(0.01050)Arg+(−0.03932)Trp
63	0.606	0.661	(0.6790)+(0.001623)Ala+(−0.01177)Ser+(−0.01704)His+(0.01290)Phe+(0.01044)Arg+(−0.03878)Trp
64	0.606	0.654	(0.7381)+(−0.01058)Ser+(−0.01155)His+(0.005625)Arg+(0.01783)Cit+(−0.02655)Trp
65	0.606	0.651	(1.078)+(−0.01110)Ser+(0.009015)Ile+(0.01761)Orn+(−0.01604)His+(−0.03501)Trp
66	0.605	0.654	(1.293)+(−0.01289)Ser+(0.01514)Orn+(0.004127)Lys+(0.008755)Met+(−0.01962)His+(−0.03382)Trp
67	0.605	0.657	(0.8507)+(−0.01200)Ser+(0.01228)Orn+(−0.01677)His+(0.004461)Arg+(0.01267)Cit+(−0.02708)Trp
68	0.605	0.652	(0.2681)+(−0.01321)Ser+(0.006275)Ile+(0.01124)Orn+(0.005487)Arg+(−0.03791)Trp
69	0.605	0.648	(0.2314)+(−0.01096)Ser+(0.003808)Arg+(0.01763)Cit+(−0.02963)Trp
70	0.605	0.648	(−0.05043)+(−0.01173)Ser+(0.005658)Orn+(0.003177)Lys+(0.01631)Cit+(−0.03298)Trp
71	0.605	0.653	(0.4268)+(−0.01401)Ser+(0.01081)Orn+(0.001623)Lys+(0.005424)Arg+(−0.03581)Trp
72	0.605	0.653	(0.4583)+(−0.01391)Ser+(0.0003701)Val+(0.01212)Orn+(0.005993)Arg+(−0.03511)Trp
73	0.605	0.652	(0.3752)+(−0.01289)Ser+(0.01243)Phe+(0.008382)Arg+(−0.03868)Trp
74	0.605	0.654	(1.016)+(−0.01188)Ser+(0.01722)Orn+(−0.01620)His+(0.01309)Phe+(−0.03505)Trp
75	0.605	0.644	(0.3776)+(−0.01241)Ser+(0.003831)Pro+(0.01315)Orn+(−0.03569)Trp

[図78]

No.	ROC_AUC (Validation)	ROC_AUC (No Validation)	FORMULA
76	0.605	0.657	(0.8179)+(−0.01164)Ser+(0.004493)Pro+(0.005002)Ile+(−0.01594)His+(0.01019)Arg+(−0.03405)Trp
77	0.605	0.651	(1.110)+(−0.01008)Ser+(0.004804)Leu+(0.006956)Lys+(−0.01687)His+(−0.03935)Trp
78	0.605	0.646	(0.4019)+(0.001435)Ala+(−0.01246)Ser+(0.009208)Arg+(−0.03771)Trp
79	0.605	0.650	(−0.2743)+(−0.01050)Ser+(0.005544)Ile+(0.003849)Lys+(0.01817)Cit+(−0.03582)Trp
80	0.605	0.654	(0.6032)+(−0.01053)Ser+(0.003968)Pro+(0.01165)Orn+(−0.01726)His+(0.01442)Cit+(−0.02802)Trp
81	0.604	0.651	(0.9596)+(0.001875)Ala+(−0.01190)Ser+(−0.01510)His+(0.01147)Arg+(−0.03486)Trp
82	0.604	0.644	(0.5477)+(−0.01267)Ser+(0.001572)Val+(0.009423)Arg+(−0.03632)Trp
83	0.604	0.652	(0.5249)+(−0.01360)Ser+(0.01250)Orn+(−0.006989)Met+(0.006491)Arg+(−0.03335)Trp
84	0.604	0.654	(0.5864)+(−0.009955)Ser+(0.008144)Ile+(0.01187)Orn+(−0.01653)His+(0.01537)Cit+(−0.03097)Trp
85	0.604	0.650	(−0.1244)+(−0.01101)Ser+(0.0002108)Val+(0.004351)Lys+(0.01898)Cit+(−0.03333)Trp
86	0.604	0.655	(0.8193)+(−0.01189)Ser+(0.004860)Pro+(0.001440)Val+(−0.01691)His+(0.01063)Arg+(−0.03363)Trp
87	0.604	0.653	(0.6495)+(−0.009961)Ser+(0.004366)Leu+(0.01145)Orn+(−0.01746)His+(0.01623)Cit+(−0.03047)Trp
88	0.604	0.653	(1.034)+(0.001414)Ala+(−0.01165)Ser+(0.01460)Orn+(0.004132)Lys+(−0.02072)His+(−0.03605)Trp
89	0.604	0.643	(−0.04439)+(−0.009137)Ser+(0.008043)Ile+(0.01958)Cit+(−0.03352)Trp
90	0.604	0.645	(−0.3941)+(0.006699)Lys+(−0.01584)Met+(−0.01899)His+(0.02226)Cit+(−0.02628)Trp
91	0.604	0.653	(0.4245)+(−0.01373)Ser+(0.001379)Leu+(0.01171)Orn+(0.005913)Arg+(−0.03591)Trp
92	0.604	0.651	(1.208)+(−0.01166)Ser+(0.001618)Val+(0.01848)Orn+(−0.01567)His+(−0.03279)Trp
93	0.604	0.656	(0.6119)+(−0.01026)Ser+(0.002087)Val+(0.01207)Orn+(−0.01688)His+(0.01649)Cit+(−0.02959)Trp
94	0.604	0.660	(0.5098)+(−0.01039)Ser+(0.004521)Pro+(−0.01515)His+(0.005611)Arg+(0.01525)Cit+(−0.02814)Trp
95	0.604	0.649	(−0.09255)+(−0.01130)Ser+(0.003311)Pro+(0.007985)Orn+(0.01418)Cit+(−0.03218)Trp
96	0.604	0.644	(0.4477)+(−0.01194)Ser+(0.007245)Ile+(0.01410)Orn+(−0.03829)Trp
97	0.604	0.642	(−0.3529)+(0.007438)Leu+(−0.01700)His+(0.02220)Cit+(−0.03157)Trp
98	0.604	0.655	(0.6388)+(−0.01062)Ser+(0.004916)Pro+(0.006506)Lys+(−0.02021)His+(0.01251)Phe+(−0.04016)Trp
99	0.603	0.648	(0.9258)+(−0.01071)Ser+(0.005253)Pro+(0.007178)Lys+(−0.01833)His+(−0.03629)Trp
100	0.603	0.652	(−0.09684)+(−0.01089)Ser+(0.003782)Pro+(0.003345)Arg+(0.01537)Cit+(−0.03168)Trp

[図79]

No.	ROC_AUC (Validation)	ROC_AUC (No Validation)	FORMULA
1	0.674	0.700	(−0.4537)+(−0.0500)Sar+(−0.0018)Leu+(0.0054)Glu+(0.0935)3−MeHis+(0.0010)Arg+(−0.0064)Trp
2	0.669	0.683	(−0.4055)+(−0.0021)Leu+(0.0054)Glu+(0.0879)3−MeHis+(−0.0064)Trp
3	0.669	0.696	(−0.5249)+(−0.0483)Sar+(−0.0085)Hypro+(0.0045)Glu+(0.0991)3−MeHis+(0.0011)Arg+(−0.0076)Trp
4	0.668	0.694	(−0.4550)+(−0.0535)Sar+(−0.0008)Val+(0.0051)Glu+(0.0906)3−MeHis+(0.0009)Arg+(−0.0068)Trp
5	0.668	0.692	(−0.1823)+(−0.0445)Sar+(0.0004)Ser+(0.0046)Glu+(−0.0061)His+(0.0998)3−MeHis+(−0.0059)Trp
6	0.668	0.691	(−0.1567)+(−0.0433)Sar+(0.0045)Glu+(−0.0059)His+(0.0967)3−MeHis+(0.0005)Cit+(−0.0060)Trp
7	0.667	0.691	(−0.1463)+(−0.0432)Sar+(0.0028)β−AIBA+(0.0045)Glu+(−0.0059)His+(0.0972)3−MeHis+(−0.0059)Trp
8	0.666	0.685	(−0.4376)+(−0.0445)Sar+(−0.0080)Hypro+(0.0043)Glu+(0.1014)3−MeHis+(−0.0074)Trp
9	0.666	0.685	(−0.4525)+(−0.0518)Sar+(−0.0007)Ile+(0.0046)Glu+(0.0916)3−MeHis+(−0.0074)Trp
10	0.665	0.692	(−0.5284)+(−0.0548)Sar+(−0.0007)Orn+(0.0047)Glu+(0.0895)3−MeHis+(0.0011)Arg+(−0.0080)Trp
11	0.665	0.692	(−0.3034)+(−0.0478)Sar+(−0.0021)Ile+(0.0043)Glu+(−0.0088)His+(0.1068)3−MeHis+(0.0018)Arg
12	0.665	0.691	(−0.0989)+(−0.0389)Sar+(−0.0039)α−ABA+(0.0046)Glu+(−0.0057)His+(0.0998)3−MeHis+(−0.0059)Trp
13	0.665	0.683	(−0.4057)+(−0.0021)Leu+(0.0054)Glu+(0.0879)3−MeHis+(0.0000)Cit+(−0.0064)Trp
14	0.665	0.693	(−0.2232)+(−0.0003)Orn+(0.0049)Glu+(−0.0075)His+(0.0875)3−MeHis+(0.0016)Arg+(−0.0063)Trp
15	0.665	0.689	(−0.1392)+(−0.0090)Hypro+(0.0045)Glu+(−0.0063)His+(0.1018)3−MeHis+(0.0007)Cit+(−0.0058)Trp
16	0.664	0.690	(−0.1617)+(−0.0456)Sar+(0.0003)Pro+(0.0043)Glu+(−0.0060)His+(0.0968)3−MeHis+(−0.0061)Trp
17	0.664	0.685	(−0.4879)+(−0.0537)Sar+(0.0044)Glu+(0.0890)3−MeHis+(0.0004)Cit+(−0.0077)Trp
18	0.664	0.693	(−0.2293)+(0.0015)β−AIBA+(0.0049)Glu+(−0.0076)His+(0.0861)3−MeHis+(0.0015)Arg+(−0.0062)Trp
19	0.664	0.686	(−0.4702)+(−0.0552)Sar+(0.0043)Glu+(0.0171)α−AAA+(0.0896)3−MeHis+(−0.0078)Trp
20	0.664	0.688	(−0.3348)+(−0.0111)Hypro+(0.0036)Glu+(−0.0098)His+(0.1127)3−MeHis+(0.0018)Arg
21	0.664	0.684	(−0.1545)+(−0.0000)Ala+(0.0046)Glu+(−0.0065)His+(0.0905)3−MeHis+(−0.0062)Trp
22	0.664	0.692	(−0.5497)+(−0.0574)Sar+(0.0000)Lys+(0.0046)Glu+(0.0880)3−MeHis+(0.0009)Arg+(−0.0080)Trp
23	0.664	0.684	(−0.1704)+(0.0002)Ser+(0.0046)Glu+(−0.0066)His+(0.0909)3−MeHis+(−0.0062)Trp
24	0.663	0.688	(−0.3348)+(−0.0111)Hypro+(0.0036)Glu+(−0.0098)His+(0.1127)3−MeHis+(0.0018)Arg
25	0.663	0.687	(−0.2739)+(−0.0024)Leu+(0.0049)Glu+(−0.0080)His+(0.1015)3−MeHis+(0.0015)Arg

[図80]

No.	ROC_AUC (Validation)	ROC_AUC (No Validation)	FORMULA
26	0.663	0.688	(−0.1249)+(−0.0013)Leu+(0.0051)Glu+(−0.0058)His+(0.0938)3−MeHis+(0.0002)Cit+(−0.0052)Trp
27	0.663	0.688	(−0.1153)+(−0.0089)Hypro+(0.0044)Glu+(−0.0063)His+(0.0004) α −AAA+(0.1044)3−MeHis+(−0.0058)Trp
28	0.663	0.687	(−0.1208)+(0.0000)Ala+(−0.0090)Hypro+(0.0044)Glu+(−0.0064)His+(0.1043)3−MeHis+(−0.0059)Trp
29	0.663	0.685	(−0.4879)+(−0.0537)Sar+(0.0044)Glu+(0.0890)3−MeHis+(0.0004)Cit+(−0.0077)Trp
30	0.663	0.684	(−0.1371)+(−0.0007)Ile+(0.0048)Glu+(−0.0064)His+(0.0918)3−MeHis+(−0.0059)Trp
31	0.662	0.686	(−0.1267)+(0.0001)Ala+(−0.0014)Leu+(0.0050)Glu+(−0.0058)His+(0.0945)3−MeHis+(−0.0053)Trp
32	0.662	0.682	(−0.1219)+(−0.0005)Val+(0.0049)Glu+(−0.0061)His+(0.0917)3−MeHis+(−0.0057)Trp
33	0.662	0.687	(−0.3680)+(0.0038) β −AIBA+(−0.0091)Hypro+(−0.0020)Leu+(0.0053)Glu+(0.1001)3−MeHis+(−0.0060)Trp
34	0.662	0.690	(−0.4407)+(−0.0021)Leu+(−0.0010)Orn+(0.0057)Glu+(0.0878)3−MeHis+(0.0010)Arg+(−0.0066)Trp
35	0.662	0.687	(−0.4610)+(−0.0007)Val+(−0.0092)Hypro+(0.0050)Glu+(0.0942)3−MeHis+(0.0009)Arg+(−0.0069)Trp
36	0.662	0.683	(−0.4209)+(0.0003)Pro+(−0.0022)Leu+(0.0054)Glu+(0.0865)3−MeHis+(−0.0064)Trp
37	0.662	0.686	(−0.4204)+(−0.0441)Sar+(−0.0001)Ala+(−0.0079)Hypro+(0.0045)Glu+(0.1018)3−MeHis+(−0.0072)Trp
38	0.661	0.689	(−0.4765)+(−0.0023)Leu+(0.0002)Lys+(0.0056)Glu+(0.0854)3−MeHis+(0.0006)Arg+(−0.0066)Trp
39	0.661	0.685	(−0.4464)+(−0.0509)Sar+(−0.0007)Ile+(0.0046)Glu+(−0.0005)Met+(0.0916)3−MeHis+(−0.0073)Trp
40	0.661	0.687	(−0.1290)+(−0.0095)Hypro+(0.0046)Glu+(0.0033)Met+(−0.0069)His+(0.1047)3−MeHis+(−0.0062)Trp
41	0.661	0.688	(−0.1296)+(−0.0090)Hypro+(0.0045)Glu+(−0.0064)His+(0.0006)Phe+(0.1036)3−MeHis+(−0.0060)Trp
42	0.661	0.685	(−0.4340)+(0.0014)Lys+(0.0061)Glu+(−0.0054)His+(0.0061)Cit+(−0.0087)Trp
43	0.661	0.688	(−0.4589)+(−0.0001)Val+(−0.0021)Leu+(0.0056)Glu+(0.0856)3−MeHis+(0.0007)Arg+(−0.0065)Trp
44	0.660	0.688	(−0.3768)+(−0.0515)Sar+(−0.0008)Val+(0.0048)Glu+(0.0179) α −AAA+(0.0920)3−MeHis+(−0.0067)Trp
45	0.660	0.685	(−0.4616)+(0.0002)Pro+(−0.0024)Leu+(0.0004)Lys+(0.0054)Glu+(0.0855)3−MeHis+(−0.0066)Trp
46	0.660	0.690	(−0.2773)+(−0.0102)Hypro+(−0.0019)Ile+(0.0042)Glu+(−0.0092)His+(0.1131)3−MeHis+(0.0019)Arg
47	0.660	0.682	(−0.3718)+(0.0064)Glu+(−0.0034)His+(0.0064)Cit+(−0.0082)Trp
48	0.660	0.690	(−0.2604)+(−0.0018)Ser+(0.0015)Lys+(0.0055)Glu+(−0.0050)His+(0.0062)Cit+(−0.0088)Trp
49	0.660	0.686	(−0.4615)+(−0.0531)Sar+(−0.0001)Ala+(0.0046)Glu+(0.0898)3−MeHis+(0.0004)Cit+(−0.0075)Trp
50	0.660	0.688	(−0.4162)+(0.0010)Pro+(0.0059)Glu+(−0.0040)His+(0.0059)Cit+(−0.0085)Trp

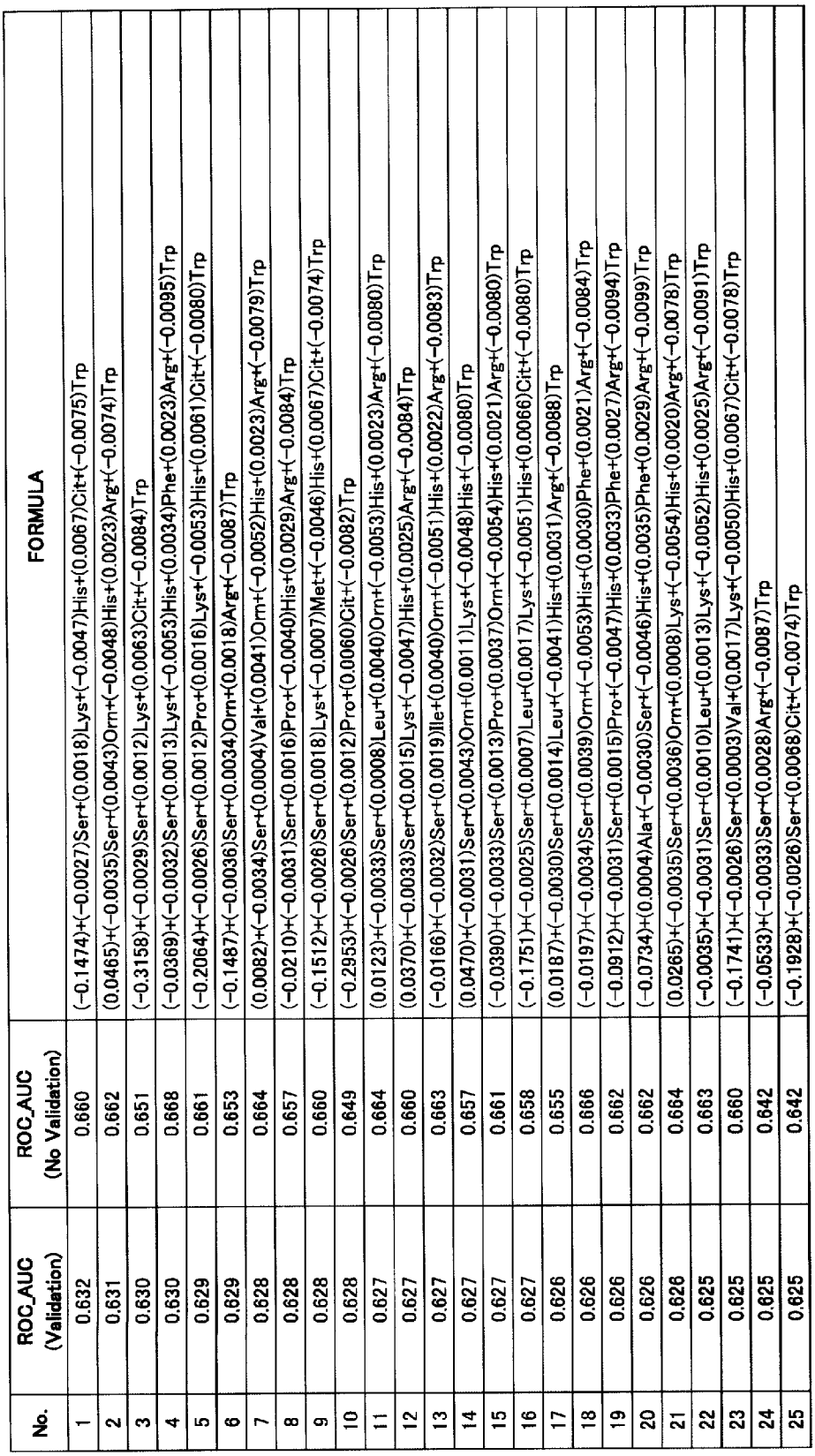
[図81]

No.	ROC_AUC (Validation)	ROC_AUC (No Validation)	FORMULA
51	0.660	0.682	(-0.5554)+(0.0061)Glu+(0.0355)α-AAA+(0.0056)Cit+(-0.0093)Trp
52	0.659	0.685	(-0.2009)+(-0.0000)Ala+(0.0010)Lys+(0.0045)Glu+(-0.0078)His+(0.0885)3-MeHis+(-0.0065)Trp
53	0.659	0.686	(-0.4271)+(-0.0524)Sar+(-0.0001)Ala+(0.0046)Glu+(-0.0007)Phe+(0.0923)3-MeHis+(-0.0072)Trp
54	0.659	0.688	(-0.4429)+(-0.0546)Sar+(-0.0001)Ala+(0.0046)Glu+(0.0182)α-AAA+(0.0902)3-MeHis+(-0.0075)Trp
55	0.659	0.684	(-0.4440)+(-0.0528)Sar+(0.0044)Glu+(-0.0008)Phe+(0.0919)3-MeHis+(-0.0074)Trp
56	0.659	0.687	(-0.4811)+(-0.0551)Sar+(0.0044)Glu+(0.0163)α-AAA+(0.0884)3-MeHis+(0.0003)Cit+(-0.0078)Trp
57	0.659	0.686	(-0.1478)+(-0.0051)α-ABA+(0.0005)Ser+(0.0048)Glu+(-0.0064)His+(0.0947)3-MeHis+(-0.0060)Trp
58	0.659	0.682	(-0.3718)+(0.0064)Glu+(-0.0034)His+(0.0064)Cit+(-0.0082)Trp
59	0.659	0.695	(-0.0758)+(-0.0023)Ser+(0.0062)Glu+(-0.0040)His+(0.0527)α-AAA+(0.0031)Arg+(-0.0094)Trp
60	0.659	0.680	(-0.5091)+(-0.0384)Sar+(-0.0087)Hypro+(-0.0031)Leu+(0.0045)Glu+(0.1188)3-MeHis
61	0.659	0.676	(-0.5055)+(0.0071)Glu+(0.0021)Arg+(-0.0105)Trp
62	0.659	0.684	(-0.4727)+(-0.0529)Sar+(0.0002)Pro+(0.0043)Glu+(-0.0013)Met+(0.0895)3-MeHis+(-0.0076)Trp
63	0.658	0.682	(-0.4056)+(0.0024)β-AIBA+(-0.0001)Val+(-0.0020)Leu+(0.0055)Glu+(0.0868)3-MeHis+(-0.0063)Trp
64	0.658	0.685	(-0.5092)+(-0.0010)Ile+(0.0048)Glu+(-0.0052)Met+(0.0803)3-MeHis+(0.0011)Arg+(-0.0070)Trp
65	0.658	0.693	(-0.3611)+(-0.0022)Ser+(0.0056)Glu+(0.0357)α-AAA+(0.0011)Arg+(0.0047)Cit+(-0.0094)Trp
66	0.658	0.684	(-0.4649)+(-0.0519)Sar+(0.0021)β-AIBA+(0.0044)Glu+(-0.0009)Met+(0.0897)3-MeHis+(-0.0076)Trp
67	0.658	0.678	(-0.2212)+(0.0002)Ser+(-0.0024)Leu+(0.0047)Glu+(-0.0070)His+(0.1055)3-MeHis
68	0.658	0.685	(-0.1598)+(-0.0305)Sar+(-0.0084)Hypro+(-0.0020)Leu+(0.0043)Glu+(-0.0064)His+(0.1222)3-MeHis
69	0.658	0.686	(-0.3540)+(0.0003)Pro+(-0.0118)Hypro+(0.0034)Glu+(-0.0099)His+(0.1120)3-MeHis+(0.0018)Arg
70	0.658	0.683	(-0.4433)+(-0.0517)Sar+(-0.0002)Ser+(0.0044)Glu+(-0.0007)Met+(0.0902)3-MeHis+(-0.0076)Trp
71	0.658	0.685	(-0.4580)+(-0.0528)Sar+(0.0044)Glu+(-0.0009)Phe+(0.0902)3-MeHis+(0.0005)Cit+(-0.0074)Trp
72	0.658	0.679	(-0.2311)+(-0.0020)Ser+(0.0012)Lys+(0.0059)Glu+(-0.0108)Trp
73	0.658	0.686	(-0.2838)+(0.0002)Pro+(-0.0025)Leu+(0.0049)Glu+(-0.0080)His+(0.1005)3-MeHis+(0.0015)Arg
74	0.658	0.688	(-0.4264)+(-0.0040)α-ABA+(-0.0017)Leu+(0.0055)Glu+(0.0865)3-MeHis+(0.0007)Arg+(-0.0066)Trp
75	0.657	0.685	(-0.4107)+(-0.0019)Ser+(0.0008)Pro+(0.0052)Glu+(0.0056)Cit+(-0.0095)Trp

[図82]

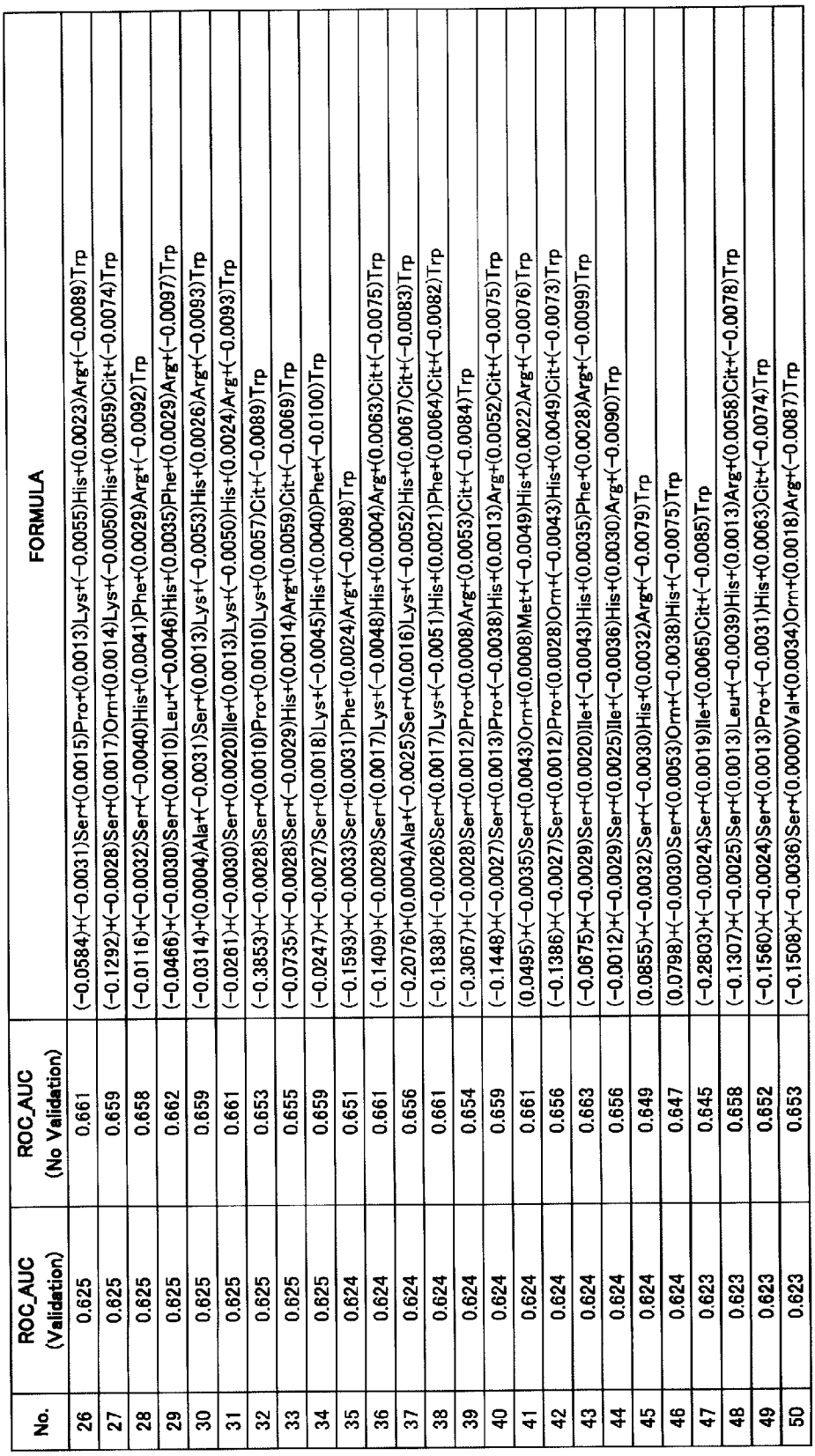
No.	ROC_AUC (Validation)	ROC_AUC (No Validation)	FORMULA
76	0.657	0.683	(−0.1510)+(0.0001)Ser+(−0.0007)Ile+(0.0048)Glu+(−0.0065)His+(0.0922)3−MeHis+(−0.0059)Trp
77	0.657	0.684	(−0.1699)+(0.0031)β−AIBA+(0.0046)Glu+(−0.0066)His+(0.0004)Phe+(0.0886)3−MeHis+(−0.0063)Trp
78	0.657	0.684	(−0.1724)+(0.0046)Glu+(0.0012)Met+(−0.0068)His+(0.0889)3−MeHis+(0.0004)Cit+(−0.0063)Trp
79	0.657	0.682	(−0.1274)+(0.0001)Ala+(−0.0005)Val+(0.0048)Glu+(−0.0061)His+(0.0916)3−MeHis+(−0.0057)Trp
80	0.657	0.686	(−0.4546)+(−0.0061)α−ABA+(−0.0100)Hypro+(0.0047)Glu+(0.0964)3−MeHis+(0.0009)Arg+(−0.0076)Trp
81	0.657	0.691	(−0.2073)+(−0.0020)Ser+(0.0061)Glu+(−0.0038)His+(0.0018)Arg+(0.0049)Cit+(−0.0085)Trp
82	0.657	0.693	(−0.3152)+(−0.0024)Ser+(0.0059)Glu+(0.0434)α−AAA+(0.0019)Phe+(0.0023)Arg+(−0.0111)Trp
83	0.657	0.683	(−0.5653)+(0.0219)β−AIBA+(−0.0004)Leu+(0.0065)Glu+(0.0050)Cit+(−0.0085)Trp
84	0.657	0.686	(−0.3654)+(−0.0495)Sar+(−0.0007)Val+(0.0049)Glu+(−0.0005)Phe+(0.0938)3−MeHis+(−0.0065)Trp
85	0.657	0.677	(−0.2108)+(0.0059)β−AIBA+(−0.0024)Leu+(0.0047)Glu+(−0.0069)His+(0.1022)3−MeHis
86	0.657	0.685	(−0.1158)+(−0.0047)α−ABA+(0.0047)Glu+(−0.0061)His+(0.0914)3−MeHis+(0.0005)Cit+(−0.0060)Trp
87	0.657	0.683	(−0.1658)+(0.0002)Val+(−0.0095)Hypro+(−0.0024)Leu+(0.0044)Glu+(−0.0068)His+(0.1190)3−MeHis
88	0.656	0.682	(−0.4403)+(−0.0009)Val+(−0.0012)Orn+(0.0054)Glu+(0.0842)3−MeHis+(0.0009)Arg+(−0.0071)Trp
89	0.656	0.677	(−0.2108)+(0.0059)β−AIBA+(−0.0024)Leu+(0.0047)Glu+(−0.0069)His+(0.1022)3−MeHis
90	0.656	0.683	(−0.6677)+(0.0210)β−AIBA+(0.0006)Lys+(0.0061)Glu+(0.0047)Cit+(−0.0093)Trp
91	0.656	0.682	(−0.5258)+(−0.0001)Ala+(−0.0012)Ile+(0.0052)Glu+(0.0803)3−MeHis+(0.0006)Arg+(−0.0076)Trp
92	0.656	0.683	(−0.3362)+(−0.0025)Ser+(0.0010)Pro+(0.0057)Glu+(0.0024)Arg+(−0.0107)Trp
93	0.656	0.679	(−0.4874)+(−0.0061)α−ABA+(0.0048)Glu+(0.0815)3−MeHis+(0.0006)Arg+(−0.0080)Trp
94	0.656	0.682	(−0.2429)+(−0.0001)Ala+(−0.0026)Leu+(0.0011)Lys+(0.0047)Glu+(−0.0082)His+(0.1039)3−MeHis
95	0.656	0.683	(−0.4025)+(−0.0021)Leu+(0.0054)Glu+(−0.0001)Phe+(0.0880)3−MeHis+(0.0000)Cit+(−0.0063)Trp
96	0.656	0.683	(−0.3969)+(−0.0022)Leu+(0.0054)Glu+(0.0153)α−AAA+(0.0873)3−MeHis+(−0.0001)Cit+(−0.0063)Trp
97	0.656	0.680	(−0.4363)+(−0.0001)Ala+(−0.0091)Hypro+(0.0045)Glu+(−0.0018)Met+(0.0953)3−MeHis+(−0.0073)Trp
98	0.656	0.684	(−0.5865)+(0.0009)Pro+(0.0057)Glu+(−0.0040)Met+(0.0058)Cit+(−0.0089)Trp
99	0.655	0.688	(−0.6030)+(−0.0531)Sar+(−0.0034)Leu+(0.0046)Glu+(0.0265)α−AAA+(0.1048)3−MeHis+(0.0007)Arg
100	0.655	0.688	(−0.3724)+(−0.0078)Sar+(−0.0021)Ser+(0.0058)Glu+(0.0012)Arg+(0.0051)Cit+(−0.0094)Trp

[図83]



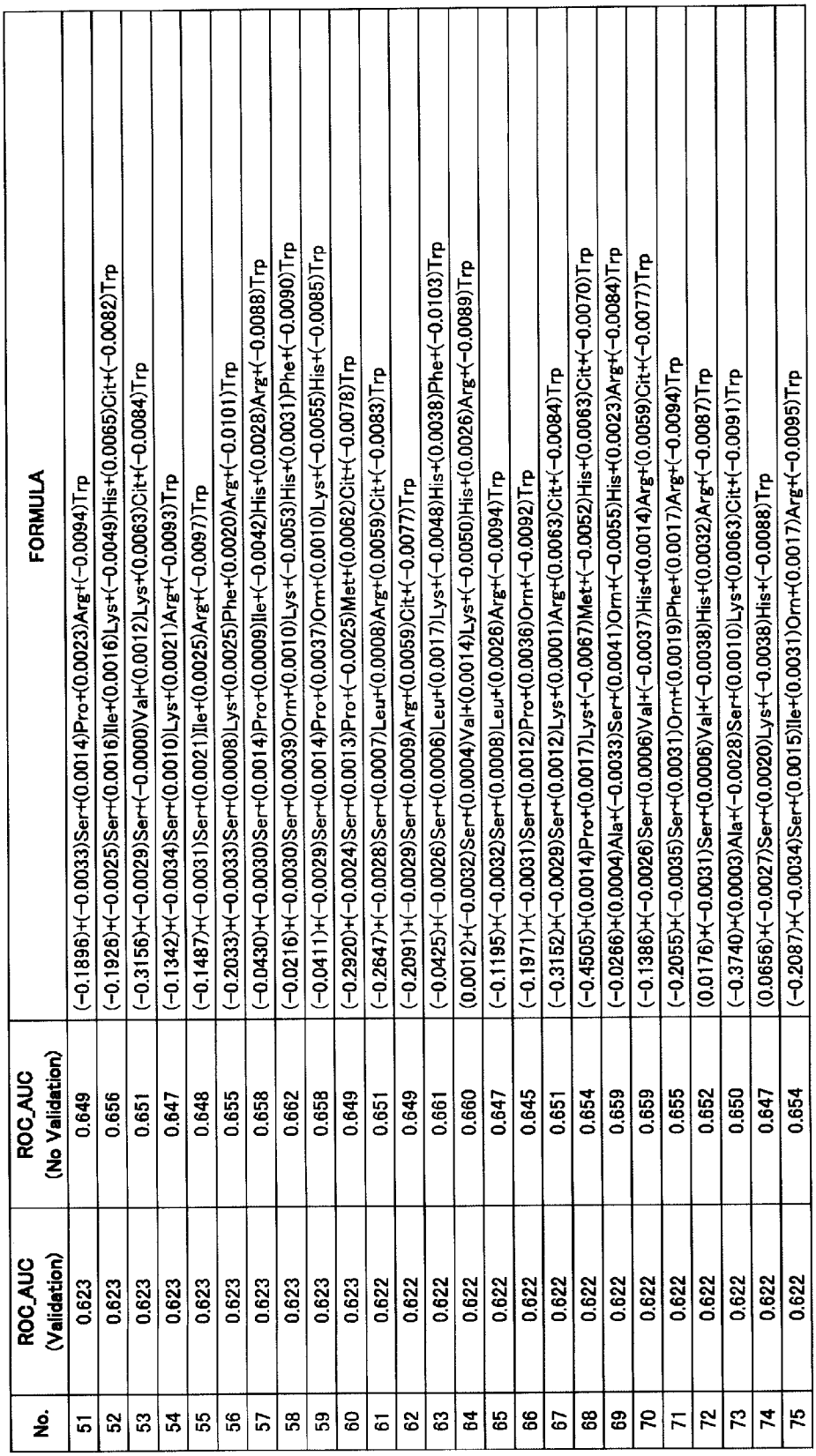
No.	ROC_AUC (Validation)	ROC_AUC (No Validation)	FORMULA
1	0.632	0.660	(-0.1474)+(-0.0027)Ser+(0.0018)Lys+(-0.0047)His+(0.0067)Cit+(-0.0075)Trp
2	0.631	0.662	(0.0465)+(-0.0035)Ser+(0.0043)Orn+(-0.0048)His+(0.0023)Arg+(-0.0074)Trp
3	0.630	0.651	(-0.3158)+(-0.0029)Ser+(0.0012)Lys+(0.0063)Cit+(-0.0084)Trp
4	0.630	0.668	(-0.0369)+(-0.0032)Ser+(0.0013)Lys+(-0.0053)His+(0.0034)Phe+(0.0023)Arg+(-0.0095)Trp
5	0.629	0.661	(-0.2064)+(-0.0026)Ser+(0.0012)Pro+(0.0016)Lys+(-0.0053)His+(0.0061)Cit+(-0.0080)Trp
6	0.629	0.653	(-0.1487)+(-0.0036)Ser+(0.0034)Orn+(0.0018)Arg+(-0.0087)Trp
7	0.628	0.664	(0.0082)+(-0.0034)Ser+(0.0004)Val+(0.0041)Orn+(-0.0052)His+(0.0023)Arg+(-0.0079)Trp
8	0.628	0.657	(-0.0210)+(-0.0031)Ser+(0.0016)Pro+(-0.0040)His+(0.0029)Arg+(-0.0084)Trp
9	0.628	0.660	(-0.1512)+(-0.0026)Ser+(0.0018)Lys+(-0.0007)Met+(-0.0046)His+(0.0067)Cit+(-0.0074)Trp
10	0.628	0.649	(-0.2953)+(-0.0026)Ser+(0.0012)Pro+(0.0060)Cit+(-0.0082)Trp
11	0.627	0.664	(0.0123)+(-0.0033)Ser+(0.0008)Leu+(0.0040)Orn+(-0.0053)His+(0.0023)Arg+(-0.0080)Trp
12	0.627	0.660	(0.0370)+(-0.0033)Ser+(0.0015)Lys+(-0.0047)His+(0.0025)Arg+(-0.0084)Trp
13	0.627	0.663	(-0.0166)+(-0.0032)Ser+(0.0019)Ile+(0.0040)Orn+(-0.0051)His+(0.0022)Arg+(-0.0083)Trp
14	0.627	0.657	(0.0470)+(-0.0031)Ser+(0.0043)Orn+(0.0011)Lys+(-0.0048)His+(-0.0080)Trp
15	0.627	0.661	(-0.0390)+(-0.0033)Ser+(0.0013)Pro+(0.0037)Orn+(-0.0054)His+(0.0021)Arg+(-0.0080)Trp
16	0.627	0.658	(-0.1751)+(-0.0025)Ser+(0.0007)Leu+(0.0017)Lys+(-0.0051)His+(0.0066)Cit+(-0.0080)Trp
17	0.626	0.655	(0.0187)+(-0.0030)Ser+(0.0014)Leu+(-0.0041)His+(0.0031)Arg+(-0.0088)Trp
18	0.626	0.666	(-0.0197)+(-0.0034)Ser+(0.0039)Orn+(-0.0053)His+(0.0030)Phe+(0.0021)Arg+(-0.0084)Trp
19	0.626	0.662	(-0.0912)+(-0.0031)Ser+(0.0015)Pro+(-0.0047)His+(0.0033)Phe+(0.0027)Arg+(-0.0094)Trp
20	0.626	0.662	(-0.0734)+(0.0004)Ala+(-0.0030)Ser+(-0.0046)His+(0.0035)Phe+(0.0029)Arg+(-0.0099)Trp
21	0.626	0.664	(0.0265)+(-0.0035)Ser+(0.0036)Orn+(0.0008)Lys+(-0.0054)His+(0.0020)Arg+(-0.0078)Trp
22	0.625	0.663	(-0.0035)+(-0.0031)Ser+(0.0010)Leu+(0.0013)Lys+(-0.0052)His+(0.0025)Arg+(-0.0091)Trp
23	0.625	0.660	(-0.1741)+(-0.0026)Ser+(0.0003)Val+(0.0017)Lys+(-0.0050)His+(0.0067)Cit+(-0.0078)Trp
24	0.625	0.642	(-0.0533)+(-0.0033)Ser+(0.0028)Arg+(-0.0087)Trp
25	0.625	0.642	(-0.1928)+(-0.0026)Ser+(0.0068)Cit+(-0.0074)Trp

[図84]



No.	ROC_AUC (Validation)	ROC_AUC (No Validation)	FORMULA
26	0.625	0.661	(−0.0584)+(−0.0031)Ser+(0.0015)Pro+(0.0013)Lys+(−0.0055)His+(0.0023)Arg+(−0.0089)Trp
27	0.625	0.659	(−0.1292)+(−0.0028)Ser+(0.0017)Orn+(0.0014)Lys+(−0.0050)His+(0.0059)Cit+(−0.0074)Trp
28	0.625	0.658	(−0.0116)+(−0.0032)Ser+(−0.0040)His+(0.0041)Phe+(0.0029)Arg+(−0.0092)Trp
29	0.625	0.662	(−0.0466)+(−0.0030)Ser+(0.0010)Leu+(−0.0046)His+(0.0035)Phe+(0.0029)Arg+(−0.0097)Trp
30	0.625	0.659	(−0.0314)+(0.0004)Ala+(−0.0031)Ser+(0.0013)Lys+(−0.0053)His+(0.0026)Arg+(−0.0093)Trp
31	0.625	0.661	(−0.0261)+(−0.0030)Ser+(0.0020)Ile+(0.0013)Lys+(−0.0050)His+(0.0024)Arg+(−0.0093)Trp
32	0.625	0.653	(−0.3853)+(−0.0028)Ser+(0.0010)Pro+(0.0010)Lys+(0.0057)Cit+(−0.0089)Trp
33	0.625	0.655	(−0.0735)+(−0.0028)Ser+(−0.0029)His+(0.0014)Arg+(0.0059)Cit+(−0.0069)Trp
34	0.625	0.659	(−0.0247)+(−0.0027)Ser+(0.0018)Lys+(−0.0045)His+(0.0040)Phe+(−0.0100)Trp
35	0.624	0.651	(−0.1593)+(−0.0033)Ser+(0.0031)Phe+(0.0024)Arg+(−0.0098)Trp
36	0.624	0.661	(−0.1409)+(−0.0028)Ser+(0.0017)Lys+(−0.0048)His+(0.0004)Arg+(0.0063)Cit+(−0.0075)Trp
37	0.624	0.656	(−0.2076)+(0.0004)Ala+(−0.0025)Ser+(0.0016)Lys+(−0.0052)His+(0.0067)Cit+(−0.0083)Trp
38	0.624	0.661	(−0.1838)+(−0.0026)Ser+(0.0017)Lys+(−0.0051)His+(0.0021)Phe+(0.0064)Cit+(−0.0082)Trp
39	0.624	0.654	(−0.3067)+(−0.0028)Ser+(0.0012)Pro+(0.0008)Arg+(0.0053)Cit+(−0.0084)Trp
40	0.624	0.659	(−0.1448)+(−0.0027)Ser+(0.0013)Pro+(−0.0038)His+(0.0013)Arg+(0.0052)Cit+(−0.0075)Trp
41	0.624	0.661	(0.0495)+(−0.0035)Ser+(0.0043)Orn+(0.0008)Met+(−0.0049)His+(0.0022)Arg+(−0.0076)Trp
42	0.624	0.656	(−0.1386)+(−0.0027)Ser+(0.0012)Pro+(0.0028)Orn+(−0.0043)His+(0.0049)Cit+(−0.0073)Trp
43	0.624	0.663	(−0.0675)+(−0.0029)Ser+(0.0020)Ile+(−0.0043)His+(0.0035)Phe+(0.0028)Arg+(−0.0099)Trp
44	0.624	0.656	(−0.0012)+(−0.0029)Ser+(0.0025)Ile+(−0.0036)His+(0.0030)Arg+(−0.0090)Trp
45	0.624	0.649	(0.0855)+(−0.0032)Ser+(−0.0030)His+(0.0032)Arg+(−0.0079)Trp
46	0.624	0.647	(0.0798)+(−0.0030)Ser+(0.0053)Orn+(−0.0038)His+(−0.0075)Trp
47	0.623	0.645	(−0.2803)+(−0.0024)Ser+(0.0019)Ile+(0.0065)Cit+(−0.0085)Trp
48	0.623	0.658	(−0.1307)+(−0.0025)Ser+(0.0013)Leu+(−0.0039)His+(0.0013)Arg+(0.0058)Cit+(−0.0078)Trp
49	0.623	0.652	(−0.1560)+(−0.0024)Ser+(0.0013)Pro+(−0.0031)His+(0.0063)Cit+(−0.0074)Trp
50	0.623	0.653	(−0.1508)+(−0.0036)Ser+(0.0000)Val+(0.0034)Orn+(0.0018)Arg+(−0.0087)Trp

[図85]



No.	ROC_AUC (Validation)	ROC_AUC (No Validation)	FORMULA
51	0.623	0.649	(−0.1896)+(−0.0033)Ser+(0.0014)Pro+(0.0023)Arg+(−0.0094)Trp
52	0.623	0.656	(−0.1926)+(−0.0025)Ser+(0.0016)Ile+(0.0016)Lys+(−0.0049)His+(0.0065)Cit+(−0.0082)Trp
53	0.623	0.651	(−0.3156)+(−0.0029)Ser+(−0.0000)Val+(0.0012)Lys+(0.0063)Cit+(−0.0084)Trp
54	0.623	0.647	(−0.1342)+(−0.0034)Ser+(0.0010)Lys+(0.0021)Arg+(−0.0093)Trp
55	0.623	0.648	(−0.1487)+(−0.0031)Ser+(0.0021)Ile+(0.0025)Arg+(−0.0097)Trp
56	0.623	0.655	(−0.2033)+(−0.0033)Ser+(0.0008)Lys+(0.0025)Phe+(0.0020)Arg+(−0.0101)Trp
57	0.623	0.658	(−0.0430)+(−0.0030)Ser+(0.0014)Pro+(0.0009)Ile+(−0.0042)His+(0.0028)Arg+(−0.0088)Trp
58	0.623	0.662	(−0.0216)+(−0.0030)Ser+(0.0039)Orn+(0.0010)Lys+(−0.0053)His+(0.0031)Phe+(−0.0090)Trp
59	0.623	0.658	(−0.0411)+(−0.0029)Ser+(0.0014)Pro+(0.0037)Orn+(0.0010)Lys+(−0.0055)His+(−0.0085)Trp
60	0.623	0.649	(−0.2920)+(−0.0024)Ser+(0.0013)Pro+(−0.0025)Met+(0.0062)Cit+(−0.0078)Trp
61	0.622	0.651	(−0.2647)+(−0.0028)Ser+(0.0007)Leu+(0.0008)Arg+(0.0059)Cit+(−0.0083)Trp
62	0.622	0.649	(−0.2091)+(−0.0029)Ser+(0.0009)Arg+(0.0059)Cit+(−0.0077)Trp
63	0.622	0.661	(−0.0425)+(−0.0026)Ser+(0.0006)Leu+(0.0017)Lys+(−0.0048)His+(0.0038)Phe+(−0.0103)Trp
64	0.622	0.660	(0.0012)+(−0.0032)Ser+(0.0004)Val+(0.0014)Lys+(−0.0050)His+(0.0026)Arg+(−0.0089)Trp
65	0.622	0.647	(−0.1195)+(−0.0032)Ser+(0.0008)Leu+(0.0026)Arg+(−0.0094)Trp
66	0.622	0.645	(−0.1971)+(−0.0031)Ser+(0.0012)Pro+(0.0036)Orn+(−0.0092)Trp
67	0.622	0.651	(−0.3152)+(−0.0029)Ser+(0.0012)Lys+(0.0001)Arg+(0.0063)Cit+(−0.0084)Trp
68	0.622	0.654	(−0.4505)+(0.0014)Pro+(0.0017)Lys+(−0.0067)Met+(−0.0052)His+(0.0063)Cit+(−0.0070)Trp
69	0.622	0.659	(−0.0266)+(0.0004)Ala+(−0.0033)Ser+(0.0041)Orn+(−0.0055)His+(0.0023)Arg+(−0.0084)Trp
70	0.622	0.659	(−0.1386)+(−0.0026)Ser+(0.0006)Val+(−0.0037)His+(0.0014)Arg+(0.0059)Cit+(−0.0077)Trp
71	0.622	0.655	(−0.2055)+(−0.0035)Ser+(0.0031)Orn+(0.0019)Phe+(0.0017)Arg+(−0.0094)Trp
72	0.622	0.652	(0.0176)+(−0.0031)Ser+(0.0006)Val+(−0.0038)His+(0.0032)Arg+(−0.0087)Trp
73	0.622	0.650	(−0.3740)+(0.0003)Ala+(−0.0028)Ser+(0.0010)Lys+(0.0063)Cit+(−0.0091)Trp
74	0.622	0.647	(0.0656)+(−0.0027)Ser+(0.0020)Lys+(−0.0038)His+(−0.0088)Trp
75	0.622	0.654	(−0.2087)+(−0.0034)Ser+(0.0015)Ile+(0.0031)Orn+(0.0017)Arg+(−0.0095)Trp

[図86]

No.	ROC_AUC (Validation)	ROC_AUC (No Validation)	FORMULA
76	0.622	0.646	(-0.1535)+(0.0004)Ala+(-0.0032)Ser+(0.0026)Arg+(-0.0097)Trp
77	0.622	0.660	(-0.0627)+(-0.0030)Ser+(0.0005)Val+(-0.0046)His+(0.0039)Phe+(0.0029)Arg+(-0.0098)Trp
78	0.622	0.649	(-0.6363)+(0.0013)Pro+(0.0012)Lys+(-0.0093)Met+(0.0061)Cit+(-0.0076)Trp
79	0.622	0.650	(-0.2603)+(-0.0028)Ser+(0.0003)Val+(0.0009)Arg+(0.0059)Cit+(-0.0082)Trp
80	0.622	0.652	(-0.0117)+(-0.0029)Ser+(0.0014)Pro+(0.0046)Orn+(-0.0045)His+(-0.0080)Trp
81	0.622	0.659	(-0.1452)+(-0.0025)Ser+(0.0022)Ile+(-0.0035)His+(0.0012)Arg+(0.0057)Cit+(-0.0079)Trp
82	0.621	0.660	(0.0334)+(-0.0032)Ser+(0.0015)Lys+(-0.0008)Met+(-0.0046)His+(0.0025)Arg+(-0.0084)Trp
83	0.621	0.650	(-0.3585)+(-0.0027)Ser+(0.0013)Ile+(0.0010)Lys+(0.0062)Cit+(-0.0090)Trp
84	0.621	0.650	(-0.3193)+(-0.0029)Ser+(0.0011)Pro+(0.0018)Orn+(0.0050)Cit+(-0.0084)Trp
85	0.621	0.658	(-0.0387)+(-0.0030)Ser+(0.0015)Pro+(0.0005)Leu+(-0.0044)His+(0.0029)Arg+(-0.0087)Trp
86	0.621	0.653	(-0.1579)+(-0.0036)Ser+(0.0001)Leu+(0.0033)Orn+(0.0018)Arg+(-0.0088)Trp
87	0.621	0.654	(-0.0020)+(-0.0030)Ser+(0.0048)Orn+(-0.0045)His+(0.0035)Phe+(-0.0086)Trp
88	0.621	0.651	(-0.2165)+(-0.0031)Ser+(0.0017)Ile+(0.0025)Phe+(0.0023)Arg+(-0.0105)Trp
89	0.621	0.653	(-0.1445)+(-0.0035)Ser+(0.0035)Orn+(-0.0021)Met+(0.0019)Arg+(-0.0084)Trp
90	0.621	0.649	(-0.2976)+(-0.0026)Ser+(0.0012)Pro+(0.0000)Leu+(0.0060)Cit+(-0.0082)Trp
91	0.621	0.650	(-0.3255)+(-0.0028)Ser+(0.0002)Leu+(0.0011)Lys+(0.0063)Cit+(-0.0086)Trp
92	0.621	0.642	(-0.3946)+(0.0016)Lys+(-0.0054)His+(0.0067)Cit+(-0.0072)Trp
93	0.621	0.656	(-0.3059)+(-0.0026)Ser+(0.0013)Pro+(-0.0039)Met+(0.0011)Arg+(0.0053)Cit+(-0.0078)Trp
94	0.621	0.657	(0.0259)+(-0.0029)Ser+(0.0005)Leu+(0.0041)Orn+(0.0010)Lys+(-0.0051)His+(-0.0084)Trp
95	0.621	0.643	(-0.3650)+(0.0017)Leu+(-0.0042)His+(0.0069)Cit+(-0.0078)Trp
96	0.621	0.656	(-0.0110)+(-0.0028)Ser+(0.0018)Ile+(0.0041)Orn+(0.0010)Lys+(-0.0050)His+(-0.0088)Trp
97	0.621	0.657	(0.0332)+(-0.0030)Ser+(0.0001)Val+(0.0042)Orn+(0.0011)Lys+(-0.0049)His+(-0.0082)Trp
98	0.620	0.650	(-0.3189)+(-0.0026)Ser+(0.0013)Lys+(-0.0032)Met+(0.0065)Cit+(-0.0080)Trp
99	0.620	0.645	(-0.2505)+(-0.0025)Ser+(0.0004)Val+(0.0068)Cit+(-0.0080)Trp
100	0.620	0.644	(-0.2363)+(-0.0029)Ser+(0.0023)Orn+(0.0054)Cit+(-0.0077)Trp

[図87]

No.	ROC_AUC (Validation)	ROC_AUC (No Validation)	FORMULA
1	0.669	0.686	(-0.0232)Hypro+(0.0110)Glu+(0.1855)3-MeHis+(-0.0269)Trp
2	0.667	0.691	(-0.1282)Sar+(0.0109)Glu+(0.1751)3-MeHis+(-0.0262)Trp
3	0.667	0.692	(-0.0989)Sar+(-0.0184)Hypro+(0.0107)Glu+(0.1930)3-MeHis+(-0.0260)Trp
4	0.666	0.686	(-0.0032)Leu+(0.0124)Glu+(0.1640)3-MeHis+(-0.0240)Trp
5	0.666	0.690	(-0.0219)Hypro+(-0.0023)Leu+(0.0117)Glu+(0.1883)3-MeHis+(-0.0244)Trp
6	0.665	0.685	(-0.0031)β-AIBA+(-0.0231)Hypro+(0.0109)Glu+(0.1869)3-MeHis+(-0.0269)Trp
7	0.665	0.690	(-0.1281)Sar+(-0.0094)β-AIBA+(0.0106)Glu+(0.1797)3-MeHis+(-0.0264)Trp
8	0.665	0.693	(-0.1015)Sar+(-0.0206)Hypro+(0.0090)Glu+(0.1764)3-MeHis+(-0.0269)Trp+(0.0078)Cys
9	0.664	0.685	(-0.0238)Hypro+(0.0010)Ile+(0.0107)Glu+(0.1850)3-MeHis+(-0.0274)Trp
10	0.664	0.685	(0.0000)Ala+(-0.0233)Hypro+(0.0109)Glu+(0.1855)3-MeHis+(-0.0269)Trp
11	0.664	0.692	(-0.1180)Sar+(-0.0018)Leu+(0.0115)Glu+(0.1771)3-MeHis+(-0.0243)Trp
12	0.664	0.688	(-0.0232)Hypro+(0.0112)Glu+(-0.0026)Phe+(0.1897)3-MeHis+(-0.0257)Trp
13	0.664	0.692	(-0.0993)Sar+(-0.0044)β-AIBA+(-0.0181)Hypro+(0.0106)Glu+(0.1949)3-MeHis+(-0.0261)Trp
14	0.664	0.691	(-0.1284)Sar+(0.0000)Ala+(0.0108)Glu+(0.1751)3-MeHis+(-0.0263)Trp
15	0.663	0.695	(-0.1199)Sar+(-0.0193)Hypro+(0.0026)Lys+(0.0102)Glu+(0.1890)3-MeHis+(-0.0284)Trp
16	0.663	0.690	(-0.1246)Sar+(-0.0004)Val+(0.0111)Glu+(0.1752)3-MeHis+(-0.0255)Trp
17	0.663	0.690	(-0.1302)Sar+(0.0006)Ile+(0.0107)Glu+(0.1746)3-MeHis+(-0.0265)Trp
18	0.663	0.686	(-0.0247)Hypro+(0.0019)Lys+(0.0106)Glu+(0.1817)3-MeHis+(-0.0287)Trp
19	0.663	0.686	(-0.0007)Pro+(-0.0221)Hypro+(0.0113)Glu+(0.1899)3-MeHis+(-0.0265)Trp
20	0.663	0.686	(-0.0027)Ser+(-0.0218)Hypro+(0.0108)Glu+(0.1787)3-MeHis+(-0.0269)Trp
21	0.663	0.691	(-0.0998)Sar+(0.0001)Ala+(-0.0186)Hypro+(0.0104)Glu+(0.1928)3-MeHis+(-0.0263)Trp
22	0.663	0.686	(-0.0003)Val+(-0.0228)Hypro+(0.0111)Glu+(0.1853)3-MeHis+(-0.0264)Trp
23	0.663	0.694	(-0.0923)Sar+(-0.0179)Hypro+(-0.0013)Leu+(0.0111)Glu+(0.1939)3-MeHis+(-0.0246)Trp
24	0.663	0.700	(-0.1207)Sar+(0.0060)Lys+(0.0096)Glu+(-0.0290)His+(0.2000)3-MeHis+(-0.0221)Trp
25	0.663	0.686	(-0.0255)Hypro+(0.0093)Glu+(0.1689)3-MeHis+(-0.0278)Trp+(0.0078)Cys

[図88]

No.	ROC_AUC (Validation)	ROC_AUC (No Validation)	FORMULA
26	0.663	0.691	(−0.1336)Sar+(0.0095)Glu+(0.1585)3−MeHis+(−0.0272)Trp+(0.0069)Cys
27	0.663	0.685	(−0.0241)Hypro+(0.0014)Orn+(0.0107)Glu+(0.1831)3−MeHis+(−0.0271)Trp
28	0.662	0.692	(−0.0998)Sar+(0.0001)Val+(−0.0186)Hypro+(0.0106)Glu+(0.1932)3−MeHis+(−0.0262)Trp
29	0.662	0.689	(−0.1048)Sar+(−0.0197)Hypro+(0.0024)Ile+(0.0100)Glu+(0.1923)3−MeHis+(−0.0272)Trp
30	0.662	0.686	(−0.0079) β −AIBA+(−0.0031)Leu+(0.0122)Glu+(0.1679)3−MeHis+(−0.0242)Trp
31	0.662	0.686	(0.0001)Ala+(−0.0032)Leu+(0.0123)Glu+(0.1638)3−MeHis+(−0.0241)Trp
32	0.662	0.682	(0.0115)Glu+(−0.0026)Phe+(0.1620)3−MeHis+(−0.0263)Trp
33	0.662	0.692	(−0.0974)Sar+(−0.0004)Pro+(−0.0177)Hypro+(0.0109)Glu+(0.1958)3−MeHis+(−0.0258)Trp
34	0.662	0.693	(−0.1499)Sar+(0.0025)Lys+(0.0104)Glu+(0.1705)3−MeHis+(−0.0286)Trp
35	0.662	0.692	(−0.0975)Sar+(−0.0185)Hypro+(0.0108)Glu+(−0.0009)Phe+(0.1942)3−MeHis+(−0.0256)Trp
36	0.661	0.691	(−0.0026) β −AIBA+(−0.0218)Hypro+(−0.0023)Leu+(0.0116)Glu+(0.1894)3−MeHis+(−0.0244)Trp
37	0.661	0.690	(−0.0258)Hypro+(0.0097)Glu+(−0.0065)Phe+(0.1761)3−MeHis+(−0.0250)Trp+(0.0092)Cys
38	0.661	0.698	(−0.1379)Sar+(−0.0029)Leu+(0.0029)Lys+(0.0114)Glu+(0.1730)3−MeHis+(−0.0259)Trp
39	0.661	0.687	(−0.0001)Ala+(−0.0253)Hypro+(0.0096)Glu+(0.1690)3−MeHis+(−0.0275)Trp+(0.0079)Cys
40	0.661	0.691	(−0.1326)Sar+(−0.0001)Ala+(0.0097)Glu+(0.1586)3−MeHis+(−0.0269)Trp+(0.0070)Cys
41	0.661	0.683	(−0.0003)Ala+(0.0106)Glu+(0.1421)3−MeHis+(−0.0278)Trp+(0.0067)Cys
42	0.661	0.690	(−0.0243)Hypro+(−0.0020)Leu+(0.0100)Glu+(0.1721)3−MeHis+(−0.0255)Trp+(0.0075)Cys
43	0.661	0.690	(0.0052)Lys+(0.0100)Glu+(−0.0302)His+(0.1873)3−MeHis+(−0.0221)Trp
44	0.661	0.684	(−0.0035) β −AIBA+(−0.0236)Hypro+(0.0010)Ile+(0.0106)Glu+(0.1864)3−MeHis+(−0.0275)Trp
45	0.661	0.692	(−0.0201)Hypro+(0.0108)Glu+(−0.0213)His+(0.2123)3−MeHis+(−0.0193)Trp
46	0.661	0.693	(−0.1322)Sar+(0.0108)Glu+(0.1734)3−MeHis+(0.0007)Arg+(−0.0263)Trp
47	0.661	0.681	(−0.0001)Ala+(−0.0014)Ile+(0.0118)Glu+(0.1599)3−MeHis+(−0.0266)Trp
48	0.661	0.692	(−0.1253)Sar+(−0.0199)Hypro+(0.0042)Orn+(0.0099)Glu+(0.1884)3−MeHis+(−0.0264)Trp
49	0.661	0.686	(−0.0031)Leu+(0.0125)Glu+(−0.0012)Phe+(0.1658)3−MeHis+(−0.0235)Trp
50	0.661	0.695	(−0.1044)Sar+(−0.0189)Hypro+(0.0105)Glu+(0.1909)3−MeHis+(0.0011)Arg+(−0.0261)Trp

[図89]

No.	ROC_AUC (Validation)	ROC_AUC (No Validation)	FORMULA
51	0.661	0.687	(−0.0041)Leu+(0.0021)Lys+(0.0124)Glu+(0.1594)3−MeHis+(−0.0251)Trp
52	0.661	0.689	(0.0002)Ala+(−0.0221)Hypro+(−0.0024)Leu+(0.0114)Glu+(0.1881)3−MeHis+(−0.0246)Trp
53	0.660	0.695	(−0.0237)Hypro+(0.0056)Lys+(0.0097)Glu+(−0.0301)His+(0.2133)3−MeHis+(−0.0219)Trp
54	0.660	0.690	(−0.1281)Sar+(0.0000)Ala+(−0.0094)β−AIBA+(0.0106)Glu+(0.1797)3−MeHis+(−0.0264)Trp
55	0.660	0.685	(0.0000)Ala+(−0.0031)β−AIBA+(−0.0231)Hypro+(0.0108)Glu+(0.1868)3−MeHis+(−0.0270)Trp
56	0.660	0.689	(−0.1220)Sar+(−0.0011)Pro+(0.0114)Glu+(0.1833)3−MeHis+(−0.0257)Trp
57	0.660	0.686	(−0.0029)β−AIBA+(−0.0003)Val+(−0.0226)Hypro+(0.0110)Glu+(0.1865)3−MeHis+(−0.0265)Trp
58	0.660	0.685	(−0.0030)Leu+(0.0112)Glu+(0.1483)3−MeHis+(−0.0251)Trp+(0.0061)Cys
59	0.660	0.695	(−0.1435)Sar+(−0.0010)Val+(0.0028)Lys+(0.0109)Glu+(0.1702)3−MeHis+(−0.0271)Trp
60	0.660	0.693	(−0.1182)Sar+(−0.0088)β−AIBA+(−0.0017)Leu+(0.0113)Glu+(0.1813)3−MeHis+(−0.0246)Trp
61	0.660	0.688	(−0.0035)β−AIBA+(−0.0230)Hypro+(0.0111)Glu+(−0.0026)Phe+(0.1913)3−MeHis+(−0.0257)Trp
62	0.660	0.692	(−0.1249)Sar+(−0.0015)Leu+(0.0101)Glu+(0.1607)3−MeHis+(−0.0256)Trp+(0.0067)Cys
63	0.660	0.689	(−0.1505)Sar+(0.0033)Orn+(0.0102)Glu+(0.1705)3−MeHis+(−0.0266)Trp
64	0.660	0.684	(−0.0221)Hypro+(−0.0083)Leu+(0.0103)Glu+(0.2275)3−MeHis
65	0.660	0.686	(−0.0232)Hypro+(0.0108)Glu+(0.0136)α−AAA+(0.1848)3−MeHis+(−0.0269)Trp
66	0.660	0.691	(−0.0219)Hypro+(−0.0021)Leu+(0.0118)Glu+(−0.0016)Phe+(0.1906)3−MeHis+(−0.0238)Trp
67	0.660	0.692	(−0.1300)Sar+(−0.0004)Val+(0.0098)Glu+(0.1586)3−MeHis+(−0.0265)Trp+(0.0069)Cys
68	0.660	0.691	(−0.0932)Sar+(−0.0021)Ser+(−0.0176)Hypro+(0.0106)Glu+(0.1872)3−MeHis+(−0.0260)Trp
69	0.660	0.688	(−0.1305)Sar+(−0.0099)β−AIBA+(0.0008)Ile+(0.0104)Glu+(0.1793)3−MeHis+(−0.0269)Trp
70	0.660	0.690	(−0.0004)Pro+(−0.0212)Hypro+(−0.0021)Leu+(0.0119)Glu+(0.1909)3−MeHis+(−0.0243)Trp
71	0.660	0.689	(−0.1357)Sar+(0.0007)Ile+(0.0093)Glu+(0.1579)3−MeHis+(−0.0276)Trp+(0.0069)Cys
72	0.660	0.688	(−0.0036)Ser+(−0.0231)Hypro+(0.0023)Lys+(0.0104)Glu+(0.1716)3−MeHis+(−0.0292)Trp
73	0.660	0.688	(−0.0003)Val+(−0.0228)Hypro+(0.0113)Glu+(−0.0025)Phe+(0.1894)3−MeHis+(−0.0253)Trp
74	0.660	0.686	(−0.0234)Hypro+(0.0109)Glu+(0.1850)3−MeHis+(0.0002)Arg+(−0.0269)Trp
75	0.659	0.686	(−0.0067)β−AIBA+(−0.0252)Hypro+(0.0091)Glu+(0.1716)3−MeHis+(−0.0279)Trp+(0.0079)Cys

[図90]

No.	ROC_AUC (Validation)	ROC_AUC (No Validation)	FORMULA
76	0.659	0.693	(-0.0233)Hypro+(-0.0033)Leu+(0.0024)Lys+(0.0116)Glu+(0.1848)3-MeHis+(-0.0255)Trp
77	0.659	0.692	(-0.1103)Sar+(-0.0195)Hypro+(0.0109)Glu+(0.0069)Met+(0.1939)3-MeHis+(-0.0271)Trp
78	0.659	0.685	(-0.0232)Hypro+(0.0109)Glu+(-0.0002)Met+(0.1855)3-MeHis+(-0.0268)Trp
79	0.659	0.685	(-0.0038) β -AIBA+(-0.0007)Pro+(-0.0218)Hypro+(0.0112)Glu+(0.1917)3-MeHis+(-0.0266)Trp
80	0.659	0.685	(-0.0067)Leu+(0.0110)Glu+(-0.0147)Phe+(0.1988)3-MeHis+(0.0074)Cys
81	0.659	0.699	(-0.0975)Sar+(0.0104)Glu+(-0.0226)His+(0.1936)3-MeHis+(0.0033)Arg+(-0.0189)Trp
82	0.659	0.694	(-0.1493)Sar+(-0.0001)Ala+(0.0025)Lys+(0.0106)Glu+(0.1707)3-MeHis+(-0.0284)Trp
83	0.659	0.688	(-0.0006)Pro+(-0.0222)Hypro+(0.0115)Glu+(-0.0023)Phe+(0.1931)3-MeHis+(-0.0255)Trp
84	0.659	0.684	(0.0104)Glu+(-0.0058)Phe+(0.1477)3-MeHis+(-0.0259)Trp+(0.0077)Cys
85	0.659	0.686	(-0.0240)Hypro+(0.0014)Ile+(0.0109)Glu+(-0.0030)Phe+(0.1895)3-MeHis+(-0.0262)Trp
86	0.659	0.689	(-0.1340)Sar+(-0.0134) β -AIBA+(0.0091)Glu+(0.1646)3-MeHis+(-0.0275)Trp+(0.0071)Cys
87	0.659	0.683	(-0.0012)Pro+(-0.0028)Leu+(0.0129)Glu+(0.1732)3-MeHis+(-0.0238)Trp
88	0.659	0.687	(0.0001)Ala+(-0.0234)Hypro+(0.0111)Glu+(-0.0028)Phe+(0.1898)3-MeHis+(-0.0258)Trp
89	0.659	0.685	(-0.0042) β -AIBA+(-0.0245)Hypro+(0.0019)Lys+(0.0105)Glu+(0.1835)3-MeHis+(-0.0288)Trp
90	0.659	0.686	(-0.0034)Leu+(0.0008)Orn+(0.0123)Glu+(0.1623)3-MeHis+(-0.0239)Trp
91	0.659	0.687	(-0.0217)Hypro+(-0.0063)Leu+(0.0115)Glu+(-0.0113)Phe+(0.2363)3-MeHis
92	0.659	0.692	(0.0013)Val+(-0.0231)Hypro+(-0.0038)Leu+(0.0116)Glu+(0.1910)3-MeHis+(-0.0248)Trp
93	0.659	0.691	(-0.1185)Sar+(0.0001)Ala+(-0.0019)Leu+(0.0113)Glu+(0.1768)3-MeHis+(-0.0245)Trp
94	0.659	0.689	(-0.0249)Hypro+(0.0022)Lys+(0.0110)Glu+(-0.0046)Phe+(0.1885)3-MeHis+(-0.0268)Trp
95	0.659	0.685	(-0.0054) β -AIBA+(-0.0027)Ser+(-0.0214)Hypro+(0.0107)Glu+(0.1809)3-MeHis+(-0.0270)Trp
96	0.659	0.685	(-0.0261)Hypro+(0.0011)Ile+(0.0090)Glu+(0.1681)3-MeHis+(-0.0284)Trp+(0.0078)Cys
97	0.659	0.682	(-0.0015)Ile+(0.0105)Glu+(0.1436)3-MeHis+(-0.0276)Trp+(0.0064)Cys
98	0.659	0.690	(-0.1301)Sar+(-0.0000)Ala+(0.0006)Ile+(0.0107)Glu+(0.1746)3-MeHis+(-0.0265)Trp
99	0.659	0.691	(-0.1276)Sar+(0.0109)Glu+(-0.0004)Phe+(0.1756)3-MeHis+(-0.0260)Trp
100	0.658	0.686	(-0.0003)Val+(-0.0251)Hypro+(0.0095)Glu+(0.1688)3-MeHis+(-0.0273)Trp+(0.0078)Cys

[図91]

No.	ROC_AUC (Validation)	ROC_AUC (No Validation)	FORMULA
1	0.623	0.660	(-0.0090)Ser+(0.0072)Lys+(-0.0201)His+(0.0153)Cit+(-0.0266)Trp
2	0.620	0.661	(-0.0100)Ser+(0.0084)Orn+(0.0055)Lys+(-0.0225)His+(0.0121)Cit+(-0.0261)Trp
3	0.620	0.660	(-0.0084)Ser+(0.0040)Leu+(0.0067)Lys+(-0.0223)His+(0.0152)Cit+(-0.0301)Trp
4	0.619	0.661	(-0.0088)Ser+(0.0035)Pro+(0.0071)Lys+(-0.0227)His+(0.0130)Cit+(-0.0281)Trp
5	0.619	0.659	(-0.0115)Ser+(0.0063)Lys+(-0.0181)His+(0.0060)Arg+(-0.0306)Trp
6	0.619	0.664	(-0.0119)Ser+(0.0121)Orn+(0.0042)Lys+(-0.0222)His+(0.0040)Arg+(-0.0284)Trp
7	0.619	0.657	(0.0014)Ala+(-0.0083)Ser+(0.0069)Lys+(-0.0224)His+(0.0150)Cit+(-0.0296)Trp
8	0.618	0.669	(-0.0112)Ser+(0.0058)Lys+(-0.0201)His+(0.0134)Phe+(0.0052)Arg+(-0.0350)Trp
9	0.618	0.658	(-0.0084)Ser+(0.0075)Ile+(0.0067)Lys+(-0.0213)His+(0.0145)Cit+(-0.0306)Trp
10	0.617	0.659	(-0.0117)Ser+(0.0147)Orn+(-0.0190)His+(0.0052)Arg+(-0.0256)Trp
11	0.617	0.657	(-0.0113)Ser+(0.0135)Orn+(0.0048)Lys+(-0.0210)His+(-0.0295)Trp
12	0.617	0.660	(-0.0090)Ser+(0.0072)Lys+(-0.0201)His+(0.0001)Arg+(0.0153)Cit+(-0.0266)Trp
13	0.616	0.661	(-0.0085)Ser+(0.0020)Val+(0.0068)Lys+(-0.0220)His+(0.0156)Cit+(-0.0293)Trp
14	0.616	0.667	(-0.0090)Ser+(0.0067)Lys+(-0.0213)His+(0.0095)Phe+(0.0138)Cit+(-0.0301)Trp
15	0.616	0.658	(0.0015)Ala+(-0.0108)Ser+(0.0059)Lys+(-0.0211)His+(0.0063)Arg+(-0.0337)Trp
16	0.616	0.656	(-0.0110)Ser+(0.0036)Pro+(0.0115)Orn+(0.0051)Lys+(-0.0236)His+(-0.0307)Trp
17	0.616	0.660	(-0.0113)Ser+(0.0035)Pro+(0.0132)Orn+(-0.0210)His+(0.0049)Arg+(-0.0265)Trp
18	0.616	0.657	(-0.0111)Ser+(0.0042)Pro+(0.0063)Lys+(-0.0215)His+(0.0051)Arg+(-0.0316)Trp
19	0.615	0.642	(0.0065)Lys+(-0.0221)His+(0.0170)Cit+(-0.0253)Trp
20	0.615	0.662	(-0.0107)Ser+(0.0045)Leu+(0.0056)Lys+(-0.0208)His+(0.0061)Arg+(-0.0343)Trp
21	0.615	0.660	(-0.0090)Ser+(0.0073)Lys+(-0.0011)Met+(-0.0199)His+(0.0154)Cit+(-0.0265)Trp
22	0.615	0.650	(-0.0096)Ser+(0.0134)Orn+(-0.0172)His+(0.0108)Cit+(-0.0232)Trp
23	0.614	0.654	(-0.0104)Ser+(0.0043)Pro+(-0.0144)His+(0.0079)Arg+(-0.0277)Trp
24	0.614	0.661	(-0.0110)Ser+(0.0021)Val+(0.0057)Lys+(-0.0204)His+(0.0064)Arg+(-0.0334)Trp
25	0.614	0.659	(-0.0106)Ser+(0.0085)Ile+(0.0058)Lys+(-0.0195)His+(0.0055)Arg+(-0.0348)Trp

[図92]

No.	ROC_AUC (Validation)	ROC_AUC (No Validation)	FORMULA
26	0.614	0.653	(−0.0093)Ser+(0.0031)Pro+(0.0123)Orn+(−0.0191)His+(0.0092)Cit+(−0.0245)Trp
27	0.613	0.653	(−0.0101)Ser+(0.0063)Leu+(−0.0161)His+(0.0087)Arg+(−0.0323)Trp
28	0.613	0.660	(−0.0101)Ser+(0.0069)Lys+(−0.0182)His+(0.0152)Phe+(−0.0373)Trp
29	0.613	0.662	(−0.0110)Ser+(0.0119)Orn+(0.0046)Lys+(−0.0225)His+(0.0113)Phe+(−0.0332)Trp
30	0.613	0.659	(−0.0107)Ser+(−0.0142)His+(0.0157)Phe+(0.0077)Arg+(−0.0322)Trp
31	0.613	0.658	(−0.0108)Ser+(0.0030)Leu+(0.0128)Orn+(0.0046)Lys+(−0.0226)His+(−0.0321)Trp
32	0.613	0.648	(−0.0099)Ser+(0.0047)Lys+(0.0131)Cit+(−0.0303)Trp
33	0.613	0.647	(−0.0108)Ser+(0.0174)Orn+(−0.0167)His+(−0.0264)Trp
34	0.613	0.652	(0.0014)Ala+(−0.0106)Ser+(0.0132)Orn+(0.0046)Lys+(−0.0236)His+(−0.0325)Trp
35	0.613	0.659	(−0.0108)Ser+(0.0078)Ile+(0.0137)Orn+(−0.0202)His+(0.0047)Arg+(−0.0298)Trp
36	0.613	0.661	(−0.0113)Ser+(0.0023)Val+(0.0140)Orn+(−0.0216)His+(0.0056)Arg+(−0.0292)Trp
37	0.612	0.657	(−0.0106)Ser+(0.0076)Ile+(0.0126)Orn+(0.0045)Lys+(−0.0221)His+(−0.0334)Trp
38	0.612	0.660	(−0.0110)Ser+(0.0040)Leu+(0.0135)Orn+(−0.0215)His+(0.0053)Arg+(−0.0292)Trp
39	0.612	0.650	(−0.0104)Ser+(0.0035)Pro+(0.0155)Orn+(−0.0188)His+(−0.0274)Trp
40	0.612	0.649	(−0.0103)Ser+(0.0077)Lys+(−0.0156)His+(−0.0326)Trp
41	0.612	0.655	(0.0016)Ala+(−0.0110)Ser+(0.0140)Orn+(−0.0222)His+(0.0054)Arg+(−0.0291)Trp
42	0.612	0.661	(−0.0100)Ser+(0.0049)Leu+(−0.0176)His+(0.0136)Phe+(0.0076)Arg+(−0.0358)Trp
43	0.612	0.646	(0.0054)Leu+(0.0058)Lys+(−0.0249)His+(0.0167)Cit+(−0.0300)Trp
44	0.612	0.663	(−0.0102)Ser+(0.0039)Pro+(−0.0166)His+(0.0133)Phe+(0.0068)Arg+(−0.0322)Trp
45	0.611	0.666	(−0.0113)Ser+(0.0131)Orn+(−0.0202)His+(0.0109)Phe+(0.0046)Arg+(−0.0293)Trp
46	0.611	0.656	(−0.0102)Ser+(0.0127)Orn+(−0.0182)His+(0.0026)Arg+(0.0090)Cit+(−0.0233)Trp
47	0.611	0.644	(−0.0102)Ser+(0.0090)Orn+(0.0103)Cit+(−0.0276)Trp
48	0.611	0.646	(0.0090)Ile+(0.0059)Lys+(−0.0232)His+(0.0159)Cit+(−0.0301)Trp
49	0.611	0.655	(−0.0088)Ser+(0.0078)Ile+(0.0122)Orn+(−0.0187)His+(0.0102)Cit+(−0.0276)Trp
50	0.611	0.650	(0.0018)Ala+(−0.0103)Ser+(−0.0151)His+(0.0090)Arg+(−0.0306)Trp

[図93]

No.	ROC_AUC (Validation)	ROC_AUC (No Validation)	FORMULA
51	0.611	0.641	(0.0050)Lys+(−0.0233)Met+(0.0156)Cit+(−0.0266)Trp
52	0.611	0.646	(0.0070)Lys+(−0.0122)Met+(−0.0205)His+(0.0173)Cit+(−0.0241)Trp
53	0.611	0.656	(−0.0079)Ser+(0.0061)Leu+(−0.0162)His+(0.0042)Arg+(0.0128)Cit+(−0.0285)Trp
54	0.611	0.662	(0.0015)Ala+(−0.0101)Ser+(−0.0170)His+(0.0133)Phe+(0.0079)Arg+(−0.0345)Trp
55	0.611	0.659	(−0.0116)Ser+(0.0062)Lys+(0.0020)Met+(−0.0183)His+(0.0059)Arg+(−0.0309)Trp
56	0.611	0.647	(−0.0120)Ser+(0.0109)Orn+(0.0035)Arg+(−0.0306)Trp
57	0.611	0.646	(−0.0110)Ser+(−0.0112)His+(0.0089)Arg+(−0.0268)Trp
58	0.611	0.652	(−0.0099)Ser+(0.0100)Ile+(−0.0135)His+(0.0081)Arg+(−0.0320)Trp
59	0.611	0.657	(−0.0110)Ser+(0.0014)Val+(0.0134)Orn+(0.0046)Lys+(−0.0222)His+(−0.0315)Trp
60	0.611	0.649	(−0.0105)Ser+(0.0052)Orn+(0.0034)Lys+(0.0109)Cit+(−0.0303)Trp
61	0.611	0.645	(0.0037)Pro+(0.0063)Lys+(−0.0247)His+(0.0147)Cit+(−0.0266)Trp
62	0.610	0.646	(−0.0118)Ser+(0.0044)Lys+(0.0044)Arg+(−0.0340)Trp
63	0.610	0.648	(0.0039)Pro+(0.0070)Lys+(−0.0166)Met+(−0.0228)His+(0.0149)Cit+(−0.0251)Trp
64	0.610	0.647	(−0.0100)Ser+(0.0025)Pro+(0.0078)Orn+(0.0089)Cit+(−0.0289)Trp
65	0.610	0.654	(0.0015)Ala+(−0.0097)Ser+(0.0047)Leu+(−0.0180)His+(0.0088)Arg+(−0.0342)Trp
66	0.610	0.650	(−0.0100)Ser+(0.0083)Ile+(0.0160)Orn+(−0.0182)His+(−0.0309)Trp
67	0.610	0.641	(0.0028)Pro+(0.0032)Lys+(0.0127)Cit+(−0.0305)Trp
68	0.610	0.651	(−0.0088)Ser+(−0.0116)His+(0.0044)Arg+(0.0130)Cit+(−0.0229)Trp
69	0.610	0.641	(0.0109)Ile+(−0.0146)His+(0.0165)Cit+(−0.0279)Trp
70	0.610	0.645	(0.0015)Ala+(0.0046)Lys+(−0.0285)Met+(0.0151)Cit+(−0.0299)Trp
71	0.610	0.643	(0.0010)Ala+(−0.0097)Ser+(0.0082)Orn+(0.0102)Cit+(−0.0303)Trp
72	0.610	0.644	(−0.0109)Ser+(0.0037)Pro+(0.0058)Arg+(−0.0313)Trp
73	0.610	0.656	(−0.0079)Ser+(0.0094)Ile+(−0.0139)His+(0.0037)Arg+(0.0123)Cit+(−0.0282)Trp
74	0.610	0.660	(−0.0102)Ser+(0.0029)Val+(−0.0179)His+(0.0151)Phe+(0.0079)Arg+(−0.0362)Trp
75	0.609	0.657	(−0.0099)Ser+(0.0037)Pro+(0.0040)Leu+(−0.0170)His+(0.0079)Arg+(−0.0314)Trp

[図94]

No.	ROC_AUC (Validation)	ROC_AUC (No Validation)	FORMULA
76	0.609	0.657	(-0.0085)Ser+(0.0037)Pro+(-0.0144)His+(0.0043)Arg+(0.0106)Cit+(-0.0244)Trp
77	0.609	0.646	(0.0027)Val+(0.0059)Lys+(-0.0245)His+(0.0172)Cit+(-0.0290)Trp
78	0.609	0.652	(0.0017)Ala+(-0.0081)Ser+(-0.0151)His+(0.0045)Arg+(0.0124)Cit+(-0.0268)Trp
79	0.609	0.650	(-0.0098)Ser+(0.0026)Pro+(0.0043)Lys+(0.0111)Cit+(-0.0316)Trp
80	0.609	0.639	(0.0070)Leu+(-0.0171)His+(0.0174)Cit+(-0.0283)Trp
81	0.609	0.655	(-0.0105)Ser+(0.0153)Orn+(-0.0184)His+(0.0123)Phe+(-0.0305)Trp
82	0.609	0.656	(-0.0091)Ser+(0.0024)Val+(0.0125)Orn+(-0.0196)His+(0.0114)Cit+(-0.0268)Trp
83	0.609	0.653	(-0.0102)Ser+(0.0038)Pro+(0.0020)Val+(-0.0167)His+(0.0081)Arg+(-0.0306)Trp
84	0.609	0.657	(-0.0082)Ser+(0.0033)Val+(-0.0160)His+(0.0045)Arg+(0.0132)Cit+(-0.0278)Trp
85	0.609	0.641	(-0.0111)Ser+(0.0029)Pro+(0.0110)Orn+(-0.0319)Trp
86	0.609	0.651	(-0.0096)Ser+(0.0043)Leu+(0.0071)Lys+(-0.0182)His+(-0.0362)Trp
87	0.609	0.655	(-0.0120)Ser+(0.0137)Orn+(0.0044)Lys+(0.0106)Met+(-0.0225)His+(-0.0305)Trp
88	0.609	0.656	(-0.0099)Ser+(0.0035)Pro+(0.0058)Ile+(-0.0151)His+(0.0076)Arg+(-0.0307)Trp
89	0.609	0.648	(-0.0101)Ser+(0.0044)Pro+(0.0075)Lys+(-0.0196)His+(-0.0334)Trp
90	0.608	0.652	(-0.0088)Ser+(0.0041)Leu+(0.0120)Orn+(-0.0197)His+(0.0111)Cit+(-0.0269)Trp
91	0.608	0.652	(0.0012)Ala+(-0.0100)Ser+(0.0035)Pro+(-0.0164)His+(0.0081)Arg+(-0.0301)Trp
92	0.608	0.649	(-0.0104)Ser+(0.0032)Val+(-0.0156)His+(0.0091)Arg+(-0.0314)Trp
93	0.608	0.646	(0.0015)Ala+(-0.0095)Ser+(0.0074)Lys+(-0.0183)His+(-0.0356)Trp
94	0.608	0.659	(-0.0098)Ser+(0.0084)Ile+(-0.0157)His+(0.0136)Phe+(0.0070)Arg+(-0.0359)Trp
95	0.608	0.646	(0.0015)Ala+(-0.0089)Ser+(0.0128)Orn+(-0.0200)His+(0.0106)Cit+(-0.0266)Trp
96	0.608	0.647	(0.0032)Pro+(0.0047)Lys+(-0.0280)Met+(0.0132)Cit+(-0.0276)Trp
97	0.608	0.656	(-0.0100)Ser+(0.0041)Pro+(0.0069)Lys+(-0.0215)His+(0.0127)Phe+(-0.0372)Trp
98	0.608	0.649	(0.0009)Ala+(-0.0094)Ser+(0.0043)Lys+(0.0128)Cit+(-0.0326)Trp
99	0.608	0.656	(-0.0123)Ser+(0.0150)Orn+(0.0119)Met+(-0.0208)His+(0.0045)Arg+(-0.0271)Trp
100	0.608	0.648	(-0.0095)Ser+(0.0091)Ile+(0.0071)Lys+(-0.0173)His+(-0.0370)Trp

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.
PCT/JP2013/052115

A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER
G01N33/49(2006.01)i, *A61B10/00*(2006.01)i

According to International Patent Classification (IPC) or to both national classification and IPC

B. FIELDS SEARCHED

Minimum documentation searched (classification system followed by classification symbols)
G01N33/49, A61B10/00

Documentation searched other than minimum documentation to the extent that such documents are included in the fields searched
Jitsuyo Shinan Koho 1922-1996 Jitsuyo Shinan Toroku Koho 1996-2013
Kokai Jitsuyo Shinan Koho 1971-2013 Toroku Jitsuyo Shinan Koho 1994-2013

Electronic data base consulted during the international search (name of data base and, where practicable, search terms used)
JSTPlus/JMEDPlus/JST7580(JDreamII)

C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
X/Y	WO 2011/136228 A1 (Sysmex Corp.), 03 November 2011 (03.11.2011), examples; particularly, paragraphs [0092], [0093], [0101], [0102] (Family: none)	1,2,4/3,5-24
Y/A	WO 2008/015929 A1 (Ajinomoto Co., Inc.), 07 February 2008 (07.02.2008), claims; paragraph [0003] & US 2009/0253116 A1 & EP 2053395 A1	3,5-24/1,2,4
A	WO 2010/126055 A1 (Niigata University), 04 November 2010 (04.11.2010), claims & EP 2426496 A1	1-24

☒ Further documents are listed in the continuation of Box C. ☐ See patent family annex.

* Special categories of cited documents:
"A" document defining the general state of the art which is not considered to be of particular relevance
"E" earlier application or patent but published on or after the international filing date
"L" document which may throw doubts on priority claim(s) or which is cited to establish the publication date of another citation or other special reason (as specified)
"O" document referring to an oral disclosure, use, exhibition or other means
"P" document published prior to the international filing date but later than the priority date claimed
"T" later document published after the international filing date or priority date and not in conflict with the application but cited to understand the principle or theory underlying the invention
"X" document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered novel or cannot be considered to involve an inventive step when the document is taken alone
"Y" document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered to involve an inventive step when the document is combined with one or more other such documents, such combination being obvious to a person skilled in the art
"&" document member of the same patent family

Date of the actual completion of the international search	Date of mailing of the international search report
01 March, 2013 (01.03.13)	12 March, 2013 (12.03.13)
Name and mailing address of the ISA/ Japanese Patent Office Facsimile No.	Authorized officer Telephone No.

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.
PCT/JP2013/052115

C (Continuation). DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
A	WO 2010/064435 A1 (Sekisui Medical Co., Ltd.), 10 June 2010 (10.06.2010), paragraph [0002] & EP 2357475 A1 & CA 2745610 A & CN 102227639 A & KR 10-2011-0111370 A	1-24
A	US 2011/0079077 A1 (Wei-Ya Lin), 07 April 2011 (07.04.2011), claims & JP 2012-516431 A & US 2010/0197033 A1 & US 2011/0086371 A1 & EP 2391654 A & WO 2010/085879 A1 & CA 2748937 A & TW 201033616 A & CN 102300877 A & MX 2011007811 A	1-24

国際調査報告

国際出願番号　ＰＣＴ／ＪＰ２０１３／０５２１１５

Ａ．　発明の属する分野の分類（国際特許分類（ＩＰＣ））

Int.Cl.　G01N33/49(2006.01)i, A61B10/00(2006.01)i

Ｂ．　調査を行った分野

調査を行った最小限資料（国際特許分類（ＩＰＣ））

Int.Cl.　G01N33/49, A61B10/00

最小限資料以外の資料で調査を行った分野に含まれるもの

日本国実用新案公報	１９２２－１９９６年
日本国公開実用新案公報	１９７１－２０１３年
日本国実用新案登録公報	１９９６－２０１３年
日本国登録実用新案公報	１９９４－２０１３年

国際調査で使用した電子データベース（データベースの名称、調査に使用した用語）

JSTPlus/JMEDPlus/JST7580(JDreamII)

Ｃ．　関連すると認められる文献

引用文献のカテゴリー＊	引用文献名　及び一部の箇所が関連するときは、その関連する箇所の表示	関連する請求項の番号
X/Y	WO 2011/136228 A1（シスメックス株式会社）2011.11.03, 実施例、特に[0092][0093][0101][0102]等参照（ファミリーなし）	１、２、４／３、５－２４
Y/A	WO 2008/015929 A1（味の素株式会社）2008.02.07, クレーム、【００９３】等参照 & US 2009/0253116 A1 & EP 2053395 A1	３、５－２４／１、２、４
A	WO 2010/126055 A1（国立大学法人新潟大学）2010.11.04, クレーム等参照 & EP 2426496 A1	１－２４

☑　Ｃ欄の続きにも文献が列挙されている。

☐　パテントファミリーに関する別紙を参照。

＊　引用文献のカテゴリー
「Ａ」特に関連のある文献ではなく、一般的技術水準を示すもの
「Ｅ」国際出願日前の出願または特許であるが、国際出願日以後に公表されたもの
「Ｌ」優先権主張に疑義を提起する文献又は他の文献の発行日若しくは他の特別な理由を確立するために引用する文献（理由を付す）
「Ｏ」口頭による開示、使用、展示等に言及する文献
「Ｐ」国際出願日前で、かつ優先権の主張の基礎となる出願の日の後に公表された文献
「Ｔ」国際出願日又は優先日後に公表された文献であって出願と矛盾するものではなく、発明の原理又は理論の理解のために引用するもの
「Ｘ」特に関連のある文献であって、当該文献のみで発明の新規性又は進歩性がないと考えられるもの
「Ｙ」特に関連のある文献であって、当該文献と他の１以上の文献との、当業者にとって自明である組合せによって進歩性がないと考えられるもの
「＆」同一パテントファミリー文献

国際調査を完了した日 ０１．０３．２０１３	国際調査報告の発送日 １２．０３．２０１３
国際調査機関の名称及びあて先 日本国特許庁（ＩＳＡ／ＪＰ） 郵便番号１００－８９１５ 東京都千代田区霞が関三丁目４番３号	特許庁審査官（権限のある職員）　２Ｊ　９４０８ 加々美　一恵 電話番号　０３－３５８１－１１０１　内線　３２５２

Ｃ（続き）．　関連すると認められる文献

引用文献のカテゴリー＊	引用文献名　及び一部の箇所が関連するときは、その関連する箇所の表示	関連する請求項の番号
A	WO 2010/064435 A1 (積水メディカル株式会社) 2010.06.10, 【０００２】等参照 & EP 2357475 A1 & CA 2745610 A & CN 102227639 A & KR 10-2011-0111370 A	１－２４
A	US 2011/0079077 A1 (Wei-Ya Lin) 2011.04.07, クレーム等参照 & JP 2012-516431 A & US 2010/0197033 A1 & US 2011/0086371 A1 & EP 2391654 A & WO 2010/085879 A1 & CA 2748937 A & TW 201033616 A & CN 102300877 A & MX 2011007811 A	１－２４