

(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
2016年10月6日(06.10.2016)



(10) 国際公開番号
WO 2016/159191 A1

- (51) 国際特許分類:
G01N 33/68 (2006.01)
- (21) 国際出願番号: PCT/JP2016/060576
- (22) 国際出願日: 2016年3月30日(30.03.2016)
- (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 2015-071830 2015年3月31日(31.03.2015) 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1番1号 Tokyo (JP).
- (72) 発明者: 嵐田 直子(ARASHIDA, Naoko); 〒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). 西本 瑠美(NISHIMOTO, Rumi); 〒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). 新保 和高(SHIMBO, Kazutaka); 〒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). 中村 英寛(NAKAMURA, Hidehiro); 〒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). 西方 菜摘(NISHIKATA, Natsumi); 〒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). 今泉 明(IMAIZUMI, Akira); 〒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).

(74) 代理人: 特許業務法人酒井国際特許事務所(SAKAI INTERNATIONAL PATENT OFFICE); 〒1000013 東京都千代田区霞が関3丁目8番1号 虎の門三井ビルディング 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, IR, IS, JP, KE, KG, KN, KP, KR, KZ, LA, LC, LK, LR, LS, 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, SA, 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.

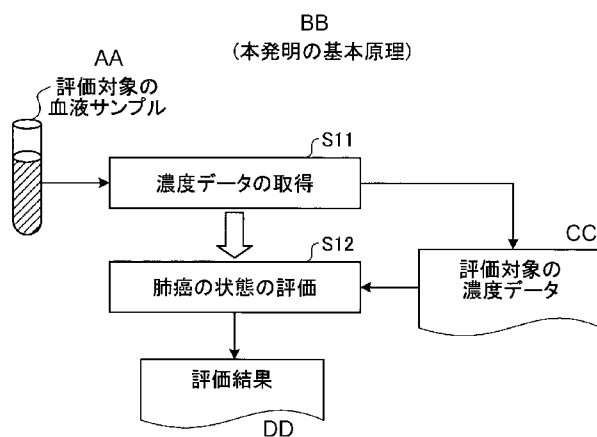
(84) 指定国(表示のない限り、全ての種類の広域保護が可能): ARIPO (BW, GH, GM, KE, LR, LS, MW, MZ, NA, RW, SD, SL, ST, SZ, TZ, UG, ZM, ZW), ユーラシア (AM, AZ, BY, KG, KZ, RU, TJ, TM), ユーロッパ (AL, AT, BE, BG, CH, CY, CZ, DE, DK, EE, ES, FI, FR, GB, GR, HR, HU, IE, IS, IT, LT, LU, LV, MC, MK, MT, NL, NO, PL, PT, RO, RS, SE, SI, SK, SM, TR),

[続葉有]

(54) Title: EVALUATION METHOD, EVALUATION DEVICE, EVALUATION PROGRAM, EVALUATION SYSTEM, AND TERMINAL DEVICE

(54) 発明の名称: 評価方法、評価装置、評価プログラム、評価システム、及び端末装置

[図1]



- S11 Acquire concentration data
S12 Evaluate state of lung cancer
AA Blood sample from subject for evaluation
BB Basic principle of present invention
CC Concentration data for subject for evaluation
DD Evaluation result

肺癌の状態を評価する。

(57) Abstract: The present invention addresses the problem of providing an evaluation method which can present highly reliable information that can be referred to in discerning the state of lung cancer. According to the present embodiment, the state of lung cancer in a subject for evaluation is evaluated from the concentration, in a blood sample from the subject for evaluation, of at least one substance among homoarginine, GABA, 3-Me-His, ADMA, spermine, spermidine, cystathionine, sarcosine, aAiBA, bAiBA, putrescine, N-acetyl-L-lys, hypotaurine, bABA, and ethylglycine.

(57) 要約: 肺癌の状態を知る上で参考となり得る信頼性の高い情報を提供することができる評価方法などを提供することを課題とする。本実施形態では、評価対象の血液中のHomoarginine, GABA, 3-Me-His, ADMA, Spermine, Spermidine, Cystathionine, Sarcosine, aAiBA, bAiBA, Putrescine, N-Acetyl-L-lys, Hypotaurine, bABA, Ethylglycineのうち少なくとも1つの濃度値を用いて、評価対象について、

WO 2016/159191 A1



OAPI (BF, BJ, CF, CG, CI, CM, GA, GN, GQ, GW, KM, 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：

評価方法、評価装置、評価プログラム、評価システム、及び端末装置
技術分野

[0001] 本発明は、評価方法、評価装置、評価プログラム、評価システム、及び端末装置に関するものである。

背景技術

[0002] 日本における肺癌による死亡は2003年で男41634人、女15086人で全ての癌による死亡の18.3%を占め、男では癌による死亡の第一位となっている。女性では癌による死亡の第3位であるが、年々増加しつつあり、遠からず第一位になるのは確実視されている現状である。

[0003] 肺癌は治癒の困難な癌であり、発見されたときにはすでに進行していて手術ができないものが半数以上あるのが現状である。一方、初期（Ⅰ～Ⅱ期）の肺癌の5年生存率は50%以上、特にⅠA期の肺癌（腫瘍が3cm以下でリンパ節転移、周りの臓器への浸潤がないもの）では5年生存率は約90%であり、早期発見が肺癌治癒にとっては重要である。

[0004] 肺癌の診断は、レントゲン写真、CT、MRI、PETなど画像によるもの、喀痰細胞診、気管支鏡による肺生検、経皮針による肺生検、試験開胸または胸腔鏡による肺生検などがある。

[0005] しかし、画像による診断は確定診断とはならず、例えば胸部X線検査（間接撮影）での有所見率は20%であるのに対して、特異度は0.1%であり、有所見者のほとんどは偽陽性である。また、検出感度も低く、厚生労働省の検討結果では、間接撮影検査の場合約80%の肺癌発症者は胸部X線検査では見落とされていたという報告もある。特に、初期の肺癌においてはこれらの方法では検出感度、検出特異度共に更に低くなることが懸念される。一方、胸部X線検査においては、被験者の放射線被曝の問題もある。一方、CT、MRI、PETなどは設備、コスト面で集団検診で実施するには問題が

ある。

[0006] また、喀痰細胞診は2～3割の患者の確定診断しか可能ではない。気管支鏡、経皮針、試験開胸および胸腔鏡による肺生検は確定診断になるが、侵襲度の高い検査であり、画像診断により肺癌の疑いのある患者全員に肺生検を施行するのは实际的でない。さらにこうした侵襲的診断は患者の苦痛を伴うなど負担があり、また検査による出血などのリスクも起こりえる。望むべくは肺癌発症の可能性の高い被験者を、侵襲の少ない方法で選択し、肺生検により肺癌の確定診断を得て治療の対象とすることが、患者に対する身体的負担および費用対効果の面から望ましい。

[0007] ところで、LC-MSやLC-MS/MSといった測定機器の開発により、アミノ酸よりも血液中濃度が低い代謝物も肺癌患者でその血液中濃度が変動していることが明らかになりつつある。例えば特許文献1によれば、肺癌患者の血清中ADMA濃度が上昇するとの報告がある。特許文献2によれば、肺癌患者の血清中サルコシン濃度が上昇するとの報告がある。

[0008] なお、血中アミノ酸の濃度が、癌発症により変化することについては知られており、例えばシノベール（非特許文献1）によれば、例えばグルタミンは主に酸化エネルギー源として、アルギニンは窒素酸化物やポリアミンの前駆体として、メチオニンは癌細胞がメチオニン取り込み能の活性化により、それぞれ癌細胞での消費量が増加するという報告がある。また、プロエンツァら（非特許文献2）やカスツィーノ（非特許文献3）によれば、肺癌患者の血漿中アミノ酸組成は健常者と異なっていることが報告されている。更に、例えばロドリゲスら（非特許文献4）によれば、癌細胞と接触した骨髄細胞においてはアルギナーゼ1の遺伝子発現、酵素活性の上昇が認められ、その結果として血漿中のアルギニン濃度が低下するとの報告がある。

[0009] また、アミノ酸濃度を用いて肺癌の状態を評価する方法に関する特許文献3が公開されている。また、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4～6が公開されている。

先行技術文献

特許文献

[0010] 特許文献1：国際公開第2011/096210号

特許文献2：特開2011-247869号公報

特許文献3：国際公開第2008/016111号

特許文献4：国際公開第2004/052191号

特許文献5：国際公開第2006/098192号

特許文献6：国際公開第2009/054351号

非特許文献

[0011] 非特許文献1：Cynober, L. ed., Metabolic and therapeutic aspects of amino acids in clinical nutrition. 2nd ed., CRC Press.

非特許文献2：Proenza, A.M., J. Oliver, A. Palou and P. Roca, Breast and lung cancer are associated with a decrease in blood cell amino acid content. J Nutr Biochem, 2003. 14(3): p. 133-8.

非特許文献3：Cascino, A., M. Muscaritoli, C. Cangiano, L. Conv ersano, A. Laviano, S. Ariemma, M.M. Meguid and F. Rossi Fannelli, Plasma amino acid imbalance in patients with lung and breast cancer. Anticancer Res, 1995. 15(2): p. 507-10.

非特許文献4：Rodriguez, P.C., C.P. Hernandez, D. Quiceno, S.M. Dubinett, J. Zabaleta, J.B. Ochoa, J. Gilbert and A.C. Ochoa, Arginase I in myeloid suppressor cells is induced by COX-2 in lung carcinoma. J Exp Med, 2005. 202(7): p. 931-9.

発明の概要

発明が解決しようとする課題

[0012] しかしながら、これまでに、血液中の代謝物を腫瘍マーカーとして肺癌を診断する技術の開発は、行われていない又は実用化されていない、という問題点があった。

[0013] 本発明は、上記に鑑みてなされたもので、肺癌の状態を知る上で参考となり得る信頼性の高い情報を提供することができる評価方法、評価装置、評価プログラム、評価システム、及び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

[0014] 上述した課題を解決し、目的を達成するために、本発明にかかる評価方法は、評価対象の血液中の15種類の代謝物（Homoarginine（ホモアルギニン）、GABA（ γ -aminobutyric acid）（ γ -アミノ酪酸）、3-Me-His（3-methyl-histidine）（3-メチルヒスチジン）、ADMA（asymmetric dimethylarginine）（非対称性ジメチルアルギニン）、Spermin（スペルミン）、Spermidine（スペルミジン）、Cystathionine（シスタチオニン）、Sarcosine（サルコシン）、aAiBA（ α -amino-iso-butyric acid）（ α -アミノイソ酪酸）、bAiBA（ β -amino-iso-butyric acid）（ β -アミノイソ酪酸）、Putrescine（プトレシン）、N-Acetyl-L-lys（N-Acetyl-L-lysine）（N-アセチル-L-リジン）、Hypotaurine（ヒポタウリン）、bABA（ β -aminobutyric acid）（ β -アミノ酪酸）、Ethylglycine（エチルグリシン））のうちの少なくとも1つの濃度値を用いて、前記評価対象について、肺癌の状態を評価する評価ステップを含むこと、を特徴とする。

[0015] また、本発明にかかる評価方法は、前記の評価方法において、前記評価ステップでは、評価対象の血液中の19種類のアミノ酸（Asn, His, Thr, Ala, Cit, Arg, Tyr, Val, Met, Lys, Trp, Gly, Pro, Orn, Ile, Leu, Phe, Ser, Gln）のうちの少なくとも1つの濃度値をさらに用いること、を特徴とする。

[0016] 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)
A l a	A l a n i n e
A r g	A r g i n i n e
A s n	A s p a r a g i n e
C i t	C i t r u l l i n e
G l n	G l u t a m i n e
G l y	G l y c i n e
H i s	H i s t i d i n e
I l e	I s o l e u c i n e
L e u	L e u c i n e
L y s	L y s i n e
M e t	M e t h i o n i n e
O r n	O r n i t h i n e
P h e	P h e n y l a l a n i n e
P r o	P r o l i n e
S e r	S e r i n e
T h r	T h r e o n i n e
T r p	T r y p t o p h a n
T y r	T y r o s i n e
V a l	V a l i n e

[0017] また、本発明にかかる評価方法は、前記の評価方法において、前記評価ステップでは、上記15種類の代謝物のうちの少なくとも1つの濃度値が代入される変数を含む式（以下では、評価式と記す場合がある。）をさらに用いて、前記式の値（以下では、評価式の値又は評価値と記す場合がある。）を算出することで、前記評価対象について、肺癌の状態を評価すること、を特徴とする。

[0018] また、本発明にかかる評価方法は、前記の評価方法において、前記評価ステップでは、評価対象の血液中の上記19種類のアミノ酸のうちの少なくと

も1つの濃度値をさらに用い、前記式は、上記19種類のアミノ酸のうちの少なくとも1つの濃度値が代入される変数をさらに含むものであること、を特徴とする。

[0019] また、本発明にかかる評価装置は、制御部を備えた評価装置であって、前記制御部は、評価対象の血液中の上記15種類の代謝物のうちの少なくとも1つの濃度値を用いて、前記評価対象について、肺癌の状態を評価する評価手段を備えたこと、を特徴とする。

[0020] また、本発明にかかる評価方法は、制御部を備えた情報処理装置において実行される評価方法であって、前記制御部において実行される、評価対象の血液中の上記15種類の代謝物のうちの少なくとも1つの濃度値を用いて、前記評価対象について、肺癌の状態を評価する評価ステップを含むこと、を特徴とする。

[0021] また、本発明にかかる評価プログラムは、制御部を備えた情報処理装置において実行させるための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、評価対象の血液中の上記15種類の代謝物のうちの少なくとも1つの濃度値を用いて、前記評価対象について、肺癌の状態を評価する評価ステップを含むこと、を特徴とする。

[0022] 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。

[0023] また、本発明にかかる評価システムは、制御部を備えた評価装置と、制御部を備え、評価対象の血液中の上記15種類の代謝物のうちの少なくとも1つの濃度値に関する濃度データを提供する端末装置とを、ネットワークを介して通信可能に接続して構成された評価システムであって、前記端末装置の前記制御部は、前記評価対象の前記濃度データを前記評価装置へ送信する濃度データ送信手段と、前記評価装置から送信された、前記評価対象における肺癌の状態に関する評価結果を受信する結果受信手段と、を備え、前記評価装置の前記制御部は、前記端末装置から送信された前記評価対象の前記濃度

データを受信する濃度データ受信手段と、前記濃度データ受信手段で受信した前記評価対象の前記濃度データに含まれている、上記１５種類の代謝物のうちの少なくとも１つの前記濃度値を用いて、前記評価対象について、肺癌の状態を評価する評価手段と、前記評価手段で得られた前記評価結果を前記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。

[0024] また、本発明にかかる端末装置は、制御部を備えた端末装置であって、前記制御部は、評価対象における肺癌の状態に関する評価結果を取得する結果取得手段を備え、前記評価結果は、前記評価対象の血液中の上記１５種類の代謝物のうちの少なくとも１つの濃度値を用いて、前記評価対象について、肺癌の状態を評価した結果であること、を特徴とする。

[0025] また、本発明にかかる端末装置は、前記の端末装置において、前記評価対象について肺癌の状態を評価する評価装置とネットワークを介して通信可能に接続して構成されており、前記制御部は、前記評価対象の血液中の上記１５種類の代謝物のうちの少なくとも１つの前記濃度値に関する濃度データを前記評価装置へ送信する濃度データ送信手段をさらに備え、前記結果取得手段は、前記評価装置から送信された前記評価結果を受信すること、を特徴とする。

[0026] また、本発明にかかる評価装置は、評価対象の血液中の上記１５種類の代謝物のうちの少なくとも１つの濃度値に関する濃度データを提供する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、制御部を備えた評価装置であって、前記制御部は、前記端末装置から送信された前記評価対象の前記濃度データを受信する濃度データ受信手段と、前記濃度データ受信手段で受信した前記評価対象の前記濃度データに含まれている、上記１５種類の代謝物のうちの少なくとも１つの前記濃度値を用いて、前記評価対象について、肺癌の状態を評価する評価手段と、前記評価手段で得られた評価結果を前記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。

発明の効果

[0027] 本発明によれば、評価対象の血液中の上記１５種類の代謝物のうちの少な

くとも1つの濃度値を用いて、評価対象について、肺癌の状態を評価するので、肺癌の状態を知る上で参考となり得る信頼性の高い情報を提供することができるという効果を奏する。

図面の簡単な説明

[0028] [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2実施形態の基本原理を示す原理構成図である。

[図3]図3は、本システムの全体構成の一例を示す図である。

[図4]図4は、本システムの全体構成の他の一例を示す図である。

[図5]図5は、本システムの評価装置100の構成の一例を示すブロック図である。

[図6]図6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7]図7は、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8]図8は、指標状態情報ファイル106cに格納される情報の一例を示す図である。

[図9]図9は、指定指標状態情報ファイル106dに格納される情報の一例を示す図である。

[図10]図10は、評価式ファイル106e1に格納される情報の一例を示す図である。

[図11]図11は、評価結果ファイル106fに格納される情報の一例を示す図である。

[図12]図12は、評価部102iの構成を示すブロック図である。

[図13]図13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14]図14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15]図15は、ロジスティック回帰式の一覧を示す図である。

- [図16]図16は、ロジスティック回帰式の一覧を示す図である。
- [図17]図17は、ロジスティック回帰式の一覧を示す図である。
- [図18]図18は、ロジスティック回帰式の一覧を示す図である。
- [図19]図19は、ロジスティック回帰式の一覧を示す図である。
- [図20]図20は、ロジスティック回帰式の一覧を示す図である。
- [図21]図21は、ロジスティック回帰式の一覧を示す図である。
- [図22]図22は、ロジスティック回帰式の一覧を示す図である。
- [図23]図23は、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、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、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、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、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、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、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、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、ロジスティック回帰式の一覧を示す図である。
- [図32]図32は、ロジスティック回帰式の一覧を示す図である。
- [図33]図33は、ロジスティック回帰式の一覧を示す図である。
- [図34]図34は、ロジスティック回帰式の一覧を示す図である。
- [図35]図35は、ロジスティック回帰式の一覧を示す図である。
- [図36]図36は、ロジスティック回帰式の一覧を示す図である。
- [図37]図37は、ロジスティック回帰式の一覧を示す図である。
- [図38]図38は、ロジスティック回帰式の一覧を示す図である。
- [図39]図39は、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、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、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、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、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、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、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、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、ロジスティック回帰式の一覧を示す図である。
- [図48]図48は、ロジスティック回帰式の一覧を示す図である。
- [図49]図49は、ロジスティック回帰式の一覧を示す図である。
- [図50]図50は、ロジスティック回帰式の一覧を示す図である。
- [図51]図51は、ロジスティック回帰式の一覧を示す図である。
- [図52]図52は、ロジスティック回帰式の一覧を示す図である。
- [図53]図53は、ロジスティック回帰式の一覧を示す図である。
- [図54]図54は、ロジスティック回帰式の一覧を示す図である。
- [図55]図55は、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、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、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、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、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、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、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、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、ロジスティック回帰式の一覧を示す図である。
- [図64]図64は、ロジスティック回帰式の一覧を示す図である。
- [図65]図65は、健常者のプール血漿および肺癌患者のプール血漿を測定したときのクロマトグラムを示す図である。
- [図66]図66は、ロジスティック回帰式の一覧を示す図である。
- [図67]図67は、ロジスティック回帰式の一覧を示す図である。
- [図68]図68は、ロジスティック回帰式の一覧を示す図である。
- [図69]図69は、ロジスティック回帰式の一覧を示す図である。
- [図70]図70は、ロジスティック回帰式の一覧を示す図である。

[図71]図 7 1 は、ロジスティック回帰式の一覧を示す図である。

[図72]図 7 2 は、ロジスティック回帰式の一覧を示す図である。

発明を実施するための形態

[0029] 以下に、本発明にかかる評価方法の実施形態（第 1 実施形態）、及び、本発明にかかる評価装置、評価方法、評価プログラム、記録媒体、評価システム及び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。

[0030] [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。

[0031] まず、評価対象（例えば動物やヒトなどの個体）から採取した血液（例えば血漿、血清などを含む）中の物質（「上記 15 種類の代謝物および上記 19 種類のアミノ酸」のうちの少なくとも 1 つを含む血中物質）の濃度値に関する濃度データを取得する（ステップ S 1 1）。

[0032] なお、ステップ S 1 1 では、例えば、濃度値測定を行う企業等が測定した上記血中物質に関する濃度データを取得してもよい。また、評価対象から採取した血液から、例えば以下の（A）、（B）、または（C）などの測定方法により上記血中物質の濃度値を測定することで上記血中物質の濃度値に関する濃度データを取得してもよい。ここで、上記血中物質の濃度値の単位は、例えばモル濃度、重量濃度又は酵素活性であってもよく、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漿を分離する。全ての血漿サンプルは、濃度値の測定時まで -80°C で凍結保存する。濃度値測定時には、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-アミノピリジルー 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）により濃度値を分析する（国際公開第 2003/06932

8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漿を分離する。全ての血漿サンプルは、濃度値の測定時まで -80°C で凍結保存する。濃度値測定時には、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濃度値を分析する。

(C) 採取した血液サンプルを、膜やMEMS技術または遠心分離の原理を用いて血球分離を行い、血液から血漿または血清を分離する。血漿または血清取得後すぐに濃度値の測定を行わない血漿または血清サンプルは、濃度値の測定時まで -80°C で凍結保存する。濃度値測定時には、酵素やアプタマーなど、標的とする血中物質と反応または結合する分子等を用い、基質認識によって増減する物質や分光学的値を定量等することにより濃度値を分析する。

[0033] つぎに、ステップS11で取得した濃度データに含まれている、上記15種類の代謝物および上記19種類のアミノ酸のうちの少なくとも1つの濃度値を、肺癌の状態を評価するための評価値として用いて、評価対象について肺癌の状態を評価する(ステップS12)。なお、ステップS12を実行する前に、ステップS11で取得した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。

[0034] 以上、第1実施形態によれば、ステップS11では評価対象の濃度データを取得し、ステップS12では、ステップS11で取得した評価対象の濃度データに含まれている、上記15種類の代謝物および上記19種類のアミノ酸のうちの少なくとも1つの濃度値を評価値として用いて、評価対象について肺癌の状態を評価する。これにより、肺癌の状態を知る上で参考となり得る信頼性の高い情報を提供することができる。

[0035] また、上記15種類の代謝物および上記19種類のアミノ酸のうちの少なくとも1つの濃度値が評価対象についての肺癌の状態を反映したものであると決定してもよく、さらに、濃度値を例えば以下に挙げた手法などで変換し

、変換後の値が評価対象についての肺癌の状態を反映したものであると決定してもよい。換言すると、濃度値又は変換後の値そのものを、評価対象についての肺癌の状態に関する評価結果として扱ってもよい。

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-10.0から10.0までの範囲、など）に収まるようにするためなどに、例えば、濃度値に対して任意の値を加減乗除したり、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、逆数変換、 Box-Cox 変換、又はべき乗変換など）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で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、肺癌の状態が所定の状態（例えば、基準値を超えた状態、など）である確率 p 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。

また、各代謝物および各アミノ酸ごとに、濃度分布を正規分布化した後、平均50、標準偏差10となるように偏差値化してもよい。

なお、これらの変換は、男女別や年齢別に行ってもよい。

[0036] また、モニタ等の表示装置又は紙等の物理媒体に視認可能に示される所定の物差し上における所定の目印の位置に関する位置情報を、上記15種類の代謝物および上記19種類のアミノ酸のうちの少なくとも1つの濃度値又は当該濃度値を変換した場合にはその変換後の値を用いて生成し、生成した位置情報が評価対象についての肺癌の状態を反映したものであると決定しても

よい。なお、所定の物差しとは、肺癌の状態を評価するためのものであり、例えば、目盛りが示された物差しであって、「濃度値又は変換後の値の取り得る範囲、又は、当該範囲の一部」における上限値と下限値に対応する目盛りが少なくとも示されたもの、などである。また、所定の目印とは、濃度値又は変換後の値に対応するものであり、例えば、丸印又は星印などである。

[0037] また、上記 15 種類の代謝物および上記 19 種類のアミノ酸のうちの少なくとも 1 つの濃度値が、所定値（平均値 $\pm 1SD$ 、 $2SD$ 、 $3SD$ 、 N 分位点、 N パーセンタイル又は臨床的意義の認められたカットオフ値など）より低い若しくは所定値以下の場合又は所定値以上若しくは所定値より高い場合に、評価対象について、肺癌の状態を評価してもよい。その際、濃度値そのものではなく、濃度偏差値（各代謝物および各アミノ酸ごとに、男女別に濃度分布を正規分布化した後、平均 50、標準偏差 10 となるように偏差値化した値）を用いてもよい。例えば、濃度偏差値が平均値 $-2SD$ 未満の場合（濃度偏差値 < 30 の場合）又は濃度偏差値が平均値 $+2SD$ より高い場合（濃度偏差値 > 70 の場合）に、評価対象について、肺癌の状態を評価してもよい。

[0038] また、上記 15 種類の代謝物および上記 19 種類のアミノ酸のうちの少なくとも 1 つの濃度値、および、上記 15 種類の代謝物および上記 19 種類のアミノ酸のうちの少なくとも 1 つの濃度値が代入される変数を含む式を用いて、式の値を算出することで、評価対象について肺癌の状態を評価してもよい。

[0039] また、算出した式の値が評価対象についての肺癌の状態を反映したものであると決定してもよく、さらに、式の値を例えば以下に挙げた手法などで変換し、変換後の値が評価対象についての肺癌の状態を反映したものであると決定してもよい。換言すると、式の値又は変換後の値そのものを、評価対象についての肺癌の状態に関する評価結果として扱ってもよい。

評価式の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）に収まるようにするためなどに、例えば、評価式の値に対して任意の値を加減乗除したり、評価式の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、逆数変換、Box-Cox変換、又はべき乗変換など）で変換したり、また、評価式の値に対してこれらの計算を組み合わせで行ったりすることで、評価式の値を変換してもよい。例えば、評価式の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、肺癌の状態が所定の状態（例えば、基準値を超えた状態、など）である確率 p を定義したときの自然対数 $\ln(p/(1-p))$ が評価式の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、評価式の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となるように評価式の値を変換してもよい。

また、平均50、標準偏差10となるように偏差値化してもよい。

なお、これらの変換は、男女別や年齢別に行ってもよい。

なお、本明細書における評価値は、評価式の値そのものであってもよく、評価式の値を変換した後の値であってもよい。

[0040] また、モニタ等の表示装置又は紙等の物理媒体に視認可能に示される所定の物差し上における所定の目印の位置に関する位置情報を、式の値又は当該式の値を変換した場合にはその変換後の値を用いて生成し、生成した位置情報が評価対象についての肺癌の状態を反映したものであると決定してもよい。なお、所定の物差しとは、肺癌の状態を評価するためのものであり、例えば、目盛りが示された物差しであって、「式の値又は変換後の値の取り得る範囲、又は、当該範囲の一部」における上限値と下限値に対応する目盛り

が少なくとも示されたもの、などである。また、所定の目印とは、式の値又は変換後の値に対応するものであり、例えば、丸印又は星印などである。

[0041] また、評価対象が肺癌に罹患している可能性の程度を定性的に評価してもよい。具体的には、「上記 15 種類の代謝物および上記 19 種類のアミノ酸のうちの少なくとも 1 つの濃度値および予め設定された 1 つまたは複数の閾値」または「上記 15 種類の代謝物および上記 19 種類のアミノ酸のうちの少なくとも 1 つの濃度値、上記 15 種類の代謝物および上記 19 種類のアミノ酸のうちの少なくとも 1 つの濃度値が代入される変数を含む評価式、および予め設定された 1 つまたは複数の閾値」を用いて、評価対象を、肺癌に罹患している可能性の程度を少なくとも考慮して定義された複数の区分のうちのどれか 1 つに分類してもよい。なお、複数の区分には、肺癌に罹患している可能性の程度が高い対象（例えば、肺癌に罹患していると見做す対象）を属させるための区分（例えば、実施例に記載したランク C など）、肺癌に罹患している可能性の程度が低い対象（例えば、肺癌に罹患していないと見做す対象）を属させるための区分（例えば、実施例に記載したランク A など）、および肺癌に罹患している可能性の程度が中程度である対象を属させるための区分（例えば、実施例に記載したランク B など）が含まれていてもよい。また、複数の区分には、肺癌に罹患している可能性の程度が高い対象を属させるための区分（例えば、実施例に記載した肺癌区分など）、および、肺癌に罹患している可能性の程度が低い対象を属させるための区分（例えば、実施例に記載した、健常である可能性が高い対象（例えば健常であると見做す対象）を属させるための健常区分など）が含まれていてもよい。また、濃度値又は式の値を所定の手法で変換し、変換後の値を用いて評価対象を複数の区分のうちのどれか 1 つに分類してもよい。

[0042] また、式の形式は特に問わないが、例えば、最小二乗法に基づく重回帰式、線形判別式、主成分分析、正準判別分析などの線形モデル、最尤法に基づくロジスティック回帰、Cox 回帰などの一般化線形モデル、一般化線形モデルに加えて個体間差、施設間差などの変量効果を考慮した一般化線形混合

モデル、K-means法、階層的クラスタ解析などクラスタ解析で作成された式、MCMC(マルコフ連鎖モンテカルロ法)、ベイジアンネットワーク、階層ベイズ法などベイズ統計に基づき作成された式、サポートベクターマシンや決定木などクラス分類により作成された式、分数式など上記のカテゴリに属さない手法により作成された式、および異なる形式の式の和で示されるような式のうちのいずれか1つでもよい。

[0043] ここで、評価式として採用する式を、例えば、本出願人による国際出願である国際公開第2004/052191号に記載の方法又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、これらの方法で得られた式であれば、入力データとしての濃度データにおける代謝物および／またはアミノ酸の濃度値の単位に因らず、当該式を肺癌の状態を評価するのに好適に用いることができる。

[0044] ここで、重回帰式、多重ロジスティック回帰式、正準判別関数などにおいては各変数に係数及び定数項が付加されるが、この係数及び定数項は、好ましくは実数であれば構わず、より好ましくは、データから前記の各種分類を行うために得られた係数及び定数項の99%信頼区間の範囲に属する値であれば構わず、さらに好ましくは、データから前記の各種分類を行うために得られた係数及び定数項の95%信頼区間の範囲に属する値であれば構わない。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よい。ロジスティック回帰式、線形判別式、重回帰式などを評価式として用いる場合、線形変換（定数の加算、定数倍）及び単調増加（減少）の変換（例えばlogit変換など）は評価性能を変えるものではなく変換前と同等であるので、これらの変換が行われた後のものを用いてもよい。

[0045] なお、分数式とは、当該分数式の分子が変数A, B, C, ...の和で表わされ及び／又は当該分数式の分母が変数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 $\alpha + \beta$ 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変数にはそれぞれ適当な係数がついても構わない。また、分子や分母に用いられる変数は重複しても構わない。また、各分数式に適当な係数がついても構わない。また、各変数の係数の値や定数項の値は、実数であれば構わない。ある分数式と、当該分数式において分子の変数と分母の変数が入れ替えられたものとは、目的変数との相関の正負の符号が概して逆転するものの、それらの相関性は保たれるが故に、評価性能も同等と見做せるので、分数式には、分子の変数と分母の変数が入れ替えられたものも含まれる。

[0046] そして、肺癌の状態を評価する際、上記 15 種類の代謝物および上記 19 種類のアミノ酸のうちの少なくとも 1 つの濃度値以外に、他の生体情報に関する値（例えば、以下に挙げた値など）をさらに用いても構わない。また、評価式として採用する式には、上記 15 種類の代謝物および上記 19 種類のアミノ酸のうちの少なくとも 1 つの濃度値が代入される変数以外に、他の生体情報に関する値（例えば、以下に挙げた値など）が代入される 1 つ又は複数の変数がさらに含まれていてもよい。

1. アミノ酸以外の他の血中の代謝物（アミノ酸代謝物・糖類・脂質等）、タンパク質、ペプチド、ミネラル、ホルモン等の濃度値
2. アルブミン、総蛋白、トリグリセリド（中性脂肪）、HbA1c、糖化アルブミン、インスリン抵抗性指数、総コレステロール、LDLコレステロール、HDLコレステロール、アミラーゼ、総ビリルビン、クレアチニン、推算糸球体濾過量(eGFR)、尿酸、GOT(AST)、GPT(ALT)、GGTP(γ-GTP)、グルコース（血糖値）、CRP（C反応性蛋白）、赤血球、ヘモグロビン、ヘマトクリット、MCV、MCH、MCHC、白血球、血小板数等の血液検査値
3. 超音波エコー、X線、CT、MRI、内視鏡像等の画像情報から得られる値
4. 年齢、身長、体重、BMI、腹囲、収縮期血圧、拡張期血圧、性別、喫煙情報、食事情報、飲酒情報、運動情報、ストレス情報、睡眠情報、家族の

既往歴情報、疾患歴情報（糖尿病等）等の生体指標に関する値

[0047] [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2を参照して説明する。図2は第2実施形態の基本原理を示す原理構成図である。なお、本第2実施形態の説明では、上述した第1実施形態と重複する説明を省略する場合がある。特に、ここでは、肺癌の状態を評価する際に、評価式の値又はその変換後の値を用いるケースを一例として記載しているが、例えば、「上記15種類の代謝物および上記19種類のアミノ酸」のうちの少なくとも1つの濃度値又はその変換後の値（例えば濃度偏差値など）を用いてもよい。

[0048] 制御部は、血液中の上記15種類の代謝物および上記19種類のアミノ酸のうちの少なくとも1つの濃度値に関する予め取得した評価対象（例えば動物やヒトなどの個体）の濃度データに含まれている、上記15種類の代謝物および上記19種類のアミノ酸のうちの少なくとも1つの濃度値、および、上記15種類の代謝物および上記19種類のアミノ酸のうちの少なくとも1つの濃度値が代入される変数を含む予め記憶部に記憶された式を用いて、式の値を算出することで、評価対象について肺癌の状態を評価する（ステップS21）。

[0049] 以上、第2実施形態によれば、ステップS21では、評価対象の濃度データに含まれている、上記15種類の代謝物および上記19種類のアミノ酸のうちの少なくとも1つの濃度値、および、評価式として記憶部に記憶された、上記15種類の代謝物および上記19種類のアミノ酸のうちの少なくとも1つの濃度値が代入される変数を含む式を用いて、評価式の値を算出することで、評価対象について肺癌の状態を評価する。これにより、肺癌の状態を知る上で参考となり得る信頼性の高い情報を提供することができる。

[0050] ここで、評価式作成処理（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、評価式の作成方法はこれに限定されない。

[0051] まず、制御部は、濃度データと肺癌の状態を表す指標に関する指標データとを含む予め記憶部に記憶された指標状態情報から所定の式作成手法に基づいて、評価式の候補である候補式（例えば、 $y = a_1 x_1 + a_2 x_2 + \dots + a_n x_n$ 、 y ：指標データ、 x_i ：濃度データ、 a_i ：定数、 $i = 1, 2, \dots, n$ ）を作成する（工程１）。なお、事前に、指標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。

[0052] なお、工程１において、指標状態情報から、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、Cox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式を作成してもよい。具体的には、多数の健常群および肺癌群から得た血液を分析して得た濃度データおよび指標データから構成される多変量データである指標状態情報に対して、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式を利用して指標状態情報を変換し、変換した指標状態情報に対して判別分析を行うことで候補式を作成してもよい。これにより、最終的に、最適な評価式を作成することができる。

[0053] ここで、主成分分析を用いて作成した候補式は、全ての濃度データの分散を最大にするような各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式は、各群内の分散の和の全ての濃度データの分散に対する比を最小にするような各変数を含む高次式（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式は、群間の境界を最大にするような各変数を含む高次式（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式は、全ての濃度データからの距離の和を最小にするような各変数を含む高次式である。また、Cox回帰分析を用いて作成した候補式は、対数ハザード比を含む線形モデルで、そのモデルの尤度を最

大とするような各変数とその係数を含む1次式である。また、ロジスティック回帰分析を用いて作成した候補式は、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変数を含む一次式である。また、*k-means*法とは、各濃度データの*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、変数に序列をつけて、序列が上位である変数の取りうるパターンから濃度データの群を予測する手法である。

[0054] 評価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）。候補式の検証は、工程1で作成した各候補式に対して行う。

[0055] 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*-fold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、指標状態情報や評価条件を考慮した予測性または頑健性の高い候補式を作成することができる。

[0056] ここで、判別率とは、本実施形態にかかる肺癌評価手法で、真の状態が陰性である評価対象（例えば、肺癌に罹患していない評価対象など）を正しく陰性と評価し、真の状態が陽性である評価対象（例えば、肺癌に罹患している評価対象など）を正しく陽性と評価している割合である。また、感度とは、本実施形態にかかる肺癌評価手法で、真の状態が陽性である評価対象を正しく陽性と評価している割合である。また、特異度とは、本実施形態にかかる肺癌評価手法で、真の状態が陰性である評価対象を正しく陰性と評価している割合である。また、赤池情報量基準とは、回帰分析などの場合に、観測データが統計モデルにどの程度一致するかを表す基準であり、「 $-2 \times$ （統

計モデルの最大対数尤度) + 2 × (統計モデルの自由パラメータ数)」で定義される値が最小となるモデルを最もよいと判断する。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。

[0057] 評価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式の変数を選択することで、候補式を作成する際に用いる指標状態情報に含まれる濃度データの組み合わせを選択する (工程3)。変数の選択は、工程1で作成した各候補式に対して行ってもよい。これにより、候補式の変数を適切に選択することができる。そして、工程3で選択した濃度データを含む指標状態情報を用いて再び工程1を実行する。

[0058] 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つに基づいて候補式の変数を選択してもよい。

[0059] ここで、ベストパス法とは、候補式に含まれる変数を1つずつ順次減らしていき、候補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。

[0060] 評価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、複数の候補式の中から評価式として採用する候補式を選出することで、評価式を作成する (工程4)。なお、候補式の選出には、例えば、同じ式作成手法で作成した候補式の中から最適なものを選出する場合と、すべての候補式の中から最適なものを選出する場合とがある。

[0061] 以上、説明したように、評価式作成処理では、指標状態情報に基づいて、

候補式の作成、候補式の検証および候補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、肺癌の評価に最適な評価式を作成することができる。換言すると、評価式作成処理では、上記 15 種類の代謝物および上記 19 種類のアミノ酸のうちの少なくとも 1 つを含む血中物質の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、評価性能の高い評価式を抽出する。

[0062] [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3から図14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。特に、ここでは、肺癌の状態を評価する際に、評価式の値又はその変換後の値を用いるケースを一例として記載しているが、例えば、「上記15種類の代謝物および上記19種類のアミノ酸」のうちの少なくとも1つの濃度値又はその変換後の値（例えば濃度偏差値など）を用いてもよい。

[0063] まず、本システムの全体構成について図3および図4を参照して説明する。図3は本システムの全体構成の一例を示す図である。また、図4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3に示すように、評価対象である個体について肺癌の状態を評価する評価装置100と、血液中の上記15種類の代謝物および上記19種類のアミノ酸のうちの少なくとも1つを含む血中物質の濃度値に関する個体の濃度データを提供するクライアント装置200（本発明の端末装置に相当）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。

[0064] なお、本システムは、図4に示すように、評価装置100やクライアント装置200の他に、評価装置100で評価式を作成する際に用いる指標状態情報や、肺癌の状態を評価する際に用いる評価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、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から評価装置１００へ、肺癌の状態を知る上で参考となる情報などが提供される。ここで、肺癌の状態を知る上で参考となる情報とは、例えば、ヒトを含む生物の肺癌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などである。また、肺癌の状態を知る上で参考となる情報は、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。

[0065] つぎに、本システムの評価装置１００の構成について図５から図１２を参照して説明する。図５は、本システムの評価装置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。

[0066] 評価装置１００は、当該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、評価装置１００は、各種の分析装置（例えばアミノ酸分析装置等）と同一筐体で構成されてもよい。例えば、血液中の上記１５種類の代謝物および上記１９種類のアミノ酸のうちの少なくとも１つを含む所定の血中物質の濃度値を算出（測定）・出力（印刷やモニタ表示など）する構成（ハードウェアおよびソフトウェア）を備えた小型分析装置において、後述する評価部１０２ｉをさらに備え、当該評価部１０２ｉで得られた結果を前記構成を用いて出力すること、を特徴とするものでもよい。

[0067] 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、濃度データファイル106bと、指標状態情報ファイル106cと、指定指標状態情報ファイル106dと、評価式関連情報データベース106eと、評価結果ファイル106fと、を格納する。

[0068] 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6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6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。

[0069] 図5に戻り、濃度データファイル106bは、血液中の上記15種類の代謝物および上記19種類のアミノ酸のうちの少なくとも1つを含む血中物質の濃度値に関する濃度データを格納する。図7は、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。濃度データファイル106bに格納される情報は、図7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、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7では、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、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、濃度データに、他の生体情報に関する値（上記参照）を組み合わせてもよい。

[0070] 図5に戻り、指標状態情報ファイル106cは、評価式を作成する際に用いる指標状態情報を格納する。図8は、指標状態情報ファイル106cに格

納される情報の一例を示す図である。指標状態情報ファイル 106c に格納される情報は、図 8 に示すように、個体番号と、肺癌の状態を表す指標（指標 T1、指標 T2、指標 T3・・・）に関する指標データ（T）と、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、指標データおよび濃度データを数値（すなわち連続尺度）として扱っているが、指標データおよび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、指標データは、肺癌の状態のマーカーとなる既知の指標などであり、数値データを用いてもよい。

[0071] 図 5 に戻り、指定指標状態情報ファイル 106d は、後述する指標状態情報指定部 102g で指定した指標状態情報を格納する。図 9 は、指定指標状態情報ファイル 106d に格納される情報の一例を示す図である。指定指標状態情報ファイル 106d に格納される情報は、図 9 に示すように、個体番号と、指定した指標データと、指定した濃度データと、を相互に関連付けて構成されている。

[0072] 図 5 に戻り、評価式関連情報データベース 106e は、後述する評価式作成部 102h で作成した評価式を格納する評価式ファイル 106e1、で構成される。

[0073] 評価式ファイル 106e1 は、評価式を格納する。図 10 は、評価式ファイル 106e1 に格納される情報の一例を示す図である。評価式ファイル 106e1 に格納される情報は、図 10 に示すように、ランクと、評価式（図 10 では、Fp (Homo, ...) や Fp (Homo, GABA, Asn)、Fk (Homo, GABA, Asn, ...) など）と、各式作成手法に対応する閾値と、各評価式の検証結果（例えば各評価式の評価値）と、を相互に関連付けて構成されている。なお、“Homo” という文字は、Homarginine を意味するものである。

[0074] 図 5 に戻り、評価結果ファイル 106f は、後述する評価部 102i で得られた評価結果を格納する。図 11 は、評価結果ファイル 106f 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 106 f 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、予め取得した個体の濃度データと、肺癌の状態に関する評価結果（例えば、後述する算出部 102 i 1 で算出した評価式の値、後述する変換部 102 i 2 で評価式の値を変換した後の値、後述する生成部 102 i 3 で生成した位置情報、又は、後述する分類部 102 i 4 で得られた分類結果、など）と、を相互に関連付けて構成されている。

[0075] 図 5 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 WAV 形式や A I F F 形式の如き音声ファイルで格納したり、静止画や動画を J P E G 形式や M P E G 2 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。

[0076] 通信インターフェース部 104 は、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。

[0077] 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。

[0078] 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と指標状態情報指定部102gと評価式作成部102hと評価部102iと結果出力部102jと送信部102kとを備えている。制御部102は、データベース装置400から送信された指標状態情報やクライアント装置200から送信された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。

[0079] 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。

[0080] 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、濃度データや指標状態情報、評価式など）を、ネットワーク300を介して受信する。指標状態情報指定部102gは、評価式を作成するにあたり、対象とする指標データおよび濃度データを指定する。

[0081] 評価式作成部102hは、受信部102fで受信した指標状態情報や指標状態情報指定部102gで指定した指標状態情報に基づいて評価式を作成する。なお、評価式が予め記憶部106の所定の記憶領域に格納されている場合には、評価式作成部102hは、記憶部106から所望の評価式を選択す

ることで、評価式を作成してもよい。また、評価式作成部 102h は、評価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）から所望の評価式を選択しダウンロードすることで、評価式を作成してもよい。

[0082] 評価部 102i は、事前に得られた式（例えば、評価式作成部 102h で作成した評価式、又は、受信部 102f で受信した評価式など）、及び、受信部 102f で受信した個体の濃度データに含まれる、上記 15 種類の代謝物および上記 19 種類のアミノ酸のうちの少なくとも 1 つの濃度値を用いて、評価式の値を算出することで、個体について肺癌の状態を評価する。なお、評価部 102i は、上記 15 種類の代謝物および上記 19 種類のアミノ酸のうちの少なくとも 1 つの濃度値又は当該濃度値の変換後の値（例えば濃度偏差値）を用いて、個体について肺癌の状態を評価してもよい。

[0083] ここで、評価部 102i の構成について図 12 を参照して説明する。図 12 は、評価部 102i の構成を示すブロック図であり、該構成のうち本発明に係る部分のみを概念的に示している。評価部 102i は、算出部 102i1 と、変換部 102i2 と、生成部 102i3 と、分類部 102i4 と、をさらに備えている。

[0084] 算出部 102i1 は、上記 15 種類の代謝物および上記 19 種類のアミノ酸のうちの少なくとも 1 つの濃度値、および、上記 15 種類の代謝物および上記 19 種類のアミノ酸のうちの少なくとも 1 つの濃度値が代入される変数を少なくとも含む評価式を用いて、評価式の値を算出する。なお、評価部 102i は、算出部 102i1 で算出した評価式の値を評価結果として評価結果ファイル 106f の所定の記憶領域に格納してもよい。

[0085] 変換部 102i2 は、算出部 102i1 で算出した評価式の値を例えば上述した変換手法などで変換する。なお、評価部 102i は、変換部 102i2 で変換した後の値を評価結果として評価結果ファイル 106f の所定の記憶領域に格納してもよい。また、変換部 102i2 は、濃度データに含まれている、上記 15 種類の代謝物および上記 19 種類のアミノ酸のうちの少な

くとも1つの濃度値を、例えば上述した変換手法などで変換してもよい。

[0086] 生成部102i3は、モニタ等の表示装置又は紙等の物理媒体に視認可能に示される所定の物差し上における所定の目印の位置に関する位置情報を、算出部102i1で算出した式の値又は変換部102i2で変換した後の値（濃度値又は当該濃度値の変換後の値でもよい）を用いて生成する。なお、評価部102iは、生成部102i3で生成した位置情報を評価結果として評価結果ファイル106fの所定の記憶領域に格納してもよい。

[0087] 分類部102i4は、算出部102i1で算出した評価式の値又は変換部102i2で変換した後の値（濃度値又は当該濃度値の変換後の値でもよい）を用いて、個体を、肺癌に罹患している可能性の程度を少なくとも考慮して定義された複数の区分のうちのどれか1つに分類する。

[0088] 結果出力部102jは、制御部102の各処理部での処理結果（評価部102iで得られた評価結果を含む）等を出力装置114に出力する。

[0089] 送信部102kは、個体の濃度データの送信元のクライアント装置200に対して評価結果を送信したり、データベース装置400に対して、評価装置100で作成した評価式や評価結果を送信したりする。

[0090] 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13を参照して説明する。図13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。

[0091] 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。

[0092] 制御部210は、Webブラウザ211、電子メール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ン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。電子メール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は、通信IF280を介して、評価装置100から送信された評価結果などの各種情報を受信する。送信部214は、通信IF280を介して、個体の濃度データなどの各種情報を評価装置100へ送信する。

[0093] 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。

[0094] 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評価装置100にアクセスすることができる。

[0095] 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。

[0096] 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。ROM 220またはHD 230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、RAM 240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。

[0097] ここで、制御部 210は、評価装置 100の制御部 102に備えられている評価部 102 i が有する機能と同様の機能を有する評価部 210 a (算出部 210 a 1、変換部 210 a 2、生成部 210 a 3、及び分類部 210 a 4を含む) を備えていてもよい。そして、制御部 210に評価部 210 a が備えられている場合には、評価部 210 a は、評価装置 100から送信された評価結果に含まれている情報に応じて、変換部 210 a 2で式の値を変換したり、生成部 210 a 3で式の値又は変換後の値 (濃度値又は当該濃度値の変換後の値でもよい) に対応する位置情報を生成したり、分類部 210 a 4で式の値又は変換後の値 (濃度値又は当該濃度値の変換後の値でもよい) を用いて個体を複数の区分のうちのどれか 1つに分類したりしてもよい。

[0098] つぎに、本システムのネットワーク 300について図 3、図 4を参照して説明する。ネットワーク 300は、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。

[0099] 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14を参照して説明する。図14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係る部分のみを概念的に示している。

[0100] データベース装置400は、評価装置100または当該データベース装置で評価式を作成する際に用いる指標状態情報や、評価装置100で作成した評価式、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14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。

[0101] 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などを格納する。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その他、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。

[0102] 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。

[0103] 要求解釈部４０２ａは、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、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、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、指標状態情報や評価式などの各種情報を、評価装置１００へ送信する。

[0104] なお、本説明では、評価装置１００が、濃度データの受信から、評価式の値の算出、個体の区分への分類、そして評価結果の送信までを実行し、クライアント装置２００が評価結果の受信を実行するケースを例として挙げたが、クライアント装置２００に評価部２１０ａが備えられている場合は、評価装置１００は評価式の値の算出を実行すれば十分であり、例えば評価式の値の変換、位置情報の生成、及び、個体の区分への分類などは、評価装置１００とクライアント装置２００とで適宜分担して実行してもよい。

例えば、クライアント装置２００は、評価装置１００から評価式の値を受信した場合には、評価部２１０ａは、変換部２１０ａ２で評価式の値を変換

したり、生成部 210a3 で評価式の値又は変換後の値に対応する位置情報を生成したり、分類部 210a4 で式の値又は変換後の値を用いて個体を複数の区分のうちのどれか 1 つに分類したりしてもよい。

また、クライアント装置 200 は、評価装置 100 から変換後の値を受信した場合には、評価部 210a は、生成部 210a3 で変換後の値に対応する位置情報を生成したり、分類部 210a4 で変換後の値を用いて個体を複数の区分のうちのどれか 1 つに分類したりしてもよい。

また、クライアント装置 200 は、評価装置 100 から評価式の値又は変換後の値と位置情報とを受信した場合には、評価部 210a は、分類部 210a4 で評価式の値又は変換後の値を用いて個体を複数の区分のうちのどれか 1 つに分類してもよい。

[0105] [2-3. 他の実施形態]

本発明にかかる評価装置、評価方法、評価プログラム、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。

[0106] 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。

[0107] 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。

[0108] また、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。

[0109] 例えば、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 (Cent

ral 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。

[0110] また、このコンピュータプログラムは評価装置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。

[0111] また、本発明にかかる評価プログラムを、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 (登録商標) Disc等の任意の「可搬用の物理媒体」を含むものとする。

[0112] 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。

[0113] 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。

[0114] また、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、評価装置 100 は、当該情報処理装置に本発明の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。

[0115] 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。

実施例 1

[0116] 肺癌の確定診断が行われた肺癌患者（肺癌群：72名）、及び、癌の既往歴、罹患歴がない健常者（健常群：69名）の血漿サンプルから、前述の代謝物分析法（A）により血中代謝物濃度を測定した。

[0117] 14種類の代謝物（Homoarginine, GABA, 3-Me-His, ADMA, Spermine, Spermidine, Cystathionine, Sarcosine, aAIBA, bAIBA, Putrescine, N-Acetyl-L-Lys, Hypotaurine, bABA）の血漿中濃度値（nmol/ml）のデータを用いて、各代謝物について肺癌群と健常群の判別能をROC_AUC（受信者特性曲線の曲線下面積）で評価した。表1に各代謝物の判別能を評価する際の指標となるR

ROC_AUCを示す。

[0118] [表1]

(表1)

	ROC_AUC	漸近有意確率
3-Me-His	0.6760	0.0003
Putrescine	0.5419	0.3910
GABA	0.7401	<0.0001
ADMA	0.6603	0.0010
bAiBA	0.5727	0.1365
bABA	0.5350	0.4730
N ϵ -Acetyl-L-Lys	0.5312	0.5226
Spermidine	0.5043	0.9293
aAiBA	0.5635	0.1932
Homoarginine	0.7711	<0.0001
Hypotaurine	0.5239	0.6250
Sarcosine	0.5736	0.1317
Cystathionine	0.5974	0.0459
Spermine	0.5984	0.0437

[0119] 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 ($p < 0.05$) であった代謝物は、Homoarginine, GABA, 3-Me-His, ADMA, Spermine, Cystathionineであった。Homoarginine, GABA, 3-Me-Hisは肺癌群で有意に減少し、ADMA, Spermine, Cystathionineは肺癌群で有意に増加した。これらの代謝物の濃度値は、ROC_AUCが有意であることから、健常の状態を考慮した、肺癌の状態の評価において有用なものであると考えられる。

実施例 2

[0120] 実施例1で得られたサンプルデータを用いた。血漿中の代謝物濃度値が代入される変数を含む、肺癌群と健常群との2群を判別するための多変量判別式（多変量関数）を求めた。

[0121] 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2個の変数の組み合わせを、上記14種類の代謝物のうち少なくとも1つを必須としたうえで、19種類のアミノ酸 (Asn, His, Thr, Ala, Cit, Arg, Tyr, Val, Met, Lys, Trp, Gly, Pro, Orn, Ile, Leu, Phe, Ser, Gln) および上記14種類の代謝物から探索し、肺癌群と健常群の判別能が良好なロジスティック回帰式の探索を実施した。

[0122] 肺癌群と健常群のROC_AUC値が0.597 (単独の代謝物で有意なROC_AUCの最小値) 以上で、変数の個数が2個のロジスティック回帰式の一覧を、図15から図20に示した。これらのロジスティック回帰式は、ROC_AUC値が高いことから、前記の評価において有用なものであると考えられる。

実施例 3

[0123] 実施例1で用いたサンプルデータを用いた。血漿中の代謝物濃度値が代入される変数を含む、肺癌群と健常群との2群を判別するための多変量判別式 (多変量関数) を求めた。

[0124] 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3個の変数の組み合わせを、実施例2と同様に、上記14種類の代謝物のうち少なくとも1つを必須としたうえで、上記19種類のアミノ酸および上記14種類の代謝物から探索し、肺癌群と健常群の判別能が良好なロジスティック回帰式の探索を実施した。

[0125] 肺癌群と健常群のROC_AUC値が0.771 (単独の代謝物で有意なROC_AUCの最大値) 以上で、変数の個数が3個のロジスティック回帰式の一覧を、図21から図48に示した。これらのロジスティック回帰式は、ROC_AUC値が高いことから、前記の評価において有用なものであると考えられる。

実施例 4

[0126] 実施例1で用いたサンプルデータを用いた。血漿中の代謝物濃度値が代入される変数を含む、肺癌群と健常群との2群を判別するための多変量判別式

(多変量関数)を求めた。

[0127] 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6個の変数の組み合わせを、上記19種類のアミノ酸および上記14種類の代謝物から探索し、肺癌群と健常群の判別能が良好なロジスティック回帰式の探索を実施した。

[0128] 上記で得られたロジスティック回帰式のうち、ROC_AUCが0.95以上の383式に含まれるアミノ酸変数の出現頻度を求めた。ロジスティック回帰式の一覧を図49から図64に、出現頻度を表2に示した。これより、Pro, Cit, Phe, His, Trp, ADMA, Cystathionineの出現頻度は50以上と高いことが示された。特に、Pro, Cit, Phe, His, Trp, ADMAの出現頻度は100以上と高いことが示された。更に、Pro, Cit, His, ADMAの出現頻度は300以上と高いことが示された。

[0129]

[表2]

(表2)

	ROC_AUC 0.95以上
Thr	37
Ser	30
Asn	14
Gln	13
Pro	326
Gly	13
Ala	34
Cit	330
Val	15
Met	21
Ile	23
Leu	14
Tyr	15
Phe	140
His	377
Trp	168
Orn	33
Lys	21
Arg	16
3_MeHis	33
Putrescine	11
GABA	46
ADMA	309
bAiBA	34
bABA	19
Nε_Acetyl_L_lys	14
Spermidine	14
aAiBA	24
homoarginine	32
Hypotaurine	23
Sarcosine	24
Cystathionine	52
Spermine	11

[0130] 上記で得られたロジスティック回帰式のうち、例えば、変数の組「P r o

、Cit、His、GABA、ADMA、Homoarginine」を持つ指標式1「 $6.0201 + 0.029344 * Pro - 0.17847 * Cit - 0.17485 * His - 22.9141 * GABA + 23.6129 * ADMA - 0.57734 * homoarginine$ (Pro, Cit, His, GABA, ADMA, Homoarginineを変数として含む多変量判別式)の判別能は、ROC_AUC=0.9601, 感度=0.903, 特異度=0.899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。

[0131] ここで、指標式1、並びに、肺癌群のアミノ酸及び代謝物濃度値 ($\mu\text{mol/L}$) を用いて、式の値を算出し、そして、算出した式の値及び予め設定したカットオフ値を用いて、肺癌群の各症例を、以下に示す通り設定した複数の区分のうちのどれか1つに分類した。ここで、カットオフ値の候補として、特異度80%のときの式の値と特異度95%のときの式の値を求めたところ、それぞれ-1.016と0.816であった。なお、これらのカットオフ値とした場合の感度はそれぞれ93%、79%である。

[0132] 式の値が最も高かった1症例のアミノ酸濃度値はそれぞれ、Pro: 209.6、Cit: 24.5、His: 35.1、GABA: 0.100、ADMA: 0.629、Homoarginine: 0.812であり、この症例の式の値は13.7であった。ここで、「対数オッズ $\ln(p/(1-p)) = \text{式の値}$ 」という関係式 (pは癌である確率) を定義して、この式の値13.7からオッズ $p/(1-p)$ を計算したところ、918043.4であった。さらに、このオッズから確率pを計算したところ、1.0であった。

[0133] そして、カットオフ値として特異度95%のときの式の値0.816を設定し、そして、式の値がカットオフ値より高い場合は陽性 (肺癌区分に相当) でカットオフ値より低い場合は陰性 (健常区分に相当) と定義して、式の値が13.7であった前記症例を陽性及び陰性のどちらかに分類したところ

、この式の値はカットオフ値より高いため、この症例は陽性に分類された。

- [0134] また、第一のカットオフ値として特異度80%のときの式の値 -1.016 を設定し、第二のカットオフ値として特異度95%のときの式の値 0.816 を設定し、そして、式の値が第一のカットオフ値より低い場合はランクA（肺癌である可能性（確率、リスク）が低いことを意味する区分）で、第一のカットオフ値より高く第二のカットオフ値より低い場合はランクB（肺癌である可能性が中程度であることを意味する区分）で、第二のカットオフ値より高い場合はランクC（肺癌である可能性が高いことを意味する区分）と定義して、式の値が 13.7 であった前記症例を3つのランクのうちのどれか1つに分類したところ、この式の値は第二のカットオフ値より高いため、この症例はランクCに分類された。

実施例 5

- [0135] 本実施例5においては、実施例1で用いた血液サンプルの中から健常者19名分の血漿、肺癌患者20名分の血漿をそれぞれまとめたプール血漿を用い、前述の代謝物分析法（A）を用いて定性分析を行った。
- [0136] 実施例1で測定した14種類の代謝物以外に、「ACQUITY™ UPLC」（ウォータース社）を用い（分析カラム：「Inertsil ODS-3（粒子径： $2.0\mu\text{m}$ 、内径： 2.1mm 、長さ： 100mm ）」（ジエルサイエンス社）、ガードカラム：「Cartridge Guard Column E Inertsil ODS-3（粒子径： $3.0\mu\text{m}$ 、内径： 1.5mm 、長さ： 10mm ）」（ジエルサイエンス社））、カラム温度を 50°C とし、溶離液AにAPDSアミノタグワコー用溶離液（和光純薬工業）を用い、溶離液Bとしてアセトニトリル／水（60：40、v／v）を用いて、 $0.5\text{mL}/\text{min}$ の流量で分析を実施し、そして、この実施において、溶離液Bを、下記の通り、時間経過に合わせて段階的に変化させたところ、3.3分付近の β -アミノイソ酪酸の直後に溶出する保持時間3.5分付近にピーク（ m/z 224）が出現した。そして、このピークの面積値は、健常者の血漿プールで202,000、肺癌患者のプー

ル血漿で2, 790, 000であった。つまり、肺癌患者のプール血漿で約13.8倍の面積値の上昇が認められた。そのときのクロマトグラムを図65に示した。

0.00分～ 0.01分：5%～6%
0.01分～ 3.50分：6%
3.50分～ 5.00分：6%～8%
5.00分～ 6.00分：8%～20%
6.00分～ 8.50分：20%
8.50分～ 9.50分：20%～24%
9.50分～12.00分：24%
12.00分～12.01分：24%～35%
12.01分～15.00分：35%～80%
15.00分～15.10分：80%～95%
15.10分～17.00分：95%
17.01分～19.00分：5%

[0137] 上記のピークはその質量数および液体クロマトグラフィの保持時間から Ethylglycine であることが示された。これより、Ethylglycine が、肺癌の状態を評価するのに有用であることが示された。

実施例 6

[0138] 実施例1のサンプルを用いて、前述の代謝物分析法（A）により実施例1の血中代謝物濃度に加え、血中の Ethylglycine 濃度を測定した。

[0139] Ethylglycine の血漿中濃度値（nmol/ml）のデータを用いて、肺癌群と健常群の判別能を ROC__AUC で評価した。表3に Ethylglycine の判別能を評価する際の指標となる ROC__AUC を示す。

[0140]

[表3]

(表3)

	R O C _ A U C	漸近有意確率
Ethylglycine	0.7788	<0.0001

[0141] Ethylglycineは、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 ($p < 0.05$) であり、肺癌群で有意に増加した。Ethylglycineの濃度値は、 ROC_AUC が有意であることから、健常の状態を考慮した、肺癌の状態の評価において有用なものであると考えられる。

実施例 7

[0142] 実施例6で得られたサンプルデータを用いた。血漿中の代謝物濃度値が代入される変数を含む、肺癌群と健常群との2群を判別するための多変量判別式（多変量関数）を求めた。

[0143] 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2個の変数の組み合わせを、Ethylglycineを必須としたうえで、上記19種類のアミノ酸および上記14種類の代謝物から探索し、肺癌群と健常群の判別能が良好なロジスティック回帰式の探索を実施した。

[0144] 肺癌群と健常群の ROC_AUC 値が0.779 (Ethylglycine単独の ROC_AUC 値) 以上で、変数の個数が2個のロジスティック回帰式（変数の組み合わせ）の一覧を図66に示した。なお、図66に示す各式について、各変数の係数の数値はゼロを除く任意の数値であればよく、また、定数の数値は任意の数値であればよい。これらのロジスティック回帰式は、 ROC_AUC 値が高いことから、前記の評価において有用なものであると考えられる。

実施例 8

[0145] 実施例6で用いたサンプルデータを用いた。血漿中の代謝物濃度値が代入

される変数を含む、肺癌群と健常群との2群を判別するための多変量判別式（多変量関数）を求めた。

[0146] 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3個の変数の組み合わせを、実施例7と同様に、E t h y l g l y c i n eを必須としたうえで、上記19種類のアミノ酸および上記14種類の代謝物から探索し、肺癌群と健常群の判別能が良好なロジスティック回帰式の探索を実施した。

[0147] 肺癌群と健常群のROC__AUC値が0.779（E t h y l g l y c i n e単独のROC__AUC値）以上で、変数の個数が3個のロジスティック回帰式（変数の組み合わせ）の一覧を図67から図69に示した。なお、図67から図69に示す各式について、各変数の係数の数値はゼロを除く任意の数値であればよく、また、定数の数値は任意の数値であればよい。これらのロジスティック回帰式は、ROC__AUC値が高いことから、前記の評価において有用なものであると考えられる。

実施例 9

[0148] 実施例6で用いたサンプルデータを用いた。血漿中の代謝物濃度値が代入される変数を含む、肺癌群と健常群との2群を判別するための多変量判別式（多変量関数）を求めた。

[0149] 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6個の変数の組み合わせを、実施例7と同様に、E t h y l g l y c i n eを必須としたうえで、上記19種類のアミノ酸および上記14種類の代謝物から探索し、肺癌群と健常群の判別能が良好なロジスティック回帰式の探索を実施した。

[0150] 上記で得られたロジスティック回帰式のうち、肺癌群と健常群のROC__AUC値が0.95以上の122式に含まれるアミノ酸変数の出現頻度を求めた。ロジスティック回帰式の一覧を図70から図72に、出現頻度を表4に示した。なお、図70から図72に示す各式について、各変数の係数の数値はゼロを除く任意の数値であればよく、また、定数の数値は任意の数値で

あればよい。これより、Pro, Cit, Phe, His, GABA, ADMA, Cystathionine, Ethylglycineの出現頻度は20以上と高いことが示された。特に、Cit, His, ADMA, Ethylglycineの出現頻度は100以上と高いことが示された。

[0151] [表4]

(表4)

	ROC_AUC 0.95以上
Thr	7
Ser	4
Asn	3
Gln	6
Pro	36
Gly	3
Ala	2
Cit	117
Val	5
Met	5
Ile	4
Leu	5
Tyr	6
Phe	28
His	116
Trp	19
Orn	7
Lys	8
Arg	6
3_MeHis	5
Putrescine	3
GABA	37
ADMA	117
bAiBA	7
bABA	3
Nε_Acetyl_L_lys	2
Spermidine	3
aAiBA	2
Homoarginine	14
Hypotaurine	3
Sarcosine	4
Cystathionine	21
Spermine	2
Ethylglycine	122

[0152] 上記で得られたロジスティック回帰式のうち、例えば、変数の組「Pro

, Cit, His, ADMA, Homoarginine, Ethylglycine」を持つ指標式2「 $2.8645 + 0.024531 * Pro - 0.20356 * Cit - 0.15864 * His + 24.334 * ADMA - 0.74621 * Homoarginine + 3.7291 * Ethylglycine$ (Pro, Cit, His, ADMA, Homoarginine, Ethylglycineを変数として含む多変量判別式)の判別能は、ROC_AUC=0.9599, 感度=0.889, 特異度=0.899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。

[0153] ここで、指標式2、並びに、肺癌群のアミノ酸及び代謝物濃度値 ($\mu\text{mol/L}$) を用いて、式の値を算出し、そして、算出した式の値及び予め設定したカットオフ値を用いて、肺癌群の各症例を、以下に示す通り設定した複数の区分のうちのどれか1つに分類した。ここで、カットオフ値の候補として、特異度80%のときの式の値と特異度95%のときの式の値を求めたところ、それぞれ-0.7765と0.5558であった。なお、これらのカットオフ値とした場合の感度はそれぞれ93%、79%である。

[0154] 式の値が最も高かった1症例のアミノ酸濃度値はそれぞれ、Pro: 279.7、Cit: 26.8、His: 72.4、ADMA: 0.572、Homoarginine: 0.833、Ethylglycine: 4.20であり、この症例の式の値は21.7であった。ここで、「対数オッズ $\ln(p/(1-p)) = \text{式の値}$ 」という関係式 (pは癌である確率) を定義して、この式の値21.7からオッズ $p/(1-p)$ を計算したところ、2,655,768,756であった。さらに、このオッズから確率pを計算したところ、1.0であった。

[0155] そして、カットオフ値として特異度95%のときの式の値0.5558を設定し、そして、式の値がカットオフ値より高い場合は陽性 (肺癌区分に相当) でカットオフ値より低い場合は陰性 (健常区分に相当) と定義して、式の値が21.7であった前記症例を陽性及び陰性のどちらかに分類したとこ

ろ、この式の値はカットオフ値より高いため、この症例は陽性に分類された。

[0156] また、第一のカットオフ値として特異度 80%のときの式の値 -0.7765 を設定し、第二のカットオフ値として特異度 95%のときの式の値 0.5558 を設定し、そして、式の値が第一のカットオフ値より低い場合はランク A（肺癌である可能性（確率、リスク）が低いことを意味する区分）で、第一のカットオフ値より高く第二のカットオフ値より低い場合はランク B（肺癌である可能性が中程度であることを意味する区分）で、第二のカットオフ値より高い場合はランク C（肺癌である可能性が高いことを意味する区分）と定義して、式の値が 21.7 であった前記症例を 3つのランクのうちのどれか 1つに分類したところ、この式の値は第二のカットオフ値より高いため、この症例はランク C に分類された。

産業上の利用可能性

[0157] 以上のように、本発明は、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、特に肺癌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

[0158] 100 評価装置
 102 制御部
 102 a 要求解釈部
 102 b 閲覧処理部
 102 c 認証処理部
 102 d 電子メール生成部
 102 e Web ページ生成部
 102 f 受信部
 102 g 指標状態情報指定部
 102 h 評価式作成部

- 102 i 評価部
- 102 i 1 算出部
- 102 i 2 変換部
- 102 i 3 生成部
- 102 i 4 分類部
- 102 j 結果出力部
- 102 k 送信部
- 104 通信インターフェース部
- 106 記憶部
- 106 a 利用者情報ファイル
- 106 b 濃度データファイル
- 106 c 指標状態情報ファイル
- 106 d 指定指標状態情報ファイル
- 106 e 評価式関連情報データベース
- 106 e 1 評価式ファイル
- 106 f 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（端末装置（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] 評価対象の血液中のHomoarginine, GABA, 3-Me-His, ADMA, Spermine, Spermidine, Cystathionine, Sarcosine, aAibA, bAibA, Putrescine, N-Acetyl-L-lys, Hypotaurine, bABA, Ethylglycineのうちの少なくとも1つの濃度値を用いて、前記評価対象について、肺癌の状態を評価する評価ステップを含むこと、
を特徴とする評価方法。
- [請求項2] 前記評価ステップでは、評価対象の血液中のAsn, His, Thr, Ala, Cit, Arg, Tyr, Val, Met, Lys, Trp, Gly, Pro, Orn, Ile, Leu, Phe, Ser, Glnのうちの少なくとも1つの濃度値をさらに用いること、
を特徴とする請求項1に記載の評価方法。
- [請求項3] 前記評価ステップでは、Homoarginine, GABA, 3-Me-His, ADMA, Spermine, Spermidine, Cystathionine, Sarcosine, aAibA, bAibA, Putrescine, N-Acetyl-L-lys, Hypotaurine, bABA, Ethylglycineのうちの少なくとも1つの濃度値が代入される変数を含む式をさらに用いて、前記式の値を算出することで、前記評価対象について、肺癌の状態を評価すること、
を特徴とする請求項1に記載の評価方法。
- [請求項4] 前記評価ステップでは、評価対象の血液中のAsn, His, Thr, Ala, Cit, Arg, Tyr, Val, Met, Lys, Trp, Gly, Pro, Orn, Ile, Leu, Phe, Ser, Glnのうちの少なくとも1つの濃度値をさらに用い、
前記式は、Asn, His, Thr, Ala, Cit, Arg, T

y r, V a l, M e t, L y s, T r p, G l y, P r o, O r n, I l e, L e u, P h e, S e r, G l nのうちの少なくとも1つの濃度値が代入される変数をさらに含むものであること、

を特徴とする請求項3に記載の評価方法。

[請求項5]

制御部を備えた評価装置であって、

前記制御部は、

評価対象の血液中のHomoarginine, GABA, 3-Me-His, ADMA, Spermine, Spermidine, Cystathionine, Sarcosine, aAiBA, bAiBA, Putrescine, N-Acetyl-L-lys, Hypotaurine, bABA, Ethylglycineのうちの少なくとも1つの濃度値を用いて、前記評価対象について、肺癌の状態を評価する評価手段

を備えたこと、

を特徴とする評価装置。

[請求項6]

制御部を備えた情報処理装置において実行される評価方法であって、

前記制御部において実行される、

評価対象の血液中のHomoarginine, GABA, 3-Me-His, ADMA, Spermine, Spermidine, Cystathionine, Sarcosine, aAiBA, bAiBA, Putrescine, N-Acetyl-L-lys, Hypotaurine, bABA, Ethylglycineのうちの少なくとも1つの濃度値を用いて、前記評価対象について、肺癌の状態を評価する評価ステップ

を含むこと、

を特徴とする評価方法。

[請求項7]

制御部を備えた情報処理装置において実行させるための評価プログ

ラムであって、

前記制御部において実行させるための、

評価対象の血液中のHomoarginine, GABA, 3-Me-His, ADMA, Spermine, Spermidine, Cystathionine, Sarcosine, aAiBA, bAiBA, Putrescine, N-Acetyl-L-Lys, Hypotaurine, bABA, Ethylglycineのうちの少なくとも1つの濃度値を用いて、前記評価対象について、肺癌の状態を評価する評価ステップ

を含むこと、

を特徴とする評価プログラム。

[請求項8]

制御部を備えた評価装置と、制御部を備え、評価対象の血液中のHomoarginine, GABA, 3-Me-His, ADMA, Spermine, Spermidine, Cystathionine, Sarcosine, aAiBA, bAiBA, Putrescine, N-Acetyl-L-Lys, Hypotaurine, bABA, Ethylglycineのうちの少なくとも1つの濃度値に関する濃度データを提供する端末装置とを、ネットワークを介して通信可能に接続して構成された評価システムであって、

前記端末装置の前記制御部は、

前記評価対象の前記濃度データを前記評価装置へ送信する濃度データ送信手段と、

前記評価装置から送信された、前記評価対象における肺癌の状態に関する評価結果を受信する結果受信手段と、

を備え、

前記評価装置の前記制御部は、

前記端末装置から送信された前記評価対象の前記濃度データを受信する濃度データ受信手段と、

前記濃度データ受信手段で受信した前記評価対象の前記濃度データに含まれている、Homoarginine, GABA, 3-Me-His, ADMA, Spermine, Spermidine, Cystathionine, Sarcosine, aAiBA, bAiBA, Putrescine, N-Acetyl-L-lys, Hypotaurine, bABA, Ethylglycineのうちの少なくとも1つの前記濃度値を用いて、前記評価対象について、肺癌の状態を評価する評価手段と、

前記評価手段で得られた前記評価結果を前記端末装置へ送信する結果送信手段と、

を備えたこと、

を特徴とする評価システム。

[請求項9]

制御部を備えた端末装置であって、

前記制御部は、

評価対象における肺癌の状態に関する評価結果を取得する結果取得手段

を備え、

前記評価結果は、前記評価対象の血液中のHomoarginine, GABA, 3-Me-His, ADMA, Spermine, Spermidine, Cystathionine, Sarcosine, aAiBA, bAiBA, Putrescine, N-Acetyl-L-lys, Hypotaurine, bABA, Ethylglycineのうちの少なくとも1つの濃度値を用いて、前記評価対象について、肺癌の状態を評価した結果であること、

を特徴とする端末装置。

[請求項10]

評価対象の血液中のHomoarginine, GABA, 3-Me-His, ADMA, Spermine, Spermidine, Cystathionine, Sarcosine, aAiBA, b

A i B A, P u t r e s c i n e, N - A c e t y l - L - l y s, H y p o t a u r i n e, b A B A, E t h y l g l y c i n e のうちの少なくとも1つの濃度値に関する濃度データを提供する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、制御部を備えた評価装置であって、

前記制御部は、

前記端末装置から送信された前記評価対象の前記濃度データを受信する濃度データ受信手段と、

前記濃度データ受信手段で受信した前記評価対象の前記濃度データに含まれている、H o m o a r g i n i n e, G A B A, 3 - M e - H i s, A D M A, S p e r m i n e, S p e r m i d i n e, C y s t a t h i o n i n e, S a r c o s i n e, a A i B A, b A i B A, P u t r e s c i n e, N - A c e t y l - L - l y s, H y p o t a u r i n e, b A B A, E t h y l g l y c i n e のうちの少なくとも1つの前記濃度値を用いて、前記評価対象について、肺癌の状態を評価する評価手段と、

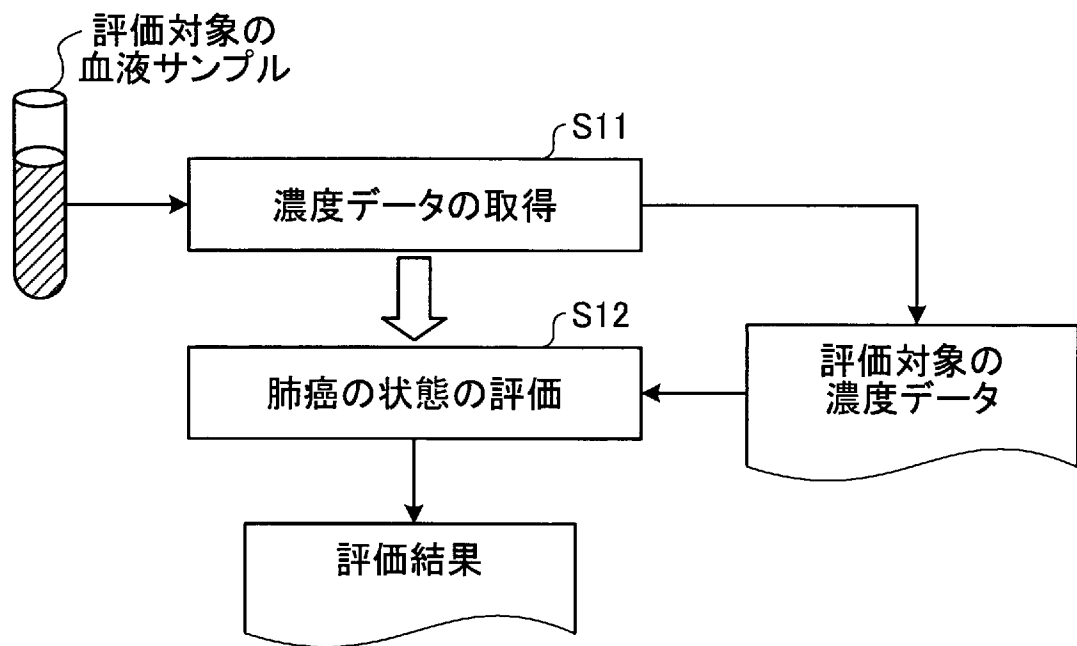
前記評価手段で得られた評価結果を前記端末装置へ送信する結果送信手段と、

を備えたこと、

を特徴とする評価装置。

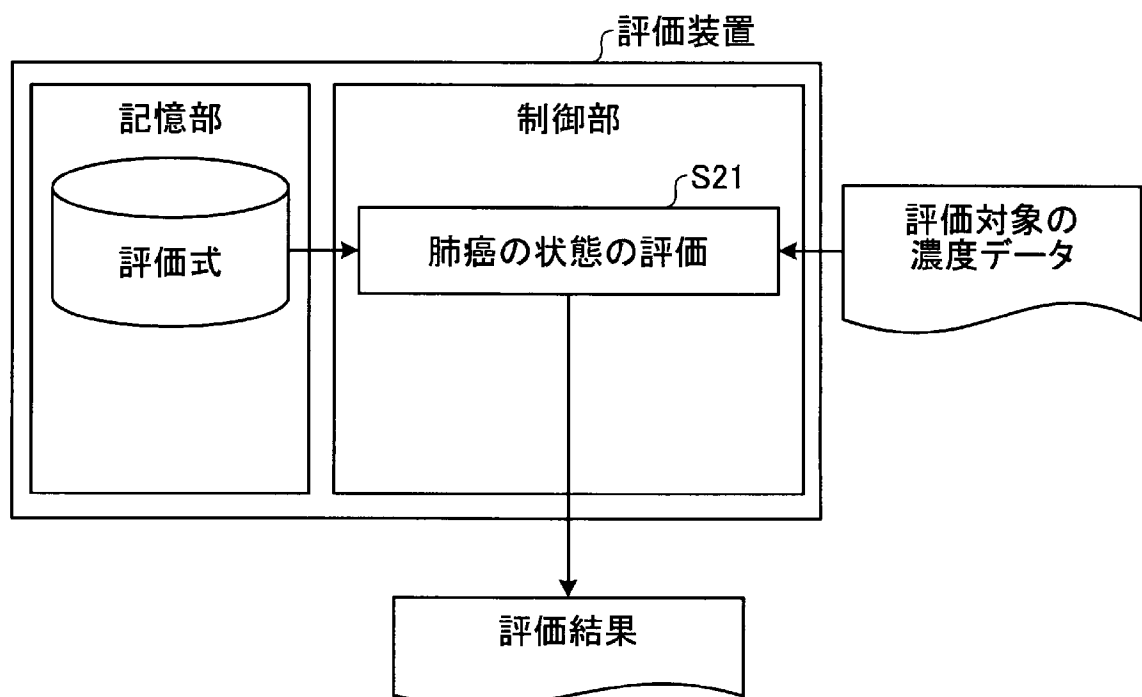
[図1]

(本発明の基本原理)

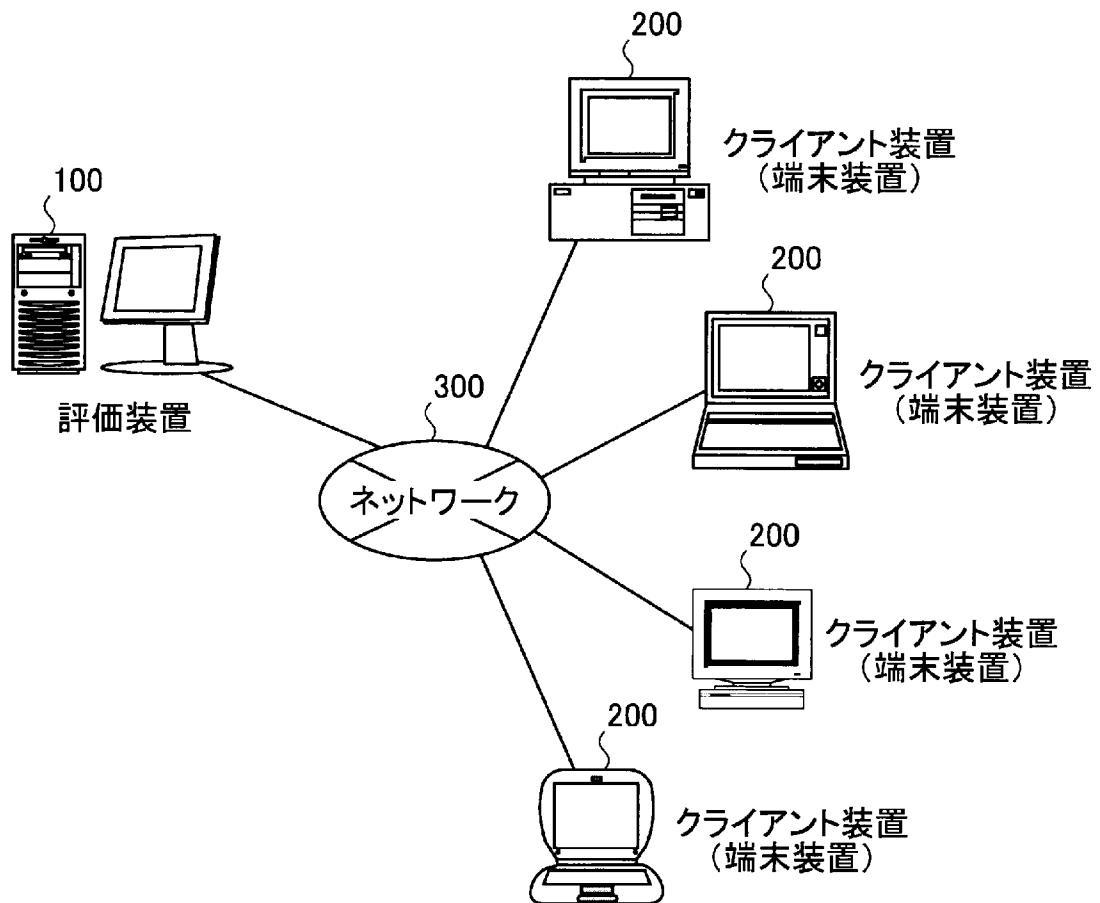


[図2]

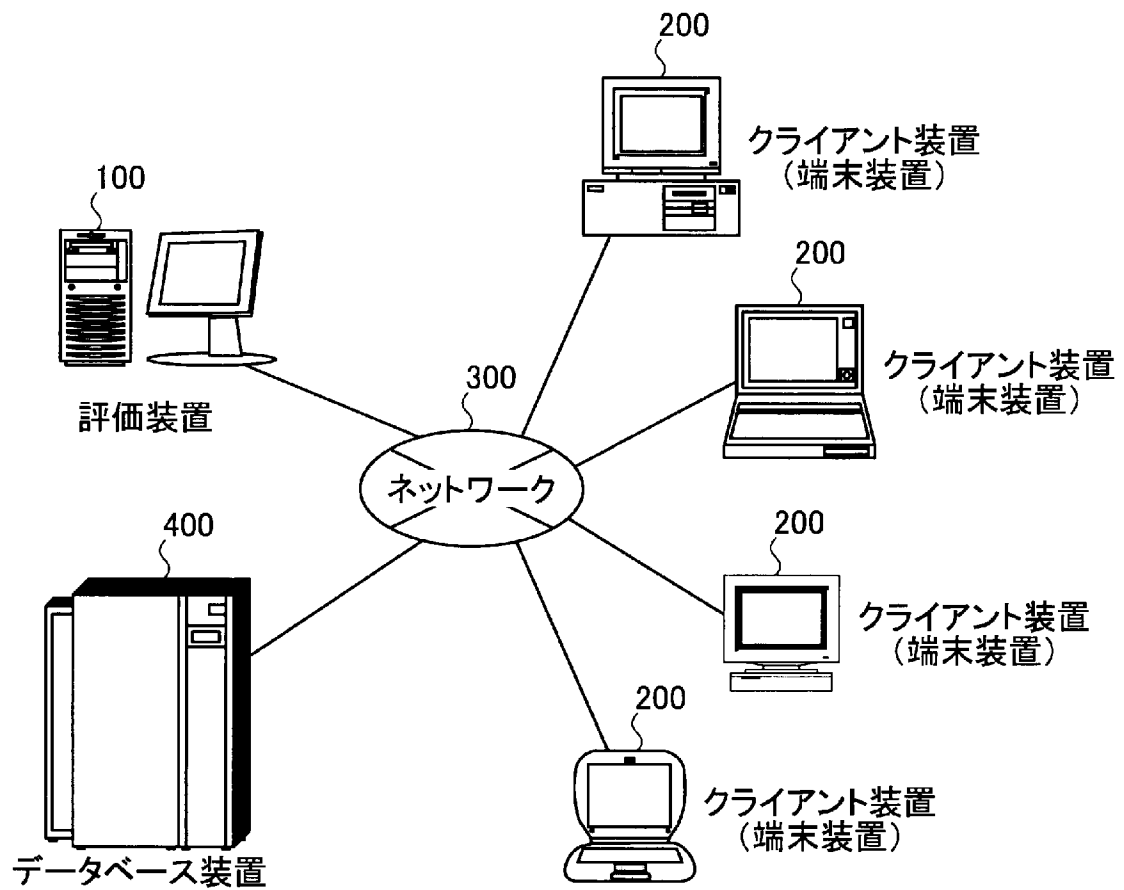
(本発明の基本原理)



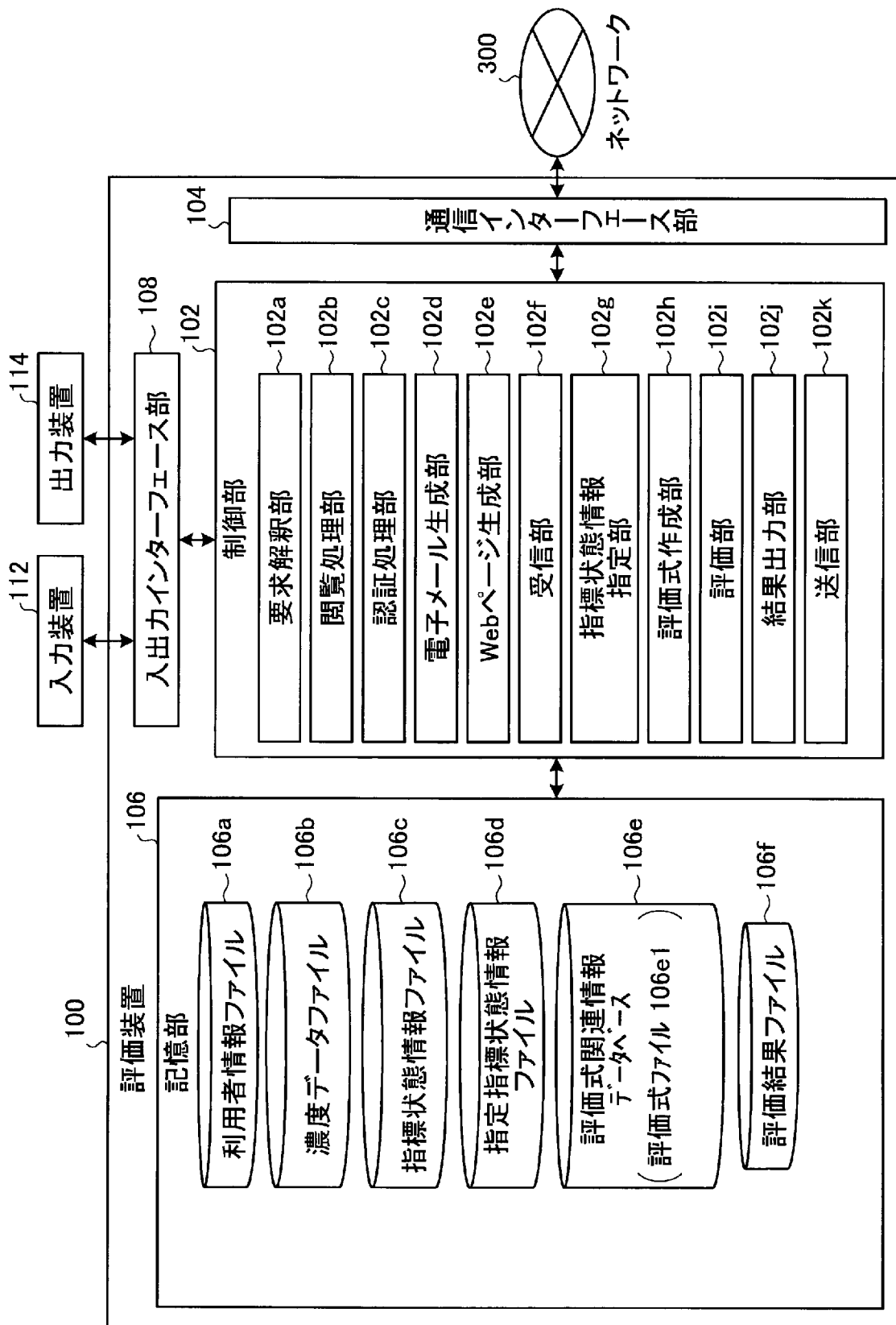
[図3]



[図4]



[図5]



[図6]

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7]

106b

個体(サンプル) 番号	濃度データ					
	His	Homo	GABA	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8]

[illegible]

[図9]

106d

個体(サンプル) 番号	指標データ(T)	濃度データ			
	T_2	His	Homo	GABA	...
A-1	62.5	9.5	11.2	4.9	...
A-2	66.1	8.5	10.5	6.1	...
⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮

[図10]

106e1

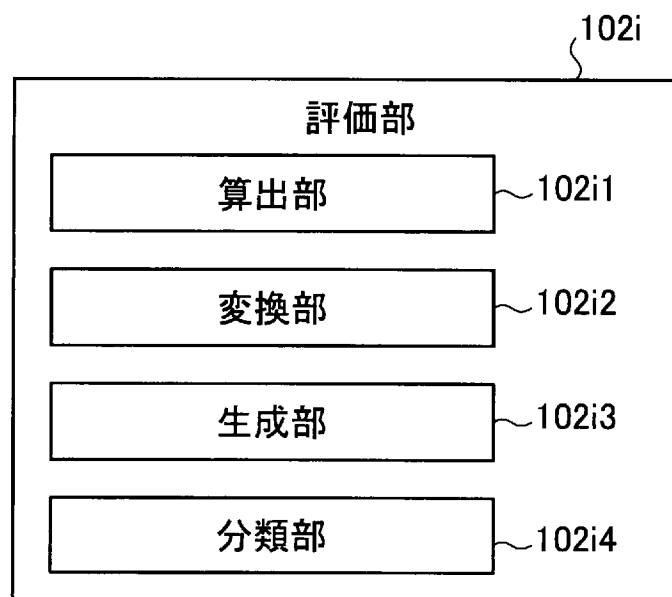
ランク	評価式	閾値	検証結果
1	$F_p(\text{His}, \dots)$	0.23	0.62
2	$F_p(\text{His}, \text{Homo}, \text{GABA})$	-2.12	1.02
3	$F_k(\text{His}, \text{Homo}, \text{GABA}, \dots)$	1.23	1.22
⋮	⋮	⋮	⋮

[図11]

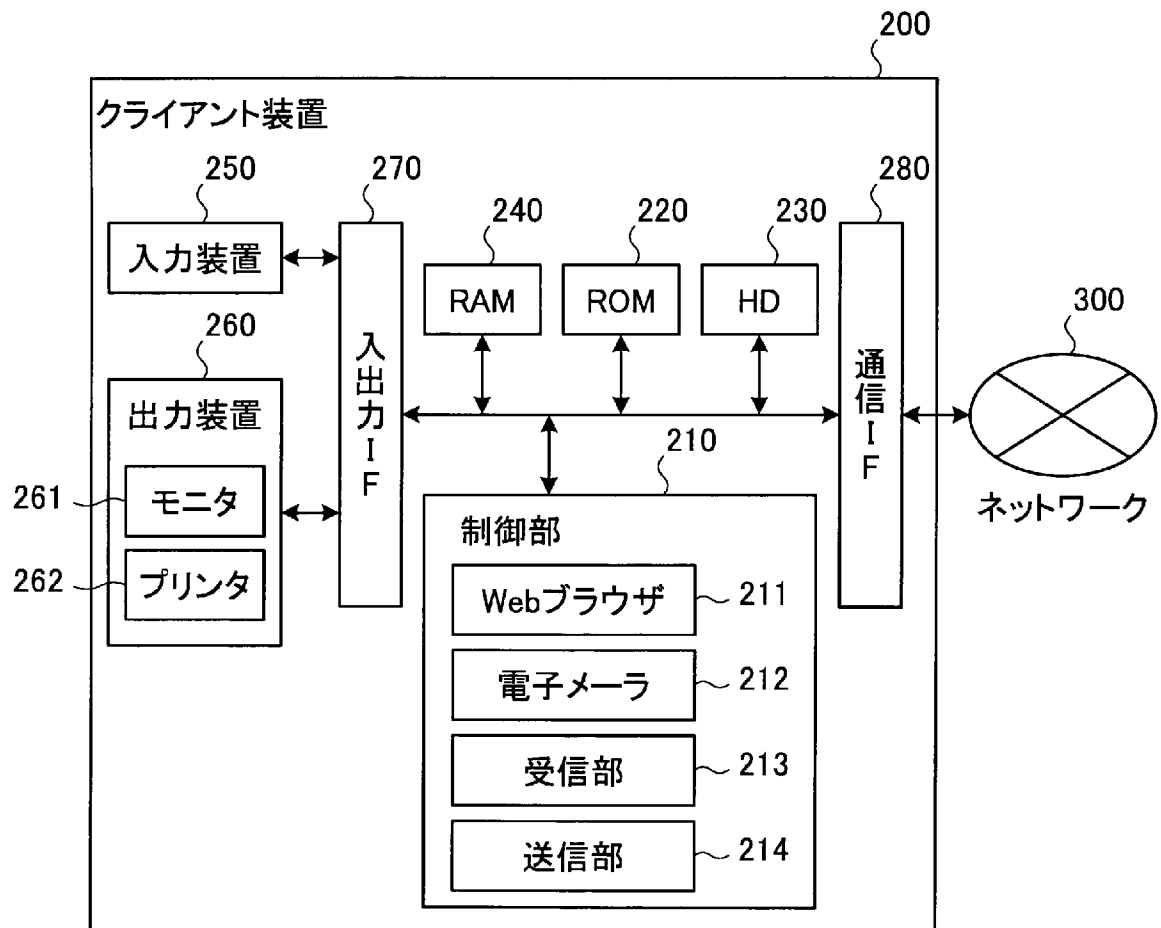
106f

個体(サンプル) 番号	濃度データ				評価結果
	His	Homo	GABA	...	
U-1	9.5	11.2	4.9	...	
U-2	8.5	10.5	6.1	...	
⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮

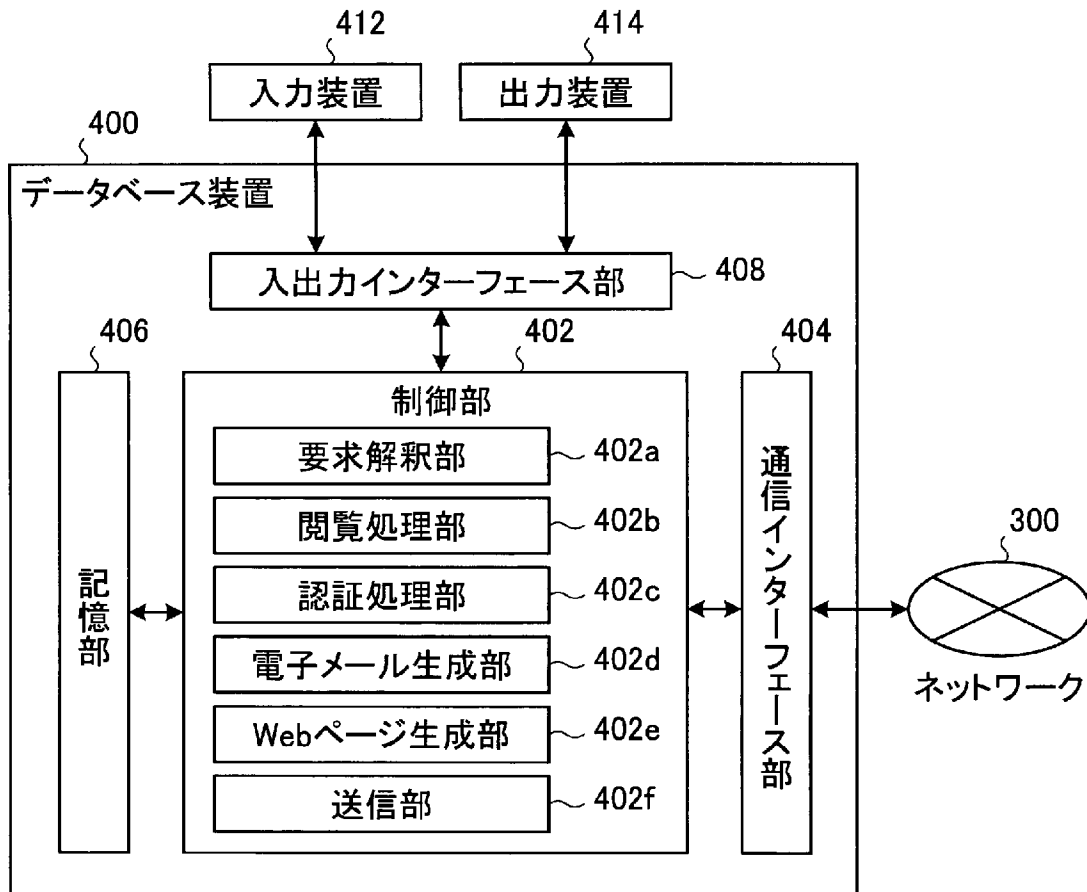
[図12]



[図13]



[図14]



[図15]

No.	Formula	ROC_AUC
1	4.4003-0.14151*His+11.2639*ADMA	0.872
2	8.1734-0.12135*His+3.617*Cystathionine	0.843
3	10.6771-0.11014*His-17.632*GABA	0.838
4	-2.4027-0.16304*Cit+13.945*ADMA	0.831
5	8.3998-0.13079*His+3.5211*N_Acetyl_L_lys	0.829
6	8.9061-0.098555*His-0.55883*homoarginine	0.827
7	5.479-21.1176*GABA-1.0339*homoarginine	0.826
8	1.4127-0.11077*Trp+8.2472*ADMA	0.825
9	9.1222-0.109*His-0.22148*x3_Me_His	0.823
10	9.3937-0.12013*His-0.14211*bAiBA	0.822
11	8.9604-0.11759*His-0.050833*Hypotaurine	0.820
12	9.1108-0.11978*His-1.9293*Spermine	0.820
13	9.2145-0.11887*His-2.7465*Putrescine	0.820
14	8.7243-0.11923*His+8.0041*bABA	0.820
15	9.4987-0.12185*His-2.5739*Spermidine	0.819
16	8.8958-0.11755*His-0.18709*aAiBA	0.819
17	-1.347+7.7158*ADMA-1.1596*homoarginine	0.819
18	8.9174-0.11713*His-0.0081386*Sarcosine	0.818
19	7.9208-0.093012*Trp-21.2593*GABA	0.818
20	4.3253-0.098039*Trp+3.7004*Cystathionine	0.812
21	2.7468-0.14834*Cit+7.8895*Cystathionine	0.811
22	4.9851-0.075088*Cit-0.95943*homoarginine	0.810
23	5.5097-0.081102*Cit-21.2026*GABA	0.808
24	-0.32402-28.8626*GABA+7.459*ADMA	0.807
25	1.05+0.012837*Pro-1.2024*homoarginine	0.807
26	-0.48621+0.054681*Phe-1.1895*homoarginine	0.807
27	4.1815-0.35083*x3_Me_His-1.0749*homoarginine	0.803
28	6.5485-0.095853*Trp-0.33113*x3_Me_His	0.796
29	1.2235+0.027843*Tyr-1.2347*homoarginine	0.792
30	1.633+0.0080209*Lys-1.2386*homoarginine	0.790
31	5.0578-0.057863*Trp-0.74066*homoarginine	0.787
32	1.8188-1.0177*homoarginine+2.7857*Cystathionine	0.787
33	2.052+0.010396*Orn-1.0856*homoarginine	0.785
34	1.82+0.0097501*Ser-1.1411*homoarginine	0.785
35	1.5513+0.019191*Ile-1.1244*homoarginine	0.785
36	5.0757-0.10124*Trp+3.8997*Spermidine	0.785
37	5.0475-0.098773*Trp+12.5045*Spermine	0.785
38	-2.8251-0.65837*x3_Me_His+9.849*ADMA	0.785
39	-0.070555-0.009896*Gln+10.4906*ADMA	0.784
40	5.0378-0.0099249*Gly-1.112*homoarginine	0.782
41	-1.5649-0.030742*Thr+9.383*ADMA	0.782
42	5.9797-0.10356*Trp-0.14997*bAiBA	0.782
43	5.3886-0.018513*Thr-24.021*GABA	0.781
44	5.6015-0.10023*Trp-3.8899*aAiBA	0.780
45	3.088-0.11453*bAiBA-1.1059*homoarginine	0.778
46	2.4264-25.4247*GABA+3.3261*Cystathionine	0.778
47	3.354-1.1179*homoarginine-0.36205*Hypotaurine	0.777
48	5.2115-0.097023*Trp+0.85092*Putrescine	0.776
49	5.0004-0.097023*Trp+0.66938*N_Acetyl_L_lys	0.775
50	2.8489-2.1747*bABA-1.0822*homoarginine	0.775

[図16]

No.	Formula	ROC_AUC
51	5.6024-0.096617*Trp-0.04627*Sarcosine	0.774
52	5.5746-0.098282*Trp-0.16332*Hypotaurine	0.774
53	5.4974-0.098652*Trp-3.3361*bABA	0.773
54	2.8624-1.0993*Putrescine-1.0818*homoarginine	0.773
55	2.9758-3.9072*aAiBA-1.1064*homoarginine	0.773
56	2.5822-1.0529*homoarginine+4.1556*Spermine	0.773
57	2.8809-1.0609*homoarginine-0.022613*Sarcosine	0.773
58	2.648+0.78712*Spermidine-1.0694*homoarginine	0.772
59	2.6923+0.00017888*Ala-1.0782*homoarginine	0.771
60	2.6171+0.0018326*Arg-1.0922*homoarginine	0.771
61	2.7355+0.00010911*Leu-1.0744*homoarginine	0.770
62	3.0212-0.0014049*Val-1.0518*homoarginine	0.770
63	2.9016-0.0069086*Met-1.0604*homoarginine	0.770
64	1.2521-0.82503*x3_Me_His+7.5214*Cystathionine	0.768
65	4.9527-0.063309*Met-24.2842*GABA	0.768
66	3.1574+9.5068*Putrescine-29.8822*GABA	0.767
67	2.4962+0.58512*N_Acetyl_L_lys-1.0721*homoarginine	0.766
68	3.6721-0.022323*Asn-1.0219*homoarginine	0.764
69	3.6783-0.0095703*Thr-0.98391*homoarginine	0.764
70	3.76-0.095781*Cit-0.079814*Sarcosine	0.764
71	4.3975-0.0059431*Gly-23.409*GABA	0.763
72	-1.2779-0.085932*Asn+9.5562*ADMA	0.763
73	4.9094-0.037765*Asn-23.5397*GABA	0.762
74	1.3564+0.030698*Phe-25.3134*GABA	0.761
75	4.1508-0.0026343*Gln-1.0143*homoarginine	0.761
76	5.2967-0.0037889*Gln-23.1978*GABA	0.759
77	4.7808-0.016529*Arg-23.9842*GABA	0.758
78	3.4105-0.084537*Cit-0.15007*x3_Me_His	0.756
79	5.0189-0.0081148*Val-23.552*GABA	0.756
80	3.0668-25.6221*GABA+12.7843*Spermine	0.753
81	-2.1229-0.036693*Arg+10.1354*ADMA	0.753
82	3.3037-25.833*GABA+3.579*aAiBA	0.753
83	3.9919-0.24821*x3_Me_His-22.344*GABA	0.752
84	4.8186-0.0082072*Lys-24.3596*GABA	0.751
85	3.0052-26.3091*GABA+4.4571*Spermidine	0.751
86	4.5539-0.010281*Leu-24.2225*GABA	0.748
87	2.7663+0.0098914*Orn-25.9175*GABA	0.748
88	2.7867-0.095386*Cit+0.27875*Hypotaurine	0.748
89	2.9527-28.0958*GABA+21.19*bABA	0.747
90	1.9828-0.10392*Cit+3.4601*N_Acetyl_L_lys	0.747
91	-1.6969-0.020109*Lys+9.987*ADMA	0.747
92	3.7731-25.0324*GABA-0.059156*Sarcosine	0.747
93	2.6985-0.096971*Cit+13.9702*bABA	0.745
94	2.7903-25.9847*GABA+1.5688*N_Acetyl_L_lys	0.744
95	2.7489-0.098604*Cit+6.1227*Putrescine	0.743
96	2.0484+0.0087267*Pro-25.7411*GABA	0.743
97	3.6664-0.0010487*Ala-24.61*GABA	0.743
98	-1.5685-0.11626*Met+8.5175*ADMA	0.742
99	3.085-0.092775*Cit-0.0048095*bAiBA	0.742
100	3.0094-0.098039*Cit+6.6713*aAiBA	0.741

[図17]

No.	Formula	ROC_AUC
101	3.4284-0.00083849*Ser-25.0394*GABA	0.741
102	3.4194-24.9238*GABA-0.042561*bAiBA	0.740
103	3.6168-0.004184*Tyr-24.9734*GABA	0.740
104	3.2427-25.1282*GABA+0.077399*Hypotaurine	0.739
105	2.9553-0.092239*Cit+0.91829*Spermidine	0.738
106	2.8014+0.0081988*Ile-25.2757*GABA	0.737
107	2.8868-0.090138*Cit+3.8061*Spermine	0.737
108	-1.4381-0.01168*Gly+7.1578*ADMA	0.730
109	1.9568-0.027605*Thr+4.8196*Cystathionine	0.730
110	2.2932-0.13988*Met+5.45*Cystathionine	0.724
111	1.9181-0.06738*Asn+4.5342*Cystathionine	0.722
112	0.36703-0.61182*x3_Me_His+5.0212*N_Acetyl_L_lys	0.720
113	-0.79103+0.038856*Phe-0.42549*x3_Me_His	0.712
114	2.487-0.0059675*Gln+3.6397*Cystathionine	0.711
115	-0.75216-0.013746*Val+7.0906*ADMA	0.707
116	3.5896-0.019008*Thr-0.32264*x3_Me_His	0.706
117	0.38673+0.0087466*Pro-0.4318*x3_Me_His	0.705
118	1.184-0.45322*x3_Me_His+18.3199*bABA	0.705
119	0.64088+0.016132*Ile-0.42563*x3_Me_His	0.702
120	2.0134-0.37644*x3_Me_His-0.062224*Sarcosine	0.702
121	1.2928-0.012329*Lys+3.875*Cystathionine	0.699
122	1.212-0.024384*Arg+4.085*Cystathionine	0.699
123	1.4203-0.55123*x3_Me_His+9.6217*Putrescine	0.697
124	1.1956-0.36189*x3_Me_His+11.4261*Spermine	0.697
125	-2.5356-0.0043344*Ala+7.4994*ADMA	0.696
126	-1.4664-0.01786*Leu+6.794*ADMA	0.695
127	4.1148-0.0047722*Gln-0.32071*x3_Me_His	0.692
128	1.8197-0.012329*Val+3.7637*Cystathionine	0.690
129	0.89214+0.01351*Orn-0.44389*x3_Me_His	0.688
130	3.0835-0.061789*Met-0.33959*x3_Me_His	0.687
131	1.2877-0.37097*x3_Me_His+2.1817*Spermidine	0.685
132	-3.954+6.3856*ADMA+16.1667*Spermine	0.684
133	3.2742-0.0084689*Gly-0.34837*x3_Me_His	0.684
134	3.1171-0.0077249*Val-0.31991*x3_Me_His	0.684
135	3.2282-0.040757*Asn-0.31783*x3_Me_His	0.684
136	3.1373-0.017529*Arg-0.35424*x3_Me_His	0.681
137	2.225-0.0019958*Ala-0.35831*x3_Me_His	0.678
138	2.7682-0.0073352*Lys-0.32819*x3_Me_His	0.678
139	1.8765-0.005147*Tyr-0.36715*x3_Me_His	0.677
140	-3.4471+0.0038147*Pro+5.1657*ADMA	0.676
141	1.335-0.38441*x3_Me_His+0.18692*Hypotaurine	0.676
142	-4.2452+0.022371*Phe+5.0542*ADMA	0.675
143	2.0614-0.004664*Ser-0.37209*x3_Me_His	0.673
144	-2.7099+5.4471*ADMA-0.039335*Sarcosine	0.672
145	1.5196-0.37823*x3_Me_His+0.01983*bAiBA	0.672
146	1.7284-0.51418*x3_Me_His+10.3414*aAiBA	0.672
147	-3.001+4.2056*ADMA+2.4313*Cystathionine	0.672
148	2.3542-0.0076151*Leu-0.33086*x3_Me_His	0.671
149	2.9089-0.021838*Thr-0.1235*bAiBA	0.669
150	-3.1429+5.8598*ADMA-2.3266*aAiBA	0.669

[図18]

No.	Formula	ROC_AUC
151	1.638-0.067638*Met+8.4129*Spermine	0.668
152	1.9495-0.044719*Asn+6.4704*Spermine	0.668
153	2.7507-0.0048823*Gln+4.7163*Spermine	0.667
154	0.27677-0.0036918*Ala+3.9724*Cystathionine	0.666
155	-3.3586+5.6679*ADMA+6.3497*bABA	0.665
156	-2.9853+6.0194*ADMA-0.24592*Hypotaurine	0.665
157	2.6481-0.019278*Thr-0.044716*Sarcosine	0.665
158	2.8064-0.0057818*Gln+1.3964*N_Acetyl_L_lys	0.665
159	2.9509-0.0052559*Gln+1.3031*Spermidine	0.664
160	2.0754-0.010015*Val+10.3286*Spermine	0.664
161	2.0646-0.01883*Thr+7.4952*Spermine	0.664
162	-2.4193-0.0085506*Ser+6.1263*ADMA	0.663
163	3.1873-0.0053833*Gln-0.43031*aAiBA	0.663
164	-2.9171+6.4614*ADMA-1.5189*N_Acetyl_L_lys	0.663
165	3.0659-0.0053921*Gln+0.081369*Hypotaurine	0.662
166	0.8409-0.014338*Leu+3.683*Cystathionine	0.662
167	-3.0485-0.0085562*Orn+6.5983*ADMA	0.661
168	-2.9732+5.7246*ADMA-0.078007*bAiBA	0.661
169	2.9937-0.0054066*Gln+2.2378*Putrescine	0.661
170	-3.3536+5.6381*ADMA+2.1963*Spermidine	0.660
171	3.43-0.0055125*Gln-0.079176*bAiBA	0.659
172	2.3803-0.070131*Met-0.060586*Sarcosine	0.659
173	2.045-0.02013*Thr+0.88454*N_Acetyl_L_lys	0.659
174	2.2346-0.019517*Thr+1.0108*Spermidine	0.658
175	2.035-0.046955*Asn+1.7559*Spermidine	0.658
176	2.3695-0.019789*Thr+0.13988*Putrescine	0.657
177	1.8599-0.050752*Asn+1.2933*N_Acetyl_L_lys	0.657
178	2.2057-0.019549*Thr+3.9344*bABA	0.657
179	-2.2158-0.020578*Tyr+6.5922*ADMA	0.657
180	3.4739-0.005244*Gln-0.052383*Sarcosine	0.657
181	2.0005-0.048542*Asn+8.1955*bABA	0.657
182	2.7685-0.048484*Asn-0.063107*Sarcosine	0.656
183	0.92666-0.0083491*Gly+3.1641*Cystathionine	0.656
184	2.4187-0.019892*Thr-0.67572*aAiBA	0.655
185	2.2169-0.020085*Thr+0.14789*Hypotaurine	0.655
186	1.6745-0.071223*Met+2.5747*Spermidine	0.655
187	-2.8414-0.0065801*Ile+5.9756*ADMA	0.654
188	-3.2277+1.7607*Putrescine+5.5866*ADMA	0.653
189	2.0992-0.046981*Asn+1.5804*Putrescine	0.652
190	2.0774-0.049641*Asn+0.20835*Hypotaurine	0.650
191	2.9649-0.0056609*Gln+9.8384*bABA	0.650
192	1.4864-0.013533*Leu+10.6368*Spermine	0.649
193	-0.61447-0.16564*bAiBA+3.5885*Cystathionine	0.647
194	2.2809-0.047656*Asn-0.35624*aAiBA	0.646
195	2.5412-0.049352*Asn-0.083281*bAiBA	0.646
196	1.6652-0.069712*Met+6.9231*bABA	0.646
197	2.6571-0.0095511*Val-0.055732*Sarcosine	0.646
198	1.6048-0.071388*Met+0.86063*N_Acetyl_L_lys	0.645
199	2.1137-0.0088111*Gly-0.076686*bAiBA	0.644
200	0.51677-0.0020332*Ala+10.1595*Spermine	0.644

[図19]

No.	Formula	ROC_AUC
201	2.1954-0.072554*Met-0.082595*bAiBA	0.643
202	2.1233-0.017688*Arg-0.054439*Sarcosine	0.642
203	2.0849-0.0080606*Gly-0.042413*Sarcosine	0.640
204	1.7701-0.067826*Met+1.221*Putrescine	0.639
205	2.1095-0.0087922*Lys-0.053307*Sarcosine	0.639
206	-0.77314-10.3277*aAiBA+4.1472*Cystathionine	0.639
207	2.0655-0.0099921*Val+2.5237*Spermidine	0.638
208	2.4602-0.0098167*Val-0.06456*bAiBA	0.638
209	2.0069-0.070813*Met-1.3532*aAiBA	0.636
210	-0.068288-2.3263*N__Acetyl_L_lys+3.7941*Cystathionine	0.636
211	2.0358-0.012059*Leu-0.060919*Sarcosine	0.635
212	1.385-0.008115*Lys+7.4902*Spermine	0.634
213	2.1473-0.019742*Arg-0.097982*bAiBA	0.634
214	1.4007-0.016238*Arg+6.8459*Spermine	0.634
215	1.7565-0.071715*Met+0.16555*Hypotaurine	0.632
216	1.4012-0.013463*Leu+3.2733*Spermidine	0.631
217	-0.51185-0.045906*Sarcosine+3.065*Cystathionine	0.627
218	-0.028177-3.4117*Spermidine+16.7262*Spermine	0.626
219	1.6418-0.0085824*Gly+0.57575*N__Acetyl_L_lys	0.626
220	2.2864-0.0097299*Val+0.13091*aAiBA	0.625
221	1.7794-0.018178*Arg-0.17339*aAiBA	0.624
222	1.5256-0.0081376*Gly+10.0031*Spermine	0.624
223	2.1401-0.0095268*Val+1.2026*Putrescine	0.623
224	1.5896-0.017578*Arg+1.1149*Spermidine	0.623
225	-1.0406+2.9682*Cystathionine+8.1977*Spermine	0.623
226	2.2203-0.0097414*Val+0.054303*Hypotaurine	0.622
227	-0.11396-0.05187*bAiBA+10.1387*Spermine	0.622
228	1.6432-0.017822*Arg+1.1109*Putrescine	0.622
229	1.2247-0.0026359*Ala-0.090887*bAiBA	0.622
230	1.8833-0.0085368*Gly-0.12302*aAiBA	0.622
231	1.7106-0.0083786*Gly+1.5513*Putrescine	0.621
232	1.7881-0.0085651*Gly+0.071288*Hypotaurine	0.621
233	-0.49961-0.36299*Hypotaurine+3.5773*Cystathionine	0.620
234	1.4504-0.018682*Arg+0.86876*N__Acetyl_L_lys	0.620
235	1.6514-0.0083159*Gly+1.5964*Spermidine	0.619
236	1.6218-0.0085077*Gly+6.647*bABA	0.619
237	-0.022301-0.013393*Tyr+3.4539*Cystathionine	0.619
238	1.7134-0.011903*Leu-0.061373*bAiBA	0.618
239	1.6492-0.018341*Arg+0.10285*Hypotaurine	0.618
240	2.0397-0.0095778*Val+5.7132*bABA	0.617
241	1.946-0.010301*Val+1.1155*N__Acetyl_L_lys	0.617
242	-0.065986-0.13807*Hypotaurine+10.7906*Spermine	0.616
243	1.5718-0.017675*Arg+4.0651*bABA	0.616
244	-2.2442+0.022674*Phe+2.7415*Cystathionine	0.615
245	1.3985-0.0024074*Ala-0.064004*Sarcosine	0.615
246	2.0862-0.0096754*Lys-0.085097*bAiBA	0.614
247	1.519-0.0091264*Lys+7.0104*bABA	0.613
248	1.4225-0.0098175*Lys+1.1561*N__Acetyl_L_lys	0.613
249	1.7935-0.0091134*Lys-0.31647*aAiBA	0.612
250	-1.452+0.0074169*Pro+11.7164*Spermine	0.612

[図20]

No.	Formula	ROC_AUC
251	1.5359-0.0088597*Lys+1.741*Spermidine	0.611
252	1.6983-0.0091115*Lys+0.061056*Hypotaurine	0.611
253	1.5681-0.01185*Leu-0.092077*aAiBA	0.611
254	0.13993-0.051983*Sarcosine+10.4464*Spermine	0.611
255	0.60752-0.0021144*Ala+1.8956*Spermidine	0.610
256	0.86532-0.0022195*Ala-0.10803*aAiBA	0.610
257	1.6406-0.0088342*Lys+1.01*Putrescine	0.610
258	-1.4411+0.0040419*Pro+2.9058*Cystathionine	0.610
259	0.79208-0.0022223*Ala+0.051724*Hypotaurine	0.608
260	1.2296-0.012964*Leu+1.119*N__Acetyl_L_lys	0.608
261	0.53291-0.0025298*Ala+1.036*N__Acetyl_L_lys	0.607
262	-0.57598-0.0056042*Orn+3.485*Cystathionine	0.607
263	0.675-0.0020672*Ala+1.4933*Putrescine	0.606
264	1.3695-0.011581*Leu+1.8444*Putrescine	0.605
265	0.60411-0.0020579*Ala+5.2108*bABA	0.604
266	1.3527-0.013117*Leu+9.8995*bABA	0.603
267	-0.99611+3.8265*bABA+3.0807*Cystathionine	0.603
268	0.95687-0.0070429*Tyr-0.058619*Sarcosine	0.601
269	-0.66424-0.0018397*Ser+3.1525*Cystathionine	0.600
270	1.4547-0.012017*Leu+0.097143*Hypotaurine	0.600
271	-0.5887-0.0047212*Ile+3.3097*Cystathionine	0.599
272	-1.5066+0.028691*Phe-0.045993*Sarcosine	0.598
273	-0.26048+0.32292*aAiBA+10.711*Spermine	0.598

[図21]

No.	Formula	ROC_AUC
1	4.196-0.16491*Cit-0.14042*His+21.4143*ADMA	0.922
2	4.2428+0.022865*Pro-0.18673*His+11.2158*ADMA	0.909
3	1.5866-0.18178*Cit-0.11303*Trp+18.7602*ADMA	0.901
4	4.5656-0.14364*His-0.52492*x3_Me_His+15.1003*ADMA	0.899
5	-1.2593-0.1653*Cit+17.1446*ADMA-1.0865*homoarginine	0.893
6	3.0152+0.085928*Phe-0.17148*His+8.0765*ADMA	0.893
7	6.1935+0.11983*Phe-0.16201*His-0.39985*x3_Me_His	0.892
8	5.9758-0.13219*His-19.1467*GABA+11.7661*ADMA	0.892
9	10.385+0.024459*Pro-0.15368*His-20.1595*GABA	0.891
10	3.2172+0.02593*Ser-0.16216*His+10.8974*ADMA	0.890
11	5.9691-0.12385*His-0.056627*Trp+11.5667*ADMA	0.889
12	6.8593+0.12105*Phe-0.17873*His-0.79749*Hypotaurine	0.887
13	7.1803+0.11642*Phe-0.18199*His-7.908*Spermidine	0.886
14	9.536-0.11794*Cit-0.10114*His+7.8101*Cystathionine	0.885
15	3.8839+0.030656*Tyr-0.15511*His+10.2456*ADMA	0.884
16	6.4798+0.11677*Phe-0.17815*His-0.20274*bAiBA	0.883
17	7.3831+0.10207*Phe-0.15904*His-13.9195*GABA	0.883
18	4.5369-0.1607*His+0.010796*Lys+9.9206*ADMA	0.883
19	3.8269+0.032661*Ile-0.15501*His+10.1465*ADMA	0.882
20	6.4162+0.11274*Phe-0.17451*His-4.9573*Putrescine	0.882
21	5.0073-0.14768*His+11.8686*ADMA-0.21895*bAiBA	0.882
22	7.9136-0.1581*Cit-0.098265*Trp+10.1014*Cystathionine	0.881
23	4.4147-0.12327*His+11.0218*ADMA-0.48502*homoarginine	0.881
24	5.1304-0.14988*His-6.8919*Putrescine+12.1335*ADMA	0.881
25	4.4307-0.1445*His+12.183*ADMA-9.2539*aAiBA	0.881
26	-0.23207-0.15265*Cit-22.8885*GABA+14.914*ADMA	0.880
27	3.9643+0.015061*Leu-0.15907*His+11.0022*ADMA	0.880
28	5.0242-0.1464*His+12.4087*ADMA-0.65614*Hypotaurine	0.880
29	6.0656+0.11247*Phe-0.17286*His-4.6946*aAiBA	0.880
30	5.7846+0.10421*Phe-0.17688*His+2.2544*N_Acetyl_L_Lys	0.879
31	5.9741+0.11027*Phe-0.17072*His-2.5302*bABA	0.879
32	6.4404+0.10825*Phe-0.17413*His-7.0279*Spermine	0.879
33	5.9146+0.10552*Phe-0.16859*His+0.38191*Cystathionine	0.878
34	8.4919+0.022926*Pro-0.13937*His-0.61134*homoarginine	0.878
35	4.7908-0.00343*Gly-0.13802*His+11.4542*ADMA	0.878
36	4.1308-0.14593*His+11.7394*ADMA+0.045614*Sarcosine	0.877
37	5.0884-0.14689*His+11.4231*ADMA-3.4085*Spermidine	0.877
38	4.4734-0.0068318*Thr-0.13518*His+11.7513*ADMA	0.877
39	5.9851+0.11132*Phe-0.15229*His-0.58473*homoarginine	0.877
40	3.8383+0.005618*Val-0.15129*His+11.2743*ADMA	0.876
41	8.4209+0.023401*Pro-0.14579*His-0.27918*x3_Me_His	0.876
42	4.4074+0.0136*Asn-0.14729*His+10.8962*ADMA	0.876
43	4.4957-0.14292*His+0.0058366*Orn+10.5584*ADMA	0.876
44	5.8397+0.10935*Phe-0.17143*His+0.020599*Sarcosine	0.875
45	4.3329-0.13804*His-0.0040245*Arg+11.6103*ADMA	0.875
46	4.4364-0.13959*His+10.5027*ADMA+0.88799*Cystathionine	0.875
47	8.6803+0.022173*Pro-0.15752*His-0.13294*bAiBA	0.874
48	4.3609+0.0023595*Ala-0.15002*His+10.9241*ADMA	0.874
49	4.3912+0.029137*Met-0.14808*His+10.7686*ADMA	0.874
50	7.8109+0.02059*Pro-0.15451*His+2.1571*Cystathionine	0.873

[図22]

No.	Formula	ROC_AUC
51	4.3878-0.14363*His+10.9365*ADMA+0.84923*N_Acetyl_L_lys	0.873
52	4.4138-0.14161*His+11.2599*ADMA-0.13063*Spermine	0.872
53	4.3863-0.14145*His+11.2447*ADMA+0.57177*bABA	0.872
54	4.386+0.00011993*Gln-0.14201*His+11.2319*ADMA	0.872
55	8.4432+0.022579*Pro-0.15822*His-2.1222*Spermine	0.872
56	8.0751+0.021179*Pro-0.16006*His+1.5875*N_Acetyl_L_lys	0.871
57	8.5079+0.02247*Pro-0.15672*His-2.7365*Putrescine	0.870
58	3.9032+0.11213*Phe-0.16802*Trp-0.50707*x3_Me_His	0.870
59	8.2789+0.022522*Pro-0.15551*His-0.067833*Hypotaurine	0.870
60	8.2143+0.022511*Pro-0.15533*His-0.0052212*Sarcosine	0.870
61	8.1892+0.022649*Pro-0.15661*His+1.8561*aAiBA	0.870
62	9.163+0.031044*Ser-0.13529*His-18.401*GABA	0.870
63	8.6688+0.02232*Pro-0.15858*His-1.9943*Spermidine	0.870
64	10.444-0.10909*His-0.062653*Trp+4.5073*Cystathionine	0.869
65	8.0509+0.022502*Pro-0.1575*His+8.3464*bABA	0.868
66	-0.32025+0.078099*Phe-0.15073*Trp+6.1312*ADMA	0.868
67	7.7178-0.13743*His+0.024918*Lys-0.8109*homoarginine	0.868
68	-0.88482-0.61534*x3_Me_His+11.4822*ADMA-1.1917*homoarginine	0.867
69	13.305-0.099093*His-0.060981*Trp-18.3513*GABA	0.866
70	9.8496-0.12288*His+0.027007*Orn-18.3052*GABA	0.866
71	8.2973-0.10218*His-0.59656*x3_Me_His+6.4958*Cystathionine	0.866
72	9.0123+0.046332*Ile-0.13099*His-17.2622*GABA	0.865
73	-2.5276-0.21906*Cit+13.8553*ADMA+7.5028*Cystathionine	0.864
74	1.9591+0.098609*Phe-0.16216*Trp+17.5069*Spermine	0.864
75	6.6346+0.029177*Ser-0.1441*His+3.3881*Cystathionine	0.864
76	4.7389+0.088794*Phe-0.14501*Trp-19.5473*GABA	0.863
77	1.1097-23.8009*GABA+8.7247*ADMA-1.0948*homoarginine	0.860
78	3.0634+0.10531*Phe-0.16894*Trp-19.658*bABA	0.860
79	7.4298+0.032362*Ser-0.12498*His-0.64192*homoarginine	0.859
80	1.8437+0.095344*Phe-0.11383*Trp-0.69346*homoarginine	0.859
81	3.7464-0.10282*Trp-23.2695*GABA+8.8528*ADMA	0.858
82	2.7642+0.095725*Phe-0.16106*Trp-6.264*aAiBA	0.857
83	7.7075-0.14896*His+0.014913*Lys+2.4931*Cystathionine	0.857
84	9.8854-0.11325*His-17.748*GABA+3.7504*Cystathionine	0.857
85	2.2399+0.091026*Phe-0.15697*Trp+3.3579*Spermidine	0.857
86	4.6926-0.13249*Cit-0.87431*homoarginine+7.3254*Cystathionine	0.857
87	8.4688-0.15008*His+0.021117*Lys-0.29942*x3_Me_His	0.857
88	-1.5161-0.0058634*Ala-0.17347*Cit+16.8709*ADMA	0.856
89	7.2885+0.054065*Tyr-0.12089*His-0.72852*homoarginine	0.856
90	9.6409-0.14319*His+0.016725*Lys-15.2571*GABA	0.856
91	1.9656-0.111*Trp-0.6496*x3_Me_His+11.8706*ADMA	0.856
92	3.3633-0.0078393*Gln-0.10143*Trp+12.0349*ADMA	0.856
93	9.0736-0.071385*Cit-0.11824*His+5.4537*N_Acetyl_L_lys	0.855
94	6.7737+0.029928*Ser-0.15565*His+3.7969*N_Acetyl_L_lys	0.855
95	7.4293+0.054646*Ile-0.12854*His-0.36476*x3_Me_His	0.855
96	8.4154-0.12138*His+0.032925*Orn-0.37988*x3_Me_His	0.855
97	11.7092-0.10509*His-0.061393*Trp-0.18707*bAiBA	0.855
98	5.1717-0.13859*Cit-20.663*GABA+7.9125*Cystathionine	0.854
99	1.995+0.083926*Phe-0.14464*Trp-1.5492*Cystathionine	0.854
100	1.5386-0.092698*Cit+0.070859*Phe-1.1564*homoarginine	0.853

[図23]

No.	Formula	ROC_AUC
101	9.1767+0.03979*Tyr-0.1295*His-16.0829*GABA	0.853
102	10.2973-0.1175*His-0.051804*Trp+3.3579*N__Acetyl_L_lys	0.853
103	-1.3061-0.16081*Cit-0.10484*Met+16.8933*ADMA	0.853
104	7.7245-0.16494*His+0.01792*Lys+3.0968*N__Acetyl_L_lys	0.853
105	7.9085+0.04934*Ile-0.14411*His-0.18084*bAiBA	0.853
106	2.9721+0.10364*Phe-0.16854*Trp-0.23637*bAiBA	0.853
107	7.3569+0.044443*Ile-0.11948*His-0.53022*homoarginine	0.853
108	10.8928-0.091453*His-17.7882*GABA-0.61092*homoarginine	0.852
109	1.3692-0.028929*Thr-28.0947*GABA+10.3308*ADMA	0.851
110	0.60046-0.013622*Gly+9.7897*ADMA-1.2032*homoarginine	0.851
111	8.7538-0.16088*His+0.019434*Lys-2.9726*Spermidine	0.851
112	3.6577-0.77695*x3_Me_His-0.97493*homoarginine+7.1806*Cystathionine	0.851
113	8.5103-0.15639*His+0.0185*Lys-0.11208*bAiBA	0.851
114	10.0446+0.073533*Met-0.12939*His-16.902*GABA	0.850
115	7.861+0.028908*Ser-0.14355*His-0.13127*bAiBA	0.850
116	3.05+0.017254*Pro-0.086856*Cit-1.1072*homoarginine	0.850
117	8.0719+0.045147*Tyr-0.14367*His-0.15834*bAiBA	0.850
118	2.5828+0.093867*Phe-0.15405*Trp-0.74164*N__Acetyl_L_lys	0.850
119	7.5919+0.028554*Ser-0.13409*His-0.17388*x3_Me_His	0.850
120	2.2842+0.092155*Phe-0.15245*Trp+0.099408*Putrescine	0.850
121	3.1346+0.098627*Phe-0.15884*Trp-0.69901*Hypotaurine	0.850
122	11.0062-0.095609*His-0.054571*Trp-0.19894*x3_Me_His	0.850
123	8.386-0.15714*His+0.019213*Lys-2.467*Putrescine	0.850
124	7.9756-0.15692*His+0.018962*Lys+6.5308*bABA	0.850
125	-1.1408-0.063695*Asn-0.15573*Cit+16.6031*ADMA	0.849
126	9.2813+0.0065059*Gln-0.13914*His-19.64*GABA	0.849
127	9.9705+0.016721*Leu-0.12913*His-17.7*GABA	0.849
128	10.1752+0.051249*Asn-0.13512*His-17.8602*GABA	0.849
129	7.0458+0.036407*Ile-0.13468*His+2.3066*Cystathionine	0.849
130	7.2423+0.031283*Tyr-0.13364*His+2.45*Cystathionine	0.849
131	8.859-0.12245*His-0.58078*Hypotaurine+4.244*Cystathionine	0.849
132	2.4899+0.09134*Phe-0.15207*Trp-0.022195*Sarcosine	0.849
133	11.3265-0.048597*Cit-0.099486*His-16.0437*GABA	0.849
134	8.2914-0.15661*His+0.01943*Lys-0.14084*Hypotaurine	0.849
135	8.7606-0.1239*His-0.23946*bAiBA+4.0534*Cystathionine	0.849
136	5.8737-0.091241*Trp-0.78131*x3_Me_His+8.2681*Cystathionine	0.849
137	7.0256+0.043476*Tyr-0.15344*His+3.6829*N__Acetyl_L_lys	0.849
138	10.103-0.1233*His-17.6785*GABA+3.7163*N__Acetyl_L_lys	0.849
139	-1.4356-0.16045*Cit-0.017161*Lys+17.962*ADMA	0.848
140	11.0699-0.10304*His-0.057626*Trp-3.5806*aAiBA	0.848
141	8.3211-0.15831*His+0.019281*Lys-2.2599*Spermine	0.848
142	8.0725-0.12026*His-0.53053*x3_Me_His+7.4448*N__Acetyl_L_lys	0.848
143	10.349+0.0044222*Ala-0.12548*His-18.8269*GABA	0.848
144	6.9747-0.094448*Trp-21.9541*GABA+4.0339*Cystathionine	0.848
145	-1.2991-0.0077952*Gly-0.1573*Cit+14.6604*ADMA	0.848
146	11.0748-0.1035*His-0.055583*Trp-0.15353*Hypotaurine	0.848
147	8.1007-0.15617*His-0.019271*Lys-9.162e-05*Sarcosine	0.848
148	7.8566-0.1278*His+0.016681*Orn+2.3218*Cystathionine	0.848
149	8.0968-0.1562*His+0.01927*Lys+0.17834*aAiBA	0.848
150	8.0618+0.048702*Ile-0.14446*His-4.4371*Spermidine	0.847

[図24]

No.	Formula	ROC_AUC
151	8.1299-0.11913*His-8.8167*aAiBA+4.258*Cystathionine	0.847
152	-2.2395-0.14527*Cit-0.27873*x3_Me_His+14.6141*ADMA	0.847
153	7.6715+0.047577*Ile-0.1403*His-3.9966*Putrescine	0.847
154	10.9303-0.10487*His-0.054407*Trp-0.83388*Spermine	0.847
155	10.0092+0.005797*Val-0.11876*His-17.9328*GABA	0.846
156	11.1607-0.10536*His-0.054381*Trp-2.6097*Putrescine	0.846
157	10.7466-0.105*His-0.053374*Trp+3.1644*bABA	0.846
158	7.2505+0.029812*Ser-0.14171*His+2.4146*aAiBA	0.846
159	2.2053-0.0083639*Gln-25.8557*GABA+10.8968*ADMA	0.846
160	7.3461+0.043537*Tyr-0.14111*His+8.3056*bABA	0.846
161	8.2901+0.046119*Tyr-0.14611*His-4.0736*Spermidine	0.846
162	11.0717-0.10632*His-0.053035*Trp-1.1559*Spermidine	0.846
163	8.567-0.12561*His+3.7352*Cystathionine-3.8417*Spermine	0.846
164	7.6385+0.047572*Ile-0.14235*His-5.2726*Spermine	0.846
165	7.7661+0.045819*Tyr-0.13216*His-0.23892*x3_Me_His	0.846
166	10.897-0.10321*His-0.054941*Trp-0.011578*Sarcosine	0.846
167	11.2615-0.11409*His-17.4863*GABA-0.13768*bAiBA	0.846
168	9.6594-0.071726*Cit-0.08786*Trp-18.2963*GABA	0.846
169	-1.3604-0.02021*Thr-0.14717*Cit+15.4364*ADMA	0.845
170	7.4852+0.029344*Ser-0.1425*His-1.456*Spermine	0.845
171	8.8635-0.12634*His-3.0521*Spermidine+3.6977*Cystathionine	0.845
172	7.7058+0.028834*Ser-0.14291*His-1.5729*Spermidine	0.845
173	3.7275+0.015156*Pro-23.6668*GABA-1.1644*homoarginine	0.845
174	0.79882-0.069413*Trp+8.9467*ADMA-0.78771*homoarginine	0.845
175	7.4723+0.02902*Ser-0.14119*His-1.089*Putrescine	0.845
176	7.3331+0.029369*Ser-0.14083*His-0.0023193*Sarcosine	0.845
177	10.424-0.094721*His-0.04248*Trp-0.35976*homoarginine	0.845
178	7.3597+0.029366*Ser-0.14092*His-0.027148*Hypotaurine	0.845
179	7.9686+0.024153*Asn-0.13174*His+3.0824*Cystathionine	0.845
180	8.2843+0.087955*Met-0.12021*His-0.60209*homoarginine	0.845
181	8.4868-0.1313*His+0.026824*Orn-0.31265*Hypotaurine	0.845
182	-0.58163-0.020498*Thr+10.0061*ADMA-1.0037*homoarginine	0.845
183	7.1018+0.029734*Ser-0.14288*His+9.1661*bABA	0.844
184	-0.77726-0.0054918*Gln-0.14667*Cit+15.7838*ADMA	0.844
185	8.089+0.019114*Met-0.12583*His+3.2824*Cystathionine	0.844
186	7.5773+0.047244*Ile-0.1382*His-0.27706*Hypotaurine	0.844
187	7.7835+0.045023*Tyr-0.14053*His-0.2131*Hypotaurine	0.844
188	8.5649-0.13224*His+0.025397*Orn-0.15084*bAiBA	0.844
189	8.5885-0.13359*His+0.027455*Orn-4.7527*Putrescine	0.844
190	8.2326-0.10384*His-0.51338*homoarginine+3.4337*Cystathionine	0.844
191	7.1891+0.040175*Ile-0.14151*His+1.7659*N_Acetyl_L_lys	0.844
192	7.1533+0.045364*Ile-0.13831*His+5.2423*bABA	0.844
193	7.7567+0.043941*Tyr-0.14198*His-2.7343*Spermine	0.844
194	7.7974-0.13979*His+0.022588*Orn+2.8475*N_Acetyl_L_lys	0.844
195	7.9457+0.0019443*Val-0.12386*His+3.4825*Cystathionine	0.844
196	7.2509+0.046517*Ile-0.13742*His-1.4344*aAiBA	0.844
197	7.6084+0.01275*Leu-0.13354*His+3.0589*Cystathionine	0.844
198	8.5829-0.12263*His-4.5645*Putrescine+3.8432*Cystathionine	0.844
199	-0.61613-0.503*x3_Me_His-23.2078*GABA+10.2948*ADMA	0.844
200	7.2046+0.046296*Ile-0.13787*His+0.0058463*Sarcosine	0.843

[図25]

No.	Formula	ROC_AUC
201	8.0892-0.12198*His+4.4361*bABA+3.4931*Cystathionine	0.843
202	7.8663+0.044466*Tyr-0.14153*His-3.0583*Putrescine	0.843
203	8.1476-0.12187*His+0.0078157*Sarcosine+3.6436*Cystathionine	0.843
204	10.3694-0.12018*His+0.010719*Arg-17.525*GABA	0.843
205	-0.85951-0.15823*Cit-0.010306*Val+15.12*ADMA	0.843
206	10.8636-0.11631*His-21.9342*GABA+23.8899*bABA	0.843
207	7.5057+0.043866*Tyr-0.13956*His+0.0083272*aAiBA	0.842
208	7.9718-0.12835*His+2.1308*N_Acetyl_L_lys+3.0096*Cystathionine	0.842
209	-1.1932-0.16252*Cit-0.015737*Leu+15.3273*ADMA	0.842
210	8.9507-0.13738*His+0.026769*Orn-3.8373*Spermidine	0.842
211	8.4976-0.0088566*Thr-0.11385*His+4.2653*Cystathionine	0.842
212	9.8425-0.055686*Cit-0.085589*His-0.56622*homoarginine	0.842
213	8.4012-0.13376*His+0.025868*Orn-3.0315*Spermine	0.842
214	8.3737-0.0014514*Gly-0.1198*His+3.6315*Cystathionine	0.842
215	5.7131-0.15033*Cit-0.13485*Met+10.7568*Cystathionine	0.842
216	7.9245-0.13205*His+0.025432*Orn+7.9888*bABA	0.842
217	6.5299+0.019069*Pro-0.11715*Trp-23.5025*GABA	0.842
218	8.0916-0.11179*His+0.022797*Orn-0.47303*homoarginine	0.842
219	7.3347+0.003157*Gln-0.13407*His+3.3548*Cystathionine	0.841
220	7.5245+0.043851*Tyr-0.13929*His-0.0051122*Sarcosine	0.841
221	3.8462-0.12234*Cit-0.64348*x3_Me_His+10.0685*Cystathionine	0.841
222	7.2885-0.066878*Cit-19.1193*GABA-0.95794*homoarginine	0.841
223	9.6639-0.061037*Cit-0.10293*His+5.4808*aAiBA	0.841
224	8.1249-0.13034*His+0.027119*Orn-4.3558*aAiBA	0.841
225	10.814-0.105*His-0.16186*x3_Me_His-16.7187*GABA	0.841
226	4.9266-0.023931*Thr-0.14213*Cit+9.8008*Cystathionine	0.841
227	8.0861-0.12587*His+0.0050776*Arg+3.3716*Cystathionine	0.841
228	7.989+0.0019143*Ala-0.12708*His+3.2923*Cystathionine	0.840
229	2.1455+0.055848*Phe-20.8561*GABA-1.1487*homoarginine	0.840
230	-3.2429-0.16191*Cit+0.019548*Phe+13.1009*ADMA	0.840
231	0.61206-0.0069506*Gln+10.8513*ADMA-1.0185*homoarginine	0.840
232	5.0505-0.006273*Ala-0.16153*Cit+9.6688*Cystathionine	0.840
233	7.8795+0.073246*Met-0.14916*His+3.3647*N_Acetyl_L_lys	0.840
234	9.9043-0.058447*Cit-0.10163*His-0.032414*Sarcosine	0.839
235	10.1461-0.057924*Cit-0.10694*His-3.6512*Spermine	0.839
236	3.8275+0.029641*Tyr-21.1309*GABA-1.1959*homoarginine	0.839
237	8.1063-0.13017*His+0.025397*Orn-0.0035744*Sarcosine	0.839
238	0.60666-0.11547*Trp+9.299*ADMA+17.7965*Spermine	0.839
239	10.6039+0.00058707*Gly-0.11069*His-17.7485*GABA	0.839
240	10.1706-0.053764*Cit-0.10714*His-0.11658*bAiBA	0.839
241	2.5695+0.014494*Pro-0.41387*x3_Me_His-1.243*homoarginine	0.839
242	2.9273-0.089044*Cit+0.045155*Tyr-1.1988*homoarginine	0.839
243	10.393-0.056325*Cit-0.10788*His-2.994*Spermidine	0.839
244	0.56776+0.069203*Phe-0.43479*x3_Me_His-1.2591*homoarginine	0.839
245	10.7134-0.11018*His-17.6272*GABA-0.025588*Hypotaurine	0.839
246	10.6319+0.001009*Thr-0.11117*His-17.6212*GABA	0.839
247	9.6594-0.05738*Cit-0.1029*His+0.76825*Putrescine	0.839
248	7.1493-0.10645*Trp+0.024108*Orn-22.6091*GABA	0.839
249	2.3963-0.0086955*Gly-0.10427*Trp+9.2432*ADMA	0.838
250	-1.8985-0.16342*Cit+13.6024*ADMA-0.041065*Sarcosine	0.838

[図26]

No.	Formula	ROC_AUC
251	10.6388-0.11012*His-17.8058*GABA+1.7211*aAiBA	0.838
252	8.5814+0.084944*Met-0.13076*His-0.24904*x3_Me_His	0.838
253	10.8764-0.1122*His-17.5059*GABA-2.1747*Spermine	0.838
254	10.9548-0.11246*His-17.2733*GABA-1.3573*Spermidine	0.838
255	4.5391-21.5561*GABA-0.98787*homocysteine+3.092*Cystathionine	0.838
256	1.4082-0.077465*Asn-26.7898*GABA+10.3597*ADMA	0.838
257	9.7276-0.051651*Cit-0.10153*His-0.076195*x3_Me_His	0.838
258	3.6942-0.10359*Cit+0.030979*Orn-0.92142*homocysteine	0.838
259	10.5066-0.10853*His+2.1031*Putrescine-18.5651*GABA	0.838
260	10.7198-0.10933*His-17.6437*GABA-0.013616*Sarcosine	0.838
261	8.8554-0.13505*His-0.22359*bAiBA+4.3412*N_Acetyl_L_lys	0.838
262	9.5403-0.057844*Cit-0.10339*His+0.17773*Hypotaurine	0.837
263	1.4448-0.020625*Lys-29.2985*GABA+11.4515*ADMA	0.837
264	8.7676+0.01843*Leu-0.1427*His-0.1547*bAiBA	0.837
265	6.4927+0.051496*Tyr-0.13286*Trp-20.9984*GABA	0.837
266	1.368-0.095503*Trp-0.023784*Arg+10.9553*ADMA	0.837
267	-3.0269+0.0068265*Pro-0.16516*Cit+13.2857*ADMA	0.837
268	8.1619+0.076521*Met-0.139*His+7.6887*bABA	0.836
269	9.0861+0.085129*Met-0.14526*His-3.6746*Spermidine	0.836
270	8.1417+0.018032*Leu-0.11815*His-0.58512*homocysteine	0.836
271	8.4964-0.11445*His+0.019636*Arg-0.67668*homocysteine	0.836
272	-1.7336-0.0083503*Ser-0.16404*Cit+14.4864*ADMA	0.836
273	-2.8589-0.16948*Cit+14.1266*ADMA+15.1445*bABA	0.836
274	9.0794-0.087667*His-0.23623*x3_Me_His-0.57851*homocysteine	0.836
275	8.624+0.049046*Asn-0.13125*His-0.25376*x3_Me_His	0.836
276	9.5935-0.064328*Cit-0.10574*His+16.4076*bABA	0.835
277	-2.8315-0.16842*Cit+5.218*Putrescine+14.2241*ADMA	0.835
278	8.6549+0.085002*Met-0.14005*His-0.26885*Hypotaurine	0.835
279	8.4089+0.020749*Leu-0.13023*His-0.30639*x3_Me_His	0.835
280	8.0723+0.039302*Asn-0.14922*His+3.2235*N_Acetyl_L_lys	0.835
281	-0.38856-0.05771*Asn+10.333*ADMA-1.0419*homocysteine	0.835
282	-3.2186-0.1637*Cit+14.7976*ADMA+14.4648*Spermine	0.835
283	9.4984-0.10078*His-0.16329*bAiBA-0.58773*homocysteine	0.835
284	8.627+0.08043*Met-0.14169*His-3.212*Spermine	0.835
285	-3.2612+0.042211*Phe+6.5574*ADMA-1.2191*homocysteine	0.835
286	4.6182+0.014115*Orn-21.9069*GABA-1.0432*homocysteine	0.835
287	3.1416-0.092565*Cit+0.038387*Ile-1.0433*homocysteine	0.835
288	8.8338+0.07416*Met-0.13954*His-0.12996*bAiBA	0.835
289	8.5596+0.038277*Asn-0.11897*His-0.52483*homocysteine	0.834
290	8.2839+0.078866*Met-0.13835*His+1.349*aAiBA	0.834
291	1.8306-0.053065*Asn-0.096498*Trp+10.5646*ADMA	0.834
292	0.69734-0.01013*Gln-0.61234*x3_Me_His+13.7584*ADMA	0.834
293	-2.3674-0.17006*Cit+0.011233*Orn+12.9168*ADMA	0.834
294	4.0935+0.022632*Ile-21.4974*GABA-1.0849*homocysteine	0.834
295	7.8899+0.013821*Leu-0.14358*His+2.8171*N_Acetyl_L_lys	0.834
296	8.9902+0.019848*Leu-0.146*His-4.523*Spermidine	0.834
297	8.6949+0.079865*Met-0.14009*His-3.1623*Putrescine	0.834
298	6.3316-0.27713*x3_Me_His-18.8494*GABA-1.0441*homocysteine	0.834
299	1.4012-0.1083*Trp+7.011*ADMA+2.0599*Cystathionine	0.834
300	6.7363+0.019606*Ser-0.11089*Trp-21.7776*GABA	0.833

[図27]

No.	Formula	ROC_AUC
301	-2.0721-0.14639*Cit-0.015969*Arg+15.1177*ADMA	0.833
302	4.126-0.099417*Cit+0.02181*Arg-1.1287*homoarginine	0.833
303	1.5673-0.018662*Thr-0.094139*Trp+10.3231*ADMA	0.833
304	9.1008+0.044569*Asn-0.14396*His-2.8608*Spermidine	0.833
305	4.3991+0.0072686*Lys-20.8689*GABA-1.17*homoarginine	0.833
306	4.5333-0.11843*Cit+0.034927*Orn-22.7185*GABA	0.833
307	-2.426-0.16779*Cit+13.923*ADMA+5.2293*aAiBA	0.833
308	6.3076+0.04209*Ile-0.11486*Trp-21.8319*GABA	0.833
309	7.8236-0.057145*Trp-20.8002*GABA-0.73805*homoarginine	0.833
310	1.1586-0.11514*Trp+8.3397*ADMA+3.9774*Spermidine	0.833
311	5.1579-0.11098*Trp-20.7968*aAiBA+5.9676*Cystathionine	0.833
312	8.9249+0.042655*Asn-0.14066*His-0.13647*bAiBA	0.833
313	8.018+0.0044296*Gln-0.12768*His-0.24949*x3 Me His	0.833
314	0.99456+0.012583*Pro-0.1256*Trp+6.9037*ADMA	0.833
315	-2.4615-0.16318*Cit+0.0018863*Ile+13.8309*ADMA	0.833
316	8.0552+0.0068697*Val-0.10755*His-0.58894*homoarginine	0.833
317	8.3262+0.077744*Met-0.1377*His-0.0019717*Sarcosine	0.833
318	8.3558-0.13099*His+4.2125*N_Acetyl_L_lys-6.8477*aAiBA	0.833
319	8.5355-0.11254*His+3.1368*N_Acetyl_L_lys-0.52051*homoarginine	0.833
320	8.5268+0.017722*Leu-0.13924*His-3.2836*Putrescine	0.832
321	4.3207+0.012982*Ser-21.926*GABA-1.1136*homoarginine	0.832
322	7.5438+0.0034609*Gln-0.14507*His+3.2508*N_Acetyl_L_lys	0.832
323	7.8976+0.00439*Val-0.13661*His+3.3212*N_Acetyl_L_lys	0.832
324	5.7548-20.7917*GABA-0.10276*bAiBA-1.0674*homoarginine	0.832
325	-2.4103-0.16316*Cit+13.9173*ADMA+0.064*N_Acetyl_L_lys	0.832
326	-2.2777-0.16301*Cit+14.4976*ADMA-0.33096*Hypotaurine	0.832
327	7.8564-0.096723*Trp-22.1492*GABA+14.4822*Spermine	0.832
328	-1.9741-0.16266*Cit-0.011391*Tyr+14.5628*ADMA	0.832
329	-2.4195-0.16295*Cit+13.9373*ADMA+0.16715*Spermidine	0.831
330	3.4396-0.085647*Cit+0.012821*Lys-1.1787*homoarginine	0.831
331	-2.3991-0.16297*Cit+13.9435*ADMA-0.0023723*bAiBA	0.831
332	8.3331+0.017515*Leu-0.13748*His-0.13623*Hypotaurine	0.831
333	1.0245+0.03539*Tyr-0.13571*Trp+6.9837*ADMA	0.831
334	7.9243+0.0034719*Gln-0.11365*His-0.53325*homoarginine	0.831
335	8.5312+0.018595*Leu-0.14268*His-4.692*Spermine	0.831
336	8.9499-0.13445*His+3.4518*N_Acetyl_L_lys-2.2039*Spermidine	0.831
337	7.8394-0.10009*Trp-22.7881*GABA+6.0146*Spermidine	0.831
338	8.7298+0.047193*Asn-0.14043*His-0.24787*Hypotaurine	0.830
339	6.5476-0.0045132*Gln-0.092961*Trp+4.3384*Cystathionine	0.830
340	-1.9222+0.0095083*Pro+6.4989*ADMA-1.2534*homoarginine	0.830
341	7.0046-0.007556*Gly-19.2057*GABA-1.0789*homoarginine	0.830
342	8.4881+0.0035039*Ala-0.10994*His-0.56998*homoarginine	0.830
343	1.3432-0.1137*Met-28.3833*GABA+9.8839*ADMA	0.830
344	8.8224-0.13342*His-4.6461*Putrescine+3.8931*N_Acetyl_L_lys	0.830
345	8.8569+0.046424*Asn-0.14202*His-3.7156*Putrescine	0.830
346	8.4117+0.044346*Asn-0.13955*His+0.0071668*Sarcosine	0.830
347	7.2774-0.074494*Cit-0.056391*Trp-0.65996*homoarginine	0.830
348	6.0969-20.9767*GABA-1.0816*homoarginine-0.37818*Hypotaurine	0.830
349	8.6837+0.044049*Asn-0.1414*His-2.3873*Spermine	0.830
350	8.3133+0.0038221*Gln-0.13598*His-0.13408*bAiBA	0.830

[図28]

No.	Formula	ROC_AUC
351	0.72914-0.037552*Arg-28.0841*GABA+11.8357*ADMA	0.830
352	7.4225-0.080102*Cit-0.093799*Trp+3.0631*Spermidine	0.829
353	5.1497+0.051809*Ile-0.1258*Trp-0.45813*x3_Me_His	0.829
354	8.6121-0.13294*His+3.5198*N_Acetyl_L_lys-1.7516*Spermine	0.829
355	8.3609+0.00086157*Thr-0.13166*His+3.523*N_Acetyl_L_lys	0.829
356	1.5169-0.0019579*Ala-0.10693*Trp+8.9857*ADMA	0.829
357	9.281-0.099716*His-3.2269*Putrescine-0.56704*homoarginine	0.829
358	8.6766-0.13154*His+3.6813*N_Acetyl_L_lys-0.21427*Hypotaurine	0.829
359	8.4333+0.043786*Asn-0.13889*His+0.23*aAiBA	0.829
360	8.1196-0.14214*His+0.012127*Arg+3.4218*N_Acetyl_L_lys	0.829
361	8.3559-0.13184*His+3.6099*N_Acetyl_L_lys+0.011606*Sarcosine	0.829
362	1.7568-0.11686*Trp+8.7157*ADMA-7.5065*aAiBA	0.829
363	5.2912+4.6213*Putrescine-23.4521*GABA-0.99317*homoarginine	0.829
364	-0.77891+8.8684*ADMA-1.2453*homoarginine-0.74121*Hypotaurine	0.829
365	8.3124+0.042859*Asn-0.14011*His+7.3107*bABA	0.829
366	9.6283-0.0046023*Gly-0.091898*His-0.6365*homoarginine	0.829
367	7.654-0.090551*Trp+7.2024*Putrescine-24.8816*GABA	0.829
368	9.1782-0.10115*His-0.56276*homoarginine-2.3716*Spermine	0.829
369	8.0896+0.016592*Leu-0.13746*His+4.9153*bABA	0.828
370	8.3718-0.13079*His+2.2293*bABA+3.395*N_Acetyl_L_lys	0.828
371	4.8688-21.9534*GABA+1.6928*N_Acetyl_L_lys-1.0313*homoarginine	0.828
372	8.2371+0.0046324*Gln-0.14029*His-4.5552*Putrescine	0.828
373	5.5028-0.091235*Cit+14.3391*Putrescine-27.5814*GABA	0.828
374	8.1504+0.017339*Leu-0.13715*His-0.049158*aAiBA	0.828
375	8.1453+0.017353*Leu-0.13722*His+0.00094714*Sarcosine	0.828
376	8.5254-0.00086197*Gly-0.1298*His+3.498*N_Acetyl_L_lys	0.828
377	8.3262+0.0075741*Val-0.11938*His-0.26813*x3_Me_His	0.828
378	8.4212+0.0039452*Gln-0.13871*His-2.4397*Spermidine	0.827
379	9.5854-0.10341*His-2.7198*Spermidine-0.56323*homoarginine	0.827
380	5.2454-21.6953*GABA+2.4701*Spermidine-1.0203*homoarginine	0.827
381	8.7924+0.0026539*Thr-0.10102*His-0.56778*homoarginine	0.827
382	8.7145+0.0032699*Ala-0.11991*His-0.21849*x3_Me_His	0.827
383	8.7075+0.0061459*Val-0.12987*His-0.14784*bAiBA	0.827
384	8.9087-0.098515*His-0.55855*homoarginine-0.00085957*Sarcosine	0.827
385	5.0892+0.0015893*Ala-21.8152*GABA-1.0775*homoarginine	0.827
386	8.8069-0.13264*His+0.013062*Arg-1.8231*Spermine	0.827
387	-1.3981+6.8935*ADMA-1.1141*homoarginine+1.4281*Cystathionine	0.827
388	7.3801-0.077828*Cit-0.091367*Trp+6.6632*Spermine	0.827
389	2.581+0.031772*Ile-0.43206*x3_Me_His-1.1754*homoarginine	0.827
390	9.4634-0.11298*His-0.17407*x3_Me_His-0.10548*bAiBA	0.827
391	8.8426-0.10892*His-0.27798*x3_Me_His+13.9242*bABA	0.827
392	8.8258-0.10036*His+4.7558*bABA-0.54071*homoarginine	0.827
393	0.99555+0.01099*Ser-0.12084*Trp+7.7275*ADMA	0.827
394	0.93993+0.02427*Ile-0.12043*Trp+7.0992*ADMA	0.827
395	8.3642-0.13339*His+0.014176*Arg+9.2841*bABA	0.827
396	6.2649-0.0082143*Thr-20.9013*GABA-0.96464*homoarginine	0.826
397	8.8325+0.0063642*Val-0.13193*His-3.1294*Spermidine	0.826
398	-4.6578-0.24386*Met+0.096225*Phe+8.9997*ADMA	0.826
399	0.045608-0.14249*Met+0.099568*Phe-1.0165*homoarginine	0.826
400	5.4467+0.00029911*Leu-21.1229*GABA-1.0362*homoarginine	0.826

[図29]

No.	Formula	ROC_AUC
401	-1.1823-0.0020276*Ala+8.5293*ADMA-1.1056*homoarginine	0.826
402	5.583-0.0045945*Met-21.108*GABA-1.0262*homoarginine	0.826
403	8.6098-0.13053*His+0.013186*Arg-0.71116*aAiBA	0.826
404	1.4959-0.11321*Trp+0.0054973*Orn+7.6472*ADMA	0.826
405	-1.2404-0.041942*Arg-0.69152*x3_Me_His+14.381*ADMA	0.826
406	5.3067-21.3756*GABA-1.0143*homoarginine+5.803*Spermine	0.826
407	-0.72826-0.084572*Asn-0.65079*x3_Me_His+13.0684*ADMA	0.826
408	7.9443+0.0039168*Gln-0.13539*His-0.95601*Spermine	0.826
409	8.854-0.12322*His+0.014106*Arg-0.229*x3_Me_His	0.826
410	9.136-0.1337*His+0.012501*Arg-2.2057*Spermidine	0.826
411	6.2656-0.10058*Cit-0.089249*Trp+4.6028*N_Acetyl_L_lys	0.826
412	8.4469+0.0062245*Val-0.12991*His-2.8698*Spermine	0.826
413	5.6975-0.0011239*Val-21.0591*GABA-1.0195*homoarginine	0.826
414	8.9776-0.097457*His-2.8268*aAiBA-0.58041*homoarginine	0.826
415	9.2308-0.097349*His-0.58729*homoarginine-0.25382*Hypotaurine	0.826
416	5.5408-20.8605*GABA-1.5597*aAiBA-1.049*homoarginine	0.826
417	3.525+0.01618*Pro-0.013081*Gly-1.2576*homoarginine	0.825
418	7.3708-0.089276*Cit-0.089471*Trp+5.5325*Putrescine	0.825
419	8.9363-0.13216*His+0.013268*Arg-2.8668*Putrescine	0.825
420	9.2222-0.12353*His-0.18266*bAiBA+14.3786*bABA	0.825
421	4.5143-0.04702*Asn-0.14193*Cit+8.8041*Cystathionine	0.825
422	-0.76739-0.055251*Met+8.9147*ADMA-1.0649*homoarginine	0.825
423	9.0714-0.13125*His+0.01159*Arg-0.12538*bAiBA	0.825
424	5.9786-0.012927*Asn-20.7593*GABA-1.0079*homoarginine	0.825
425	9.0388-0.10744*His-0.26946*x3_Me_His+4.5882*aAiBA	0.825
426	1.4061-0.11075*Trp+0.057963*Putrescine+8.2479*ADMA	0.825
427	5.3905+0.0012166*Arg-21.1221*GABA-1.0454*homoarginine	0.825
428	-1.2037-0.016768*Arg+9.6383*ADMA-1.0019*homoarginine	0.825
429	5.6684-21.2041*GABA-1.0183*homoarginine-0.029361*Sarcosine	0.825
430	7.9332+0.0040279*Gln-0.13482*His-0.09186*Hypotaurine	0.825
431	9.0787+0.003376*Ala-0.13284*His-2.6597*Spermidine	0.825
432	7.8168+0.0039846*Gln-0.13462*His+0.086678*aAiBA	0.825
433	8.9142+0.0028333*Ala-0.1286*His-0.11177*bAiBA	0.825
434	8.1618+0.0024249*Ala-0.13639*His+2.9511*N_Acetyl_L_lys	0.825
435	8.4351+0.0033853*Ala-0.12879*His+0.0057951*Sarcosine	0.824
436	3.0373-0.091374*Cit+0.04422*Phe-21.7571*GABA	0.824
437	1.3523+0.00065776*Val-0.11209*Trp+8.2123*ADMA	0.824
438	9.3363-0.11112*His-0.22184*x3_Me_His-1.9192*Spermine	0.824
439	8.9991-0.10878*His-0.23088*x3_Me_His+0.10699*Hypotaurine	0.824
440	5.229-0.028052*Thr-25.2689*GABA+5.1389*Cystathionine	0.824
441	8.2172-0.085771*Cit-0.089053*Trp-0.070209*Sarcosine	0.824
442	8.7297-0.13079*His+0.013336*Arg-0.10326*Hypotaurine	0.824
443	-1.1519+8.2131*ADMA-7.7387*aAiBA-1.2356*homoarginine	0.824
444	5.9403-0.00093913*Gln-20.7652*GABA-1.0163*homoarginine	0.824
445	3.5958+0.017365*Pro-0.077431*Trp-0.82061*homoarginine	0.824
446	8.6151-0.13013*His+0.01309*Arg-0.0068618*Sarcosine	0.824
447	9.6259-0.11278*His-0.21411*x3_Me_His-2.2438*Spermidine	0.824
448	1.3835-0.10191*Trp-0.0050936*Lys+9.193*ADMA	0.824
449	8.6083-0.09288*Trp-0.24651*x3_Me_His-19.0154*GABA	0.824
450	1.877-0.11328*Trp+8.824*ADMA-0.48693*Hypotaurine	0.824

[図30]

No.	Formula	ROC AUC
451	4.1922-0.10138*Trp+3.6842*Cystathionine+12.2726*Spermine	0.824
452	8.7428+0.0032838*Ala-0.12924*His-2.3478*Putrescine	0.824
453	8.5515+0.0033546*Ala-0.12835*His-0.070542*Hypotaurine	0.824
454	7.4273-0.083615*Cit-0.089013*Trp+0.14151*Hypotaurine	0.824
455	8.5216+0.0059179*Val-0.12785*His-2.8914*Putrescine	0.824
456	2.0548-0.18802*Met+0.094386*Phe-23.2866*GABA	0.824
457	-1.8397+0.014652*Tyr+7.1472*ADMA-1.2398*homoarginine	0.824
458	9.1799-0.10963*His-0.21351*x3_Me_His-0.5023*Putrescine	0.824
459	7.8363+0.0039762*Gln-0.13425*His-0.0053211*Sarcosine	0.823
460	9.3046-0.0012962*Gly-0.1077*His-0.22013*x3_Me_His	0.823
461	8.7271+0.0034308*Ala-0.13144*His-2.3655*Spermine	0.823
462	7.7023-0.073115*Cit-0.087854*Trp-0.12409*x3_Me_His	0.823
463	7.9867+0.0060417*Val-0.12844*His+8.5899*bABA	0.823
464	9.6419-0.12259*His-0.14471*bAiBA-2.0854*Spermine	0.823
465	1.6153-0.11033*Trp+8.1073*ADMA-0.020198*Sarcosine	0.823
466	5.2764-24.4454*GABA+14.8338*bABA-0.99315*homoarginine	0.823
467	7.7743+0.0037086*Gln-0.13447*His+5.4394*bABA	0.823
468	8.4586+0.0033405*Ala-0.12829*His-0.04281*aAiBA	0.823
469	1.3028+0.00255*Leu-0.11355*Trp+8.1298*ADMA	0.823
470	10.0471-0.12467*His-0.14764*bAiBA-2.7138*Spermidine	0.823
471	1.8082-0.11407*Trp+8.2714*ADMA-6.1953*bABA	0.823
472	-1.2712-30.806*GABA+8.5958*ADMA+21.7255*Spermine	0.823
473	8.2903+0.0058422*Val-0.12635*His-0.075958*Hypotaurine	0.823
474	9.5347-0.12078*His-1.393*Putrescine-0.13234*bAiBA	0.823
475	-0.92513+7.8621*ADMA-0.16505*bAiBA-1.2152*homoarginine	0.823
476	5.3593-0.063112*Cit-0.19119*x3_Me_His-0.96298*homoarginine	0.822
477	9.1908-0.10794*His-0.22692*x3_Me_His-0.017087*Sarcosine	0.822
478	9.0352+0.0022884*Thr-0.11119*His-0.22767*x3_Me_His	0.822
479	9.1343-0.12161*His-4.1718*Putrescine+11.1552*bABA	0.822
480	8.2574-0.005638*Thr-0.086994*Trp-21.2332*GABA	0.822
481	4.1633-0.14205*Cit-0.0073808*Val+8.268*Cystathionine	0.822
482	0.22173+0.064147*Phe-1.3026*homoarginine-0.76362*Hypotaurine	0.822
483	1.7306-0.11156*Trp+9.0834*ADMA-1.762*N_Acetyl_L_lys	0.822
484	1.4752-0.035863*Met-0.10195*Trp+9.0121*ADMA	0.822
485	9.3713-0.12055*His-0.17316*bAiBA+3.444*aAiBA	0.822
486	9.2444-0.12031*His-0.15389*bAiBA+0.13918*Hypotaurine	0.822
487	5.2652-0.1076*Trp-0.28106*bAiBA+4.4284*Cystathionine	0.822
488	4.1635-0.10297*Trp+3.9275*Spermidine+3.6862*Cystathionine	0.822
489	-0.83587-0.031028*Thr-0.6375*x3_Me_His+12.6297*ADMA	0.822
490	8.7272-0.0017547*Gln-0.090282*Trp-20.6647*GABA	0.822
491	8.21+0.0057779*Val-0.12581*His-0.0062596*Sarcosine	0.822
492	7.4067+0.010198*Leu-0.10695*Trp-21.5563*GABA	0.822
493	9.4119-0.11975*His-0.14153*bAiBA-0.0064766*Sarcosine	0.822
494	9.3773-0.12408*His+8.733*bABA-2.823*Spermidine	0.822
495	-1.3413-0.0073767*Orn+8.6406*ADMA-1.1622*homoarginine	0.822
496	6.8155-0.0082316*Gly-0.068592*Cit-1.0458*homoarginine	0.821
497	8.7388-0.11909*His+8.3059*bABA-1.0382*aAiBA	0.821
498	9.5504-0.12126*His-2.6454*Spermidine-0.011938*Sarcosine	0.821
499	6.418-0.011205*Thr-0.069437*Cit-20.8717*GABA	0.821
500	9.068+0.00095112*Thr-0.12073*His-1.933*Spermine	0.821

[図31]

No.	Formula	ROC_AUC
501	7.8446-0.078221*Cit-0.092939*Trp-0.08541*bAiBA	0.821
502	-0.85808-0.005987*Leu+8.0138*ADMA-1.1147*homoarginine	0.821
503	2.5891+0.030578*Tyr-0.35902*x3_Me_His-1.2675*homoarginine	0.821
504	9.6-0.12181*His-1.8664*Putrescine-2.1343*Spermidine	0.821
505	8.505-0.099433*Trp-20.6922*GABA-0.13244*bAiBA	0.821
506	-2.24-0.94397*x3_Me_His+7.5662*ADMA+6.8082*Cystathionine	0.821
507	8.9223+0.0010487*Thr-0.11864*His-0.057891*Hypotaurine	0.821
508	3.5621-0.0058443*Gln+0.016763*Pro-1.0888*homoarginine	0.821
509	9.7161-0.0014445*Gly-0.12042*His-2.6304*Spermidine	0.821
510	7.3636-0.084926*Cit-0.0875*Trp+5.9243*bABA	0.821
511	8.9511-0.12148*His+8.0197*bABA-2.0807*Spermine	0.821
512	9.4344-0.00080255*Thr-0.11935*His-0.14356*bAiBA	0.821
513	8.1732+0.0037671*Ala-0.13192*His+11.0333*bABA	0.821
514	9.476-0.12106*His-3.344*Spermidine+1.7095*Spermine	0.821
515	8.1246-0.093912*Trp-21.1261*GABA-0.12627*Hypotaurine	0.821
516	9.6058-0.0014729*Gly-0.11864*His-0.14225*bAiBA	0.821
517	8.4548-0.0034465*Gly-0.090733*Trp-20.549*GABA	0.821
518	8.2006+0.0058667*Val-0.12621*His-0.79376*aAiBA	0.821
519	-0.60343-0.0049303*Val+8.1156*ADMA-1.0903*homoarginine	0.821
520	3.3063+0.061121*Tyr-0.0967*Trp-0.87812*homoarginine	0.821
521	9.4657+0.00068339*Thr-0.12252*His-2.5639*Spermidine	0.820
522	7.6216+0.0014532*Ala-0.096077*Trp-21.7881*GABA	0.820
523	7.4912-0.083604*Cit-0.087986*Trp+1.9663*aAiBA	0.820
524	7.7113+0.016321*Met-0.09747*Trp-21.1735*GABA	0.820
525	9.1164-0.11974*His-0.2524*aAiBA-1.9361*Spermine	0.820
526	-1.0411+8.6662*ADMA-1.9148*N_Acetyl_L_lys-1.1719*homoarginine	0.820
527	-1.4215+7.6993*ADMA+0.66971*Spermidine-1.1561*homoarginine	0.820
528	9.2605-0.1183*His-2.8214*Putrescine-0.011188*Sarcosine	0.820
529	8.869-0.1193*His+8.5255*bABA-0.11755*Hypotaurine	0.820
530	8.7249-0.11922*His+7.9985*bABA-0.00014784*Sarcosine	0.820
531	9.5081-0.12179*His-2.5821*Spermidine-0.38183*aAiBA	0.820
532	9.1118-0.11977*His-0.0012119*Hypotaurine-1.9238*Spermine	0.820
533	-1.5505+0.0034058*Ser+7.4857*ADMA-1.1801*homoarginine	0.820
534	8.9549-0.0015759*Gly-0.11775*His+8.1859*bABA	0.820
535	7.4194+0.0045782*Val-0.10266*Trp-21.5237*GABA	0.820
536	9.2201-0.11887*His-2.739*Putrescine-0.0047732*Hypotaurine	0.820
537	9.4277-0.121*His-2.7334*Putrescine-1.9133*Spermine	0.820
538	8.9611-0.11758*His-0.077858*aAiBA-0.050062*Hypotaurine	0.820
539	7.2546-0.091767*Trp-22.1182*GABA+1.6768*N_Acetyl_L_lys	0.820
540	-0.41974+7.7311*Putrescine-32.8436*GABA+7.3538*ADMA	0.820
541	9.189+0.0005074*Thr-0.11936*His-2.7262*Putrescine	0.820
542	8.654+0.0014251*Thr-0.12066*His-8.1714*bABA	0.820
543	8.8542+0.00090299*Thr-0.11846*His-0.16845*aAiBA	0.820
544	2.1895-0.15746*Cit+0.015784*Orn+7.0676*Cystathionine	0.820
545	9.2071-0.11901*His-2.9308*Putrescine-0.96525*aAiBA	0.820
546	7.4172-0.10358*Trp+0.0054312*Lys-21.0443*GABA	0.820
547	1.736-0.012607*Val-26.9462*GABA+8.5077*ADMA	0.819
548	-1.4958+0.0042483*Ile+7.4996*ADMA-1.1677*homoarginine	0.819
549	3.3014+0.043347*Tyr-0.12929*Trp+2.6734*Cystathionine	0.819
550	9.4818-0.12188*His-2.6048*Spermidine+0.016757*Hypotaurine	0.819

[図32]

No.	Formula	ROC_AUC
551	8.3545-0.092872*Trp-21.551*GABA-0.054535*Sarcosine	0.819
552	8.1084-0.0069278*Asn-0.090756*Trp-21.1479*GABA	0.819
553	9.4128-0.0013552*Gly-0.11753*His-2.7483*Putrescine	0.819
554	5.5291-0.0064271*Gly-0.09506*Trp+3.8803*Cystathionine	0.819
555	3.372-0.15068*Cit-0.072131*Sarcosine+7.8802*Cystathionine	0.819
556	9.1431-0.11931*His-0.0089978*Sarcosine-1.9762*Spermine	0.819
557	3.6404-0.079626*Trp+0.016508*Lys-0.95808*homoarginine	0.819
558	1.9327+0.0064469*Pro-0.14935*Cit+7.2084*Cystathionine	0.819
559	8.0156-0.094445*Trp-20.9875*GABA-1.4197*aAiBA	0.819
560	-1.8621+8.0817*ADMA-1.1265*homoarginine+8.6884*Spermine	0.819
561	2.2696-0.12052*Trp+8.4899*ADMA-0.21119*bAiBA	0.819
562	-1.2558-0.0021572*Lys+8.1008*ADMA-1.1183*homoarginine	0.819
563	8.8742+0.00096532*Thr-0.11808*His-0.0084068*Sarcosine	0.818
564	9.3102-0.0013605*Gly-0.11842*His-1.9766*Spermine	0.818
565	8.9207-0.1171*His-0.16246*aAiBA-0.0081079*Sarcosine	0.818
566	9.0235-0.11701*His-0.073166*Hypotaurine-0.010398*Sarcosine	0.818
567	8.3419-0.089048*Trp-0.0065904*Arg-21.2172*GABA	0.818
568	3.9842+0.010081*Ser-0.074757*Cit-1.0156*homoarginine	0.818
569	0.59478-0.058648*Asn+0.078107*Phe-1.1079*homoarginine	0.818
570	3.4448+0.028365*Ile-0.113*Trp+2.8312*Cystathionine	0.818
571	2.8915-0.065015*Asn+0.019002*Pro-1.1107*homoarginine	0.818
572	-1.1233-2.1347*Putrescine+7.7595*ADMA-1.1841*homoarginine	0.818
573	-1.4649+7.815*ADMA-1.1672*homoarginine+0.01122*Sarcosine	0.818
574	3.569-0.14517*Cit-0.0077204*Leu+8.1563*Cystathionine	0.818
575	2.4902-0.024553*Thr+0.019931*Pro-1.0545*homoarginine	0.817
576	5.1336-0.015888*Thr-0.083021*Trp+4.7297*Cystathionine	0.817
577	5.0596-0.089614*Trp-0.014115*Arg+4.3611*Cystathionine	0.817
578	3.8087+0.02637*Ser-0.015911*Gly-1.2909*homoarginine	0.817
579	3.2133+0.016247*Ser-0.11124*Trp+3.5992*Cystathionine	0.817
580	-1.6214+0.010849*Pro+0.049209*Phe-1.2767*homoarginine	0.817
581	9.0955-0.0013617*Gly-0.11619*His-0.24703*aAiBA	0.817
582	9.153-0.0013453*Gly-0.11625*His-0.048139*Hypotaurine	0.817
583	0.8672-0.0088859*Gly-26.6729*GABA+8.2158*ADMA	0.817
584	2.9725-0.14759*Cit-0.12922*bAiBA+7.9852*Cystathionine	0.817
585	3.2273+0.019166*Orn-0.42384*x3_Me_His-1.1072*homoarginine	0.817
586	2.8387+0.01064*Lys-0.3818*x3_Me_His-1.2959*homoarginine	0.817
587	1.2906-0.017659*Leu-27.8155*GABA+8.3817*ADMA	0.817
588	2.4471-0.63754*x3_Me_His+7.2259*N_Acetyl_L_lys-1.1227*homoarginine	0.817
589	9.0978-0.0012877*Gly-0.11597*His-0.0058652*Sarcosine	0.817
590	3.7172-0.1428*Cit-0.0064025*Lys+8.1957*Cystathionine	0.817
591	1.5214-0.1452*Cit+0.020633*Phe+7.0772*Cystathionine	0.817
592	5.2831-0.13476*Met-23.9912*GABA+5.5269*Cystathionine	0.816
593	3.4921-0.71211*x3_Me_His-19.2693*GABA+6.9498*Cystathionine	0.816
594	0.31688+0.011224*Pro+0.017189*Tyr-1.2854*homoarginine	0.816
595	5.8528-0.11258*Trp+0.028947*Orn-0.43168*x3_Me_His	0.816
596	4.6577-0.0015388*Ala-0.095325*Trp+4.0408*Cystathionine	0.816
597	2.2978-0.14912*Cit+0.0080924*Ile+7.5985*Cystathionine	0.816
598	-1.2631-0.019816*Lys-0.6464*x3_Me_His+13.6986*ADMA	0.816
599	-1.0823+7.7144*ADMA-5.3812*bABA-1.1869*homoarginine	0.816
600	3.5042-0.0042032*Gly-0.14335*Cit+7.9066*Cystathionine	0.815

[図33]

No.	Formula	ROC_AUC
601	2.7827-0.14632*Cit-5.6301*aAiBA+8.2282*Cystathionine	0.815
602	7.5567-0.088839*Trp-23.5941*GABA+11.9784*bABA	0.815
603	4.2279-0.095028*Cit-23.0985*GABA+4.7288*N_Acetyl_L_lys	0.815
604	2.4848-0.154*Cit+12.3767*bABA+7.8687*Cystathionine	0.815
605	5.3075-0.076863*Cit-0.93444*homoarginine-0.043727*Sarcosine	0.815
606	-1.3452+0.01953*Phe-28.8243*GABA+6.9829*ADMA	0.815
607	4.5061+0.0011563*Gln-0.079959*Cit-0.97516*homoarginine	0.814
608	5.2592+0.017832*Pro-0.11939*Trp-0.38149*x3_Me_His	0.814
609	1.3687+0.013678*Pro-1.0109*N_Acetyl_L_lys-1.2128*homoarginine	0.814
610	0.16005-0.0034715*Ala-28.0635*GABA+8.6939*ADMA	0.814
611	5.125-0.073314*Cit-0.068588*bAiBA-0.97903*homoarginine	0.814
612	4.0343+0.0061195*Leu-0.10604*Trp+3.4638*Cystathionine	0.814
613	4.0114-0.026937*Thr-0.83355*x3_Me_His+9.1648*Cystathionine	0.814
614	2.5821-0.15405*Cit+4.467*Putrescine+7.8328*Cystathionine	0.814
615	4.2255-0.062794*Trp-0.66449*homoarginine+3.2828*Cystathionine	0.814
616	3.821-0.090546*Cit+4.1316*N_Acetyl_L_lys-0.97142*homoarginine	0.814
617	0.61138-0.016121*Thr+0.062789*Phe-1.0645*homoarginine	0.813
618	5.2851-0.038319*Asn-0.087104*Trp+4.6515*Cystathionine	0.813
619	4.1071-0.1032*Trp+0.0098284*Orn+3.0161*Cystathionine	0.813
620	-0.21417-28.123*GABA+5.9545*ADMA+2.2275*Cystathionine	0.813
621	0.68371+0.010438*Pro-1.1269*homoarginine+1.943*Cystathionine	0.813
622	6.4007-0.0096968*Gly-0.353*x3_Me_His-1.1042*homoarginine	0.813
623	3.6604+0.037634*Ile-0.080896*Trp-0.71092*homoarginine	0.813
624	0.66738+0.012068*Pro+0.0035307*Lys-1.2692*homoarginine	0.812
625	4.6544-0.076779*Cit+0.0019068*Val-0.98293*homoarginine	0.812
626	4.3321-6.3764e-05*Val-0.097909*Trp+3.704*Cystathionine	0.812
627	4.4184-0.078805*Cit+0.0063592*Leu-1.0102*homoarginine	0.812
628	6.2373-0.085379*Cit-21.0285*GABA-0.081704*Sarcosine	0.812
629	0.016642-0.020754*Thr-0.0068872*Gln+11.6193*ADMA	0.812
630	5.3651-0.091195*Cit-25.8797*GABA+30.038*bABA	0.812
631	5.2064-0.079127*Cit-22.1375*GABA+3.2985*Spermidine	0.812
632	5.1935-0.084108*Cit-21.324*GABA+0.32283*Hypotaurine	0.812
633	3.4756+0.055554*Tyr-0.1421*Trp+16.3548*Spermine	0.812
634	4.5623-0.097605*Trp-0.031711*Sarcosine+3.5942*Cystathionine	0.812
635	5.131+0.048337*Tyr-0.13227*Trp-0.31254*x3_Me_His	0.812
636	4.1759-0.10213*Trp+0.002095*Lys+3.5837*Cystathionine	0.812
637	2.6123+0.0012296*Ser-0.14831*Cit+7.8675*Cystathionine	0.812
638	1.7778-0.0098159*Gly+0.054488*Phe-1.2218*homoarginine	0.812
639	4.0854-0.095205*Cit+0.029196*Ile-22.089*GABA	0.812
640	3.1414-0.14855*Cit-0.0065625*Tyr+8.1557*Cystathionine	0.812
641	-0.25879-28.5205*GABA+8.1252*ADMA-1.1249*N_Acetyl_L_lys	0.812
642	1.2937+0.012849*Pro-3.9501*aAiBA-1.2411*homoarginine	0.811
643	4.6143-0.077608*Cit+0.020213*Met-0.99519*homoarginine	0.811
644	4.8291-0.080867*Cit+3.6754*Putrescine-0.94181*homoarginine	0.811
645	-0.30477+0.059393*Phe-9.6595*bABA-1.2387*homoarginine	0.811
646	-0.21165-29.2082*GABA+8.2093*ADMA-0.35585*Hypotaurine	0.811
647	3.8543-0.031723*Thr+0.019825*Pro-24.2021*GABA	0.811
648	1.5748+0.017302*Pro-0.003752*Ala-1.1387*homoarginine	0.811
649	2.8265-0.14657*Cit-0.0014699*Arg+7.9052*Cystathionine	0.811
650	4.5574-0.14126*Met-0.86394*x3_Me_His+9.8441*Cystathionine	0.811

[図34]

No.	Formula	ROC_AUC
651	6.2634-0.054107*Trp-0.3382*x3_Me_His-0.75888*homoarginine	0.811
652	-0.62635-30.0642*GABA+7.3592*ADMA+4.6571*Spermidine	0.811
653	2.1562-15.3331*aAiBA-1.095*homoarginine+4.2374*Cystathionine	0.811
654	0.89368+0.012307*Pro+0.0033845*Orn-1.2007*homoarginine	0.811
655	1.3885+0.012462*Pro-0.096623*bAiBA-1.2266*homoarginine	0.811
656	5.0489-0.10032*Trp-0.5731*Hypotaurine+4.3216*Cystathionine	0.811
657	2.8139-0.14877*Cit-0.5523*Spermidine+7.9142*Cystathionine	0.811
658	3.0856-0.14666*Cit-0.3392*Hypotaurine+8.0437*Cystathionine	0.811
659	5.2806-0.0037684*Thr-0.072333*Cit-0.93226*homoarginine	0.810
660	5.09-0.003142*Asn-0.074217*Cit-0.95382*homoarginine	0.810
661	1.6732+0.01319*Pro-1.2527*homoarginine-0.40777*Hypotaurine	0.810
662	5.6407-0.076433*Cit-0.094118*x3_Me_His-20.4384*GABA	0.810
663	5.4939-0.08605*Cit-22.0848*GABA+8.3954*aAiBA	0.810
664	4.7904-0.078954*Cit+7.8033*bABA-0.93965*homoarginine	0.810
665	4.3002-0.069862*Trp+0.018619*Orn-0.69751*homoarginine	0.810
666	4.7294-0.10149*Trp-7.4104*bABA+3.9371*Cystathionine	0.810
667	2.6759+0.00016122*Gln-0.14917*Cit+7.9026*Cystathionine	0.810
668	2.7722-0.14819*Cit-0.083535*N_Acetyl_L_lys+7.9069*Cystathionine	0.810
669	-0.71876+0.0033149*Ser+0.053235*Phe-1.2078*homoarginine	0.810
670	5.911-0.013175*Asn-0.076414*Cit-20.7069*GABA	0.810
671	4.7369-0.060436*Asn-24.0222*GABA+4.5938*Cystathionine	0.810
672	4.9059+0.00024684*Ala-0.075016*Cit-0.96578*homoarginine	0.810
673	4.9585-0.0748*Cit-0.95779*homoarginine+0.47858*Spermine	0.810
674	2.8301-0.1498*Cit+7.9593*Cystathionine-2.0975*Spermine	0.810
675	6.0272+0.016199*Leu-0.11928*Trp-0.40464*x3_Me_His	0.810
676	4.0584-0.44296*x3_Me_His+4.436*Putrescine-1.0315*homoarginine	0.810
677	3.7844+0.019089*Ser-0.072189*Trp-0.78518*homoarginine	0.810
678	4.9586-0.075016*Cit+0.20557*Spermidine-0.9589*homoarginine	0.810
679	3.6506+0.0061599*Leu-0.37799*x3_Me_His-1.1353*homoarginine	0.810
680	3.4162+0.012482*Pro-0.1116*Trp+2.5168*Cystathionine	0.810
681	1.1599+0.012783*Pro-2.2504*bABA-1.2103*homoarginine	0.810
682	1.1946+0.01297*Pro-1.1916*homoarginine-0.026161*Sarcosine	0.810
683	6.1378-0.076301*Cit-0.003711*Val-20.6092*GABA	0.810
684	5.2802-0.077447*Cit-21.6662*GABA+6.416*Spermine	0.810
685	4.9427-0.077746*Cit+2.4902*aAiBA-0.94207*homoarginine	0.810
686	3.9176+0.013342*Pro-0.092525*Cit-22.198*GABA	0.809
687	3.6706-0.013737*Gly+0.015625*Lys-1.4213*homoarginine	0.809
688	5.1203-0.073673*Cit-0.97117*homoarginine-0.11336*Hypotaurine	0.809
689	-0.30188+0.059616*Phe-0.14323*bAiBA-1.2548*homoarginine	0.809
690	6.1058-0.075679*Cit-0.030753*Met-20.7373*GABA	0.809
691	0.72838+0.0041035*Ser+0.012387*Pro-1.2285*homoarginine	0.809
692	5.8631-0.078401*Cit-0.0037046*Leu-20.9186*GABA	0.809
693	4.7343-0.097421*Trp-1.2802*N_Acetyl_L_lys+4.0621*Cystathionine	0.809
694	-1.1661-0.033658*Thr+7.5994*ADMA+3.3961*Cystathionine	0.809
695	0.83494+0.012941*Pro-1.1761*homoarginine+4.7804*Spermine	0.809
696	4.8328-0.056639*Met-0.083758*Trp+4.6026*Cystathionine	0.809
697	0.85058+0.012944*Pro+1.459*Spermidine-1.1957*homoarginine	0.809
698	5.7983-0.0021723*Gly-0.078044*Cit-20.5838*GABA	0.809
699	5.6906-0.00061973*Ala-0.080843*Cit-20.888*GABA	0.809
700	-0.26954+0.05614*Phe-4.5779*aAiBA-1.2429*homoarginine	0.809

[図35]

No.	Formula	ROC_AUC
701	3.002-0.023875*Thr+0.046921*Phe-24.4568*GABA	0.808
702	-0.38939+0.055312*Phe-0.30121*N_Acetyl_L_Lys-1.1931*homoarginine	0.808
703	-0.6921+0.055266*Phe-1.1773*homoarginine+5.387*Spermine	0.808
704	4.4207-0.097917*Trp-1.5566*Putrescine+3.8075*Cystathionine	0.808
705	5.3448+0.00044206*Gln-0.08335*Cit-21.345*GABA	0.808
706	1.1005+0.012796*Pro-0.40854*Putrescine-1.2059*homoarginine	0.808
707	5.531-0.080912*Cit-21.2052*GABA-0.011879*bAiBA	0.808
708	4.7735-0.025408*Thr+0.023644*Orn-25.667*GABA	0.808
709	5.8462-0.077482*Cit-0.0024427*Lys-21.0807*GABA	0.808
710	0.0064922-0.0079873*Ile-28.8184*GABA+7.8375*ADMA	0.808
711	0.22977-0.0063828*Ser-28.7701*GABA+7.7124*ADMA	0.807
712	1.8869+0.0153*Pro-0.052122*Met-1.1309*homoarginine	0.807
713	-0.55808-0.0023773*Ile+0.053357*Phe-1.1924*homoarginine	0.807
714	3.5666+0.040704*Ile-0.12323*Trp+14.0386*Spermine	0.807
715	4.6719+0.055534*Tyr-0.1482*Trp-0.18977*bAiBA	0.807
716	4.7782-0.0045871*Gln-23.7268*GABA+3.708*Cystathionine	0.807
717	0.78731+0.011986*Pro+0.0060003*Ile-1.2097*homoarginine	0.807
718	-0.30978-28.5595*GABA+7.6254*ADMA-0.059707*bAiBA	0.807
719	-0.29071-29.026*GABA+7.3825*ADMA+0.80267*aAiBA	0.807
720	3.9719-0.064797*Asn-0.82937*x3_Me_His+8.6054*Cystathionine	0.807
721	5.5796-0.079433*Cit-0.001315*Arg-21.1943*GABA	0.807
722	0.032432-0.017077*Leu+0.077336*Phe-1.0911*homoarginine	0.807
723	-0.87937+0.0053482*Pro-28.9767*GABA+6.9653*ADMA	0.807
724	4.8431-0.085893*Cit+0.012089*Tyr-21.3154*GABA	0.807
725	3.6944+0.037576*Ile-0.12209*Trp+3.5076*Spermidine	0.807
726	6.3773-0.1008*Trp-0.33778*x3_Me_His+4.1338*Spermidine	0.807
727	3.3039+0.009011*Ser-0.34131*x3_Me_His-1.1435*homoarginine	0.807
728	-0.66579+0.047471*Phe-1.1201*homoarginine+1.6723*Cystathionine	0.807
729	1.5509+0.013893*Pro-0.0059045*Leu-1.1626*homoarginine	0.806
730	-0.38805-0.00042915*Ala+0.055217*Phe-1.1785*homoarginine	0.806
731	-0.45534-0.0019719*Tyr+0.056*Phe-1.1812*homoarginine	0.806
732	3.9552-0.40328*x3_Me_His+10.0888*bABA-1.0439*homoarginine	0.806
733	-2.3282-0.041437*Thr+0.015953*Pro+8.5087*ADMA	0.806
734	-0.35538+0.054894*Phe-1.3051*Putrescine-1.2018*homoarginine	0.806
735	3.0678-0.0051552*Ala-0.88194*x3_Me_His+8.6447*Cystathionine	0.806
736	-0.45334+0.055318*Phe-0.00050659*Lys-1.1805*homoarginine	0.806
737	-0.44334+0.054481*Phe-1.1871*homoarginine-0.0048853*Sarcosine	0.806
738	4.3473-0.35037*x3_Me_His-1.0625*homoarginine-0.026643*Sarcosine	0.806
739	1.3849+0.013968*Pro-0.006966*Arg-1.1386*homoarginine	0.805
740	-0.86161-0.011716*Gly-0.63852*x3_Me_His+10.7025*ADMA	0.805
741	4.5878+0.043797*Ile-0.13087*Trp-0.20161*bAiBA	0.805
742	-0.29058-0.005491*Orn-28.6285*GABA+8.0244*ADMA	0.805
743	4.5165-0.34172*x3_Me_His-1.0982*homoarginine-0.23017*Hypotaurine	0.805
744	5.1335+0.0040471*Ser-0.082512*Cit-21.4309*GABA	0.805
745	-3.3034-0.11295*Asn+0.052892*Phe+9.2788*ADMA	0.805
746	-1.0899-0.11508*Met-0.65108*x3_Me_His+12.2326*ADMA	0.805
747	-0.43961+0.055442*Phe-0.76009*Spermidine-1.1935*homoarginine	0.805
748	0.075293-0.050042*Asn-0.0071703*Gln+11.5944*ADMA	0.805
749	0.31343-0.0083065*Gln-0.075109*Met+11.7774*ADMA	0.805
750	4.0918+0.0043135*Met-0.35175*x3_Me_His-1.0838*homoarginine	0.805

[図36]

No.	Formula	ROC_AUC
751	4.2263-0.33775*x3_Me_His-0.035216*bAiBA-1.0831*homoarginine	0.805
752	-3.3846-0.76305*x3_Me_His+10.2029*ADMA+20.851*bABA	0.804
753	3.6758+0.020856*Ser-0.12264*Trp+5.6275*Spermidine	0.804
754	0.86351+0.0099229*Ser-1.0815*homoarginine+2.7714*Cystathionine	0.804
755	3.7155+0.04958*Tyr-0.13905*Trp+3.889*Spermidine	0.804
756	1.3546-0.0042127*Gln+0.062941*Phe-1.1376*homoarginine	0.804
757	3.9396+0.0035828*Arg-0.3511*x3_Me_His-1.1151*homoarginine	0.804
758	4.0805-0.35059*x3_Me_His+0.81276*Spermidine-1.0715*homoarginine	0.804
759	-0.81717-31.611*GABA+7.6156*ADMA+20.6339*bABA	0.804
760	3.524+0.016781*Pro-0.12405*Trp+5.3124*Spermidine	0.804
761	0.4429-0.008136*Val+0.065926*Phe-1.0902*homoarginine	0.804
762	4.2303+0.05002*Tyr-0.13833*Trp-4.005*aAiBA	0.804
763	2.286-0.022444*Thr+0.018831*Lys-1.2489*homoarginine	0.804
764	4.6968+0.015973*Pro-0.12583*Trp-0.15315*bAiBA	0.804
765	4.266-0.11113*Trp+0.02078*Orn+12.7512*Spermine	0.804
766	5.9933-0.11121*Trp+0.0075404*Lys-0.34708*x3_Me_His	0.804
767	2.1018+0.015578*Pro-0.0071864*Val-1.123*homoarginine	0.803
768	3.9143+0.0015648*Val-0.35831*x3_Me_His-1.1014*homoarginine	0.803
769	4.2316+0.050621*Tyr-0.13778*Trp-6.0151*bABA	0.803
770	-0.41562+0.058826*Phe-0.004615*Orn-1.1956*homoarginine	0.803
771	-0.22023+0.056816*Phe-0.0054322*Arg-1.1416*homoarginine	0.803
772	3.4806-0.024249*Arg-0.8595*x3_Me_His+8.2414*Cystathionine	0.803
773	3.6182-0.0060122*Gln+0.016579*Lys-1.2707*homoarginine	0.803
774	6.2561-0.096227*Trp-0.33*x3_Me_His+11.3906*Spermine	0.803
775	4.1884-0.41446*x3_Me_His+4.2683*aAiBA-1.0386*homoarginine	0.803
776	4.0308-0.34973*x3_Me_His-1.0547*homoarginine+3.4505*Spermine	0.803
777	0.0073051-28.6777*GABA+7.2252*ADMA-0.03042*Sarcosine	0.803
778	-0.24687-0.012637*Gln+0.013016*Pro+9.9503*ADMA	0.803
779	4.0913+0.00029144*Ala-0.35057*x3_Me_His-1.0828*homoarginine	0.803
780	-4.1318+0.026784*Phe-0.67404*x3_Me_His+9.1636*ADMA	0.803
781	-3.0108-0.033297*Thr+0.034008*Phe+8.5121*ADMA	0.802
782	3.5427+0.016425*Pro-0.11907*Trp+13.5422*Spermine	0.802
783	5.2581-0.11838*Trp+0.02271*Orn-0.1756*bAiBA	0.802
784	4.9838-0.095503*Trp-0.58313*x3_Me_His+6.0758*N_Acetyl_L_Lys	0.802
785	3.7417+0.019101*Ser-0.11588*Trp+15.0027*Spermine	0.802
786	5.571+0.013076*Ser-0.1076*Trp-0.29655*x3_Me_His	0.802
787	6.3161-0.091976*Trp-0.46683*x3_Me_His+6.4516*Putrescine	0.802
788	4.7924-0.0072164*Thr-0.33564*x3_Me_His-0.99797*homoarginine	0.802
789	4.2346+0.049089*Tyr-0.13377*Trp-0.046664*Sarcosine	0.802
790	4.3228-0.11287*Trp+0.020309*Orn+3.6412*Spermidine	0.802
791	4.6185-0.012141*Asn-0.33889*x3_Me_His-1.0416*homoarginine	0.801
792	4.3683+0.041096*Ile-0.12191*Trp-0.40649*Hypotaurine	0.801
793	2.7936-1.0917*homoarginine-0.77625*Hypotaurine+3.725*Cystathionine	0.801
794	0.35146-0.0086532*Gln-0.005513*Gly+10.5768*ADMA	0.801
795	0.62818-0.020369*Tyr-28.8108*GABA+8.2644*ADMA	0.801
796	0.74885+0.021955*Tyr-1.1423*homoarginine+2.279*Cystathionine	0.801
797	2.5283-0.056757*Asn+0.018104*Lys-1.2939*homoarginine	0.801
798	6.3235+0.019543*Met-0.1014*Trp-0.3311*x3_Me_His	0.801
799	4.4715-0.012095*Lys-24.8863*GABA+4.053*Cystathionine	0.801
800	6.7719-0.0085365*Gly-0.050504*Trp-0.82974*homoarginine	0.800

[図37]

No.	Formula	ROC_AUC
801	4.2394-0.011339*Gly+0.016026*Orn-1.1154*homoarginine	0.800
802	4.9173-0.11639*Trp+0.023862*Orn-6.6187*aAiBA	0.800
803	6.9432-0.0065575*Thr-0.088695*Trp-0.3329*x3_Me_His	0.800
804	2.5862-0.070628*Asn+0.058789*Phe-23.2991*GABA	0.800
805	-2.0639-0.0047757*Ala-0.68583*x3_Me_His+11.8524*ADMA	0.800
806	4.1009-0.010016*Gly-1.0582*homoarginine+2.9225*Cystathionine	0.800
807	4.3513+0.051884*Tyr-0.13766*Trp-0.32631*Hypotaurine	0.800
808	2.2085+0.0091482*Lys-1.3125*homoarginine-0.44357*Hypotaurine	0.800
809	4.1502+0.040534*Ile-0.12362*Trp-5.0128*aAiBA	0.799
810	6.9994-0.095996*Trp-0.34096*x3_Me_His-0.054004*Sarcosine	0.799
811	4.2615+0.041514*Ile-0.12396*Trp-9.4754*bABA	0.799
812	1.8433+0.031435*Tyr-1.3153*homoarginine-0.49039*Hypotaurine	0.799
813	3.736+0.03863*Ile-0.11825*Trp+0.74393*Putrescine	0.799
814	4.1294+0.038432*Ile-0.11806*Trp-0.044003*Sarcosine	0.799
815	3.7064+0.050283*Tyr-0.13416*Trp+1.4514*Putrescine	0.799
816	5.0647-0.0017717*Gln-0.34157*x3_Me_His-1.0268*homoarginine	0.799
817	4.3165-0.024167*Arg-24.3149*GABA+4.4261*Cystathionine	0.798
818	5.6344-0.010621*Gly-0.14223*bAiBA-1.1642*homoarginine	0.798
819	5.7548-0.058691*Trp-0.78553*homoarginine-0.39434*Hypotaurine	0.798
820	1.2036+0.0050398*Lys-1.124*homoarginine+2.5155*Cystathionine	0.798
821	1.0012-0.0086503*Gln-0.0084571*Val+10.7636*ADMA	0.798
822	7.5862-0.0024021*Gln-0.090199*Trp-0.3143*x3_Me_His	0.798
823	6.4958+0.00020767*Ala-0.096335*Trp-0.33068*x3_Me_His	0.798
824	4.118+0.040915*Ile-0.11988*Trp-0.91683*N_Acetyl_L_lys	0.798
825	3.7366+0.049411*Tyr-0.13408*Trp+0.35407*N_Acetyl_L_lys	0.798
826	0.90133+0.023121*Tyr+0.004243*Lys-1.298*homoarginine	0.797
827	6.2892-0.092845*Trp-0.37078*x3_Me_His+6.8666*bABA	0.797
828	-3.0376-0.76153*x3_Me_His+9.0271*ADMA+2.5496*N_Acetyl_L_lys	0.797
829	-1.0042-0.026531*Thr-0.0057378*Gly+9.7109*ADMA	0.797
830	2.3175-0.026026*Leu+0.064543*Phe-23.8353*GABA	0.797
831	2.5849+0.061222*Phe-0.017065*Lys-24.7663*GABA	0.797
832	6.7349-0.098831*Trp-0.29383*x3_Me_His-0.076966*bAiBA	0.797
833	3.7875-0.0045466*Gln-0.77973*x3_Me_His+7.2142*Cystathionine	0.797
834	-0.54038-0.010126*Gln+10.8064*ADMA+11.5701*bABA	0.797
835	4.4855-0.010633*Val-23.3328*GABA+3.8072*Cystathionine	0.797
836	1.3141+0.0087311*Lys-1.229*homoarginine+5.9185*Spermine	0.797
837	7.6639-0.0059936*Gly-0.09166*Trp-0.3405*x3_Me_His	0.796
838	5.8525-0.065*Trp-0.16356*bAiBA-0.75637*homoarginine	0.796
839	2.5833-0.015141*Val+0.049942*Ile-0.97108*homoarginine	0.796
840	1.0585+0.024777*Tyr+0.0050547*Orn-1.2247*homoarginine	0.796
841	2.1724+0.022506*Ile-1.1911*homoarginine-0.50529*Hypotaurine	0.796
842	1.2969+0.0099925*Ile-1.0467*homoarginine+2.4483*Cystathionine	0.796
843	-0.29496-0.0073886*Gln-0.023828*Arg+12.3453*ADMA	0.796
844	2.0675+0.057096*Ile-0.026862*Leu-0.98643*homoarginine	0.796
845	1.0979+0.014415*Ile+0.0054408*Lys-1.2256*homoarginine	0.796
846	4.4597+0.010996*Leu-0.072168*Trp-0.75716*homoarginine	0.796
847	6.4672-0.092437*Trp-0.39243*x3_Me_His+3.7706*aAiBA	0.796
848	6.8039-0.0096642*Asn-0.092614*Trp-0.32642*x3_Me_His	0.795
849	5.0147-0.11243*Trp+0.022479*Orn-0.34092*Hypotaurine	0.795
850	6.8261-0.0922*Trp-0.0048551*Arg-0.3334*x3_Me_His	0.795

[図38]

No.	Formula	ROC_AUC
851	4.3795-0.51574*x3_Me_His+15.3928*Putrescine-27.1882*GABA	0.795
852	-3.6957-0.65202*x3_Me_His+10.5165*ADMA+18.3671*Spermine	0.795
853	2.1729-1.0993*N_Acetyl_L_lys-1.0103*homoarginine+3.1164*Cystathionine	0.795
854	0.93563+0.00969*Ile+0.022064*Tyr-1.2273*homoarginine	0.795
855	6.5651-0.095912*Trp-0.33042*x3_Me_His-0.011951*Hypotaurine	0.795
856	1.7714+0.0082435*Lys-3.6151*bABA-1.2575*homoarginine	0.795
857	4.273+0.015952*Pro-0.12139*Trp-4.3203*aAiBA	0.795
858	3.4384-0.010083*Gly+0.029168*Tyr-1.2651*homoarginine	0.795
859	1.3825+0.0052172*Ser+0.0062488*Lys-1.2382*homoarginine	0.795
860	1.4663+0.027896*Tyr-3.9063*aAiBA-1.2743*homoarginine	0.795
861	2.0963-3.5623*Putrescine-1.0376*homoarginine+3.0481*Cystathionine	0.795
862	3.2151-0.017566*Thr-0.85785*homoarginine+3.9524*Cystathionine	0.795
863	2.2132-0.0045756*Val+0.010195*Lys-1.2098*homoarginine	0.795
864	5.4522-0.060464*Trp-5.165*aAiBA-0.76555*homoarginine	0.795
865	-0.032881-0.0077062*Gln-0.010838*Lys+11.8519*ADMA	0.794
866	4.4244+0.0055867*Val-0.069324*Trp-0.75951*homoarginine	0.794
867	2.2186-0.20382*bAiBA-1.0516*homoarginine+3.3164*Cystathionine	0.794
868	4.2227+0.015853*Pro-0.11804*Trp-0.20671*Hypotaurine	0.794
869	-3.2136+0.0047925*Pro-0.66417*x3_Me_His+9.2281*ADMA	0.794
870	1.5223+0.029382*Tyr-0.12463*bAiBA-1.2836*homoarginine	0.794
871	4.5284-0.10942*Trp+0.020709*Orn-0.17612*Putrescine	0.794
872	3.8004-0.010051*Gly+0.019878*Ile-1.1548*homoarginine	0.794
873	4.5976-0.10953*Trp+0.020981*Orn-0.22942*N_Acetyl_L_lys	0.794
874	1.4683+0.0082051*Lys+1.1353*Spermidine-1.2381*homoarginine	0.794
875	1.7736+0.0080122*Lys-1.2271*homoarginine-0.023025*Sarcosine	0.794
876	4.5408+0.015598*Ser-0.11394*Trp-2.91*aAiBA	0.794
877	4.3788+0.016968*Pro-0.11884*Trp-1.3449*N_Acetyl_L_lys	0.794
878	4.7436-0.11101*Trp+0.020749*Orn-3.9176*bABA	0.794
879	1.8694+0.0079973*Lys-3.8878*aAiBA-1.2731*homoarginine	0.794
880	0.8426+0.008467*Ser+0.017703*Ile-1.1808*homoarginine	0.794
881	-0.43175-0.074829*Asn-0.0077437*Gly+10.1082*ADMA	0.794
882	4.7447-0.07153*Asn+0.02833*Orn-25.1293*GABA	0.794
883	4.5741-0.012231*Gly+0.013762*Arg-1.2549*homoarginine	0.794
884	1.0062+0.028373*Tyr-1.2173*homoarginine+5.1634*Spermine	0.794
885	2.1944-0.040834*Asn+0.040245*Tyr-1.1948*homoarginine	0.793
886	1.3178+0.027656*Tyr-0.76863*Putrescine-1.2407*homoarginine	0.793
887	1.153+0.031582*Phe+9.193*Putrescine-30.2103*GABA	0.793
888	2.3883-0.01405*Thr+0.027443*Ile-1.0088*homoarginine	0.793
889	0.79296+0.0062536*Ser+0.024961*Tyr-1.2644*homoarginine	0.793
890	1.4958+0.0075097*Ser+0.0080894*Orn-1.1368*homoarginine	0.793
891	3.7141+0.015868*Pro-0.11644*Trp+1.5845*Putrescine	0.793
892	5.9265+0.0064247*Val-0.11007*Trp-0.35543*x3_Me_His	0.793
893	-0.44259-0.23642*Met+0.085909*Phe+4.5929*Cystathionine	0.793
894	3.8657-0.013188*Leu-24.3035*GABA+3.7597*Cystathionine	0.793
895	4.825-0.10864*Trp+0.020321*Orn-0.044689*Sarcosine	0.793
896	2.0636-0.016048*Thr+0.040056*Tyr-1.1359*homoarginine	0.793
897	3.9016+0.018*Ser-0.11306*Trp+2.4437*Putrescine	0.793
898	3.8983-0.077471*Asn+0.017804*Pro-22.9366*GABA	0.793
899	4.3021+0.016239*Pro-0.11765*Trp-0.060066*Sarcosine	0.793
900	6.1254-0.0054981*Gly-0.097532*Trp+3.4909*Spermidine	0.793

[図39]

No.	Formula	ROC_AUC
901	1.9554-0.0058344*Leu+0.010172*Lys-1.2296*homocysteine	0.793
902	-3.7153+0.052614*Phe-0.026868*Lys+9.7457*ADMA	0.793
903	4.4803+0.016216*Ser-0.11358*Trp-3.7005*bABA	0.793
904	4.65+0.030331*Met-0.064672*Trp-0.75602*homocysteine	0.793
905	1.5192+0.0054677*Orn+0.0062393*Lys-1.21*homocysteine	0.793
906	5.6964-0.009901*Gly-1.1609*homocysteine-0.39725*Hypotaurine	0.793
907	1.8229+0.02104*Ile-0.12654*bAiBA-1.1681*homocysteine	0.793
908	5.7733-0.10769*Trp-0.1511*bAiBA+3.8279*Spermidine	0.793
909	2.4826-0.019796*Thr+0.022843*Ser-1.0443*homocysteine	0.792
910	1.2059+0.027721*Tyr+0.19675*Spermidine-1.2331*homocysteine	0.792
911	4.7824-0.05891*Trp+0.004362*Arg-0.77651*homocysteine	0.792
912	4.9309-0.061653*Trp+2.3568*Spermidine-0.71356*homocysteine	0.792
913	4.951+0.015152*Ser-0.11678*Trp-0.13663*bAiBA	0.792
914	-0.97744-0.092964*Asn+7.9903*ADMA+3.2757*Cystathionine	0.792
915	2.0977-0.064782*Met+0.014889*Lys-1.2485*homocysteine	0.792
916	4.6656+0.0080503*Leu-0.11237*Trp+3.6978*Spermidine	0.792
917	1.3447+0.02799*Tyr-2.7734*bABA-1.2466*homocysteine	0.792
918	4.1799+0.015725*Pro-0.11882*Trp-4.7327*bABA	0.792
919	1.3527+0.027564*Tyr-1.224*homocysteine-0.018713*Sarcosine	0.792
920	4.9281-0.061154*Trp-0.69679*homocysteine+7.3673*Spermine	0.792
921	6.1705-0.0057759*Gly-0.095986*Trp+12.1938*Spermine	0.792
922	1.7539-0.00084096*Ala+0.0089725*Lys-1.2341*homocysteine	0.792
923	-2.4202-0.6588*x3_Me_His+9.631*ADMA-0.038324*Sarcosine	0.792
924	4.8412+0.00079944*Ala-0.058818*Trp-0.75204*homocysteine	0.792
925	2.1319-0.0012869*Ala-0.9829*homocysteine+3.075*Cystathionine	0.792
926	4.9884-0.016086*Thr+7.2536*Putrescine-27.8523*GABA	0.791
927	4.5729+0.01669*Ser-0.11216*Trp-0.04908*Sarcosine	0.791
928	1.7548+0.036292*Phe-0.29638*x3_Me_His-21.9428*GABA	0.791
929	1.7916+0.009977*Lys-0.006106*Arg-1.2156*homocysteine	0.791
930	2.0368+0.0072107*Lys-0.10012*bAiBA-1.2474*homocysteine	0.791
931	2.0139-4.7765*bABA-1.0376*homocysteine+2.9023*Cystathionine	0.791
932	2.9203-0.0098674*Lys-0.79245*x3_Me_His+7.7907*Cystathionine	0.791
933	1.2767-0.00022073*Ala+0.028068*Tyr-1.2292*homocysteine	0.791
934	4.5801+0.0094001*Leu-0.11267*Trp+12.9842*Spermine	0.791
935	-1.0938-0.021173*Thr-0.047465*Asn+10.4836*ADMA	0.791
936	4.5359+0.016453*Ser-0.11336*Trp-0.16957*Hypotaurine	0.791
937	3.2886-0.041376*Asn-0.92934*homocysteine+3.7545*Cystathionine	0.791
938	6.5567-0.0029119*Gln-0.095685*Trp+3.3058*Spermidine	0.791
939	1.3412+0.015804*Ile+0.0063126*Orn-1.1231*homocysteine	0.791
940	1.0894+0.027565*Tyr+0.34298*N_Acetyl_L_lys-1.2317*homocysteine	0.791
941	4.426-0.11652*Trp+0.0072693*Lys+4.6055*Spermidine	0.791
942	1.6219+0.0079888*Lys+0.035984*N_Acetyl_L_lys-1.2378*homocysteine	0.791
943	1.7622-0.057655*Met+0.040734*Tyr-1.1837*homocysteine	0.790
944	-0.69382-0.16769*Met+7.287*ADMA+4.3046*Cystathionine	0.790
945	1.75+0.020253*Ile-4.288*aAiBA-1.1681*homocysteine	0.790
946	5.3687-0.059537*Trp-5.3361*bABA-0.75043*homocysteine	0.790
947	2.7056-25.4269*GABA-0.17305*bAiBA+3.7693*Cystathionine	0.790
948	5.8694-0.017754*Thr-0.2172*x3_Me_His-21.6269*GABA	0.790
949	0.62841-0.0090722*Gln-0.010457*Leu+10.7791*ADMA	0.790
950	1.6999+0.019887*Ile-4.1177*bABA-1.1424*homocysteine	0.790

[図40]

No.	Formula	ROC_AUC
951	1.0276+0.02381*Phe-25.7129*GABA+2.8836*Cystathionine	0.790
952	5.5925-0.10039*Trp-0.34335*Hypotaurine+12.6062*Spermine	0.790
953	2.3872+6.246*Putrescine-28.3122*GABA+2.9299*Cystathionine	0.790
954	-1.2766-0.060628*Asn-0.025861*Arg+11.8709*ADMA	0.790
955	7.6997-0.0034223*Gln-0.097867*Trp-0.15676*bAiBA	0.790
956	-2.9142-0.68893*x3_Me_His+9.9819*ADMA+0.058804*bAiBA	0.790
957	3.5247-0.0060297*Gly-24.0275*GABA+3.3921*Cystathionine	0.790
958	2.9208-0.013969*Val+0.051156*Phe-22.8054*GABA	0.790
959	2.2134+0.012607*Orn-5.2136*aAiBA-1.1337*homoarginine	0.790
960	1.6984+0.0079174*Lys-0.47951*Putrescine-1.2403*homoarginine	0.790
961	2.7198-0.13067*Cit+0.033201*Orn-0.08984*Sarcosine	0.790
962	-0.88364-0.011186*Val-0.5893*x3_Me_His+10.4721*ADMA	0.790
963	1.3894+0.030293*Tyr-0.0042551*Arg-1.2042*homoarginine	0.790
964	5.801-0.10397*Trp+2.9573*Putrescine-0.17341*bAiBA	0.790
965	2.8974-0.0039958*Gln+0.035924*Tyr-1.1864*homoarginine	0.789
966	-1.7314-0.012232*Leu-0.60553*x3_Me_His+10.305*ADMA	0.789
967	-1.442-0.021856*Thr-0.022613*Arg+11.1532*ADMA	0.789
968	-1.1763-0.0098585*Gln+0.023851*Phe+9.6667*ADMA	0.789
969	4.222-0.11865*Trp+0.0093649*Lys+16.254*Spermine	0.789
970	1.5822+0.010438*Ser+1.3859*Spermidine-1.1396*homoarginine	0.789
971	2.4058+0.010165*Ser-1.1898*homoarginine-0.37289*Hypotaurine	0.789
972	1.9916-0.0071529*Val+0.039041*Tyr-1.1844*homoarginine	0.789
973	4.7278-0.057919*Trp+0.78537*N_Acetyl_L_lys-0.73971*homoarginine	0.789
974	4.8779+0.017285*Met-0.10637*Trp+3.9867*Spermidine	0.789
975	2.095-0.0045245*Arg-0.97241*homoarginine+2.9532*Cystathionine	0.789
976	3.1656-0.043985*Asn+0.020779*Orn-0.9902*homoarginine	0.789
977	6.2739-0.0023678*Gln-0.094212*Trp+9.5182*Spermine	0.789
978	2.5557-0.0041156*Val-0.95488*homoarginine+3.015*Cystathionine	0.789
979	1.78+0.00082019*Orn-1.0189*homoarginine+2.7312*Cystathionine	0.789
980	1.902-1.0111*homoarginine-0.012514*Sarcosine+2.7548*Cystathionine	0.789
981	-0.095861-0.0092105*Gln-0.0017054*Ala+10.9712*ADMA	0.788
982	6.1774-0.0021934*Gln-0.056255*Trp-0.70551*homoarginine	0.788
983	4.756+0.024922*Met-0.10622*Trp+13.372*Spermine	0.788
984	2.6599+0.0127*Orn-1.1423*homoarginine-0.46034*Hypotaurine	0.788
985	7.1611-0.0062638*Gly-0.099791*Trp-0.15829*bAiBA	0.788
986	1.6785+0.01894*Ile-1.1136*homoarginine-0.018652*Sarcosine	0.788
987	3.3876+0.01415*Ser-0.0037883*Gln-1.0757*homoarginine	0.788
988	-2.9802+0.0040553*Ile-0.66807*x3_Me_His+9.6987*ADMA	0.788
989	5.3778-0.10422*Trp+3.8739*Spermidine-3.7152*aAiBA	0.788
990	2.3754+0.010933*Orn-0.1195*bAiBA-1.1207*homoarginine	0.788
991	0.87712-0.89746*x3_Me_His+18.3727*bABA+7.4496*Cystathionine	0.788
992	2.1385-26.917*GABA+4.4632*Spermidine+3.2763*Cystathionine	0.788
993	3.1351-0.0026519*Ala-24.487*GABA+3.8535*Cystathionine	0.788
994	1.1764-0.99429*x3_Me_His+8.5116*Putrescine-7.5635*Cystathionine	0.788
995	3.9623+0.016323*Ser-0.11207*Trp+0.67392*N_Acetyl_L_lys	0.788
996	3.0839-0.071817*Met-0.88343*homoarginine+3.9933*Cystathionine	0.788
997	1.4265+0.018825*Ile-1.1085*homoarginine+4.144*Spermine	0.788
998	5.123-0.057613*Trp-0.75598*Putrescine-0.74638*homoarginine	0.788
999	5.3493-0.10172*Trp-3.8759*aAiBA+12.5367*Spermine	0.788
1000	2.1872+0.010266*Orn-1.0735*homoarginine-0.021512*Sarcosine	0.788

[図41]

No.	Formula	ROC_AUC
1001	1.6649-0.0095312*Leu+0.038256*Tyr-1.2066*homoarginine	0.787
1002	1.4739-0.13136*Cit+0.033136*Orn+16.5667*bABA	0.787
1003	1.6676+0.019245*Ile-1.1135*Putrescine-1.134*homoarginine	0.787
1004	2.2463+0.0084163*Ser-0.10265*bAiBA-1.1582*homoarginine	0.787
1005	3.1294-0.0090148*Val-0.78422*x3_Me_His+7.6826*Cystathionine	0.787
1006	5.4722+0.010745*Leu-0.11916*Trp-0.16499*bAiBA	0.787
1007	5.4258-0.011676*Asn-0.054809*Trp-0.73446*homoarginine	0.787
1008	3.5668-0.0034061*Gln-0.94999*homoarginine+3.1183*Cystathionine	0.787
1009	5.7057-0.10444*Trp-0.13861*bAiBA+11.0509*Spermine	0.787
1010	2.2628-26.3659*GABA+3.2535*Cystathionine+11.5802*Spermine	0.787
1011	1.7534+0.56796*Spermidine-1.0154*homoarginine+2.7711*Cystathionine	0.787
1012	1.9271+0.0096928*Ser-2.1991*bABA-1.1492*homoarginine	0.787
1013	-3.0834-0.66012*x3_Me_His+9.8451*ADMA+2.3654*Spermidine	0.787
1014	-2.4455-0.039409*Thr+0.016561*Ser+9.4577*ADMA	0.786
1015	-0.36667+0.0062098*Ser-0.010589*Gln+10.4908*ADMA	0.786
1016	1.9571+0.0097818*Ser-1.1301*homoarginine-0.023023*Sarcosine	0.786
1017	2.4184-0.11752*Cit+0.033789*Orn-0.20761*x3_Me_His	0.786
1018	1.5939+0.019414*Ile-0.00079811*Arg-1.1168*homoarginine	0.786
1019	-1.7757-0.023087*Tyr-0.66974*x3_Me_His+10.9061*ADMA	0.786
1020	1.5739+0.010311*Ser-1.1203*homoarginine+4.7684*Spermine	0.786
1021	3.2388-0.0040959*Gln+0.026846*Ile-1.0475*homoarginine	0.786
1022	7.2238-0.00327*Gln-0.094468*Trp-4.1529*aAiBA	0.786
1023	0.11721-0.0097814*Gln+10.9953*ADMA-1.2687*N_Acetyl_L_lys	0.786
1024	1.6301+0.02006*Ile-0.30623*N_Acetyl_L_lys-1.128*homoarginine	0.786
1025	4.6124-0.098566*Trp+0.97301*N_Acetyl_L_lys+12.9717*Spermine	0.786
1026	4.6759+0.02515*Orn-0.015449*Lys-25.9917*GABA	0.786
1027	2.188+0.010818*Orn-1.5302*Putrescine-1.0992*homoarginine	0.786
1028	4.5827+0.0041876*Val-0.10827*Trp+12.8097*Spermine	0.786
1029	0.21892-0.21382*Met+0.11315*Phe-0.42986*x3_Me_His	0.786
1030	2.075-0.0026277*Leu-0.99535*homoarginine+2.8866*Cystathionine	0.786
1031	5.187-0.097205*Trp-0.0021905*Arg+12.0128*Spermine	0.786
1032	5.2359-0.058334*Trp-0.72346*homoarginine-0.026516*Sarcosine	0.786
1033	5.3279-0.098231*Trp-0.040476*Sarcosine+12.0603*Spermine	0.786
1034	-2.8168-0.0021465*Orn-0.65275*x3_Me_His+10.0584*ADMA	0.786
1035	2.1552+0.010405*Orn-2.2082*bABA-1.0946*homoarginine	0.786
1036	1.9925+0.010262*Orn+0.54283*Spermidine-1.0826*homoarginine	0.786
1037	1.7091-1.0059*homoarginine+2.7339*Cystathionine+3.5124*Spermine	0.786
1038	4.3518-0.026955*Thr+0.018245*Ser-24.0566*GABA	0.786
1039	5.081-0.017649*Thr-24.5314*GABA+10.2507*Spermine	0.786
1040	1.6259-0.00033668*Ala+0.019623*Ile-1.1158*homoarginine	0.786
1041	4.6442-0.1012*Trp+0.9554*N_Acetyl_L_lys+4.1248*Spermidine	0.786
1042	6.1126-0.016387*Thr-0.0045148*Val-23.4554*GABA	0.786
1043	2.0872+0.0090281*Ser-3.3247*aAiBA-1.1656*homoarginine	0.786
1044	-0.038093-0.0094183*Gln+9.046*ADMA+1.7959*Cystathionine	0.786
1045	5.569-0.10336*Trp+4.2756*Spermidine-0.31235*Hypotaurine	0.786
1046	2.0152+0.010229*Orn+0.11117*N_Acetyl_L_lys-1.0851*homoarginine	0.786
1047	2.8901-25.458*GABA-0.43652*Hypotaurine+3.7618*Cystathionine	0.786
1048	-2.2978-0.029548*Thr+9.8198*ADMA+13.3094*Spermine	0.785
1049	5.5018-0.11434*Trp+0.0054607*Lys-0.14575*bAiBA	0.785
1050	5.3961-0.0049433*Thr-0.053841*Trp-0.7255*homoarginine	0.785

[図42]

No.	Formula	ROC_AUC
1051	-1.7105-0.030548*Thr+9.4151*ADMA+2.8381*bABA	0.785
1052	7.137-0.0031665*Gln-0.091001*Trp-0.042771*Sarcosine	0.785
1053	4.6262+0.0039496*Val-0.11006*Trp+3.9892*Spermidine	0.785
1054	2.727+0.018693*Ser-0.042951*Asn-1.0967*homoarginine	0.785
1055	0.035012-0.0098178*Gln+10.387*ADMA-0.012596*Sarcosine	0.785
1056	5.3519-0.010126*Gly-4.5566*aAiBA-1.1516*homoarginine	0.785
1057	-0.19058+0.024996*Phe-0.82267*x3_Me_His+6.8031*Cystathionine	0.785
1058	5.3555-0.10347*Trp-4.6013*bABA+4.0097*Spermidine	0.785
1059	-1.5103-0.028834*Thr-0.0015417*Ala+9.9066*ADMA	0.785
1060	0.093629-0.0097052*Gln-0.005522*Tyr+10.6793*ADMA	0.785
1061	0.13638-0.01055*Gln+11.2352*ADMA-6.5315*aAiBA	0.785
1062	6.7067-0.0059614*Gly-0.096472*Trp-4.0356*aAiBA	0.785
1063	5.3561-0.10046*Trp+3.571*Spermidine-0.038862*Sarcosine	0.785
1064	5.0468-0.098813*Trp+0.046917*Spermidine+12.4138*Spermine	0.785
1065	5.6866-0.019848*Thr-23.41*GABA-0.094787*bAiBA	0.785
1066	4.6453-0.0065626*Gln+0.014004*Pro-22.93*GABA	0.785
1067	4.7533-0.01053*Gly+0.0013276*Ala-1.1446*homoarginine	0.785
1068	4.7459-0.010496*Gly+0.01852*Met-1.1459*homoarginine	0.785
1069	2.0229-0.044774*Met+0.02739*Ile-1.0545*homoarginine	0.785
1070	3.7991+0.079774*Ile-0.047858*Leu-23.2779*GABA	0.785
1071	1.5288+0.019048*Ile+0.2611*Spermidine-1.1232*homoarginine	0.785
1072	5.1085-0.11211*Trp+0.005892*Lys-3.8719*aAiBA	0.785
1073	5.1347-0.10165*Trp-0.6792*Putrescine+4.0909*Spermidine	0.785
1074	5.0361-0.098749*Trp+0.13164*Putrescine+12.4642*Spermine	0.785
1075	5.2555-0.1063*Trp-0.21413*bAiBA+2.4071*N_Acetyl_L_lys	0.785
1076	5.2104-0.099842*Trp-2.6717*bABA+12.2964*Spermine	0.785
1077	1.8978+0.010269*Orn-1.0658*homoarginine+4.1763*Spermine	0.785
1078	-1.9033-0.032245*Thr+0.01059*Ile+9.0061*ADMA	0.784
1079	5.0627-0.017643*Thr-24.8362*GABA+2.9734*Spermidine	0.784
1080	-1.464-0.030545*Thr+9.3025*ADMA-0.010744*Sarcosine	0.784
1081	1.8538+0.0096307*Ser-0.21158*Putrescine-1.1419*homoarginine	0.784
1082	-0.099581-0.0098795*Gln+0.28911*Putrescine+10.4816*ADMA	0.784
1083	5.1118-0.10906*Trp+0.0061565*Lys-0.049422*Sarcosine	0.784
1084	6.2863-0.10297*Trp-0.15094*bAiBA-0.045949*Sarcosine	0.784
1085	-2.7799-0.65401*x3_Me_His+9.9432*ADMA-0.083902*Hypotaurine	0.784
1086	-0.092017-0.0098109*Gln-0.0028702*Orn+10.7971*ADMA	0.784
1087	0.4204-0.010357*Gln+10.6509*ADMA-0.13876*bAiBA	0.784
1088	0.19549-0.010104*Gln+11.1484*ADMA-0.38019*Hypotaurine	0.784
1089	4.0301-0.0048228*Gly+9.0144*Putrescine-28.2922*GABA	0.784
1090	5.1026+0.0091135*Leu-0.1127*Trp-3.8733*aAiBA	0.784
1091	-0.90138-0.034014*Thr+9.6199*ADMA-0.18364*bAiBA	0.784
1092	-1.7806-0.011797*Ser-0.68164*x3_Me_His+10.5042*ADMA	0.784
1093	-0.30054-0.010271*Gln+0.0088713*Ile+10.2112*ADMA	0.784
1094	4.9696+0.0002948*Ala-0.099369*Trp+12.5295*Spermine	0.784
1095	5.2679-0.098886*Trp-0.0030206*Arg+3.6488*Spermidine	0.784
1096	2.9784-0.014539*Thr+0.017449*Orn-0.95343*homoarginine	0.784
1097	4.7748-0.019032*Thr-25.1454*GABA+1.9252*N_Acetyl_L_lys	0.784
1098	2.5281-0.037378*Asn+0.027883*Ile-1.0497*homoarginine	0.784
1099	5.3348-0.0094837*Asn-0.095419*Trp+11.5599*Spermine	0.784
1100	6.8085-0.0032962*Gln-0.091282*Trp+1.258*Putrescine	0.784

[図43]

No.	Formula	ROC_AUC
1101	-0.16426-0.0098339*Gln+10.4612*ADMA+0.67595*Spermidine	0.784
1102	2.1565-0.00050299*Ala+0.011145*Orn-1.0734*homoarginine	0.784
1103	5.1424+0.011181*Leu-0.11585*Trp-7.4969*bABA	0.784
1104	5.1682+0.0098557*Leu-0.11227*Trp-0.24323*Hypotaurine	0.784
1105	5.0545-0.11182*Trp+0.0062663*Lys-4.704*bABA	0.784
1106	5.4037-0.0055127*Thr-0.092818*Trp+11.6891*Spermine	0.784
1107	1.9271+0.0099654*Ser-0.0011942*Leu-1.1319*homoarginine	0.784
1108	1.862+0.0099711*Ser-0.00088869*Arg-1.1334*homoarginine	0.784
1109	3.6658-0.0035899*Gln+0.014641*Orn-1.0043*homoarginine	0.784
1110	4.7659-0.009923*Gly+0.62373*N_Acetyl_L_lys-1.1091*homoarginine	0.784
1111	4.9663+0.00041432*Ala-0.10218*Trp+3.9554*Spermidine	0.784
1112	2.2781-0.0028015*Leu+0.011487*Orn-1.0618*homoarginine	0.784
1113	-1.7903-0.032236*Thr+0.0070398*Tyr+9.2263*ADMA	0.783
1114	-1.2663-0.023673*Thr-0.010257*Lys+10.8644*ADMA	0.783
1115	2.9502-0.0078999*Gly-0.82473*x3_Me_His+7.5149*Cystathionine	0.783
1116	4.8954-0.10271*Trp+2.3346*N_Acetyl_L_lys-7.8806*aAiBA	0.783
1117	5.6374-0.017809*Thr-23.9745*GABA-0.045555*Sarcosine	0.783
1118	2.1797+0.010289*Ser-0.0021221*Val-1.1112*homoarginine	0.783
1119	3.9662+0.015468*Pro-0.1133*Met-25.0212*GABA	0.783
1120	4.2074-0.02279*Thr+0.025136*Ile-24.3842*GABA	0.783
1121	6.716-0.009942*Thr-0.094317*Trp-0.17411*bAiBA	0.783
1122	5.4338-0.0055313*Thr-0.09485*Trp+3.4994*Spermidine	0.783
1123	1.8857+0.010111*Ser-0.00032983*Ala-1.1345*homoarginine	0.783
1124	6.4759-0.098655*Trp-0.0076747*Arg-0.16005*bAiBA	0.783
1125	2.0783+0.010499*Orn-0.0004745*Arg-1.0807*homoarginine	0.783
1126	2.3997-24.6995*GABA-7.595*aAiBA+4.0632*Cystathionine	0.783
1127	-0.59755-0.0093486*Gln+10.5567*ADMA+6.5256*Spermine	0.783
1128	1.3306-0.12975*Cit+0.028914*Orn+2.3305*N_Acetyl_L_lys	0.783
1129	4.5424-0.025783*Val+0.064148*Ile-22.3443*GABA	0.783
1130	-0.41762-0.026967*Thr-0.0079272*Val+9.8098*ADMA	0.783
1131	-0.66952-0.0087673*Gly-0.017403*Lys+10.6153*ADMA	0.783
1132	5.2667-0.010061*Gly-1.9261*Putrescine-1.1262*homoarginine	0.783
1133	2.8075-25.4288*GABA-0.047613*Sarcosine+3.2254*Cystathionine	0.783
1134	5.1976-0.021057*Thr+0.0015013*Ala-24.5236*GABA	0.782
1135	5.8089-0.017154*Thr-0.0048545*Leu-23.6625*GABA	0.782
1136	1.6124+0.009627*Ser+0.51098*N_Acetyl_L_lys-1.1389*homoarginine	0.782
1137	2.04-0.033963*Tyr+0.055617*Phe-24.9724*GABA	0.782
1138	5.3367-0.018277*Thr-24.5831*GABA+2.6293*aAiBA	0.782
1139	5.0576-0.0099441*Gly-0.12304*Spermidine-1.1128*homoarginine	0.782
1140	5.096-0.11046*Trp+0.0060668*Lys-0.1875*Hypotaurine	0.782
1141	4.6405-0.022107*Thr+0.017075*Tyr-24.1242*GABA	0.782
1142	-1.6435-0.03054*Thr+9.3536*ADMA+0.63633*Spermidine	0.782
1143	6.5361-0.0054864*Gly-0.093269*Trp-0.034644*Sarcosine	0.782
1144	5.8298+0.01166*Met-0.1067*Trp-0.14792*bAiBA	0.782
1145	5.7855-0.10079*Trp-3.6103*aAiBA-0.12024*Hypotaurine	0.782
1146	3.3701-1.0983*homoarginine-0.51721*Hypotaurine+5.1193*Spermine	0.782
1147	6.6455-0.005872*Gly-0.094563*Trp-0.15572*Hypotaurine	0.782
1148	5.1303-0.0099003*Gly-2.1132*bABA-1.1205*homoarginine	0.782
1149	2.5378-0.0030689*Val+0.012001*Orn-1.0389*homoarginine	0.782
1150	4.7079+0.0090769*Leu-0.10945*Trp+0.92918*Putrescine	0.782

[図44]

No.	Formula	ROC_AUC
1151	3.1296+0.0037494*Arg-1.1599*homocysteine-0.38602*Hypotaurine	0.782
1152	5.4565-0.017688*Thr-0.0062735*Met-23.9823*GABA	0.782
1153	6.0155-0.0069251*Thr-0.092627*Trp-3.9224*aAiBA	0.782
1154	5.1731-0.019055*Thr-24.2905*GABA+0.23452*Hypotaurine	0.782
1155	5.1104-0.009936*Gly-0.00064397*Leu-1.1069*homocysteine	0.782
1156	4.8806-0.0098664*Gly-1.099*homocysteine+4.299*Spermine	0.782
1157	5.4205-0.018051*Thr-0.0020083*Asn-23.9613*GABA	0.781
1158	-1.3065-0.025532*Thr-0.04142*Met+9.8266*ADMA	0.781
1159	-1.352-0.031685*Thr-1.8146*Putrescine+9.4799*ADMA	0.781
1160	4.532-0.032712*Asn+8.508*Putrescine-27.9731*GABA	0.781
1161	4.5407-0.053942*Met+8.5693*Putrescine-28.6339*GABA	0.781
1162	2.7505-0.022323*Trp-0.87177*x3_Me_His+8.395*Cystathionine	0.781
1163	5.9752-0.10355*Trp-0.15023*bAiBA+0.0032336*Hypotaurine	0.781
1164	5.4532-0.10045*Trp+2.4852*Putrescine-5.3263*aAiBA	0.781
1165	5.9226-0.10319*Trp-0.15336*bAiBA+1.1841*bABA	0.781
1166	5.7282-0.10113*Trp-2.2441*bABA-3.7175*aAiBA	0.781
1167	2.1704+0.012425*Ser-0.027221*Met-1.1072*homocysteine	0.781
1168	7.1262-0.0032091*Gln-0.092501*Trp-0.14484*Hypotaurine	0.781
1169	5.9817-0.10358*Trp-0.14926*bAiBA-0.073025*aAiBA	0.781
1170	-1.5416-0.031304*Thr+0.0029728*Orn+9.0877*ADMA	0.781
1171	5.1907-0.0058996*Asn-0.0094966*Gly-1.0991*homocysteine	0.781
1172	6.9114-0.003219*Gln-0.091687*Trp-0.55348*bABA	0.781
1173	2.4242-0.0057385*Gly+0.030334*Phe-23.8876*GABA	0.781
1174	5.0283-0.010009*Gly-1.1161*homocysteine+0.0052473*Sarcosine	0.781
1175	4.6929-0.10837*Trp+0.0056208*Lys+0.28695*N_Acetyl_L_lys	0.781
1176	-2.5096-0.76685*x3_Me_His+9.4266*ADMA+9.8199*aAiBA	0.781
1177	2.1835-27.5888*GABA+16.7367*bABA+2.9911*Cystathionine	0.781
1178	6.5344-0.018093*Asn-0.097904*Trp-0.15543*bAiBA	0.781
1179	5.5546+0.00018409*Ala-0.10064*Trp-3.8743*aAiBA	0.781
1180	5.4374+0.013046*Met-0.10383*Trp-3.7117*aAiBA	0.781
1181	5.1226+0.0088206*Leu-0.10889*Trp-0.045035*Sarcosine	0.781
1182	4.6266-0.1093*Trp+0.0062201*Lys+1.437*Putrescine	0.781
1183	5.5718-0.017367*Thr-0.0016792*Gly-23.6827*GABA	0.780
1184	5.2579-0.0099108*Gly-0.0011177*Val-1.0967*homocysteine	0.780
1185	6.0982-0.00040007*Ala-0.10285*Trp-0.15393*bAiBA	0.780
1186	-1.4864-0.0732*Met-0.028687*Arg+11.187*ADMA	0.780
1187	5.0875-0.0013254*Thr-0.0095661*Gly-1.0993*homocysteine	0.780
1188	5.4243-0.018191*Thr-0.00038876*Lys-24.0121*GABA	0.780
1189	5.5756-0.016282*Thr-0.0049352*Arg-23.8325*GABA	0.780
1190	6.3304-0.0058951*Gly-0.093385*Trp+0.54187*Putrescine	0.780
1191	6.0761-0.0059531*Gly-0.093209*Trp+0.71549*N_Acetyl_L_lys	0.780
1192	4.728+0.0087847*Leu-0.10918*Trp+0.19395*N_Acetyl_L_lys	0.780
1193	5.8131-0.016688*Thr-0.0012001*Gln-23.5548*GABA	0.780
1194	-1.4932-0.03189*Thr+9.8443*ADMA-5.2749*aAiBA	0.780
1195	4.9901-0.0051055*Gln+0.017067*Orn-24.051*GABA	0.780
1196	5.9232-0.096429*Trp-0.0054489*Arg-3.9282*aAiBA	0.780
1197	-0.71961-0.02823*Thr-0.010737*Leu+9.8061*ADMA	0.780
1198	-1.4565-0.030618*Thr+9.5938*ADMA-0.18121*Hypotaurine	0.780
1199	5.2557-0.00054951*Gln-0.0095489*Gly-1.1023*homocysteine	0.780
1200	2.5171-0.03177*Met+0.013976*Orn-1.0283*homocysteine	0.780

[図45]

No.	Formula	ROC_AUC
1201	3.4637-0.095516*bAiBA-1.1324*homoarginine-0.25677*Hypotaurine	0.780
1202	5.4655-0.012954*Asn-0.096652*Trp+3.6176*Spermidine	0.779
1203	5.1455+0.0042639*Val-0.1099*Trp-4.1943*aAiBA	0.779
1204	3.1772-0.012228*Tyr-25.2356*GABA+3.597*Cystathionine	0.779
1205	6.5137-0.003643*Gln-0.09045*Trp+1.3214*N__Acetyl_L_lys	0.779
1206	5.4654+0.0049272*Val-0.11481*Trp-0.15908*bAiBA	0.779
1207	5.1439+0.0040773*Val-0.10725*Trp-0.18731*Hypotaurine	0.779
1208	5.4043+0.021345*Met-0.10461*Trp-0.21075*Hypotaurine	0.779
1209	-1.9353-0.0031166*Ala-0.034231*Arg+11.4591*ADMA	0.779
1210	4.6617-0.090186*Cit-0.040109*Met-0.080507*Sarcosine	0.779
1211	3.3565-0.0013776*Val-0.11452*bAiBA-1.0847*homoarginine	0.779
1212	5.0026+0.016715*Met-0.1017*Trp+0.96701*Putrescine	0.779
1213	2.9394-0.10998*bAiBA-1.0861*homoarginine+3.2121*Spermine	0.779
1214	3.2497+1.6133*Spermidine-1.1144*homoarginine-0.42661*Hypotaurine	0.779
1215	6.5384-0.005861*Gly-0.09464*Trp-2.7198*bABA	0.779
1216	5.3251+0.018165*Met-0.10409*Trp-3.9738*bABA	0.779
1217	3.3336-0.0048076*Gln+0.039231*Phe-23.2358*GABA	0.779
1218	3.216-0.00037669*Ala-0.11869*bAiBA-1.0971*homoarginine	0.779
1219	5.0656+0.0040104*Val-0.10759*Trp-3.7726*bABA	0.779
1220	4.6373-0.10372*Met+0.022709*Orn-25.5422*GABA	0.779
1221	4.4254-0.014344*Arg+8.454*Putrescine-28.3202*GABA	0.779
1222	2.9999-0.11375*bAiBA+0.67731*Spermidine-1.102*homoarginine	0.779
1223	5.9742-0.0065021*Thr-0.089602*Trp-0.042984*Sarcosine	0.778
1224	3.2237+0.00142*Leu-1.132*homoarginine-0.37542*Hypotaurine	0.778
1225	2.8734-25.1008*GABA-1.4202*N__Acetyl_L_lys+3.7248*Cystathionine	0.778
1226	3.6806-1.1057*homoarginine-0.42382*Hypotaurine-0.037304*Sarcosine	0.778
1227	5.0372-0.0035768*Gln+8.7127*Putrescine-27.7871*GABA	0.778
1228	3.0462+0.00039424*Leu-0.11458*bAiBA-1.1095*homoarginine	0.778
1229	2.4419-0.00035619*Orn-25.3973*GABA+3.3457*Cystathionine	0.778
1230	-1.6498-0.01231*Lys-0.026412*Arg+11.7517*ADMA	0.778
1231	1.8772-0.83951*x3_Me_His-0.51963*Hypotaurine+7.9284*Cystathionine	0.778
1232	3.3031+0.0028264*Met-1.1241*homoarginine-0.36941*Hypotaurine	0.778
1233	2.5374-0.0019469*Ile-25.3654*GABA+3.3803*Cystathionine	0.778
1234	2.55+0.043694*Phe-0.022944*Arg-24.0679*GABA	0.778
1235	3.07+0.00024151*Arg-0.1142*bAiBA-1.1083*homoarginine	0.778
1236	2.821+0.0022463*Arg-3.944*aAiBA-1.1308*homoarginine	0.778
1237	3.2044-0.1132*bAiBA-1.094*homoarginine-0.020515*Sarcosine	0.778
1238	4.918-0.016887*Thr-26.8372*GABA+17.7127*bABA	0.778
1239	-1.2725-0.031067*Thr+10.3169*ADMA-1.8371*N__Acetyl_L_lys	0.778
1240	1.9934-0.12584*Cit+0.03166*Orn+0.002945*bAiBA	0.778
1241	0.99829+0.012792*Pro-0.10932*Cit+7.2141*Putrescine	0.778
1242	1.9082-0.12615*Cit+0.031269*Orn+0.096451*Hypotaurine	0.778
1243	3.9572-0.10659*Met+0.031545*Ile-24.3067*GABA	0.778
1244	5.8771-0.099558*Trp-3.6093*aAiBA-0.043835*Sarcosine	0.778
1245	0.72003-0.90192*x3_Me_His+2.0785*N__Acetyl_L_lys+7.3892*Cystathionine	0.778
1246	3.0639+0.29685*Putrescine-0.11685*bAiBA-1.1044*homoarginine	0.778
1247	3.125-0.10146*bAiBA-1.314*aAiBA-1.1129*homoarginine	0.778
1248	3.4723-3.173*aAiBA-1.1389*homoarginine-0.32377*Hypotaurine	0.778
1249	6.0554-0.015747*Asn-0.094946*Trp-3.9391*aAiBA	0.777
1250	1.6337-0.12933*Cit+0.031541*Orn+5.8485*Putrescine	0.777

[図46]

No.	Formula	ROC_AUC
1251	2.262+0.0015368*Ser-25.4992*GABA+3.3364*Cystathionine	0.777
1252	-1.0779-0.061534*Asn-0.011543*Lys+11.1086*ADMA	0.777
1253	2.0122-0.12588*Cit+0.03168*Orn-0.11226*Spermidine	0.777
1254	5.4299+0.014498*Met-0.10075*Trp-0.04568*Sarcosine	0.777
1255	5.8678-0.094823*Trp-0.00581*Arg-3.7909*bABA	0.777
1256	3.3638-0.29564*bABA-1.1187*homoarginine-0.35982*Hypotaurine	0.777
1257	5.9355-0.0070484*Thr-0.091091*Trp-3.5448*bABA	0.777
1258	3.3073-0.013922*Thr+0.011154*Arg-1.0588*homoarginine	0.777
1259	4.3782-0.012143*Thr-0.14766*bAiBA-1.0078*homoarginine	0.777
1260	-1.7204-0.087357*Asn+9.8203*ADMA+9.6768*bABA	0.777
1261	1.9688-0.12743*Cit+0.030391*Orn+4.6976*aAiBA	0.777
1262	5.906-0.0066287*Thr-0.090803*Trp-0.12424*Hypotaurine	0.777
1263	3.2741+0.00026743*Ala-1.1251*homoarginine-0.36358*Hypotaurine	0.777
1264	5.8968-0.093044*Trp-0.0051352*Arg-0.045069*Sarcosine	0.777
1265	3.0173-2.7134*bABA-1.0708*homoarginine-0.024291*Sarcosine	0.777
1266	-1.7125-0.095265*Asn+0.015386*Ile+9.2371*ADMA	0.776
1267	4.9729-0.096957*Trp+0.54934*Putrescine+0.61551*N__Acetyl_L_lys	0.776
1268	3.0876-3.7799*aAiBA-1.0952*homoarginine-0.019831*Sarcosine	0.776
1269	-1.7429-0.11653*Asn+0.015617*Pro+8.5937*ADMA	0.776
1270	4.7318+0.0039904*Val-0.10563*Trp+1.0612*Putrescine	0.776
1271	4.8709+0.014145*Met-0.10104*Trp+0.58512*N__Acetyl_L_lys	0.776
1272	0.98127+0.032279*Phe-26.1018*GABA+14.3201*Spermine	0.776
1273	5.9123-0.098619*Trp-4.7422*bABA-0.049474*Sarcosine	0.776
1274	5.5395-0.096472*Trp+0.60381*Putrescine-0.045812*Sarcosine	0.776
1275	3.0175+0.92633*N__Acetyl_L_lys-1.1198*homoarginine-0.39954*Hypotaurine	0.776
1276	3.9794-0.018441*Asn-1.0647*homoarginine-0.28*Hypotaurine	0.776
1277	4.6309-0.0024763*Gln-1.0586*homoarginine-0.33805*Hypotaurine	0.776
1278	5.8484-0.094626*Trp-0.0051495*Arg-0.14454*Hypotaurine	0.776
1279	5.4953-0.0982*Trp+1.1198*Putrescine-0.1784*Hypotaurine	0.776
1280	3.3214+12.348*Putrescine-30.6398*GABA-0.12663*bAiBA	0.776
1281	3.4042-0.62387*Putrescine-1.1211*homoarginine-0.35385*Hypotaurine	0.776
1282	3.0194-0.11973*bAiBA+1.8431*bABA-1.1007*homoarginine	0.776
1283	2.5081-0.15253*bAiBA+1.6172*N__Acetyl_L_lys-1.113*homoarginine	0.776
1284	5.6727-0.0068801*Thr-0.089611*Trp+0.35642*Putrescine	0.775
1285	4.6892-0.0029324*Gln-0.12653*bAiBA-1.0454*homoarginine	0.775
1286	0.68458+0.0042267*Pro-0.82681*x3_Me_His+7.1777*Cystathionine	0.775
1287	3.549-0.0010521*Val-1.1013*homoarginine-0.35504*Hypotaurine	0.775
1288	5.2976-0.092785*Trp-0.0060801*Arg+0.81356*N__Acetyl_L_lys	0.775
1289	5.7151-0.099382*Trp-2.7276*bABA-0.14741*Hypotaurine	0.775
1290	5.2651-0.09821*Trp+0.81035*N__Acetyl_L_lys-0.19139*Hypotaurine	0.775
1291	3.3738-0.012252*Met-0.11833*bAiBA-1.0844*homoarginine	0.775
1292	5.4334-0.09889*Trp+1.4166*Putrescine-4.5158*bABA	0.775
1293	2.7553+0.0017519*Arg-1.0791*homoarginine-0.022412*Sarcosine	0.775
1294	2.7508-2.2491*bABA+0.80391*Spermidine-1.0782*homoarginine	0.775
1295	5.3813-0.007233*Thr-0.089057*Trp+0.78853*N__Acetyl_L_lys	0.775
1296	4.1065-0.0087096*Thr-1.0295*homoarginine-0.3063*Hypotaurine	0.775
1297	1.7941-0.0060996*Ser+0.034117*Phe-25.1963*GABA	0.775
1298	5.133+0.00027823*Ala-0.09761*Trp+0.93085*Putrescine	0.775
1299	4.9998+3.9171e-06*Ala-0.097032*Trp+0.66838*N__Acetyl_L_lys	0.775
1300	5.368-0.096526*Trp+0.5159*N__Acetyl_L_lys-0.044771*Sarcosine	0.775

[図47]

No.	Formula	ROC_AUC
1301	2.7198+0.0018143*Arg-2.1545*bABA-1.101*homoarginine	0.775
1302	3.0085-1.1631*Putrescine-1.0699*homoarginine-0.023326*Sarcosine	0.775
1303	2.6727-1.869*bABA-1.0603*homoarginine+4.0235*Spermine	0.775
1304	3.4098-0.031832*Asn+0.0092387*Arg-1.0952*homoarginine	0.775
1305	4.6976+0.0035591*Val-0.10482*Trp+0.42844*N_Acetyl_L_lys	0.775
1306	2.7971+0.00056415*Leu-2.3571*bABA-1.0879*homoarginine	0.775
1307	5.5518-0.093375*Trp-0.0053978*Arg+0.66164*Putrescine	0.775
1308	-3.2039-0.8293*x3_Me_His+12.6341*Putrescine+9.8268*ADMA	0.775
1309	3.004-0.68912*bABA-3.8425*aAiBA-1.1086*homoarginine	0.775
1310	2.2339+0.011957*Pro-0.10526*Cit-0.083607*Sarcosine	0.775
1311	3.6149+0.01483*Pro-0.027475*Arg-25.0162*GABA	0.775
1312	6.0159-0.0056838*Gly-0.0079429*Val-22.1149*GABA	0.775
1313	2.7374+0.0017246*Arg-1.066*Putrescine-1.0996*homoarginine	0.775
1314	1.877-0.12395*Cit+0.03142*Orn+2.967*Spermine	0.774
1315	2.9099-0.92662*Putrescine-1.3996*bABA-1.0861*homoarginine	0.774
1316	2.762-1.48*Putrescine+1.1312*Spermidine-1.0796*homoarginine	0.774
1317	2.7089-1.2899*Putrescine-1.0617*homoarginine+4.3759*Spermine	0.774
1318	2.7083-1.0424*homoarginine-0.020381*Sarcosine+4.0334*Spermine	0.774
1319	6.116-0.017201*Asn-0.090851*Trp-0.048837*Sarcosine	0.774
1320	5.5937+3.2128e-05*Ala-0.096688*Trp-0.046182*Sarcosine	0.774
1321	2.8272+0.00010542*Ala-1.0706*Putrescine-1.0844*homoarginine	0.774
1322	4.0405-0.087604*Cit-0.13971*x3_Me_His-0.077119*Sarcosine	0.774
1323	2.3676+0.0028515*Arg-1.081*homoarginine+4.4917*Spermine	0.774
1324	2.8891+0.665*Spermidine-3.839*aAiBA-1.1028*homoarginine	0.774
1325	4.1504-0.024845*Asn-0.12512*bAiBA-1.0527*homoarginine	0.774
1326	5.4524+0.00016356*Ala-0.098986*Trp-3.2749*bABA	0.774
1327	2.8047+0.00013238*Ala-2.0989*bABA-1.0854*homoarginine	0.774
1328	2.466+0.0023445*Arg+0.91415*Spermidine-1.093*homoarginine	0.774
1329	3.9867-0.051458*Asn+0.022273*Ile-23.3201*GABA	0.774
1330	4.3735-0.066712*Met-25.2598*GABA+1.8754*N_Acetyl_L_lys	0.774
1331	2.9895+8.5799*Putrescine-30.0739*GABA+2.4257*Spermidine	0.774
1332	5.6681-0.015657*Asn-0.091845*Trp+0.82853*Putrescine	0.773
1333	4.0759-0.0056195*Gly-24.0261*GABA+12.5878*Spermine	0.773
1334	2.9654+9.7231e-05*Leu-3.9057*aAiBA-1.1073*homoarginine	0.773
1335	2.9572+0.25272*Putrescine-4.058*aAiBA-1.1055*homoarginine	0.773
1336	1.6537+0.0058754*Pro-25.7541*GABA+2.924*Cystathionine	0.773
1337	-1.2364-0.0072406*Gly-0.030846*Arg+10.3501*ADMA	0.773
1338	5.5164+0.00023347*Ala-0.098788*Trp-0.16412*Hypotaurine	0.773
1339	3.1178-0.001389*Val-2.1362*bABA-1.0606*homoarginine	0.773
1340	2.8923-0.00010501*Leu-1.06*homoarginine-0.022658*Sarcosine	0.773
1341	4.3219-0.0063546*Lys+8.2971*Putrescine-28.6663*GABA	0.773
1342	2.8596+6.4468e-05*Ala-1.0628*homoarginine-0.022372*Sarcosine	0.773
1343	5.1574+0.0040575*Val-0.10561*Trp-0.04778*Sarcosine	0.773
1344	3.1614-0.0014335*Val-1.0387*homoarginine-0.022822*Sarcosine	0.773
1345	5.1874-0.099109*Trp-4.8754*bABA+0.9271*N_Acetyl_L_lys	0.773
1346	6.1395-0.098432*Trp-0.27055*Hypotaurine-0.055853*Sarcosine	0.773
1347	2.6813-0.49814*x3_Me_His-22.8964*GABA+5.6287*N_Acetyl_L_lys	0.773
1348	1.3893-0.8156*x3_Me_His-0.087805*bAiBA+7.5758*Cystathionine	0.773
1349	2.5782-3.7805*bABA+0.81167*N_Acetyl_L_lys-1.0875*homoarginine	0.773
1350	-1.9061-0.083222*Asn+9.9779*ADMA+9.5834*Spermine	0.773

[図48]

No.	Formula	ROC_AUC
1351	5.5255-0.0043641*Gly-0.055241*Met-23.1462*GABA	0.773
1352	4.5757-0.0067867*Val+8.5368*Putrescine-28.0613*GABA	0.773
1353	1.3566-0.89929*x3_Me_His+6.2833*aAiBA+7.4117*Cystathionine	0.773
1354	2.1491-0.0084536*Leu-0.78618*x3_Me_His+7.6661*Cystathionine	0.773
1355	2.8516+0.0001008*Leu-1.0989*Putrescine-1.0827*homoarginine	0.773
1356	5.3937-0.018369*Asn-0.090826*Trp+0.98474*N_Acetyl_L_lys	0.772
1357	4.4179-0.0040185*Gly-0.090704*Cit-0.073347*Sarcosine	0.772
1358	5.6979-0.0061457*Gly-0.010699*Leu-22.4571*GABA	0.772
1359	2.9302+0.00014754*Ala-3.8946*aAiBA-1.1104*homoarginine	0.772
1360	2.5296+0.00017185*Ala-1.0573*homoarginine+4.1388*Spermine	0.772
1361	3.1609-0.0014931*Val-1.1754*Putrescine-1.0592*homoarginine	0.772
1362	2.7925+0.63909*Spermidine-1.0585*homoarginine-0.021227*Sarcosine	0.772
1363	-1.1222-0.066847*Asn-0.046229*Met+9.9175*ADMA	0.772
1364	0.7162-0.090922*Cit+0.046896*Phe-0.18156*x3_Me_His	0.772
1365	2.675-0.00027611*Leu+0.80646*Spermidine-1.0668*homoarginine	0.772
1366	1.1063-0.81383*x3_Me_His+7.3215*Cystathionine+5.7562*Spermine	0.772
1367	3.5792+9.1629*Putrescine-29.7588*GABA-0.055529*Sarcosine	0.772
1368	2.9457+8.9879*Putrescine-30.0959*GABA+10.7015*Spermine	0.772
1369	5.8665-0.01496*Asn-0.093206*Trp-2.3219*bABA	0.772
1370	1.083+0.011978*Pro-0.10658*Cit+15.458*bABA	0.772
1371	-0.45798-0.0093393*Gly-0.10003*Met+9.3642*ADMA	0.772
1372	3.1923-0.0011377*Val-3.8457*aAiBA-1.0878*homoarginine	0.772
1373	4.3632-0.092257*Met+0.019852*Tyr-24.2864*GABA	0.772
1374	-1.5277-0.020238*Lys+8.4497*ADMA+2.5166*Cystathionine	0.772
1375	2.5973+9.1563e-05*Ala+0.0017161*Arg-1.0935*homoarginine	0.772
1376	2.6369-0.00052868*Leu-1.0478*homoarginine+4.1774*Spermine	0.772
1377	5.8856-0.014229*Asn-0.093136*Trp-0.1059*Hypotaurine	0.772
1378	3.8689-0.0075429*Gly+0.014121*Orn-24.215*GABA	0.772
1379	5.0818-0.0061281*Gly-0.24549*x3_Me_His-20.6745*GABA	0.772
1380	2.99-0.0064998*Met-2.0829*bABA-1.0696*homoarginine	0.772
1381	2.6297+0.0091659*Orn+9.2125*Putrescine-30.5233*GABA	0.772
1382	1.5601-0.8198*x3_Me_His-0.041047*Sarcosine+7.4274*Cystathionine	0.772
1383	0.075394-0.075038*Asn-0.0095291*Val+10.1454*ADMA	0.771
1384	3.8286+0.014092*Pro-0.014024*Lys-25.2393*GABA	0.771
1385	2.9595+0.00024712*Ala-0.0014784*Val-1.0572*homoarginine	0.771
1386	2.688+0.00017786*Ala+4.3543e-05*Leu-1.0785*homoarginine	0.771
1387	2.5796+0.00021392*Ala+0.80978*Spermidine-1.075*homoarginine	0.771
1388	1.2817+0.031464*Phe-26.2692*GABA+3.9136*aAiBA	0.771
1389	2.2714+2.1572*N_Acetyl_L_lys-7.6514*aAiBA-1.1336*homoarginine	0.771
1390	2.6936-1.8041*Spermidine-1.0483*homoarginine+7.1102*Spermine	0.771

[図49]

No.	Formula	ROC_AUC
1	6.9112+0.04262*Pro-0.28438*Cit+0.16408*Phe-0.25983*His-0.17659*Trp+26.6193*ADMA	0.976
2	7.255+0.033195*Pro-0.33041*Cit-0.19066*His-0.10964*Trp+30.0512*ADMA+7.8203*Cystathionine	0.969
3	8.6721+0.038543*Pro-0.20704*Cit-0.18413*His-0.1064*Trp-24.173*GABA+27.0608*ADMA	0.967
4	11.7224+0.045232*Pro-0.13516*Cit-0.24344*Met+0.28398*Phe-0.20493*His-0.18535*Trp	0.966
5	6.9719+0.035226*Pro-0.25352*Cit+0.030943*Leu-0.22025*His-0.13829*Trp+28.9695*ADMA	0.966
6	7.9674+0.035887*Pro-0.25078*Cit-0.23251*His-0.13896*Trp+0.024117*Lys+27.2676*ADMA	0.966
7	12.0801+0.038156*Pro-0.11708*Cit+0.22612*Phe-0.21709*His-0.20065*Trp-0.43018*baIBA	0.966
8	5.5505+0.027013*Ser+0.035174*Pro-0.2376*Cit-0.20831*His-0.11768*Trp+28.5738*ADMA	0.965
9	6.6087+0.032638*Pro-0.23689*Cit+0.057942*Tyr-0.19989*His-0.13511*Trp+26.183*ADMA	0.965
10	7.1758+0.04569*Pro-0.0076468*Ala-0.26528*Cit-0.19109*His-0.10408*Trp+31.2509*ADMA	0.965
11	7.1067+0.034808*Pro-0.25499*Cit-0.20842*His-0.11401*Trp+0.021884*Arg+28.1316*ADMA	0.964
12	2.8982+0.032791*Pro-0.212*Cit-0.22529*Met+0.16512*Phe-0.22908*His+21.485*ADMA	0.964
13	7.5303+0.036328*Pro-0.27016*Cit-0.20912*His-0.11161*Trp+0.034809*Orn+27.305*ADMA	0.964
14	6.4407+0.032777*Pro-0.24579*Cit+0.044987*Ile-0.20264*His-0.11862*Trp+27.4465*ADMA	0.963
15	4.0435+0.026909*Pro-0.1815*Cit+0.073829*Phe-0.21445*His-18.6901*GABA+21.2288*ADMA	0.963
16	6.0927+0.033549*Pro-0.24784*Cit+0.01238*Val-0.20958*His-0.12557*Trp+29.8649*ADMA	0.963
17	11.7715+0.036778*Pro-0.10323*Cit+0.18545*Phe-0.18705*His-0.16428*Trp-19.0694*GABA	0.963
18	5.8346+0.030321*Thr+0.033139*Pro-0.28273*Cit-0.19016*His+25.5556*ADMA+8.0975*Cystathionine	0.962
19	4.8447+0.036696*Pro-0.010731*Ala-0.30128*Cit-0.18314*His+27.7216*ADMA+6.8436*Cystathionine	0.962
20	5.818+0.0059113*Gln+0.036908*Pro-0.25456*Cit-0.21794*His-0.11241*Trp+28.6704*ADMA	0.962
21	6.4695+0.036108*Pro-0.21376*Cit-0.18757*His-0.10646*Trp-0.24664*3_MeHis+28.5363*ADMA	0.962
22	7.1261+0.036319*Pro-0.23711*Cit-0.19032*His-0.11122*Trp+29.657*ADMA-0.84614*Hypotaureine	0.962
23	11.48+0.021494*Thr+0.042571*Pro-0.12084*Cit+0.20194*Phe-0.19822*His-0.16816*Trp	0.962
24	10.5508+0.061462*Asn+0.041416*Pro-0.12284*Cit+0.2199*Phe-0.18874*His-0.17411*Trp	0.961
25	6.2076+0.038806*Pro-0.0079751*Ala-0.20725*Cit-0.19157*His-22.0522*GABA+26.9608*ADMA	0.961

[図50]

No.	Formula	ROC_AUC
26	5.9017+0.038288*Pro-0.24657*Cit-0.21099*His-0.10376*Trp+30.7151*ADMA+0.093632*Sarcosine	0.961
27	6.9035+0.036636*Pro-0.0031077*Gly-0.23161*Cit-0.1893*His-0.10332*Trp+28.0281*ADMA	0.961
28	9.6257+0.031982*Pro-0.12048*Cit+0.033927*Leu+0.17764*Phe-0.19426*His-0.17091*Trp	0.961
29	9.8162+0.032971*Pro-0.11302*Cit+0.17625*Phe-0.20701*His-0.17373*Trp+0.015066*Lys	0.961
30	3.2774+0.025634*Pro-0.20262*Cit+0.099059*Phe-0.21873*His+20.9952*ADMA-0.70205*homocysteine	0.961
31	6.9892+0.035225*Pro-0.2253*Cit-0.18857*His-0.11087*Trp+27.7916*ADMA-0.12641*bAla	0.961
32	6.5744-0.0098705*Thr+0.038808*Pro-0.23304*Cit-0.18586*His-0.10174*Trp+28.3549*ADMA	0.961
33	6.1187-0.021561*Thr+0.03582*Pro-0.17709*Cit-0.1843*His-23.6977*GABA+24.9008*ADMA	0.961
34	9.6336+0.036438*Pro-0.098887*Cit+0.19649*Phe-0.18867*His-0.166*Trp-0.25265*3_MeHis	0.961
35	10.0756+0.035596*Pro-0.10694*Cit+0.20263*Phe-0.19608*His-0.17229*Trp-15.5241*bAla	0.961
36	10.0398+0.034147*Pro-0.13466*Cit+0.19481*Phe-0.20693*His-0.16428*Trp+3.8263*N _ε -Acetyl_L_Lys	0.961
37	6.4768-0.0075384*Asn+0.036771*Pro-0.23402*Cit-0.19013*His-0.10234*Trp+28.3253*ADMA	0.960
38	10.5572+0.035266*Pro-0.001699*Gly-0.11654*Cit+0.19247*Phe-0.19739*His-0.16325*Trp	0.960
39	10.9079+0.036605*Pro-0.11825*Cit+0.19644*Phe-0.20586*His-0.16501*Trp-16.5826*Spermine	0.960
40	6.1549+0.028709*Pro-0.20362*Cit-0.20274*His+0.024668*Orn-21.6636*GABA+22.6972*ADMA	0.960
41	2.8689-0.063592*Asn+0.03087*Pro-0.20451*Cit+0.1023*Phe-0.21753*His+21.66*ADMA	0.960
42	6.0201+0.029344*Pro-0.17847*Cit-0.17485*His-22.9141*GABA+23.6129*ADMA-0.57734*homocysteine	0.960
43	4.2337-0.021579*Thr+0.030924*Pro-0.19331*Cit+0.090208*Phe-0.22477*His+20.2131*ADMA	0.960
44	4.9311+0.036939*Pro-0.0084118*Ala-0.24949*Cit-0.20204*His+0.025566*Orn+25.5856*ADMA	0.960
45	6.5162+0.035745*Pro-0.23485*Cit+0.027248*Met-0.19638*His-0.10626*Trp+27.895*ADMA	0.960
46	10.5663+0.035081*Pro-0.12052*Cit+0.19345*Phe-0.19625*His-0.16439*Trp-0.041743*Sarcosine	0.960
47	6.4888+0.036365*Pro-0.23704*Cit-0.19276*His-0.10182*Trp+28.0026*ADMA+4.4618*bAla	0.960
48	5.4464+0.026225*Pro-0.22419*Cit-0.18325*His-20.172*GABA+23.8971*ADMA+4.2275*Cystathionine	0.960
49	9.8861+0.03396*Pro-0.11771*Cit+0.0045015*Val+0.19315*Phe-0.19942*His-0.17045*Trp	0.960
50	10.0045+0.032679*Pro-0.12656*Cit+0.17385*Phe-0.19061*His-0.16159*Trp+0.021454*Orn	0.960

[51]

No.	Formula	ROC_AUC
51	10.143+0.034869*Pro-0.12307*Cit+0.19159*Phe-0.19363*His-0.16589*Trp+2.7755*Putrescine	0.960
52	6.4855+0.036302*Pro-0.23327*Cit-0.19194*His-0.10319*Trp+28.2153*ADMA-0.15957*N ϵ _Acetyl_L_lys	0.960
53	10.1522+0.034945*Pro-0.11597*Cit+0.19329*Phe-0.19687*His-0.16382*Trp	0.960
54	6.4792+0.036251*Pro-0.23389*Cit-0.19207*His-0.10319*Trp+28.1772*ADMA	0.960
55	8.9559+0.0039979*Gln+0.034773*Pro-0.12519*Cit+0.18876*Phe-0.20414*His-0.16368*Trp	0.960
56	5.1147+0.0043916*Gln+0.028501*Pro-0.18981*Cit-0.20889*His-23.4349*GABA+23.5149*ADMA	0.960
57	10.15+0.034924*Pro+3.3698e-05*Ala-0.11597*Cit+0.19335*Phe-0.19699*His-0.16386*Trp	0.960
58	2.8592+0.024926*Pro-0.17613*Cit+0.089243*Phe-0.22621*His-0.30084*3_MeHis+21.1358*ADMA	0.960
59	3.0878+0.025822*Pro-0.18898*Cit+0.096626*Phe-0.23285*His+21.3662*ADMA-0.98648*Hypotaurine	0.960
60	6.4997+0.036236*Pro-0.23348*Cit-0.19239*His-0.1031*Trp-0.17773*Putrescine+28.1826*ADMA	0.960
61	6.5384+0.03619*Pro-0.23344*Cit-0.19233*His-0.10302*Trp+28.1549*ADMA-0.41352*Spermidine	0.960
62	6.5055+0.036683*Pro-0.23985*Cit-0.19389*His-0.10152*Trp+28.2387*ADMA+3.2231*aAiBA	0.960
63	6.1322+0.029545*Pro-0.19554*Cit-0.18912*His-29.0024*GABA+23.0617*ADMA+30.4083*bABA	0.960
64	5.0706-0.19376*Cit+0.059148*Ile+0.11949*Phe-0.1712*His-0.12676*Trp+17.4608*ADMA	0.960
65	10.0916+0.034722*Pro-0.11555*Cit+0.0073003*Tyr+0.18862*Phe-0.19668*His-0.16644*Trp	0.959
66	10.1777+0.035145*Pro-0.11877*Cit+0.1936*Phe-0.19782*His-0.16329*Trp+1.8328*aAiBA	0.959
67	6.4297+0.036172*Pro-0.23067*Cit-0.18741*His-0.097459*Trp+27.7811*ADMA-0.18145*homoarginine	0.959
68	6.6668+0.03642*Pro-0.23386*Cit-0.19358*His-0.10309*Trp+28.1211*ADMA-3.2591*Spermine	0.959
69	8.8115+0.017828*Ser+0.032128*Pro-0.10602*Cit+0.18661*Phe-0.19989*His-0.1628*Trp	0.959
70	10.0759+0.034975*Pro-0.11467*Cit+0.19469*Phe-0.19282*His-0.15703*Trp-0.26585* ^h homoarginine	0.959
71	10.1978+0.033979*Pro-0.12265*Cit+0.18995*Phe-0.19407*His-0.16249*Trp+1.012*Cystathionine	0.959
72	5.6292+0.028781*Pro-0.17185*Cit-0.19205*His-0.12239*3_MeHis-20.6228*GABA+23.977*ADMA	0.959
73	1.9556+0.014543*Ser+0.023616*Pro-0.19359*Cit+0.08541*Phe-0.23751*His+21.0288*ADMA	0.959
74	5.5886-0.030769*Asn+0.032135*Pro-0.18458*Cit-0.18515*His-21.6699*GABA+24.8967*ADMA	0.959
75	9.9519+0.034147*Pro-0.12042*Cit+0.19034*Phe-0.19823*His-0.16602*Trp+0.0090154*Arg	0.959

[52]

No.	Formula	ROC_AUC
76	2.3199+0.026196*Pro-0.20278*Cit+0.083983*Phe-0.23899*His+22.5243*ADMA+0.069847*Sarcosine	0.959
77	3.6254+0.033617*Pro-0.0072849*Ala-0.21941*Cit+0.081358*Phe-0.22361*His+23.1704*ADMA	0.959
78	10.1086+0.034354*Pro-0.11708*Cit+0.0081574*Leu+0.18648*Phe-0.19885*His-0.16912*Trp	0.959
79	5.3225+0.027154*Pro-0.1844*Cit+0.018935*Ile-0.196*His-22.4426*GABA+23.5316*ADMA	0.959
80	11.2846+0.036211*Pro-0.10232*Cit+0.21264*Phe-0.20587*His-0.17144*Trp-1.5422*Hypotaurine	0.959
81	3.287+0.025286*Pro-0.20816*Cit+0.075866*Phe-0.23148*His+0.013104*Orn+20.6216*ADMA	0.959
82	5.0264+0.029999*Pro-0.18639*Cit-0.20325*His-20.6962*GABA+25.3381*ADMA+0.063901*Sarcosine	0.959
83	10.9525+0.036168*Pro-0.25003*Met+0.25811*Phe-0.20427*His-0.18052*Trp-0.51692*AiBA	0.959
84	5.5691-0.26838*Cit+0.12947*Phe-0.16162*His-0.11206*Trp+20.528*ADMA+8.34*Cystathionine	0.959
85	3.5764+0.023533*Pro-0.23276*Cit-0.17796*His-0.5362*3_MeHis+25.4357*ADMA+7.0037*Cystathionine	0.958
86	4.7777-0.20152*Cit+0.019279*Val+0.13392*Phe-0.18959*His-0.1422*Trp+20.0325*ADMA	0.958
87	5.0395+0.012608*Ser+0.027209*Pro-0.1762*Cit-0.19928*His-21.7854*GABA+23.552*ADMA	0.958
88	5.4848+0.028708*Pro+0.15426*Phe-0.18849*His-0.14959*Trp-0.6803*3_MeHis+9.6388*ADMA	0.958
89	12.5154+0.030071*Pro+0.1738*Phe-0.19574*His-0.17987*Trp-20.6136*GABA-0.40266*AiBA	0.958
90	5.9837+0.029864*Pro-0.0036164*Gly-0.18032*Cit-0.19217*His-21.1427*GABA+24.2289*ADMA	0.958
91	5.6152+0.031008*Pro-0.18209*Cit-0.045516*Met-0.18651*His-22.3226*GABA+24.9537*ADMA	0.958
92	10.7286+0.034624*Pro-0.11293*Cit+0.20155*Phe-0.20459*His-0.16241*Trp-6.1278*Spermidine	0.958
93	5.4301+0.029899*Pro-0.18746*Cit-0.19501*His-22.5188*GABA+24.6467*ADMA+0.069177*AiBA	0.958
94	8.5047+0.040164*Pro-0.22181*Met+0.23897*Phe-0.16545*His-0.16458*Trp-0.64794*3_MeHis	0.958
95	2.2277+0.003441*Gln+0.024734*Pro-0.20668*Cit+0.085967*Phe-0.24188*His+20.8723*ADMA	0.958
96	4.9837+0.038197*Pro-0.0080856*Ala-0.2257*Cit-0.18062*His+26.5257*ADMA-0.55942*homoarginine	0.958
97	3.0607+0.025422*Pro-0.19399*Cit+0.087477*Phe-0.2335*His-1.9416*Putrescine+21.0173*ADMA	0.958
98	3.5655+0.02472*Pro-0.19279*Cit+0.090835*Phe-0.23443*His+20.7794*ADMA-5.9209*Spermidine	0.958
99	3.0298+0.024331*Pro-0.22231*Cit+0.075896*Phe-0.22336*His+21.6013*ADMA+2.3318*Cystathionine	0.958
100	5.6551+0.030699*Pro-0.19781*Cit-0.19593*His-22.4991*GABA+24.3784*ADMA+10.2545*AiBA	0.958

[53]

No.	Formula	ROC_AUC
101	3.2534+0.027227*Pro-0.21507*Cit+0.085843*Phe-0.23587*His+21.0395*ADMA+9.7723*aAiBA	0.958
102	5.2754+0.029307*Pro-0.18758*Cit-0.18589*His+4.842*Putrescine-24.3875*GABA+23.8452*ADMA	0.958
103	5.7939+0.029275*Pro-0.17842*Cit-0.19233*His-21.857*GABA+24.4009*ADMA-0.44337*Hypotaurine	0.958
104	4.827-0.012812*Thr+0.038654*Pro-0.0072612*Ala-0.22035*Cit-0.18666*His+26.6325*ADMA	0.957
105	3.6766+0.028796*Pro-0.19755*Cit-0.008953*Val+0.097095*Phe-0.22748*His+20.6595*ADMA	0.957
106	3.1209+0.027793*Pro-0.20228*Cit-0.017902*Leu+0.10769*Phe-0.2269*His+21.3497*ADMA	0.957
107	5.5759+0.02916*Pro-0.1814*Cit-0.19308*His-21.815*GABA+24.0707*ADMA	0.957
108	4.7111+0.036303*Pro-0.008481*Ala-0.2051*Cit-0.19221*His-0.30622*3_MeHis+27.612*ADMA	0.957
109	5.5903+0.029219*Pro-0.18128*Cit-0.000187*Val-0.19284*His-21.8115*GABA+24.0647*ADMA	0.957
110	3.0714+0.026559*Pro-0.19844*Cit-0.010803*Ile+0.091645*Phe-0.23138*His+21.1969*ADMA	0.957
111	3.3762+0.027637*Pro-0.20227*Cit-0.029411*Tyr+0.10806*Phe-0.2344*His+21.4795*ADMA	0.957
112	5.559+0.029055*Pro-0.18131*Cit+0.001004*Tyr-0.19325*His-21.7536*GABA+24.0094*ADMA	0.957
113	2.974+0.025225*Pro-0.19598*Cit+0.086767*Phe-0.23025*His+20.7449*ADMA-0.014037*bAiBA	0.957
114	3.6167+0.025854*Pro-0.19737*Cit+0.087346*Phe-0.23599*His+20.6311*ADMA-11.3809*Spermine	0.957
115	5.5742+0.029087*Pro-0.18132*Cit-0.19369*His+0.00043562*Lys-21.7345*GABA+24.0017*ADMA	0.957
116	5.55+0.029611*Pro-0.17892*Cit-0.19024*His-0.0035286*Arg-22.4147*GABA+24.2183*ADMA	0.957
117	6.0745+0.02952*Pro-0.18216*Cit-0.19747*His-21.8975*GABA+24.0368*ADMA-6.8461*Spermine	0.957
118	2.9647+0.025353*Pro-0.19739*Cit+0.086548*Phe-0.23073*His+20.8471*ADMA	0.957
119	5.4507+0.028587*Pro-0.18196*Cit+0.004472*Leu-0.196*His-21.8487*GABA+23.8812*ADMA	0.957
120	2.8576+0.026114*Pro-0.19549*Cit+0.087624*Phe-0.22997*His+21.398*ADMA-1.2277*N ϵ _Acetyl_L_Lys	0.957
121	5.6078+0.029266*Pro-0.18056*Cit-0.19314*His-21.7562*GABA+24.13*ADMA-0.27219*N ϵ _Acetyl_L_Lys	0.957
122	3.3793+0.02585*Pro-0.0023188*Gly-0.19506*Cit+0.085697*Phe-0.22961*His+20.6933*ADMA	0.957
123	3.9535+0.037237*Pro-0.0074052*Ala-0.23056*Cit-0.20465*His+28.1509*ADMA+0.060432*Sarcosine	0.957
124	5.4057+0.029324*Pro-0.18225*Cit-0.19217*His-22.2118*GABA+24.0841*ADMA+1.4382*Spermidine	0.957
125	7.4621-0.17098*Cit+0.16185*Phe-0.17784*His-0.12503*Trp+18.9389*ADMA-1.7795*Hypotaurine	0.957

[図54]

No.	Formula	ROC_AUC
126	5.2799-0.25379*Cit-0.098299*His-0.088743*Trp-0.77757*3_MeHis+27.1654*ADMA+12.7185*Cystathionine	0.957
127	4.3707+0.036162*Pro-0.0086491*Ala-0.22787*Cit-0.20882*His+0.011174*Lys+25.8648*ADMA	0.957
128	3.0012+0.02584*Pro-0.19903*Cit+0.093658*Phe-0.22672*His-0.0049911*Lys+21.1406*ADMA	0.957
129	2.9547+0.025508*Pro-0.19652*Cit+0.087102*Phe-0.23011*His-0.00128*Arg+20.8463*ADMA	0.956
130	4.5926+0.037752*Pro-0.0076799*Ala-0.23829*Cit-0.19688*His+26.812*ADMA+7.3821*aAiBA	0.956
131	3.0862+0.025463*Pro-0.20119*Cit+0.084706*Phe-0.23083*His+20.742*ADMA+4.8922*bABA	0.956
132	9.5628+0.032679*Pro+0.19668*Phe-0.19043*His-0.18368*Trp-0.50806*3_MeHis-0.33294*bAiBA	0.956
133	7.3708+0.029078*Pro+0.17248*Phe-0.22142*His-0.14438*Trp+8.8657*ADMA-2.4538*Hypotaourine	0.956
134	2.7205-0.026541*Thr+0.030895*Ser+0.030375*Pro-0.18585*Cit-0.20084*His+24.4426*ADMA	0.956
135	4.9582-0.020364*Thr+0.032163*Pro-0.22146*Cit-0.20125*His+0.02955*Orn+23.3659*ADMA	0.956
136	3.6307-0.017791*Thr+0.033441*Pro-0.20158*Cit-0.20737*His+26.7551*ADMA+0.09909*Sarcosine	0.956
137	4.5773+0.036256*Pro-0.0077874*Ala-0.22285*Cit-0.19178*His+27.1001*ADMA-0.39793*Hypotaourine	0.956
138	4.8016+0.036159*Pro-0.0077757*Ala-0.22385*Cit-0.19503*His+26.7684*ADMA-2.5171*Spermidine	0.956
139	7.5399+0.032091*Pro+0.1204*Phe-0.18844*His-0.12714*Trp-25.7005*GABA+7.8499*ADMA	0.956
140	7.2394+0.025706*Pro+0.16374*Phe-0.20682*His-0.16355*Trp+6.9092*ADMA-0.45429*bAiBA	0.956
141	6.4142-0.22029*Cit+0.13484*Phe-0.19099*His-0.12077*Trp+0.029945*Arg+18.9336*ADMA	0.956
142	7.027-0.16637*Cit+0.13658*Phe-0.16142*His-0.10253*Trp-12.8952*GABA+17.0837*ADMA	0.956
143	4.4714-0.010135*Asn+0.037112*Pro-0.0076355*Ala-0.22555*Cit-0.1911*His+26.9638*ADMA	0.955
144	4.6346+0.03649*Pro-0.0078837*Ala-0.22302*Cit-0.19609*His-1.5228*Putrescine+26.9151*ADMA	0.955
145	4.5004+0.03668*Pro-0.0075998*Ala-0.22983*Cit-0.19456*His+26.4612*ADMA+6.7951*bABA	0.955
146	4.4684+0.025673*Pro-0.25209*Cit-0.18175*His+24.7925*ADMA-0.54688*homocysteine+4.9165*Cystathionine	0.955
147	8.1664+0.035555*Pro-0.27923*Met+0.19872*Phe-0.20704*His-0.16268*Trp+0.028972*Lys	0.955
148	5.4371-0.15879*Cit+0.15267*Phe-0.16825*His-0.11811*Trp-0.53268*3_MeHis+20.7447*ADMA	0.955
149	7.1115-0.17156*Cit+0.18059*Phe-0.18545*His-0.1528*Trp+18.9388*ADMA-0.44626*bAiBA	0.955
150	8.5134+0.025801*Ser+0.026085*Pro+0.18013*Phe-0.21301*His-0.18248*Trp-0.41829*bAiBA	0.955

[55]

No.	Formula	ROC_AUC
151	4.2161-0.042703*Asn+0.028587*Pro-0.25772*Cit-0.18326*His+25.5144*ADMA+5.619*Cystathionine	0.955
152	6.439-0.25996*Cit+0.060882*Ile-0.13381*His-0.098387*Trp+20.6501*ADMA+7.9994*Cystathionine	0.955
153	6.2889-0.26369*Cit+0.06534*Trp-0.1341*His-0.10948*Trp+21.4352*ADMA+8.4003*Cystathionine	0.955
154	4.0178-0.020709*Thr+0.029869*Pro-0.18846*Cit+0.028809*Trp-0.19354*His+22.874*ADMA	0.955
155	3.5624+0.014651*Ser+0.034061*Pro-0.0073486*Ala-0.2209*Cit-0.20077*His+26.4581*ADMA	0.955
156	3.6797+0.015865*Ser+0.025494*Pro-0.2179*Cit-0.2204*His+0.022977*Orn+23.0933*ADMA	0.955
157	3.9573+0.030624*Ser-0.18454*Cit+0.13373*Phe-0.18248*His-0.11289*Trp+18.5178*ADMA	0.955
158	4.5017-0.04775*Asn+0.030843*Pro-0.22735*Cit-0.19754*His+0.030412*Orn+23.8714*ADMA	0.955
159	4.9001+0.026938*Pro-0.20439*Cit-0.21142*His+0.027056*Orn-0.29322*3_MeHis+23.2948*ADMA	0.955
160	5.1428+0.010621*Gln-0.3319*Cit-0.15641*His-0.08961*Trp+23.6427*ADMA+12.1142*Cystathionine	0.955
161	4.2726+0.03528*Pro-0.0078517*Ala-0.22347*Cit+0.013148*Trp-0.19595*His+26.0444*ADMA	0.955
162	5.6866+0.029026*Pro-0.0081482*Gly-0.19184*Cit-0.17553*His+23.6299*ADMA-0.72103*homoarginine	0.955
163	4.6879+0.03751*Pro-0.0079045*Ala-0.22586*Cit-0.0023415*Val-0.19181*His+26.8655*ADMA	0.955
164	4.2275+0.03456*Pro-0.0080971*Ala-0.22559*Cit+0.019289*Ile-0.19627*His+25.9522*ADMA	0.955
165	4.4492+0.025161*Pro-0.25261*Cit-0.20302*His+0.018307*Orn+23.5001*ADMA+3.7599*Cystathionine	0.955
166	10.709+0.039943*Pro-0.20838*Met+0.2122*Phe-0.18048*His-0.14627*Trp-24.0911*GABA	0.955
167	7.1427-0.18424*Cit+0.088245*Ile-0.13629*His-0.092098*Trp-20.6967*GABA+20.0434*ADMA	0.955
168	7.7548-0.27474*Cit-0.1556*His-0.11219*Trp+0.027072*Lys+20.6185*ADMA+9.8912*Cystathionine	0.955
169	3.3146+0.016115*Ser+0.02305*Pro-0.23964*Cit-0.20352*His+24.0719*ADMA+4.5245*Cystathionine	0.954
170	4.9594+0.036753*Pro-0.0030543*Gly-0.0077902*Ala-0.22168*Cit-0.19201*His+26.5378*ADMA	0.954
171	8.2316-0.25009*Cit-0.10212*His-0.083169*Trp-16.3495*GABA+21.5437*ADMA+9.7375*Cystathionine	0.954
172	4.4656+0.036565*Pro-0.0078486*Ala-0.22565*Cit-0.19383*His+26.7936*ADMA	0.954
173	3.1169+0.0057676*Gln+0.023708*Pro-0.27151*Cit-0.2149*His+24.3383*ADMA+5.7158*Cystathionine	0.954
174	4.3877+0.035977*Pro-0.0078207*Ala-0.22469*Cit+0.0032307*Leu-0.1959*His+26.5661*ADMA	0.954
175	3.6454+0.026064*Pro-0.24752*Cit-0.20453*His+25.6612*ADMA+0.05894*Sarcosine+4.5106*Cystathionine	0.954

[56]

No.	Formula	ROC_AUC
176	9.4108+0.026152*Pro+0.17246*Phe-0.20928*His-0.18318*Trp+0.011337*lys-0.38785*bAiBA	0.954
177	5.6795+0.0051594*Ala-0.18153*Cit+0.15098*Phe-0.18985*His-0.11845*Trp+17.5045*ADMA	0.954
178	5.3747-0.19225*Cit+0.047885*Trp+0.11892*Phe-0.17019*His-0.12883*Trp+18.256*ADMA	0.954
179	8.2626-0.33677*Cit-0.15764*His-0.099211*Trp+0.042181*Arg+23.7823*ADMA+11.1113*Cystathionine	0.954
180	4.4696+0.036431*Pro-0.0079781*Ala-0.22606*Cit+0.0094188*Met-0.19572*His+26.7393*ADMA	0.954
181	4.7802+0.036792*Pro-0.0078274*Ala-0.22609*Cit-0.19633*His+26.7503*ADMA-5.5698*Spermine	0.954
182	4.8878+0.025173*Pro-0.23752*Cit-0.22583*His+0.028388*Orn+0.016182*Arg+22.6374*ADMA	0.954
183	4.295+0.026319*Pro-0.25476*Cit-0.19973*His+24.6502*ADMA+5.7198*aAiBA+4.5605*Cystathionine	0.954
184	6.3854-0.27127*Cit+0.034527*Leu-0.14375*His-0.1026*Trp+22.085*ADMA+9.1578*Cystathionine	0.954
185	4.4956-0.024837*Thr+0.031696*Pro-0.18957*Cit-0.21143*His+0.016392*lys+22.7114*ADMA	0.954
186	11.4014-0.023629*Thr+0.036507*Pro+0.15201*Phe-0.17476*His-0.14108*Trp-23.0874*GABA	0.954
187	4.655+0.036181*Pro-0.0081877*Ala-0.21975*Cit-0.19209*His+26.4777*ADMA-0.072072*bAiBA	0.954
188	4.4566+0.036793*Pro-0.0078216*Ala-0.22504*Cit-0.19381*His+26.9945*ADMA-0.41038*N ε_Acetyl_L_lys	0.954
189	4.0344+0.02605*Pro-0.25129*Cit-0.19311*His+25.6401*ADMA-2.1489*N ε_Acetyl_L_lys+5.403*Cystathionine	0.954
190	4.4907+0.025155*Pro-0.24818*Cit-0.19372*His+25.1137*ADMA-0.78541*Hypotaurine+5.4934*Cystathionine	0.954
191	5.9034-0.18236*Cit+0.021566*Leu+0.12068*Phe-0.17707*His-0.12306*Trp+17.8717*ADMA	0.954
192	5.033-0.01685*Thr+0.031017*Pro-0.19108*Cit-0.19311*His+24.4005*ADMA-4.6758*Spermidine	0.954
193	3.4677+0.017716*Ser+0.025852*Pro-0.19423*Cit-0.19522*His+23.7096*ADMA-0.54783*homocysteine	0.954
194	4.2297+0.023578*Pro-0.25823*Cit-0.20235*His+0.010724*Arg+24.3836*ADMA+4.9577*Cystathionine	0.954
195	4.2852-0.0161*Thr+0.03077*Pro-0.17317*Cit-0.18695*His-0.24952*3_MeHis+24.7055*ADMA	0.953
196	2.4933+0.017699*Ser+0.026433*Pro-0.20065*Cit-0.22315*His+25.6571*ADMA+0.082035*Sarcosine	0.953
197	3.6483+0.0049798*Gln+0.036215*Pro-0.0083532*Ala-0.24012*Cit-0.21317*His+26.9801*ADMA	0.953
198	4.6532+0.028196*Pro-0.27751*Cit-0.11243*Met-0.17872*His+26.2026*ADMA+7.7359*Cystathionine	0.953
199	3.7668+0.029563*Pro-0.19054*Cit-0.19767*His-0.47705*3_MeHis+25.4391*ADMA+18.3232*aAiBA	0.953
200	11.4881-0.02658*Thr+0.033318*Pro+0.18524*Phe-0.19827*His-0.17218*Trp-0.46032*bAiBA	0.953

[57]

No.	Formula	ROC_AUC
201	4.7867+0.034695*Ser-0.2656*Cit-0.13865*His-0.086642*Trp+23.4034*ADMA+8.7841*Cystathionine	0.953
202	4.6689+0.027578*Pro-0.21703*Cit-0.196*His+0.020232*Orn+23.1534*ADMA-0.45858*homocysteine	0.953
203	4.2842+0.025314*Pro-0.26253*Cit-0.19626*His+24.1261*ADMA+15.6402*bABA+4.9654*Cystathionine	0.953
204	4.7902+0.025388*Pro-0.25262*Cit-0.19995*His+24.4672*ADMA+5.1843*Cystathionine-11.5139*Spermine	0.953
205	8.2289+0.037305*Pro-0.19978*Met+0.2383*Phe-0.18697*His-0.15683*Trp-33.6303*bABA	0.953
206	9.3138+0.024319*Pro+0.032852*Ile+0.17275*Phe-0.20435*His-0.18225*Trp-0.4362*bABA	0.953
207	7.7995+0.030114*Pro+0.16376*Phe-0.18688*His-0.17149*Trp+0.014068*His-0.53725*3_MeHis	0.953
208	9.541+0.032678*Pro+0.1948*Phe-0.18686*His-0.16547*Trp-0.49703*3_MeHis-1.4638*Hypotaurine	0.953
209	11.7335+0.030144*Pro+0.17603*Phe-0.19287*His-0.15382*Trp-18.8053*GABA-1.6564*Hypotaurine	0.953
210	5.6996+0.029921*Pro+0.16515*Phe-0.20237*His-0.16176*Trp+8.5213*ADMA-44.0649*bABA	0.953
211	6.8121+0.032628*Ser+0.032313*Pro-0.21036*Met+0.19942*Phe-0.19951*His-0.13811*Trp	0.953
212	10.4355-0.078424*Asn+0.032269*Pro+0.21302*Phe-0.19271*His-0.17911*Trp-0.45805*bABA	0.953
213	4.5746+0.035172*Pro-0.0076985*Ala-0.23116*Cit-0.19989*His+0.0081892*Arg+26.585*ADMA	0.953
214	4.0742+0.024724*Pro-0.24761*Cit+0.0014575*Leu-0.19582*His+24.4195*ADMA+4.8639*Cystathionine	0.953
215	4.6068+0.028784*Pro-0.23836*Cit-0.21563*His+0.024951*Orn+23.4362*ADMA+9.6195*aABA	0.953
216	3.9511+0.028183*Pro-0.22487*Cit-0.2208*His+0.022977*Orn+24.5862*ADMA+0.068088*Sarcosine	0.953
217	4.9925+0.027317*Pro-0.22223*Cit-0.215*His+0.025144*Orn+23.0371*ADMA-8.041*Spermine	0.953
218	4.4079+0.026462*Pro-0.19407*Cit-0.19876*His+0.011733*His+22.3432*ADMA-0.65626*homocysteine	0.953
219	4.5407+0.027882*Pro-0.19298*Cit-0.17742*His+24.651*ADMA-0.65058*homocysteine-0.81361*Hypotaurine	0.953
220	10.1869+0.03843*Pro-0.19599*Met+0.2612*Phe-0.20476*His-0.16857*Trp-2.1987*Hypotaurine	0.953
221	4.5756-0.018595*Thr+0.029785*Pro-0.20442*Cit-0.19932*His+0.01583*Arg+23.9286*ADMA	0.952
222	4.4534-0.033428*Asn+0.031008*Pro-0.19751*Cit-0.17495*His+24.5508*ADMA-0.59752*homocysteine	0.952
223	4.4436+0.025273*Pro-0.0024458*Gly-0.24459*Cit-0.19293*His+24.354*ADMA+4.7892*Cystathionine	0.952
224	4.1303+0.026898*Pro-0.19703*Cit+0.0073471*Leu-0.18946*His+23.6398*ADMA-0.57443*homocysteine	0.952
225	4.4402+0.026785*Pro-0.22001*Cit-0.21195*His+0.024014*Orn+0.0013116*His+22.9781*ADMA	0.952

[58]

No.	Formula	ROC_AUC
226	4.8002+0.027132*Pro-0.22056*Cit-0.20975*His+0.026521*Orn+23.4913*ADMA-0.59723*Hypotaurine	0.952
227	4.4694+0.02716*Pro-0.17462*Cit-0.18011*His-0.28241*3_McHis+24.1386*ADMA-0.58756*homocysteine	0.952
228	9.1207+0.038871*Pro-0.26319*Met+0.24596*Phe-0.19023*His-0.15922*Trp-20.7308*aAiBA	0.952
229	6.2733-0.18175*Cit+0.12558*Phe-0.18173*His-0.12288*Trp+0.01517*Lys+16.8817*ADMA	0.952
230	5.6826-0.17252*Cit+0.14547*Phe-0.16871*His-0.11221*Trp+18.2522*ADMA-11.2403*aAiBA	0.952
231	6.94-0.26668*Cit-0.10857*His-0.097355*Trp+23.3317*ADMA-18.4675*aAiBA+11.6783*Cystathionine	0.952
232	2.6956+0.027025*Ser-0.056395*Asn+0.029119*Pro-0.19898*Cit-0.20107*His+25.4398*ADMA	0.952
233	3.7268+0.0034294*Gln+0.027423*Pro-0.2056*Cit-0.19775*His+23.819*ADMA-0.54901*homocysteine	0.952
234	4.5533+0.029161*Pro-0.22846*Cit-0.063206*Met-0.20161*His+0.029818*Orn+23.9809*ADMA	0.952
235	4.3072+0.026031*Pro-0.22027*Cit+0.0082379*Ile-0.21131*His+0.023802*Orn+22.8412*ADMA	0.952
236	4.6018+0.026936*Pro-0.219*Cit-0.21252*His+0.024765*Orn-1.2624*Putrescine+23.2181*ADMA	0.952
237	3.6345+0.029568*Pro-0.20415*Cit-0.19922*His+25.9377*ADMA-0.58839*homocysteine+0.094966*Sarcosine	0.952
238	10.9276+0.028986*Pro+0.19292*Phe-0.21233*His-0.17173*Trp-0.28968*bAiBA-1.2784*Hypotaurine	0.952
239	5.8607-0.17965*Cit-0.074838*Met+0.16546*Phe-0.16432*His-0.10382*Trp+17.6547*ADMA	0.952
240	6.8304-0.17672*Cit+0.1477*Phe-0.17819*His-0.10277*Trp+17.4354*ADMA-8.1288*Spermidine	0.952
241	1.8635-0.19675*Cit+0.076477*Phe-0.15565*His-0.66373*3_MeHis+22.3294*ADMA+7.2622*Cystathionine	0.952
242	4.6985-0.017108*Thr+0.031488*Pro-0.18843*Cit-0.19457*His-2.8131*Putrescine+24.546*ADMA	0.952
243	9.4518-0.034264*Thr+0.034703*Pro+0.13116*Phe-0.20933*His-0.16041*Trp+0.027807*Lys	0.952
244	3.2929+0.017899*Ser+0.025146*Pro-0.19242*Cit-0.20957*His+24.3585*ADMA-0.43484*Hypotaurine	0.952
245	5.1301+0.027321*Pro-0.0046559*Gly-0.21705*Cit-0.20757*His+0.025786*Orn+22.8822*ADMA	0.952
246	4.3485+0.025873*Pro-0.24874*Cit-0.0025824*Val-0.19222*His+24.5257*ADMA+4.9631*Cystathionine	0.952
247	4.3249+0.027417*Pro-0.22584*Cit-0.21193*His+0.025218*Orn+23.4779*ADMA+0.048229*bAiBA	0.952
248	4.4642+0.027661*Pro-0.23611*Cit-0.21148*His+0.026381*Orn+22.5301*ADMA+19.5733*bABA	0.952
249	4.9879+0.026531*Pro-0.21866*Cit-0.21245*His+0.025101*Orn+23.0458*ADMA-3.6721*Spermidine	0.952
250	4.0957+0.024994*Pro-0.24885*Cit-0.19498*His+24.5612*ADMA+0.0051453*bAiBA+4.8945*Cystathionine	0.952

[59]

No.	Formula	ROC_AUC
251	9.8785+0.031812*Pro+0.16043*Phe-0.16731*His-0.15204*Trp-0.45523*3_MeHis-17.3101*GABA	0.952
252	1.7855-0.0073444*Ala-0.27031*Cit-0.10467*Trp-1.0313*3_MeHis+27.6082*ADMA+16.1175*Cystathionine	0.952
253	6.7265-0.19668*Cit+0.069662*Ile-0.18025*His-0.11191*Trp+0.021879*Lys+19.1181*ADMA	0.952
254	4.4522+0.026935*Pro-0.22113*Cit-0.2104*His+0.024735*Orn+23.1374*ADMA	0.952
255	4.1074+0.024936*Pro-0.24828*Cit-0.19481*His+24.518*ADMA+4.8972*Cystathionine	0.952
256	4.4002-0.017766*Thr+0.030962*Pro-0.19216*Cit+0.021378*Met-0.19346*His+23.9786*ADMA	0.952
257	4.087-0.018174*Thr+0.029317*Pro-0.19554*Cit+0.025057*Ile-0.19443*His+23.4187*ADMA	0.952
258	2.8393+0.016418*Ser+0.0023949*Gln+0.024943*Pro-0.20042*Cit-0.21954*His+23.8496*ADMA	0.952
259	3.5179+0.038133*Ser-0.19596*Cit+0.024417*Val-0.18394*His-0.1209*Trp+24.431*ADMA	0.952
260	4.0085+0.025278*Pro-0.19548*Cit+0.02747*Trp-0.18698*His+22.6145*ADMA-0.66641*homocysteine	0.952
261	4.125+0.024603*Pro-0.24479*Cit-0.1986*His+0.002636*Lys+24.0663*ADMA+4.7097*Cystathionine	0.952
262	6.5016-0.22784*Cit+0.074149*Ile-0.1724*His-0.1042*Trp+0.033887*Arg+20.6789*ADMA	0.952
263	4.8306-0.017202*Thr+0.032584*Pro-0.19355*Cit-0.17477*His+23.9884*ADMA-0.57823*homocysteine	0.952
264	8.337-0.066266*Asn+0.035722*Pro+0.19488*Phe-0.16117*His-0.15851*Trp-0.59038*3_MeHis	0.952
265	10.3101-0.061593*Asn+0.034632*Pro+0.21681*Phe-0.19711*His-0.16336*Trp-2.1342*Hypotaurine	0.952
266	4.4916+0.0061497*Gln-0.19849*Cit+0.13784*Phe-0.19135*His-0.10573*Trp+18.1025*ADMA	0.952
267	-0.84994+0.03119*Pro-0.20767*Cit-0.27393*Met+0.16716*Phe-0.18633*Trp+16.9886*ADMA	0.952
268	4.0009+0.025997*Pro-0.20077*Cit+0.01932*Ile-0.18796*His+23.4914*ADMA-0.57505*homocysteine	0.952
269	4.0865+0.024812*Pro-0.24793*Cit+0.0012233*Ile-0.195*His+24.4667*ADMA+4.8569*Cystathionine	0.952
270	4.4308+0.026843*Pro-0.22086*Cit+0.00064886*Leu-0.21077*His+0.024604*Orn+23.104*ADMA	0.952
271	4.4333+0.026836*Pro-0.22072*Cit+0.0010802*Trp-0.21049*His+0.024554*Orn+23.0763*ADMA	0.952
272	4.4868+0.027291*Pro-0.22008*Cit-0.2102*His+0.024659*Orn+23.3752*ADMA-0.6421*N_ε_Acetyl_L_Lys	0.952
273	4.4177+0.028838*Pro-0.2061*Cit-0.18813*His+23.9927*ADMA+5.1776*aAiBA-0.51418*homocysteine	0.952
274	3.5293+0.030029*Pro-0.21822*Cit-0.21724*His+26.1397*ADMA+8.3661*aAiBA+0.077472*Sarcosine	0.952
275	9.8289+0.02867*Pro+0.1934*Phe-0.20298*His-0.17994*Trp-0.37296*bAiBA-18.1491*bABA	0.952

[60]

No.	Formula	ROC_AUC
276	10.5023+0.02706*Pro+0.18922*Phe-0.21069*His-0.17042*Trp-0.42211*bAiBA-5.9467*Spermidine	0.952
277	11.5296-0.090806*Cit+0.072608*Ile+0.16466*Phe-0.17919*His-0.17297*Trp-0.37799*bAiBA	0.952
278	5.9617-0.18784*Cit+0.13016*Phe-0.16636*His-0.10441*Trp+0.01755*Orn+16.5472*ADMA	0.952
279	4.5419-0.015062*Thr+0.031167*Pro-0.0014386*Gly-0.19219*Cit-0.19006*His+24.2146*ADMA	0.951
280	4.2044-0.016002*Thr+0.030507*Pro-0.19253*Cit+0.0055304*Leu-0.19437*His+23.9826*ADMA	0.951
281	4.4294-0.016308*Thr+0.030943*Pro-0.18981*Cit-0.18954*His+24.0978*ADMA-0.033086*bAiBA	0.951
282	4.7784+0.02574*Pro-0.20759*Cit-0.19558*His+0.016171*Arg+23.3377*ADMA-0.62358*homocysteine	0.951
283	4.1726+0.024891*Pro-0.24563*Cit-0.19592*His-1.2888*Putrescine+24.6119*ADMA+4.8752*Cystathionine	0.951
284	5.386+0.0018816*Gly-0.1816*Cit+0.14178*Phe-0.17008*His-0.10365*Trp+17.7074*ADMA	0.951
285	5.2806-0.27689*Cit+0.020332*Val-0.14199*His-0.10559*Trp+23.9864*ADMA+8.8648*Cystathionine	0.951
286	5.4192-0.19931*Cit+0.060718*Ile+0.068291*Tyr-0.15404*His-0.12465*Trp+19.5462*ADMA	0.951
287	5.768-0.17133*Cit+0.15792*Phe-0.17302*His-0.11891*Trp+18.4958*ADMA-20.3788*bABA	0.951
288	5.8691-0.18265*Cit+0.13902*Phe-0.17239*His-0.1041*Trp+17.0142*ADMA+1.7824*N _ε -Acetyl-L-lys	0.951
289	4.3548-0.015791*Thr+0.031162*Pro-0.19316*Cit-0.19064*His+24.2782*ADMA	0.951
290	4.3547-0.015788*Thr-2.1096e-05*Asn+0.031163*Pro-0.19316*Cit-0.19064*His+24.2786*ADMA	0.951
291	4.3574-0.015787*Thr+0.031171*Pro-0.19315*Cit-2.8239e-05*Val-0.19061*His+24.2778*ADMA	0.951
292	4.5348-0.016015*Thr+0.031113*Pro-0.19032*Cit-0.18953*His+24.7548*ADMA-0.46527*Hypotaurine	0.951
293	4.7499-0.015951*Thr+0.031543*Pro-0.19436*Cit-0.19406*His+24.3021*ADMA-6.3245*Spermine	0.951
294	5.2724+0.0076941*Thr-0.1856*Cit+0.14072*Phe-0.17351*His-0.10631*Trp+18.1083*ADMA	0.951
295	3.7908+0.024256*Ser+0.025464*Pro-0.0077509*Gly-0.18627*Cit-0.20923*His+23.7004*ADMA	0.951
296	4.7388+0.027965*Pro-0.2216*Cit-0.0028418*Val-0.20805*His+0.025337*Orn+23.1408*ADMA	0.951
297	3.8359+0.027417*Pro-0.21324*Cit+0.017003*Tyr-0.20717*His+23.522*ADMA+10.153*aAiBA	0.951
298	4.2018+0.025316*Pro-0.25094*Cit-0.0045375*Tyr-0.19422*His+24.7832*ADMA+5.1012*Cystathionine	0.951
299	3.4454+0.027459*Pro-0.21202*Cit-0.22051*His+0.0093392*Arg+25.8715*ADMA+0.084885*Sarcosine	0.951
300	4.4313+0.024616*Pro-0.24555*Cit-0.19562*His+24.4275*ADMA-2.3478*Spermidine+4.8531*Cystathionine	0.951

[図61]

No.	Formula	ROC_AUC
301	5.2903+0.032537*Pro-0.18584*Met+0.17625*Phe-0.18168*His-0.11823*Trp+6.3322*ADMA	0.951
302	10.4661+0.034827*Pro+0.1674*Phe-0.1906*His-0.15585*Trp-21.7952*GABA-2.731*Cystathionine	0.951
303	9.537+0.028406*Pro+0.18613*Phe-0.19699*His-0.16575*Trp-0.43001*bAiBA-0.34697*homocysteine	0.951
304	7.4662-0.028764*Thr+0.036011*Ser+0.031631*Pro+0.14007*Phe-0.19363*His-0.13448*Trp	0.951
305	2.9278+0.023164*Ser+0.027204*Pro-0.21985*Cit-0.21979*His+24.5405*ADMA+13.1907*aAiBA	0.951
306	3.8483+0.0042759*Gln+0.026498*Pro-0.23392*Cit-0.22805*His+0.02611*Orn+22.8677*ADMA	0.951
307	10.1874+0.031429*Pro-0.0036656*Ala+0.18254*Phe-0.19602*His-0.17529*Trp-0.45421*bAiBA	0.951
308	3.3635+0.027698*Pro-0.20224*Cit-0.22028*His+0.0055648*Lys+25.1375*ADMA+0.078241*Sarcosine	0.951
309	3.8455+0.027311*Pro-0.18641*Cit-0.19591*His-0.39013*3_MeHis+24.2763*ADMA+27.3418*bABA	0.951
310	3.4175+0.02836*Pro-0.185*Cit-0.21177*His-0.26507*3_MeHis+26.3884*ADMA+0.088224*Sarcosine	0.951
311	4.396+0.028515*Pro-0.20674*Cit-0.1861*His+23.6221*ADMA+11.6705*bABA-0.53946*homocysteine	0.951
312	4.7872+0.028257*Pro-0.19767*Cit-0.18801*His+23.8229*ADMA-0.56177*homocysteine-6.828*Spermine	0.951
313	9.7196+0.02845*Pro+0.17491*Phe-0.21556*His-0.16817*Trp+0.013448*Lys-1.8544*Hypotaurine	0.951
314	2.2318-0.27158*Cit-0.15788*Met-0.097683*Trp-1.0886*3_MeHis+28.7502*ADMA+16.7172*Cystathionine	0.951
315	6.7844-0.18183*Cit+0.082387*Ile-0.15058*His-0.10783*Trp+20.8463*ADMA-0.30841*bAiBA	0.951
316	5.8213-0.17656*Cit+0.1417*Phe-0.17061*His-0.10405*Trp-2.1237*Putrescine+17.8138*ADMA	0.951
317	5.3559-0.17895*Cit+0.14364*Phe-0.16359*His-0.095149*Trp+17.7243*ADMA-0.25693*homocysteine	0.951
318	2.8543-0.24753*Cit-0.12181*Trp-0.76111*3_MeHis-17.0138*GABA+24.2508*ADMA+14.2155*Cystathionine	0.951
319	5.7077-0.17955*Cit+0.14081*Phe-0.16824*His-0.10432*Trp+17.6788*ADMA	0.951
320	4.4117-0.014473*Thr+0.031168*Pro-0.19987*Cit-0.19222*His+23.9274*ADMA+9.1345*bABA	0.951
321	4.5158-0.015027*Thr+0.032448*Pro-0.20735*Cit-0.19529*His+24.449*ADMA+7.494*aAiBA	0.951
322	3.0234+0.01771*Ser+0.024659*Pro-0.19395*Cit+0.0033045*Leu-0.21324*His+23.8462*ADMA	0.951
323	3.1979+0.016439*Ser+0.024954*Pro-0.19447*Cit-0.21532*His+0.0031802*Lys+23.6689*ADMA	0.951
324	3.0279+0.018321*Ser+0.025171*Pro-0.19515*Cit-0.21158*His+24.0587*ADMA+0.61751*Spermidine	0.951
325	4.329+0.027841*Pro-0.1974*Cit+0.00018915*Val-0.18485*His+23.9305*ADMA-0.55791*homocysteine	0.951

[62]

No.	Formula	ROC_AUC
326	4.1252+0.028061*Pro-0.21538*Cit-0.21787*His+0.0088249* ϵ -Lys+23.3732*ADMA+11.0984*aAiBA	0.951
327	4.2583+0.028759*Pro-0.21029*Cit-0.20631*His-1.9555*Putrescine+24.5495*ADMA+9.2742*aAiBA	0.951
328	4.3607+0.02783*Pro-0.19677*Cit-0.18448*His+23.8901*ADMA-0.006191*bAiBA-0.55803*homocysteine	0.951
329	3.3065+0.029212*Pro-0.21633*Cit-0.21463*His+25.6641*ADMA+16.223*bABA+0.088848*Sarcosine	0.951
330	0.59237+0.016249*Pro-0.28224*Cit-0.15062*Trp-0.8231* γ -MeHis+25.0158*ADMA+13.7664*Cystathionine	0.951
331	9.5915+0.02627*Pro+0.18074*Phe-0.20361*His-0.17111*Trp-0.44819*bAiBA+1.1921*N ϵ -Acetyl_L_Lys	0.951
332	6.2765-0.25141*Cit+0.025267*Val-0.19733*His-0.13125*Trp+0.043592*Arg+25.2608*ADMA	0.951
333	4.3786-0.016969*Thr+0.032174*Pro-0.18913*Cit-0.18875*His+24.8707*ADMA-1.5584*N ϵ -Acetyl_L_Lys	0.951
334	10.9066-0.017484*Thr+0.033591*Pro+0.19286*Phe-0.20325*His-0.1541*Trp-1.9926*Hypotaurine	0.951
335	4.3246+0.026651*Pro-0.17642*Cit-0.19671*His-0.24531* γ -MeHis+24.681*ADMA-0.38934*Hypotaurine	0.951
336	4.5098+0.027865*Pro-0.19468*Cit-0.187*His-1.4182*Putrescine+24.0296*ADMA-0.55843*homocysteine	0.951
337	4.3648+0.028157*Pro-0.19466*Cit-0.18405*His+24.2113*ADMA-0.87087*N ϵ -Acetyl_L_Lys-0.55369*homocysteine	0.951
338	9.9644+0.029006*Pro+0.13547*Phe-0.18862*His-0.15393*Trp+0.011575*Lys-20.3447*GABA	0.951
339	9.888+0.032237*Pro+0.16489*Phe-0.18117*His-0.15925*Trp-18.0348*GABA-17.3039*bABA	0.951
340	9.4337+0.027712*Pro+0.18372*Phe-0.20443*His-0.17161*Trp-0.41418*bAiBA+0.038101*Sarcosine	0.951
341	10.2385+0.028274*Pro+0.18305*Phe-0.20873*His-0.17141*Trp-0.4235*bAiBA-10.6918*Spermine	0.951
342	3.1251+0.017928*Ser+0.025123*Pro-0.19459*Cit-0.21141*His+24.0338*ADMA	0.950
343	4.3485+0.027906*Pro-0.19733*Cit-0.18467*His+23.924*ADMA-0.55729*homocysteine	0.950
344	9.2947-0.021525*Thr+0.035026*Pro+0.1814*Phe-0.1846*His-0.15791*Trp-33.7794*bABA	0.950
345	3.1365+0.017858*Ser+0.025165*Pro-0.19438*Cit-0.21136*His+24.062*ADMA-0.086155*N ϵ -Acetyl_L_Lys	0.950
346	3.1355+0.0058834*Gln+0.028956*Pro-0.23703*Cit-0.22831*His+24.3716*ADMA+13.4599*aAiBA	0.950
347	11.1135-0.0038065*Gln+0.029036*Pro+0.19044*Phe-0.19718*His-0.17692*Trp-0.43996*bAiBA	0.950
348	4.4632+0.028875*Pro-0.0025362*Gly-0.20941*Cit-0.20157*His+24.2199*ADMA+8.175*aAiBA	0.950
349	2.2922+0.029392*Pro-0.012329*Ala-0.31703*Cit-0.12669*Trp+21.9642*ADMA+10.2691*Cystathionine	0.950
350	3.1234+0.026957*Pro-0.2041*Cit+0.013086*Ile-0.21435*His+25.412*ADMA+0.080233*Sarcosine	0.950

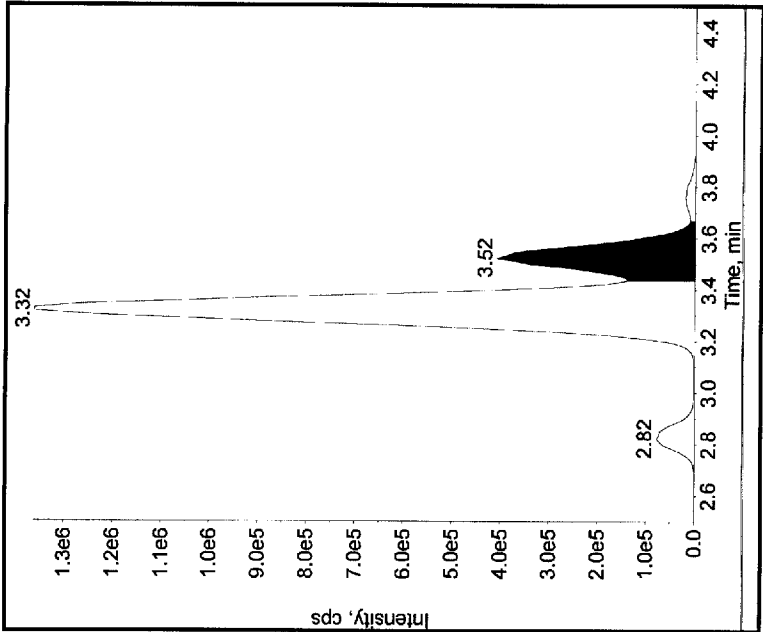
[63]

No.	Formula	ROC_AUC
351	3.1958+0.027897*Pro-0.20311*Cit+0.0039546*Leu-0.21552*His+25.7627*ADMA+0.082569*Sarcosine	0.950
352	4.1535+0.030436*Pro-0.21419*Cit-0.20443*His+25.3506*ADMA-2.0805*N ε _Acetyl_L_lys+11.6523*aAiBA	0.950
353	10.0919+0.029271*Pro+0.18806*Phe-0.20037*His-0.16897*Trp-0.013396*Arg-0.4382*bAiBA	0.950
354	6.453-0.17855*Cit+0.024628*Val-0.1478*His-0.10636*Trp-16.241*GABA+23.3863*ADMA	0.950
355	5.4173-0.17846*Cit+0.14062*Phe-0.16988*His-0.10285*Trp+17.9478*ADMA+0.021123*Sarcosine	0.950
356	7.6725-0.25941*Cit-0.11426*His-0.092021*Trp+22.4883*ADMA-0.27574*bAiBA+10.0299*Cystathionine	0.950
357	3.224+0.01786*Ser+0.025528*Pro-0.19452*Cit-0.0010838*Val-0.21032*His+24.0505*ADMA	0.950
358	2.8799+0.019692*Ser+0.025616*Pro-0.20793*Cit-0.21146*His+23.67*ADMA+17.766*bABA	0.950
359	5.7099+0.0063739*Asn-0.18028*Cit+0.13845*Phe-0.17011*His-0.1041*Trp+17.6832*ADMA	0.950
360	3.8505+0.029279*Pro-0.0046105*Gly-0.20005*Cit-0.21168*His+26.0737*ADMA+0.092297*Sarcosine	0.950
361	4.3589+0.028383*Pro-0.19724*Cit-0.012355*Met-0.18271*His+24.0601*ADMA-0.55061*homocysteine	0.950
362	3.2229+0.027818*Pro-0.20264*Cit+0.0066953*Trp-0.21321*His+25.5194*ADMA+0.078856*Sarcosine	0.950
363	4.3336+0.027416*Pro-0.22617*Cit-0.2138*His+0.012401*Arg+24.1981*ADMA+10.4746*aAiBA	0.950
364	4.7151+0.027638*Pro-0.19508*Cit-0.18603*His+23.8326*ADMA-2.5137*Spermidine-0.55314*homocysteine	0.950
365	8.3645+0.031772*Pro+0.18265*Phe-0.17865*His-0.16287*Trp-0.49171*3_MeHis-16.9653*bABA	0.950
366	6.9383-0.2666*Cit-0.1188*His-0.079799*Trp+0.023416*Orn+20.5439*ADMA+8.4701*Cystathionine	0.950
367	6.7792+0.16566*Phe-0.16938*His-0.13501*Trp-0.75712*3_MeHis+14.7701*ADMA-1.7678*Hypotaurine	0.950
368	4.109+0.028768*Pro-0.21317*Cit-0.20381*His+24.3695*ADMA+8.936*aAiBA	0.950
369	8.9146-0.019961*Thr+0.036318*Pro+0.1755*Phe-0.16837*His-0.15325*Trp-0.57824*3_MeHis	0.950
370	2.976+0.017358*Ser+0.023745*Pro-0.19417*Cit+0.01216*Ile-0.21255*His+23.4719*ADMA	0.950
371	8.584+0.020496*Ser+0.027196*Pro+0.17729*Phe-0.20626*His-0.15789*Trp-1.7064*Hypotaurine	0.950
372	3.8594+0.024107*Pro-0.17782*Cit+0.0233*Ile-0.20248*His-0.2836*3_MeHis+23.6736*ADMA	0.950
373	4.2935+0.025796*Pro-0.19365*Cit+0.0061289*Leu-0.20553*His+23.7987*ADMA-3.7101*Spermidine	0.950
374	4.1617+0.028597*Pro-0.21164*Cit-0.20359*His+24.2614*ADMA-0.020369*bAiBA+9.2282*aAiBA	0.950
375	3.3201+0.02892*Pro-0.20276*Cit-0.21301*His+26.2688*ADMA-0.65138*N ε _Acetyl_L_lys+0.083503*Sarcosine	0.950

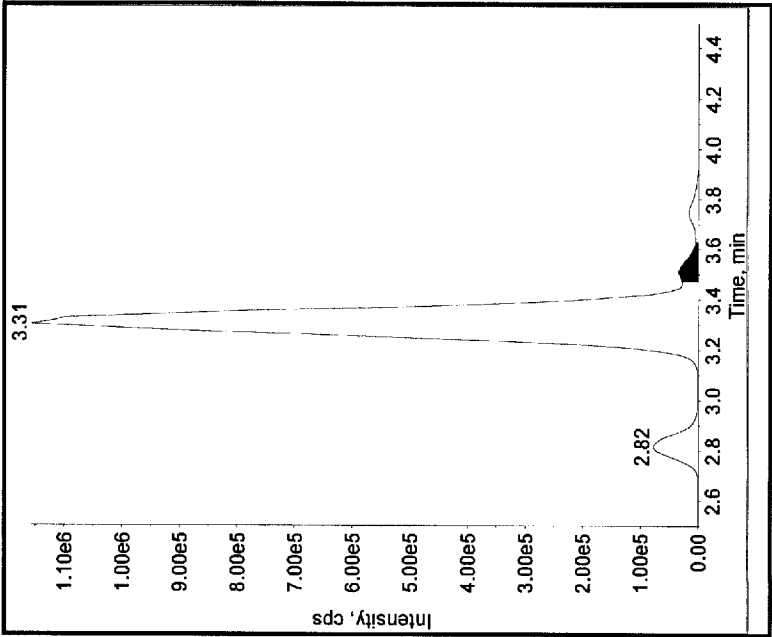
[図64]

No.	Formula	ROC_AUC
376	3.5808+0.02823*Pro-0.20221*Cit-0.21351*His+25.9221*ADMA-1.8579*Spermidine+0.080391*Sarcosine	0.950
377	3.4843+0.0284*Pro-0.20141*Cit-0.21117*His+26.079*ADMA-0.30063*Hypotaurine+0.077088*Sarcosine	0.950
378	7.3894+0.029039*Pro+0.027703*Ile+0.15992*Phe-0.17031*His-0.16128*Trp-0.58201*3_MeHis	0.950
379	9.6998+0.028578*Pro+0.18322*Phe-0.20427*His-0.17221*Trp-0.38014*bAlBA-0.57988*Cystathionine	0.950
380	8.8156+0.02889*Pro-0.16637*His-0.085681*Trp-0.40653*3_MeHis-23.2283*GABA+15.3676*ADMA	0.950
381	5.8777-0.21253*Cit+0.07222*Ile-0.14818*His-0.093556*Trp+0.028974*Orn+19.0832*ADMA	0.950
382	7.018-0.16652*Cit+0.077768*Iyr-0.13336*His-0.10463*Trp-14.4172*GABA+19.7059*ADMA	0.950
383	4.9585-0.18361*Cit+0.14475*Phe-0.16606*His-0.10834*Trp+18.3684*ADMA+13.3141*Spermine	0.950

[図65]



肺癌患者 名分のプール血漿



健常者 名分のプール血漿

[図66]

No	変数組み合わせ	ROC_AUC
1	'1 + Cit + Ethylglycine'	0.822
2	'1 + His + Ethylglycine'	0.867
3	'1 + Trp + Ethylglycine'	0.853

[図67]

No	変数組み合わせ	ROC_AUC
1	'1 + Thr + Pro + Ethylglycine'	0.841
2	'1 + Thr + Cit + Ethylglycine'	0.839
3	'1 + Thr + Ile + Ethylglycine'	0.824
4	'1 + Thr + His + Ethylglycine'	0.871
5	'1 + Thr + Trp + Ethylglycine'	0.855
6	'1 + Thr + Orn + Ethylglycine'	0.821
7	'1 + Thr + x3_MeHis + Ethylglycine'	0.823
8	'1 + Thr + GABA + Ethylglycine'	0.855
9	'1 + Thr + ADMA + Ethylglycine'	0.863
10	'1 + Thr + homoarginine + Ethylglycine'	0.848
11	'1 + Thr + Cystathionine + Ethylglycine'	0.842
12	'1 + Ser + Cit + Ethylglycine'	0.823
13	'1 + Ser + His + Ethylglycine'	0.873
14	'1 + Ser + Trp + Ethylglycine'	0.855
15	'1 + Ser + GABA + Ethylglycine'	0.825
16	'1 + Ser + homoarginine + Ethylglycine'	0.841
17	'1 + Asn + Pro + Ethylglycine'	0.822
18	'1 + Asn + Cit + Ethylglycine'	0.832
19	'1 + Asn + Ile + Ethylglycine'	0.822
20	'1 + Asn + Phe + Ethylglycine'	0.824
21	'1 + Asn + His + Ethylglycine'	0.868
22	'1 + Asn + Trp + Ethylglycine'	0.855
23	'1 + Asn + GABA + Ethylglycine'	0.847
24	'1 + Asn + ADMA + Ethylglycine'	0.857
25	'1 + Asn + homoarginine + Ethylglycine'	0.845
26	'1 + Asn + Cystathionine + Ethylglycine'	0.822
27	'1 + Gln + Cit + Ethylglycine'	0.825
28	'1 + Gln + His + Ethylglycine'	0.873
29	'1 + Gln + Trp + Ethylglycine'	0.856
30	'1 + Gln + GABA + Ethylglycine'	0.834
31	'1 + Gln + ADMA + Ethylglycine'	0.863
32	'1 + Gln + homoarginine + Ethylglycine'	0.838
33	'1 + Pro + Cit + Ethylglycine'	0.828
34	'1 + Pro + His + Ethylglycine'	0.891
35	'1 + Pro + Trp + Ethylglycine'	0.861
36	'1 + Pro + GABA + Ethylglycine'	0.826
37	'1 + Pro + homoarginine + Ethylglycine'	0.863
38	'1 + Gly + Cit + Ethylglycine'	0.830
39	'1 + Gly + His + Ethylglycine'	0.867
40	'1 + Gly + Trp + Ethylglycine'	0.857
41	'1 + Gly + GABA + Ethylglycine'	0.833
42	'1 + Gly + ADMA + Ethylglycine'	0.826
43	'1 + Gly + homoarginine + Ethylglycine'	0.852
44	'1 + Ala + Cit + Ethylglycine'	0.830
45	'1 + Ala + His + Ethylglycine'	0.871
46	'1 + Ala + Trp + Ethylglycine'	0.851
47	'1 + Ala + GABA + Ethylglycine'	0.824
48	'1 + Ala + ADMA + Ethylglycine'	0.821
49	'1 + Ala + homoarginine + Ethylglycine'	0.839
50	'1 + Cit + Val + Ethylglycine'	0.832

[図68]

No	変数組み合わせ	ROC_AUC
51	'1 + Cit + Met + Ethylglycine'	0.836
52	'1 + Cit + Ile + Ethylglycine'	0.824
53	'1 + Cit + Leu + Ethylglycine'	0.825
54	'1 + Cit + Tyr + Ethylglycine'	0.821
55	'1 + Cit + Phe + Ethylglycine'	0.829
56	'1 + Cit + His + Ethylglycine'	0.878
57	'1 + Cit + Trp + Ethylglycine'	0.874
58	'1 + Cit + Orn + Ethylglycine'	0.841
59	'1 + Cit + Lys + Ethylglycine'	0.823
60	'1 + Cit + Arg + Ethylglycine'	0.824
61	'1 + Cit + x3_MeHis + Ethylglycine'	0.827
62	'1 + Cit + Putrescine + Ethylglycine'	0.831
63	'1 + Cit + GABA + Ethylglycine'	0.864
64	'1 + Cit + ADMA + Ethylglycine'	0.885
65	'1 + Cit + bAiBA + Ethylglycine'	0.822
66	'1 + Cit + bABA + Ethylglycine'	0.821
67	'1 + Cit + N__Acetyl_L_lys + Ethylglycine'	0.827
68	'1 + Cit + Spermidine + Ethylglycine'	0.820
69	'1 + Cit + aAiBA + Ethylglycine'	0.827
70	'1 + Cit + homoarginine + Ethylglycine'	0.859
71	'1 + Cit + Hypotaurine + Ethylglycine'	0.829
72	'1 + Cit + Sarcosine + Ethylglycine'	0.836
73	'1 + Cit + Cystathionine + Ethylglycine'	0.870
74	'1 + Cit + Spermine + Ethylglycine'	0.820
75	'1 + Val + Ile + Ethylglycine'	0.821
76	'1 + Val + His + Ethylglycine'	0.868
77	'1 + Val + Trp + Ethylglycine'	0.852
78	'1 + Val + GABA + Ethylglycine'	0.832
79	'1 + Val + ADMA + Ethylglycine'	0.838
80	'1 + Val + homoarginine + Ethylglycine'	0.840
81	'1 + Met + Ile + Ethylglycine'	0.824
82	'1 + Met + Phe + Ethylglycine'	0.834
83	'1 + Met + His + Ethylglycine'	0.871
84	'1 + Met + Trp + Ethylglycine'	0.852
85	'1 + Met + GABA + Ethylglycine'	0.842
86	'1 + Met + ADMA + Ethylglycine'	0.840
87	'1 + Met + homoarginine + Ethylglycine'	0.840
88	'1 + Met + Cystathionine + Ethylglycine'	0.823
89	'1 + Ile + His + Ethylglycine'	0.881
90	'1 + Ile + Trp + Ethylglycine'	0.862
91	'1 + Ile + GABA + Ethylglycine'	0.820
92	'1 + Ile + homoarginine + Ethylglycine'	0.846
93	'1 + Leu + His + Ethylglycine'	0.873
94	'1 + Leu + Trp + Ethylglycine'	0.856
95	'1 + Leu + GABA + Ethylglycine'	0.829
96	'1 + Leu + ADMA + Ethylglycine'	0.821
97	'1 + Leu + homoarginine + Ethylglycine'	0.837
98	'1 + Tyr + His + Ethylglycine'	0.877
99	'1 + Tyr + Trp + Ethylglycine'	0.867
100	'1 + Tyr + GABA + Ethylglycine'	0.821

[図69]

No	変数組み合わせ	ROC_AUC
101	'1 + Tyr + homoarginine + Ethylglycine'	0.846
102	'1 + Phe + His + Ethylglycine'	0.895
103	'1 + Phe + Trp + Ethylglycine'	0.891
104	'1 + Phe + GABA + Ethylglycine'	0.825
105	'1 + Phe + homoarginine + Ethylglycine'	0.852
106	'1 + His + Trp + Ethylglycine'	0.889
107	'1 + His + Orn + Ethylglycine'	0.876
108	'1 + His + Lys + Ethylglycine'	0.885
109	'1 + His + Arg + Ethylglycine'	0.868
110	'1 + His + x3_MeHis + Ethylglycine'	0.869
111	'1 + His + Putrescine + Ethylglycine'	0.867
112	'1 + His + GABA + Ethylglycine'	0.889
113	'1 + His + ADMA + Ethylglycine'	0.902
114	'1 + His + bAiBA + Ethylglycine'	0.872
115	'1 + His + bABA + Ethylglycine'	0.868
116	'1 + His + N__Acetyl_L_lys + Ethylglycine'	0.875
117	'1 + His + Spermidine + Ethylglycine'	0.866
118	'1 + His + aAiBA + Ethylglycine'	0.867
119	'1 + His + homoarginine + Ethylglycine'	0.872
120	'1 + His + Hypotaurine + Ethylglycine'	0.867
121	'1 + His + Sarcosine + Ethylglycine'	0.866
122	'1 + His + Cystathionine + Ethylglycine'	0.872
123	'1 + His + Spermine + Ethylglycine'	0.868
124	'1 + Trp + Orn + Ethylglycine'	0.859
125	'1 + Trp + Lys + Ethylglycine'	0.854
126	'1 + Trp + Arg + Ethylglycine'	0.852
127	'1 + Trp + x3_MeHis + Ethylglycine'	0.858
128	'1 + Trp + Putrescine + Ethylglycine'	0.859
129	'1 + Trp + GABA + Ethylglycine'	0.874
130	'1 + Trp + ADMA + Ethylglycine'	0.882
131	'1 + Trp + bAiBA + Ethylglycine'	0.847
132	'1 + Trp + bABA + Ethylglycine'	0.852
133	'1 + Trp + N__Acetyl_L_lys + Ethylglycine'	0.851
134	'1 + Trp + Spermidine + Ethylglycine'	0.859
135	'1 + Trp + aAiBA + Ethylglycine'	0.852
136	'1 + Trp + homoarginine + Ethylglycine'	0.855
137	'1 + Trp + Hypotaurine + Ethylglycine'	0.853
138	'1 + Trp + Sarcosine + Ethylglycine'	0.859
139	'1 + Trp + Cystathionine + Ethylglycine'	0.867
140	'1 + Trp + Spermine + Ethylglycine'	0.858
141	'1 + Orn + GABA + Ethylglycine'	0.822
142	'1 + Orn + homoarginine + Ethylglycine'	0.842
143	'1 + Lys + GABA + Ethylglycine'	0.829
144	'1 + Lys + ADMA + Ethylglycine'	0.837
145	'1 + Lys + homoarginine + Ethylglycine'	0.846
146	'1 + Arg + GABA + Ethylglycine'	0.829
147	'1 + Arg + ADMA + Ethylglycine'	0.834
148	'1 + Arg + homoarginine + Ethylglycine'	0.839

[図70]

No	変数組み合わせ	ROC_AUC
1	'1 + Thr + Pro + Cit + His + ADMA + Ethylglycine'	0.962
2	'1 + Thr + Pro + His + GABA + ADMA + Ethylglycine'	0.955
3	'1 + Thr + Cit + Phe + His + ADMA + Ethylglycine'	0.951
4	'1 + Thr + Cit + His + Lys + ADMA + Ethylglycine'	0.952
5	'1 + Thr + Cit + His + GABA + ADMA + Ethylglycine'	0.954
6	'1 + Thr + Cit + His + ADMA + Cystathionine + Ethylglycine'	0.952
7	'1 + Thr + Cit + GABA + ADMA + Cystathionine + Ethylglycine'	0.950
8	'1 + Ser + Pro + Cit + His + ADMA + Ethylglycine'	0.957
9	'1 + Ser + Cit + Phe + His + ADMA + Ethylglycine'	0.951
10	'1 + Ser + Cit + His + GABA + ADMA + Ethylglycine'	0.951
11	'1 + Ser + Cit + His + ADMA + Cystathionine + Ethylglycine'	0.950
12	'1 + Asn + Pro + Cit + His + ADMA + Ethylglycine'	0.958
13	'1 + Asn + Cit + Phe + His + ADMA + Ethylglycine'	0.951
14	'1 + Asn + Cit + His + GABA + ADMA + Ethylglycine'	0.952
15	'1 + Gln + Pro + Cit + His + ADMA + Ethylglycine'	0.960
16	'1 + Gln + Cit + Phe + His + ADMA + Ethylglycine'	0.953
17	'1 + Gln + Cit + His + Orn + ADMA + Ethylglycine'	0.952
18	'1 + Gln + Cit + His + Lys + ADMA + Ethylglycine'	0.950
19	'1 + Gln + Cit + His + GABA + ADMA + Ethylglycine'	0.952
20	'1 + Gln + Cit + His + ADMA + Cystathionine + Ethylglycine'	0.952
21	'1 + Pro + Gly + Cit + His + ADMA + Ethylglycine'	0.954
22	'1 + Pro + Ala + Cit + His + ADMA + Ethylglycine'	0.960
23	'1 + Pro + Cit + Val + His + ADMA + Ethylglycine'	0.955
24	'1 + Pro + Cit + Met + His + ADMA + Ethylglycine'	0.956
25	'1 + Pro + Cit + Ile + His + ADMA + Ethylglycine'	0.955
26	'1 + Pro + Cit + Leu + His + ADMA + Ethylglycine'	0.956
27	'1 + Pro + Cit + Tyr + His + ADMA + Ethylglycine'	0.955
28	'1 + Pro + Cit + Phe + His + Trp + Ethylglycine'	0.963
29	'1 + Pro + Cit + Phe + His + ADMA + Ethylglycine'	0.962
30	'1 + Pro + Cit + His + Trp + ADMA + Ethylglycine'	0.965
31	'1 + Pro + Cit + His + Orn + ADMA + Ethylglycine'	0.960
32	'1 + Pro + Cit + His + Lys + ADMA + Ethylglycine'	0.960
33	'1 + Pro + Cit + His + Arg + ADMA + Ethylglycine'	0.955
34	'1 + Pro + Cit + His + x3_MeHis + ADMA + Ethylglycine'	0.957
35	'1 + Pro + Cit + His + Putrescine + ADMA + Ethylglycine'	0.955
36	'1 + Pro + Cit + His + GABA + ADMA + Ethylglycine'	0.964
37	'1 + Pro + Cit + His + ADMA + bAiBA + Ethylglycine'	0.955
38	'1 + Pro + Cit + His + ADMA + bABA + Ethylglycine'	0.957
39	'1 + Pro + Cit + His + ADMA + N__Acetyl_L_lys + Ethylglycine'	0.955
40	'1 + Pro + Cit + His + ADMA + Spermidine + Ethylglycine'	0.955
41	'1 + Pro + Cit + His + ADMA + aAiBA + Ethylglycine'	0.957
42	'1 + Pro + Cit + His + ADMA + homoarginine + Ethylglycine'	0.960
43	'1 + Pro + Cit + His + ADMA + Hypotaurine + Ethylglycine'	0.957
44	'1 + Pro + Cit + His + ADMA + Sarcosine + Ethylglycine'	0.957
45	'1 + Pro + Cit + His + ADMA + Cystathionine + Ethylglycine'	0.959
46	'1 + Pro + Cit + His + ADMA + Spermine + Ethylglycine'	0.955
47	'1 + Pro + Cit + GABA + ADMA + homoarginine + Ethylglycine'	0.950
48	'1 + Pro + Met + Phe + His + Trp + Ethylglycine'	0.952
49	'1 + Pro + Phe + His + Trp + x3_MeHis + Ethylglycine'	0.951
50	'1 + Pro + Phe + His + Trp + GABA + Ethylglycine'	0.952

[図71]

No	変数組み合わせ	ROC_AUC
51	'1 + Pro + Phe + His + Trp + bAiBA + Ethylglycine'	0.956
52	'1 + Gly + Cit + Phe + His + ADMA + Ethylglycine'	0.951
53	'1 + Gly + Cit + His + GABA + ADMA + Ethylglycine'	0.951
54	'1 + Ala + Cit + His + GABA + ADMA + Ethylglycine'	0.951
55	'1 + Cit + Val + Phe + His + ADMA + Ethylglycine'	0.951
56	'1 + Cit + Val + His + Trp + ADMA + Ethylglycine'	0.953
57	'1 + Cit + Val + His + GABA + ADMA + Ethylglycine'	0.954
58	'1 + Cit + Val + His + ADMA + Cystathionine + Ethylglycine'	0.951
59	'1 + Cit + Met + Phe + His + ADMA + Ethylglycine'	0.957
60	'1 + Cit + Met + His + GABA + ADMA + Ethylglycine'	0.952
61	'1 + Cit + Met + GABA + ADMA + Cystathionine + Ethylglycine'	0.950
62	'1 + Cit + Ile + Phe + His + ADMA + Ethylglycine'	0.951
63	'1 + Cit + Ile + His + Trp + ADMA + Ethylglycine'	0.955
64	'1 + Cit + Ile + His + GABA + ADMA + Ethylglycine'	0.953
65	'1 + Cit + Leu + Phe + His + ADMA + Ethylglycine'	0.950
66	'1 + Cit + Leu + His + Trp + ADMA + Ethylglycine'	0.956
67	'1 + Cit + Leu + His + GABA + ADMA + Ethylglycine'	0.954
68	'1 + Cit + Leu + His + ADMA + Cystathionine + Ethylglycine'	0.950
69	'1 + Cit + Tyr + Phe + His + ADMA + Ethylglycine'	0.950
70	'1 + Cit + Tyr + His + Trp + ADMA + Ethylglycine'	0.953
71	'1 + Cit + Tyr + His + GABA + ADMA + Ethylglycine'	0.952
72	'1 + Cit + Tyr + His + ADMA + homoarginine + Ethylglycine'	0.950
73	'1 + Cit + Tyr + His + ADMA + Cystathionine + Ethylglycine'	0.950
74	'1 + Cit + Phe + His + Trp + ADMA + Ethylglycine'	0.957
75	'1 + Cit + Phe + His + Orn + ADMA + Ethylglycine'	0.952
76	'1 + Cit + Phe + His + Lys + ADMA + Ethylglycine'	0.950
77	'1 + Cit + Phe + His + Arg + ADMA + Ethylglycine'	0.952
78	'1 + Cit + Phe + His + x3_MeHis + ADMA + Ethylglycine'	0.952
79	'1 + Cit + Phe + His + GABA + ADMA + Ethylglycine'	0.957
80	'1 + Cit + Phe + His + ADMA + bAiBA + Ethylglycine'	0.952
81	'1 + Cit + Phe + His + ADMA + Spermidine + Ethylglycine'	0.950
82	'1 + Cit + Phe + His + ADMA + homoarginine + Ethylglycine'	0.955
83	'1 + Cit + Phe + His + ADMA + Hypotaurine + Ethylglycine'	0.951
84	'1 + Cit + Phe + His + ADMA + Sarcosine + Ethylglycine'	0.951
85	'1 + Cit + Phe + His + ADMA + Cystathionine + Ethylglycine'	0.953
86	'1 + Cit + His + Trp + Orn + ADMA + Ethylglycine'	0.953
87	'1 + Cit + His + Trp + Lys + ADMA + Ethylglycine'	0.954
88	'1 + Cit + His + Trp + Arg + ADMA + Ethylglycine'	0.951
89	'1 + Cit + His + Trp + GABA + ADMA + Ethylglycine'	0.956
90	'1 + Cit + His + Trp + ADMA + bAiBA + Ethylglycine'	0.952
91	'1 + Cit + His + Trp + ADMA + homoarginine + Ethylglycine'	0.950
92	'1 + Cit + His + Trp + ADMA + Cystathionine + Ethylglycine'	0.957
93	'1 + Cit + His + Orn + GABA + ADMA + Ethylglycine'	0.956
94	'1 + Cit + His + Orn + ADMA + homoarginine + Ethylglycine'	0.953
95	'1 + Cit + His + Orn + ADMA + Cystathionine + Ethylglycine'	0.951
96	'1 + Cit + His + Lys + GABA + ADMA + Ethylglycine'	0.954
97	'1 + Cit + His + Lys + ADMA + homoarginine + Ethylglycine'	0.955
98	'1 + Cit + His + Lys + ADMA + Cystathionine + Ethylglycine'	0.951
99	'1 + Cit + His + Arg + GABA + ADMA + Ethylglycine'	0.951
100	'1 + Cit + His + Arg + ADMA + homoarginine + Ethylglycine'	0.951

[図72]

No	変数組み合わせ	ROC_AUC
101	'1 + Cit + His + Arg + ADMA + Cystathionine + Ethylglycine'	0.952
102	'1 + Cit + His + x3_MeHis + GABA + ADMA + Ethylglycine'	0.952
103	'1 + Cit + His + x3_MeHis + ADMA + Cystathionine + Ethylglycine'	0.954
104	'1 + Cit + His + Putrescine + GABA + ADMA + Ethylglycine'	0.952
105	'1 + Cit + His + GABA + ADMA + bAiBA + Ethylglycine'	0.953
106	'1 + Cit + His + GABA + ADMA + bABA + Ethylglycine'	0.955
107	'1 + Cit + His + GABA + ADMA + N__Acetyl_L_lys + Ethylglycine'	0.952
108	'1 + Cit + His + GABA + ADMA + Spermidine + Ethylglycine'	0.953
109	'1 + Cit + His + GABA + ADMA + aAiBA + Ethylglycine'	0.953
110	'1 + Cit + His + GABA + ADMA + homoarginine + Ethylglycine'	0.956
111	'1 + Cit + His + GABA + ADMA + Hypotaurine + Ethylglycine'	0.952
112	'1 + Cit + His + GABA + ADMA + Sarcosine + Ethylglycine'	0.953
113	'1 + Cit + His + GABA + ADMA + Cystathionine + Ethylglycine'	0.957
114	'1 + Cit + His + GABA + ADMA + Spermine + Ethylglycine'	0.951
115	'1 + Cit + His + ADMA + bAiBA + homoarginine + Ethylglycine'	0.953
116	'1 + Cit + His + ADMA + bAiBA + Cystathionine + Ethylglycine'	0.952
117	'1 + Cit + His + ADMA + bABA + Cystathionine + Ethylglycine'	0.950
118	'1 + Cit + His + ADMA + homoarginine + Sarcosine + Ethylglycine'	0.950
119	'1 + Cit + His + ADMA + homoarginine + Cystathionine + Ethylglycine'	0.952
120	'1 + Cit + Trp + GABA + ADMA + Cystathionine + Ethylglycine'	0.953
121	'1 + Cit + Putrescine + GABA + ADMA + homoarginine + Ethylglycine'	0.952
122	'1 + Cit + GABA + ADMA + homoarginine + Cystathionine + Ethylglycine'	0.951

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.

PCT/JP2016/060576

A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER

G01N33/68 (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)

G01N33/68

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	1996-2016
Kokai Jitsuyo Shinan Koho	1971-2016	Toroku Jitsuyo Shinan Koho	1994-2016

Electronic data base consulted during the international search (name of data base and, where practicable, search terms used)

JSTPlus/JMEDPlus/JST7580 (JDreamIII), CAPLUS/MEDLINE/EMBASE/BIOSIS (STN)

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 2011/096210 A1 (ONCOTHERAPY SCIENCE, INC.), 11 August 2011 (11.08.2011), example 4; fig. 8 (Family: none)	1 2-10
Y	WO 2008/016111 A1 (Ajinomoto Co., Inc.), 07 February 2008 (07.02.2008), claims & JP 2014-38114 A & US 2010/0017144 A1 claims & EP 2081027 A1	2-10
A	JP 2008-164517 A (Advanced Life Science Institute, Inc.), 17 July 2008 (17.07.2008), example 8 (Family: none)	1-10

☒ 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

"I" 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
02 June 2016 (02.06.16)

Date of mailing of the international search report
14 June 2016 (14.06.16)

Name and mailing address of the ISA/
Japan Patent Office
3-4-3, Kasumigaseki, Chiyoda-ku,
Tokyo 100-8915, Japan

Authorized officer

Telephone No.

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.

PCT/JP2016/060576

C (Continuation). DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
A	DEMPO K et al., Demonstration of gamma-glutamyl transferase, alkaline phosphatase, CEA and HCG in human lung cancer, Oncodev Biol Med., 1981, 2(1-2), 21-37	1-10

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.

PCT/JP2016/060576

Box No. II Observations where certain claims were found unsearchable (Continuation of item 2 of first sheet)

This international search report has not been established in respect of certain claims under Article 17(2)(a) for the following reasons:

1. ☐ Claims Nos.:
because they relate to subject matter not required to be searched by this Authority, namely:

2. ☐ Claims Nos.:
because they relate to parts of the international application that do not comply with the prescribed requirements to such an extent that no meaningful international search can be carried out, specifically:

3. ☐ Claims Nos.:
because they are dependent claims and are not drafted in accordance with the second and third sentences of Rule 6.4(a).

Box No. III Observations where unity of invention is lacking (Continuation of item 3 of first sheet)

This International Searching Authority found multiple inventions in this international application, as follows:

(Inventions 1-15) claims 1-10 (partial)

In documents 1 and 2 shown below, a lung cancer marker in blood, which comprises any one of various types of amino acids is disclosed, and therefore this matter cannot be regarded as a special technical feature.

Therefore, it is regarded that the special technical feature of claim 1 resides in the use of a specific compound as a lung cancer marker in blood.

In claim 1, on the other hand, specific 15 compounds are described as alternatives. However, it cannot be regarded that these compounds share any common characteristic moiety in light of the contents of documents 1 and 2.
(Continued to extra sheet)

1. ☐ As all required additional search fees were timely paid by the applicant, this international search report covers all searchable claims.
2. ☒ As all searchable claims could be searched without effort justifying additional fees, this Authority did not invite payment of additional fees.
3. ☐ As only some of the required additional search fees were timely paid by the applicant, this international search report covers only those claims for which fees were paid, specifically claims Nos.:

4. ☐ No required additional search fees were timely paid by the applicant. Consequently, this international search report is restricted to the invention first mentioned in the claims; it is covered by claims Nos.:

Remark on Protest

- ☐ The additional search fees were accompanied by the applicant's protest and, where applicable, the payment of a protest fee.
- ☐ The additional search fees were accompanied by the applicant's protest but the applicable protest fee was not paid within the time limit specified in the invitation.
- ☐ No protest accompanied the payment of additional search fees.

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.

PCT/JP2016/060576

Continuation of Box No.III of continuation of first sheet(2)

Consequently, in claim 1, 15 inventions each relating to a lung cancer marker in blood which is selected from 15 cancer markers in blood are described.

Document 1: WO 2011/096210 A1 (ONCOTHERAPY SCIENCE, INC.), 11 August 2011 (11.08.2011), example 4; fig. 8 (Family: none)

Document 2: WO 2008/016111 A1 (Ajinomoto Co., Inc.), 07 February 2008 (07.02.2008), claims & JP 2014-38114 A & US 2010/0017144 A1 claims & EP 2081027 A1

A. 発明の属する分野の分類 (国際特許分類 (IPC))

Int.Cl. G01N33/68 (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. G01N33/68

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	1971-2016年
日本国実用新案登録公報	1996-2016年
日本国登録実用新案公報	1994-2016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 (JDreamIII), Cplus/MEDLINE/EMBASE/BIOSIS (STN)

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 2011/096210 A1 (ONCOTHERAPY SCIENCE, INC.) 2011.08.11, Example 4, Fig. 8 (ファミリーなし)	1 2-10
Y	WO 2008/016111 A1 (味の素株式会社) 2008.02.07, 特許請求の範囲 & JP 2014-38114 A & US 2010/0017144 A1 (特許請求の範囲) & EP 2081027 A1	2-10
A	JP 2008-164517 A (株式会社先端生命科学研究所) 2008.07.17, 実 施例 8 (ファミリーなし)	1-10

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

02.06.2016

国際調査報告の発送日

14.06.2016

国際調査機関の名称及びあて先

日本国特許庁 (ISA/J P)

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)

赤坂 祐樹

2 J

3316

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	DEMPO K et al., Demonstration of gamma-glutamyl transferase, alkaline phosphatase, CEA and HCG in human lung cancer, Oncodev Biol Med., 1981, 2(1-2), 21-37	1-10

第Ⅱ欄 請求の範囲の一部の調査ができないときの意見（第1ページの2の続き）

法第8条第3項（P C T 17条(2)(a)）の規定により、この国際調査報告は次の理由により請求の範囲の一部について作成しなかった。

1. ☐ 請求項 _____ は、この国際調査機関が調査をすることを要しない対象に係るものである。
つまり、
2. ☐ 請求項 _____ は、有意義な国際調査をすることができる程度まで所定の要件を満たしていない国際出願の部分に係るものである。つまり、
3. ☐ 請求項 _____ は、従属請求の範囲であってP C T 規則6.4(a)の第2文及び第3文の規定に従って記載されていない。

第Ⅲ欄 発明の単一性が欠如しているときの意見（第1ページの3の続き）

次に述べるようにこの国際出願に二以上の発明があるところの国際調査機関は認めた。

（発明1－15）請求項1～10（部分的）

下記文献1及び文献2には、様々なアミノ酸からなる血液中の肺癌マーカーが記載されており、この点は特別な技術的特徴とならない。よって、請求項1の特別な技術的特徴は、血液中の肺癌マーカーとして、特定の化合物を用いる点にあると認められる。

一方、請求項1には、15個の特定の化合物が括一的に記載されているところ、これらの化合物は、文献1及び文献2に照らして、共通する構造的に顕著な部分を有するとは認められない。

したがって、請求項1には、15個の血液中の肺癌マーカーから1つを選択する15の発明が記載されている。

文献1：WO 2011/096210 A1 (ONCOTHERAPY SCIENCE, INC.) 2011.08.11, Example 4, Fig. 8 (ファミリーなし)

文献2：WO 2008/016111 A1 (味の素株式会社) 2008.02.07, 特許請求の範囲 & JP 2014-38114 A & US 2010/0017144 A1(特許請求の範囲) & EP 2081027 A1

1. ☐ 出願人が必要な追加調査手数料をすべて期間内に納付したので、この国際調査報告は、すべての調査可能な請求項について作成した。
2. ☒ 追加調査手数料を要求するまでもなく、すべての調査可能な請求項について調査することができたので、追加調査手数料の納付を求めなかった。
3. ☐ 出願人が必要な追加調査手数料を一部のみしか期間内に納付しなかったため、この国際調査報告は、手数料の納付のあった次の請求項のみについて作成した。
4. ☐ 出願人が必要な追加調査手数料を期間内に納付しなかったため、この国際調査報告は、請求の範囲の最初に記載されている発明に係る次の請求項について作成した。

追加調査手数料の異議の申立てに関する注意

- ☐ 追加調査手数料及び、該当する場合には、異議申立手数料の納付と共に、出願人から異議申立てがあった。
- ☐ 追加調査手数料の納付と共に出願人から異議申立てがあったが、異議申立手数料が納付命令書に示した期間内に支払われなかった。
- ☐ 追加調査手数料の納付はあったが、異議申立てはなかった。