

(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
2018年4月12日(12.04.2018)



(10) 国際公開番号

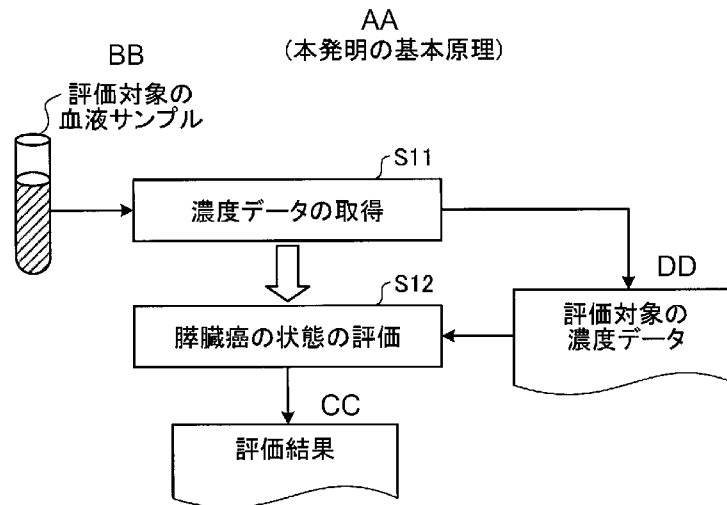
WO 2018/066620 A1

(51) 国際特許分類:
G01N 33/68 (2006.01) G01N 33/48 (2006.01)
(21) 国際出願番号: PCT/JP2017/036198
(22) 国際出願日: 2017年10月4日(04.10.2017)
(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 2016-196711 2016年10月4日(04.10.2016) JP
(71) 出願人: 味の素株式会社 (AJINOMOTO CO.,
INC.) [JP/JP]; 〒1048315 東京都中央区京橋
一丁目15番1号 Tokyo (JP).

(72) 発明者: 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). 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). 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

(54) Title: PANCREATIC CANCER EVALUATION METHOD, EVALUATION DEVICE, EVALUATION PRO-
GRAM, EVALUATION SYSTEM, AND TERMINAL DEVICE

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



S11 Acquire concentration data
S12 Evaluate status of pancreatic cancer
AA (Basic principle of present invention)
BB Blood sample from evaluation subject
CC Evaluation result
DD Concentration data for evaluation subject

(57) Abstract: The purpose of the present invention is to provide an evaluation method and the like with which it is possible to provide highly reliable information that can serve as a reference for learning the status of pancreatic cancer. According to the present embodiment, the status of pancreatic cancer in an evaluation subject is evaluated using, in blood from the evaluation subject, at least one concentration value among N-Me-bABA, bABA, GABA, N6-Acetyl-L-Lys, 1-Me-His,

奈川 県 川 崎 市 川 崎 区 鈴 木 町 1 - 1 味 の
素 株 有 限 公 司 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, DJ, DK, DM, DO,
DZ, EC, EE, EG, ES, FI, GB, GD, GE, GH, GM, GT,
HN, HR, HU, ID, IL, IN, IR, IS, JO, JP, KE, KG, KH,
KN, KP, KR, KW, 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), ヨーロッパ (AL, AT, BE, BG, CH, CY, CZ,
DE, DK, EE, ES, FI, FR, GB, GR, HR, HU, IE, IS, IT,
LT, LU, LV, MC, MK, MT, NL, NO, PL, PT, RO, RS,
SE, SI, SK, SM, TR), OAPI (BF, BJ, CF, CG, CI, CM,
GA, GN, GQ, GW, 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))

aABA, Amino adipic acid, bAiBA, Cadaverine, Ethylglycine, Homoarginine, Hypotaurine, Kinurenine, Putrescine, Serotonin, Spermidine, Spermine, ADMA, Homocitrulline, 3-Me-His, Hydroxyproline, Phosphoethanolamine, Acylcarnitine (13:1), and EPA.

(57) 要 約 : 膵 臓 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 N-Me-bABA, bABA, GABA, N6-Acetyl-L-Lys, 1-Me-His, aABA, Amino adipic acid, bAiBA, Cadaverine, Ethylglycine, Homoarginine, Hypotaurine, Kinurenine, Putrescine, Serotonin, Spermidine, Spermine, ADMA, Homocitrulline, 3-Me-His, Hydroxyproline, Phosphoethanolamine, Acylcarnitine (13:1), EPA 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、 膵 臓 癌 の 状 態 を 評 価 す る。

明 細 書

発明の名称：

膵臓癌の評価方法、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] 日本では、膵臓癌による２００９年の死亡者数は男１４０９４人・女１２６９７人で、男性では癌による死亡の第五位、女性では癌による死亡の第四位である。膵臓癌の生涯罹患率は２％である。

[0003] 膵臓癌は、癌の部位によっては症状が乏しく、進行してから発見されることが多い。膵臓癌は、画像診断を用いて２ｃｍ以下で発見されても膵臓外の隣接組織への転移がある場合が多く、予後が極めて不良である。膵臓癌については、手術可能なより早期の発見が望まれている。

[0004] 膵臓癌の診断には腹部超音波エコー、ＣＴ、ＭＲＩが用いられるが、いずれも膵臓癌の発見率は高くない。

[0005] 血清癌マーカーとしてはＣＡ１９－９、ＣＥＡ、ＳＰａｎ－１、ＤＵＰＡＮ－２等がある。これらのマーカーは、進行癌には比較的高い感度と特異度を有するが、初期癌における陽性率は低く、また膵臓癌以外の癌でも陽性になる場合がある。

[0006] ＥＲＣＰ、ＥＵＳなどの内視鏡を用いた画像診断は、膵臓癌の発見率が高く有効であることが知られているが、患者の身体的負担が高く集団検診には不向きで、検査による出血などのリスクも起こりえる。さらに、生検による組織診断は、確定診断になるが侵襲度の高い検査であり、生検による検査をスクリーニングの段階で施行するのは实际的でない。

[0007] そのため、患者に対する身体的負担および費用対効果の面から、膵臓癌発

症の可能性の高い被験者を絞り込んで、その者を治療の対象とすることが望ましい。具体的には、侵襲の少ない方法で被験者を選択し、選択した被験者に対し画像診断を実施することで被験者を絞り込み、膵臓癌の確定診断が得られた被験者を治療の対象とすることが望ましい。

[0008] ところで、血中アミノ酸の濃度が、癌発症により変化することは知られている。例えば、Cynoberによれば（非特許文献1）、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、Schraderrら（非特許文献2）やVisserら（非特許文献3）によれば、膵臓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。

[0009] また、特許文献1では、「被検者から採取した検体中の生体成分のうち、特定の有限個の解析対象成分を選別して定量し、多変量解析を行なうことによりメタボローム解析を行い、その解析結果を、予め取得した健常者グループ及び疾患患者グループの解析結果と比較することで、特定の疾患の検査、例えば早期診断、治療効果の判定、予後診断等を容易に行なうことが可能となる。」ことが開示されている。さらに、特許文献1に記載の実施例では、健常者と膵臓癌のGCMSで測定した血清メタボロームのデータに対し、「SIMCA-P+（Umetrics社）を使用して61成分を用いた多変量解析を行った。主成分分析（PCA）のスコアプロットを用い、差異を調べた。合計61の解析対象生体分子のうち、PC1（t[1]）、PC2（t[2]）、PC3（t[3]）は、各々61成分中の20（32.3%）、15（24.7%）及び7（12.0%）による（A=3、R2X=0.69）。その結果、すい臓がん患者及び健常者における解析対象生体分子の分布が異なることが確認された。」と述べている。

[0010] また、先行特許として、アミノ酸濃度と生体状態とを関連付ける方法に関する特許文献2、特許文献3および特許文献4が公開されている。また、先

行特許として、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5、アミノ酸濃度を用いて乳癌の状態を評価する方法に関する特許文献6、アミノ酸濃度を用いて大腸癌の状態を評価する方法に関する特許文献7、アミノ酸濃度を用いて癌の状態を評価する方法に関する特許文献8、アミノ酸濃度を用いて胃癌の状態を評価する方法に関する特許文献9、アミノ酸濃度を用いて癌の種類を評価する方法に関する特許文献10、アミノ酸濃度を用いて女性生殖器癌の状態を評価する方法に関する特許文献11、アミノ酸濃度を用いて前立腺癌および前立腺肥大のうち少なくとも1つを含む前立腺疾患の状態を評価する方法に関する特許文献12、アミノ酸濃度を用いて膵臓癌の状態を評価する方法に関する特許文献13、および、アミノ酸濃度を用いて膵臓癌リスク疾患の状態を評価する方法に関する特許文献14が公開されている。

[0011] さらに、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15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16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。

先行技術文献

特許文献

- [0012] 特許文献1：特開2011-247869号公報
特許文献2：国際公開第2004/052191号
特許文献3：国際公開第2006/098192号
特許文献4：国際公開第2009/054351号
特許文献5：国際公開第2008/016111号
特許文献6：国際公開第2008/075662号
特許文献7：国際公開第2008/075663号
特許文献8：国際公開第2008/075664号
特許文献9：国際公開第2009/099005号

特許文献10：国際公開第2009／110517号

特許文献11：国際公開第2009／154296号

特許文献12：国際公開第2009／154297号

特許文献13：国際公開第2014／084290号

特許文献14：特開2014－106114号公報

特許文献15：国際公開第2011／096210号

特許文献16：特開2011－247869号公報

非特許文献

[0013] 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：Schrader H, Menge BA, Belyaev O, Uhl W, Schmidt WE, Meier JJ., Amino acid malnutrition in patients with chronic pancreatitis and pancreatic carcinoma. Pancreas. 2009 May; 38(4):416-21.

非特許文献3：Vissers YL, Dejong CH, Luiking YC, Fearon KC, von Meyenfeldt MF, Deutz NE. Plasma arginine concentrations are reduced in cancer patients: evidence for arginine deficiency? Am J Clin Nutr. 2005 May;81(5):1142-6.

発明の概要

発明が解決しようとする課題

[0014] しかしながら、これまでに、血液中の代謝物を腫瘍マーカーとして膵臓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。

[0015] 本発明は、上記に鑑みてなされたもので、膵臓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

[0016] 上述した課題を解決し、目的を達成するために、本発明にかかる評価方法は、評価対象の血液中の24種類の代謝物（1-Me-His（1-methyl-histidine）（1-メチルヒスチジン）、aABA（ α -アミノ酪酸）、Aminoadipic acid（ α -アミノアジピン酸）、bABA（ β -aminobutyric acid）（ β -アミノ酪酸）、bAiBA（ β -amino-iso-butyric acid）（ β -アミノイソ酪酸）、Cadaverine（カダベリン）、Ethylglycine（エチルグリシン）、GABA（ γ -aminobutyric acid）（ γ -アミノ酪酸）、Homoarginine（ホモアルギニン）、Hypotaurine（ヒポタウリン）、Kinurenine（キヌレニン）、N6-Acetyl-L-Lys（N6-Acetyl-L-Lysine）（N6-アセチル-L-リジン）、Putrescine（プトレシン）、Serotonin（セロトニン）、Spermidine（スペルミジン）、Spermine（スペルミン）、ADMA（asymmetric dimethylarginine）（非対称性ジメチルアルギニン）、Homocitrulline（ホモシトルリン）、3-Me-His（3-methyl-histidine）（3-メチルヒスチジン）、Hydroxyproline（ヒドロキシプロリン）、Phosphoethanolamine（ホスホエタノールアミン）、N-Me-bABA（N-methyl- β -aminobutyric acid）（N-メチル- β -アミノ酪酸）、AC（13:1）（Acylcarnitine（13:1））（アシルカルニチン（13:1））、EPA（cis-5, 8, 11, 14, 17-Eicosapentaenoic acid）（エイコサペンタエン酸））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、膵臓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。

[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、前記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。

[0018] 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)

Ala	Alanine
Arg	Arginine
Asn	Asparagine
Cit	Citrulline
Gln	Glutamine
Gly	Glycine
His	Histidine
Ile	Isoleucine
Leu	Leucine
Lys	Lysine
Met	Methionine
Orn	Ornithine
Phe	Phenylalanine
Pro	Proline
Ser	Serine
Thr	Threonine
Trp	Tryptophan
Tyr	Tyrosine
Val	Valine

[0019] 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24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、膵臓癌の状態を評価すること、を特徴とする。

[0020] 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、前記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。

[0021] 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 24 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、膵臓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。

[0022] 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 24 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、膵臓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。

[0023] 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 24 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、膵臓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。

[0024] 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。

[0025] 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 24 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膵臓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 24 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、膵臓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。

[0026] 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、評価対象における膵臓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 24 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、膵臓癌の状態を評価した結果であること、を特徴とする。

[0027] 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膵臓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 24 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。

[0028] 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 24 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 24 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、膵臓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

[0029] 本発明によれば、評価対象の血液中の上記24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、膵臓癌の状態を評価するので、膵臓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

[0030] [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、濃度データファイル106aに格納される情報の一例を示す図である。

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

[図8]図8は、指定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、式ファイル106d1に格納される情報の一例を示す図である。

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

[図11]図11は、評価部102dの構成を示すブロック図である。

[図12]図12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13]図13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。

発明を実施するための形態

[0031] 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。

[0032] [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。

[0033] 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24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S11）。

[0034] なお、ステップS11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-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2003/069328号、国際公開第2005/116629号を参照）。もしくは、除蛋白処理を行った血漿を、固層抽出によるリン脂質除去後、LC/MSにより濃度

値（ピーク面積値）を分析する。

（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℃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℃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。

[0035] 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２４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、評価対象について膵臓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。ここで、状態を評価するとは、例えば、現在の状態を検査することである。

[0036] 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２４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、評価対象について膵臓癌の状態を評価する。これにより、膵臓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。

[0037] また、上記２４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膵臓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膵臓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膵臓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、膵臓癌の状態が所定の状態（例えば、基準値を超えた、膵臓癌に罹患している可能性が高い状態、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。

[0038] 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24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膵臓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、膵臓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。

[0039] また、上記 24 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、膵臓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、膵臓癌の状態を評価してもよい。

[0040] また、上記 24 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 24 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、評価対象について膵臓癌の状態を評価してもよい。

[0041] また、算出した式の値が評価対象についての膵臓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膵臓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膵臓癌の状態に関する評価結果として扱ってもよい。

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、式の値に対して任意の値を加減乗除したり、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、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、式の値を変換してもよい。例えば、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、膵臓癌の状態が所定の状態（例えば、基準値を超えた、膵臓癌に罹患している可能性が高い状態、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、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、本明細書における式の値は、式の値そのものであってもよく、式の値を変換した後の値であってもよい。

[0042] 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膵臓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、膵臓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。

[0043] また、評価対象が膵臓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24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24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24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、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、膵臓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、膵臓癌に罹患している可能性の程度が高い対象（例えば、膵臓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）、膵臓癌に罹患している可能性の程度が低い対象（例えば、膵臓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）、および膵臓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、膵臓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、実施例に記載した膵臓癌区分など）、および、膵臓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。

[0044] また、評価の際に用いる式について、その形式は特に問わないが、例えば、以下に示す形式のものでもよい。

- ・ 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、C o x 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 - m e a n s 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
- ・ M C M C (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
- ・ 異なる形式の式の和で示されるような式

[0045] また、評価の際に用いる式を、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、当該式を膵臓癌の状態を評価するのに好適に用いることができる。

[0046] 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の際に用いる場合、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。

[0047] また、分数式とは、当該分数式の分子が変数 $A, B, C, \dots$ の和で表わされ及び／又は当該分数式の分母が変数 $a, b, c, \dots$ 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 $\alpha, \beta, \gamma, \dots$ 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。

[0048] そして、膵臓癌の状態を評価する際、上記 24 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、評価の際に用いる式には、上記 24 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

[0049] [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、膵臓癌の状態を評価する際に、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２４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。

[0050] 制御部は、血液中の上記２４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２４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２４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、評価対象について膵臓癌の状態を評価する（ステップＳ２１）。これにより、膵臓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。

[0051] なお、ステップＳ２１で用いられる式は、以下に説明する式作成処理（工程１～工程４）に基づいて作成されたものでもよい。ここで、式作成処理の概要について説明する。なお、ここで説明する処理はあくまでも一例であり、式の作成方法はこれに限定されない。

[0052] まず、制御部は、濃度データと膵臓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（欠損値や外れ値などを持つデータが事前に除去されているものでもよい）から所定の式作成手法に基づいて、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）。

[0053] 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膵臓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、評価に最適な式を作成することができる。

[0054] 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。

[0055] 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。なお、工程2において、ブートストラップ法やホールドアウト法、*N*-フォールド法、リーブワンアウト法などのうち少なくとも1つに基づいて、候補式の判別率や感度、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評価手法で、真の状態が陰性である評価対象（例えば、膵臓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、膵臓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、赤池情報量規準とは、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、「 $-2 \times (\text{統計モデルの最大対数尤度}) + 2 \times (\text{統計モデルの自由パラメータ数})$ 」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は、2次元座標上に $(x, y) = (1 - \text{特異度}, \text{感度})$ 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] 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）。なお、工程3において、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。また、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。なお、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。

[0058] 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の際に用いる候補式を選出することで、評価の際に用いる式を作成する（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。

[0059] 以上、説明したように、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、膵臓癌の評価に最適な式を作成することができる。換言すると、式作成処理では、上記24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、評価性能の高い式を抽出する。

[0060] [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、膵臓癌の状態を評価する際に、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 24 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。

[0061] 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膵臓癌の状態を評価する評価装置 100 と、血液中の上記 24 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。

[0062] 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 で式を作成する際に用いる指標状態情報や、評価の際に用いる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、膵臓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、膵臓癌の状態を知る上で参考となる情報と

は、例えば、ヒトを含む生物の膵臓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、膵臓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。

[0063] 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１１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係る部分のみを概念的に示している。

[0064] 評価装置１００は、当該評価装置を統括的に制御するＣＰＵ（Central Processing Unit）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２４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）し、算出した値を出力（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１０２ｄをさらに備え、当該評価部１０２ｄ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。

[0065] 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。

[0066] 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。

[0067] 記憶部 106 は、ストレージ手段であり、例えば、RAM (Random Access Memory)・ROM (Read Only Memory) 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、濃度データファイル 106a と、指標状態情報ファイル 106b と、指定指標状態情報ファイル 106c と、式関連情報データベース 106d と、評価結果ファイル 106e と、を格納する。

[0068] 濃度データファイル 106a は、血液中の上記 24 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 6 は、濃度データファイル 106a 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 106a に格納される情報は、図 6 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 6 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。

[0069] 図 5 に戻り、指標状態情報ファイル 106b は、式を作成する際に用いる指標状態情報を格納する。図 7 は、指標状態情報ファイル 106b 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 106b に格納され

る情報は、図7に示すように、個体番号と、膵臓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7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、膵臓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。

[0070] 図5に戻り、指定指標状態情報ファイル106cは、後述する指定部102bで指定した指標状態情報を格納する。図8は、指定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。指定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、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。

[0071] 図5に戻り、式関連情報データベース106dは、後述する式作成部102cで作成した式を格納する式ファイル106d1で構成される。式ファイル106d1は、評価の際に用いる式を格納する。図9は、式ファイル106d1に格納される情報の一例を示す図である。式ファイル106d1に格納される情報は、図9に示すように、ランクと、式（図9では、 $F_p(\text{Homo}, \dots)$ や $F_p(\text{Homo}, \text{GABA}, \text{Asn})$ 、 $F_k(\text{Homo}, \text{GABA}, \text{Asn}, \dots)$ など）と、各式作成手法に対応する閾値と、各式の検証結果（例えば各式の値）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、Homoarginineを意味するものである。

[0072] 図5に戻り、評価結果ファイル106eは、後述する評価部102dで得られた評価結果を格納する。図10は、評価結果ファイル106d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106d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、膵臓癌の状態に関する評価結果（例えば、後述する算出部 102 d 1 で算出した式の値、後述する変換部 102 d 2 で式の値を変換した後の値、後述する生成部 102 d 3 で生成した位置情報、又は、後述する分類部 102 d 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。

[0073] 図 5 に戻り、制御部 102 は、OS 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、受信部 102 a と指定部 102 b と式作成部 102 c と評価部 102 d と結果出力部 102 e と送信部 102 f 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。

[0074] 受信部 102 a 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、式など）を、ネットワーク 300 を介して受信する。指定部 102 b は、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。

[0075] 式作成部 102 c は、受信部 102 a で受信した指標状態情報や指定部 102 b で指定した指標状態情報に基づいて式を作成する。なお、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、式作成部 102 c は、記憶部 106 から所望の式を選択することで、式を作成してもよい。また、式作成部 102 c は、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）から所望の式を選択しダウンロードすることで、式を作成してもよい。

[0076] 評価部 102 d は、事前に得られた式（例えば、式作成部 102 c で作成した式、又は、受信部 102 a で受信した式など）、及び、受信部 102 a で受信した個体の濃度データに含まれる、上記 24 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、式の値を算出することで、個体について膵臓癌の状態を評価する。なお、評価部102dは、上記24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、個体について膵臓癌の状態を評価してもよい。

[0077] ここで、評価部102dの構成について図11を参照して説明する。図11は、評価部102d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102dは、算出部102d1と、変換部102d2と、生成部102d3と、分類部102d4と、をさらに備えている。

[0078] 算出部102d1は、上記24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24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式を用いて、式の値を算出する。なお、評価部102dは、算出部102d1で算出した式の値を評価結果として評価結果ファイル106eの所定の記憶領域に格納してもよい。

[0079] 変換部102d2は、算出部102d1で算出した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102dは、変換部102d2で変換した後の値を評価結果として評価結果ファイル106eの所定の記憶領域に格納してもよい。また、変換部102d2は、濃度データに含まれている、上記24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。

[0080] 生成部102d3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102d1で算出した式の値又は変換部102d2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102dは、生成部102d3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106eの所定の記憶領域に格納してもよい。

- [0081] 分類部 102d4 は、算出部 102d1 で算出した式の値又は変換部 102d2 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、膀胱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。
- [0082] 結果出力部 102e は、制御部 102 の各処理部での処理結果（評価部 102d で得られた評価結果を含む）等を出力装置 114 に出力する。
- [0083] 送信部 102f 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 で作成した式や評価結果を送信したりする。
- [0084] 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 12 を参照して説明する。図 12 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係る部分のみを概念的に示している。
- [0085] クライアント装置 200 は、制御部 210 と ROM 220 と HD（Hard Disk）230 と RAM 240 と入力装置 250 と出力装置 260 と入出力 IF 270 と通信 IF 280 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。クライアント装置 200 は、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（Personal Handyphone System）端末・携帯端末・移動体通信端末・PDA（Personal Digital Assistant）等の情報処理端末など）を基にしたものであってもよい。
- [0086] 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 IF 280 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 IF 27

0は入力装置250や出力装置260に接続する。

[0087] 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（Terminal Adapter）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。

[0088] 制御部210は、受信部211および送信部212を備えている。受信部211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212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。

[0089] 制御部210は、当該制御部で行う処理の全部または任意の一部を、CPUおよび当該CPUにて解釈して実行するプログラムで実現してもよい。ROM220またはHD230には、OSと協働してCPUに命令を与え、各種処理を行うためのコンピュータプログラムが記録されている。当該コンピュータプログラムは、RAM240にロードされることで実行され、CPUと協働して制御部210を構成する。また、当該コンピュータプログラムは、クライアント装置200と任意のネットワークを介して接続されるアプリケーションプログラムサーバに記録されてもよく、クライアント装置200は、必要に応じてその全部または一部をダウンロードしてもよい。また、制御部210で行う処理の全部または任意の一部を、ワイヤードロジック等によるハードウェアで実現してもよい。

[0090] ここで、制御部210は、評価装置100に備えられている評価部102dが有する機能と同様の機能を有する評価部210a（算出部210a1、変換部210a2、生成部210a3、及び分類部210a4を含む）を備えていてもよい。そして、制御部210に評価部210aが備えられている場合には、評価部210a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210a2で式の値（濃度値でもよい）を

変換したり、生成部210a3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210a4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。

[0091] 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（Local Area Network）（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（Value-Added Network）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（Community Antenna Television）網や、携帯回線交換網または携帯パケット交換網（IMT（International Mobile Telecommunication）2000方式、GSM（登録商標）（Global System for Mobile Communications）方式またはPDC（Personal Digital Cellular）／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（Communication Satellite）、BS（Broadcasting Satellite）またはISDB（Integrated Services Digital Broadcasting）等を含む）等でもよい。

[0092] 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13を参照して説明する。図13は、本システムのデータベース装置400の構成の一例を示すブロック図であり、該構成のうち本発明に関係する部分のみを概念的に示している。

[0093] 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１３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。

[0094] 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。また、入力装置４１２には、キーボードやマウスやマイクの他、マウスと協働してポインティングデバイス機能を実現するモニタを用いることができる。

[0095] 制御部４０２は、ＯＳ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、送信部４０２ａと受信部４０２ｂを備えている。送信部４０２ａは、指標状態情報や式などの各種情報を、評価装置１００へ送信する

。受信部402bは、評価装置100から送信された、式や評価結果などの各種情報を受信する。

[0096] なお、本説明では、評価装置100が、濃度データの受信から、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は式の値の算出を実行すれば十分であり、例えば式の値の変換、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から式の値を受信した場合には、評価部210aは、変換部210a2で式の値を変換したり、生成部210a3で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。

[0097] [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、および端末装置は、上述した第2実施形態以外にも、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。

[0098] 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。

[0099] 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。

[0100] 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。

[0101] 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 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 (Hard Disk Drive) などの記憶部 106 などには、OS 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。

[0102] 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。

[0103] 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

(Universal Serial Bus) メモリ、SD (Secure Digital) カード、フレキシブルディスク、光磁気ディスク、ROM、EPROM (Erasable Programmable Read Only Memory)、EEPROM (Electrically Erasable and Programmable Read Only Memory) (登録商標)、CD-ROM (Compact Disc Read Only Memory)、MO (Magnetooptical disk)、DVD (Digital Versatile Disk)、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。

[0104] 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。

[0105] 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。

[0106] 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。

[0107] 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

[0108] 膵臓癌の確定診断が行われた膵臓癌患者（膵臓癌群：40名）、及び、性別、年齢及びBMI（Body Mass Index）を膵臓癌群とマッチングさせた、癌の既往歴及び罹患歴がない健常者（健常群：40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。

[0109] 21種類の代謝物（1-Me-His, aABA, Amino adipic acid, bABA, bAiBA, Cadaverine, Ethylglycine, GABA, Homoarginine, Hypotaurine, Kinurenine, N6-Acetyl-L-Lys, Putrescine, Serotonin, Spermidine, Spermine, ADMA, Homocitrulline, 3-Me-His, Hydroxyproline, Phosphoethanolamine）の血漿中濃度値（nmol/ml）のデータを用いて、各代謝物について膵臓癌群と健常群の判別能をROC_AUC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ROC_AUCを示す。

[0110]

[表1]

	R O C _ A U C	漸近有意確率
l-Me-His	0.5519	0.8800
aABA	0.5441	0.3107
Aminoadipic acid	0.6734	0.0043
bABA	0.6541	0.0082
bAiBA	0.6544	0.0197
Cadaverine	0.5447	0.1866
Ethylglycine	0.5513	0.0800
GABA	0.7391	0.0016
Homoarginine	0.6416	0.0261
Hypotaurine	0.5516	0.6658
Kinurenine	0.6072	0.3262
N6-Acetyl-L-Lys	0.7134	0.0116
Putrescine	0.6597	0.0652
Serotonin	0.4228	0.6316
Spermidine	0.5553	0.4719
Spermine	0.5822	0.7022
ADMA	0.6047	0.1054
Homocitrulline	0.4253	0.8534
3-Me-His	0.6222	0.0335
Hydroxyproline	0.5866	0.0874
Phosphoethanolamine	0.6074	0.5008

[0111] 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、Aminoadipic acid, bABA, bAiBA, GABA, Homoarginine, N6-Acetyl-L-Lys, 3-Me-Hisであった。Aminoadipic acid, GABA, Homoarginine, N6-Acetyl-L-Lys, 3-Me-Hisは膵臓癌群で有意に減少し、bABA, bAiBAは膵臓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、膵臓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

[0112] 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、膵臓癌群と健常群との 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。

[0113] 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21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21種類の代謝物から探索し、膵臓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。

[0114] 膵臓癌群と健常群のROC_AUC値が0.700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、以下の「11. 2変数の式」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。なお、以下の「11. 2変数の式」には、各式に関して、式に含まれる変数とROC_AUC値が示されている（以下同様）。

実施例 3

[0115] 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、膵臓癌群と健常群との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。

[0116] 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21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21種類の代謝物から探索し、膵臓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。

[0117] 膵臓癌群と健常群のROC_AUC値が0.869（実施例2における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、以下の「12. 3変数の式」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

[0118] 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、膵臓癌群と健常群との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。

[0119] 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21種類の代謝物から探索し、膵臓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。

[0120] 上記で得られたロジスティック回帰式のうち、ROC_AUCが0.894（実施例3におけるROC_AUCの最大値）以上の1590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以下の[13.6変数の式]に示し、出現頻度を表2に示した。これより、Ser, Ala, Cit, Val, Met, Tyr, His, Trp, Amino adipic acid, bABA, bAiBA, Ethylglycine, GABA, Homoarginine, N6-Acetyl-L-Lys, Putrescine, 3-Met-His, Hydroxyprolineの出現頻度は100以上と高いことが示された。特に、Ser, His, Cit, Trp, Amino adipic acid, bABA, bAiBA, Ethylglycine, GABA, N6-Acetyl-L-Lys, Putrescine, Hydroxyprolineの出現頻度は300以上と高いことが示された。更に、His, bABA, bAiBA, Ethylglycine, GABAの出現頻度は500以上と高いことが示された。

[0121]

[表2]

	R O C _ A U C 0.894以上
Thr	0
Ser	450
Asn	0
Gln	0
Pro	0
Gly	0
Ala	257
Cit	419
Val	284
Met	280
Ile	0
Leu	0
Tyr	257
Phe	0
His	1448
Trp	485
Orn	0
Lys	0
Arg	0
l-Me-His	0
aABA	0
Aminoadipic acid	367
bABA	874
bAiBA	866
Cadaverine	0
Ethylglycine	843
GABA	933
Homoarginine	297
Hypotaurine	0
Kinurenine	0
N6-Acetyl-L-Lys	332
Putrescine	456
Serotonin	0
Spermidine	0
Spermine	0
ADMA	0
Homocitrulline	0
3-Me-His	293
Hydroxyproline	399
Phosphoethanolamine	0

[0122] 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「His, GABA, bABA, bAiBA, Ethylglycine, Homoarginine」を持つ指標式1 (His, GABA, bABA, bAiBA, Ethylglycine, Homoarginineを変数として含む多変量判別式) の判別能は、ROC_AUC=0.9225, 感度=0

、 875、特異度＝0.750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。

[0123] ここで、指標式1、並びに、膵臓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、膵臓癌群の各症例を、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-0.425と2.027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90%、48%である。

[0124] 式の値が最も高かった1症例の濃度値はそれぞれ、His: 55.8, GABA: 0.099, bABA: 0.294, bAiBA: 4.62, Ethylglycine: 0.448, Homoarginine: 0.954であり、この症例の式の値は7.22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7.22からオッズ $p/(1-p)$ を計算したところ、49020.8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。

[0125] そして、カットオフ値として特異度95%のときの式の値2.027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（膵臓癌区分に相当）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7.22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。

[0126] 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-0.425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2.027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（膵臓癌である可能性（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（膵臓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（膵臓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 7.22 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

[0127] 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 24 名分の血漿、膵臓癌患者 24 名分の血漿を用い、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 N-methyl- β -aminobutyric acid (N-Me-bABA)、Acylcarnitine (AC) (13:1)、cis-5, 8, 11, 14, 17-Eicosapentaenoic acid (EPA) のピーク面積値を測定し、濃度値とした。

[0128] 3 種類の代謝物（N-Me-bABA、AC (13:1)、EPA）の濃度値（ピーク面積値）のデータを用いて、各代謝物について膵臓癌群と健常群の判別能を ROC_AUC で評価した。表 3 に各代謝物の判別能を評価する際の指標となる ROC_AUC 値を示す。

[0129] [表3]

	ROC_AUC	漸近有意確率
N-Me-bABA	0.9792	<0.0001
AC (13:1)	0.9002	<0.0001
EPA	0.5972	0.2441

[0130] 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、N-Me-bABA、AC (13:1) であった。AC (13:1) は膵臓癌群で有意に減少し、N-Me-bABA は膵臓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、膵臓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 6

[0131] 実施例 5 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、膵臓癌群と健常群との 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。

[0132] 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、N-Me-bABA、AC（13：1）、EPAのうちのいずれかを必須としたうえで、上記 19 種類のアミノ酸および上記 21 種類の代謝物から探索し、膵臓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。

[0133] 膵臓癌群と健常群のROC__AUC値が0.9792（実施例 5 におけるROC__AUCの最大値）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、以下の「14. 2変数の式」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 7

[0134] 実施例 5 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もしくはピーク面積値が代入される変数を含む、膵臓癌群と健常群との 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。

[0135] 多変量判別式としてロジスティック回帰式を用いた。Ser, Ala, Ile, His, Trp, Asnの6個のアミノ酸を変数とする、膵臓癌群と健常群のROC__AUC値が0.9288であるロジスティック回帰式に追加する1個の変数または2個の変数の組み合わせを、上記 21 種類および上記 3 種類の代謝物から探索し、膵臓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。

[0136] 追加される変数が1個の場合の探索において、膵臓癌群と健常群のROC

__AUC値が前記0.9288以上となるロジスティック回帰式に追加された代謝物を、以下の[15.1変数追加]に示した。また、追加される変数が2個の場合の探索において、膵臓癌群と健常群のROC__AUC値が前記0.9288以上となるロジスティック回帰式に追加された代謝物を、以下の[16.2変数追加]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。

産業上の利用可能性

[0137] 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、膵臓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

- [0138] 100 評価装置
- 102 制御部
 - 102a 受信部
 - 102b 指定部
 - 102c 式作成部
 - 102d 評価部
 - 102d1 算出部
 - 102d2 変換部
 - 102d3 生成部
 - 102d4 分類部
 - 102e 結果出力部
 - 102f 送信部
 - 104 通信インターフェース部
 - 106 記憶部
 - 106a 濃度データファイル

- 1 0 6 b 指標状態情報ファイル
- 1 0 6 c 指定指標状態情報ファイル
- 1 0 6 d 式関連情報データベース
- 1 0 6 d 1 式ファイル
- 1 0 6 e 評価結果ファイル
- 1 0 8 入出力インターフェース部
- 1 1 2 入力装置
- 1 1 4 出力装置
- 2 0 0 クライアント装置（端末装置（情報通信端末装置））
- 3 0 0 ネットワーク
- 4 0 0 データベース装置

[0139] [1 1. 2 変数の式]

His, bAiBA, 0.8694; His, Homocitrulline, 0.8606; His, Ethylglycine, 0.8588; His, Putrescine, 0.8588; His, GABA, 0.8531; His, ADMA, 0.8506; His, N6-Acetyl-L-Lys, 0.8494; His, Cadaverine, 0.8494; His, Homoarginine, 0.8494; His, Serotonin, 0.8475; His, Phosphoetanolamine, 0.8475; His, bABA, 0.8469; His, Spermine, 0.8469; His, Hydroxyproline, 0.8469; His, Spermidine, 0.8456; His, 3-Me-His, 0.8456; His, Hypotaurine, 0.8450; His, 1-Me-His, 0.8450; His, Kynurenine, 0.8444; His, aABA, 0.8438; His, Amino adipic acid, 0.8394; Trp, GABA, 0.8294; Trp, Ethylglycine, 0.8081; Trp, bABA, 0.8056; Trp, N6-Acetyl-L-Lys, 0.8050; Tyr, bAiBA, 0.7994; Trp, bAiBA, 0.7981; Cit, bABA, 0.7975; Trp, Putrescine, 0.7938; Trp, Hydroxyproline, 0.7906; Trp, Cadaverine, 0.7863; Trp, ADMA, 0.7838; Trp, Amino adipic acid, 0.7838; Met, bAiBA, 0.7831; Trp, Kynurenine, 0.7831; Trp, Phosphoetanolamine, 0.7819; Trp, Homoarginine, 0.7819; Trp, Spermine, 0.7806; Trp, 1-Me-His, 0.7800; Trp, Hypotaurine, 0.7794; Trp, Homocitrulline, 0.7794; Trp, Spermidine, 0.7788; Trp, Serotonin, 0.7775; Val, GABA, 0.7769; Trp, 3-Me-His, 0.7763; Trp, aABA, 0.7756; Cit, Amino adipic acid, 0.7713; Tyr, GABA, 0.7675; Cit, Homoarginine, 0.7600; Cit, Hydroxyproline, 0.7600; Met, GABA, 0.7588; Cit, N6-Ac

ethyl-L-Lys, 0.7581;Cit, GABA, 0.7531;Cit, bAiBA, 0.7519;Cit, 3-Me-His, 0.7519;Tyr, Amino adipic acid, 0.7500;Val, bABA, 0.7494;Gly, Amino adipic acid, 0.7488;Cit, Kynurenine, 0.7463;Tyr, N6-Acetyl-L-Lys, 0.7456;Gly, GABA, 0.7444;Ser, GABA, 0.7444;Cit, Phosphoetanolamine, 0.7431;Leu, GABA, 0.7425;Ile, GABA, 0.7419;Cit, Serotonin, 0.7419;Lys, GABA, 0.7413;Tyr, bABA, 0.7413;Cit, Homocitrulline, 0.7406;Cit, Spermine, 0.7394;Cit, Cadaverine, 0.7394;Cit, Ethylglycine, 0.7369;Tyr, Hydroxyproline, 0.7350;Cit, Spermidine, 0.7344;Pro, GABA, 0.7338;Tyr, ADMA, 0.7338;Cit, aABA, 0.7338;Gln, GABA, 0.7331;Ser, N6-Acetyl-L-Lys, 0.7331;Tyr, Putrescine, 0.7325;Orn, GABA, 0.7325;Arg, GABA, 0.7325;Cit, Putrescine, 0.7319;Cit, ADMA, 0.7319;Asn, GABA, 0.7313;Cit, 1-Me-His, 0.7313;Tyr, 3-Me-His, 0.7306;Thr, GABA, 0.7300;Cit, Hypotaurine, 0.7300;Ile, Amino adipic acid, 0.7294;Ile, N6-Acetyl-L-Lys, 0.7288;Ala, GABA, 0.7281;Met, N6-Acetyl-L-Lys, 0.7281;Tyr, Ethylglycine, 0.7275;Met, Amino adipic acid, 0.7275;Phe, GABA, 0.7269;Met, Ethylglycine, 0.7263;Gln, N6-Acetyl-L-Lys, 0.7256;Val, N6-Acetyl-L-Lys, 0.7250;Val, bAiBA, 0.7238;Met, Putrescine, 0.7219;Met, ADMA, 0.7194;Met, Hydroxyproline, 0.7194;Gly, N6-Acetyl-L-Lys, 0.7169;Val, Putrescine, 0.7144;Met, bABA, 0.7144;Asn, N6-Acetyl-L-Lys, 0.7131;Leu, N6-Acetyl-L-Lys, 0.7125;Gly, Homoarginine, 0.7119;Thr, N6-Acetyl-L-Lys, 0.7100;Pro, N6-Acetyl-L-Lys, 0.7100;Orn, N6-Acetyl-L-Lys, 0.7081;Ser, bABA, 0.7063;Tyr, Homoarginine, 0.7063;Ala, N6-Acetyl-L-Lys, 0.7063;Tyr, Spermine, 0.7050;Met, Cadaverine, 0.7050;Met, Homocitrulline, 0.7044;Lys, N6-Acetyl-L-Lys, 0.7044;Tyr, Spermidine, 0.7006;Tyr, Cadaverine, 0.7000;Val, Hydroxyproline, 0.7000;Phe, Ethylglycine, 0.7000

[0140] [1 2. 3変数の式]

His, bABA, GABA, 0.8944;His, bAiBA, Ethylglycine, 0.8875;His, bAiBA, GABA, 0.8831;His, Ethylglycine, GABA, 0.8813;His, Putrescine, Spermidine, 0.8800;His, bAiBA, Putrescine, 0.8781;His, bABA, Ethylglycine, 0.8781;His, bABA, bAiBA, 0.8775;His, bAiBA, Hydroxyproline, 0.8763;His, Cadaverine, Ethylglycine, 0.

8756;His, Ethylglycine, Putrescine, 0.8756;His, Ethylglycine, N6-Acetyl-L-Lys, 0.8750;His, bAiBA, N6-Acetyl-L-Lys, 0.8744;His, 1-Me-His, bAiBA, 0.8738;His, bAiBA, Homocitrulline, 0.8738;Trp, bABA, GABA, 0.8731;His, Homoarginine, Putrescine, 0.8725;His, Putrescine, Homocitrulline, 0.8719;His, bAiBA, Spermidine, 0.8719;His, Ethylglycine, ADMA, 0.8719;His, bAiBA, Spermine, 0.8713;His, bAiBA, ADMA, 0.8713;His, aABA, bAiBA, 0.8706;His, bAiBA, Cadaverine, 0.8706;His, bAiBA, Serotonin, 0.8700

[0141] [1 3. 6 変数の式]

His, Amino adipic acid, bABA, GABA, 3-Me-His, Hydroxyproline, 0.9288;His, Amino adipic acid, bABA, bAiBA, Ethylglycine, GABA, 0.9281;Ser, His, bABA, Ethylglycine, GABA, Homoarginine, 0.9275;His, Amino adipic acid, bABA, Ethylglycine, GABA, Homoarginine, 0.9256;Ser, His, bABA, bAiBA, Ethylglycine, GABA, 0.9250;His, Cit, bABA, bAiBA, Ethylglycine, GABA, 0.9250;His, Amino adipic acid, bABA, Ethylglycine, GABA, Hydroxyproline, 0.9250;His, Cit, bABA, Ethylglycine, GABA, Hydroxyproline, 0.9250;His, Cit, bABA, bAiBA, GABA, Putrescine, 0.9244;His, Amino adipic acid, bABA, Ethylglycine, GABA, 3-Me-His, 0.9244;His, Amino adipic acid, bABA, bAiBA, GABA, Hydroxyproline, 0.9244;His, bABA, bAiBA, Ethylglycine, GABA, Hydroxyproline, 0.9244;Ser, His, bABA, bAiBA, GABA, Homoarginine, 0.9238;Ser, His, bABA, Ethylglycine, GABA, 3-Me-His, 0.9238;Ser, His, Amino adipic acid, bABA, Ethylglycine, GABA, 0.9238;His, Cit, Val, bABA, bAiBA, GABA, 0.9231;His, Val, bABA, bAiBA, Ethylglycine, GABA, 0.9231;His, Cit, bABA, bAiBA, GABA, Hydroxyproline, 0.9231;His, Cit, Amino adipic acid, bABA, bAiBA, GABA, 0.9231;His, bABA, bAiBA, GABA, Putrescine, Hydroxyproline, 0.9231;Ser, His, Ala, bABA, Ethylglycine, GABA, 0.9231;His, Ala, Amino adipic acid, bABA, Ethylglycine, GABA, 0.9231;His, Cit, Trp, bABA, bAiBA, GABA, 0.9225;His, bABA, bAiBA, Ethylglycine, GABA, Homoarginine, 0.9225;Ser, His, bABA, bAiBA, GABA, Hydroxyproline, 0.9219;His, Cit, bABA, bAiBA, GABA, N6-Acetyl-L-Lys, 0.9219;His, Cit, bABA, bAiBA, GABA, Homoarginine, 0.9219;His, Cit, Trp, bABA, Eth

ylglycine, GABA, 0.9219; His, Val, bABA, Ethylglycine, GABA, Putrescine, 0.9219; His, Trp, bABA, bAiBA, Ethylglycine, GABA, 0.9219; His, bABA, Ethylglycine, GABA, 3-Me-His, Hydroxyproline, 0.9219; His, bABA, bAiBA, GABA, N6-Acetyl-L-Lys, Hydroxyproline, 0.9219; Ser, His, Cit, bABA, GABA, Homoarginine, 0.9219; Ser, His, Val, bABA, bAiBA, GABA, 0.9213; His, Ala, Trp, bABA, Ethylglycine, GABA, 0.9213; His, Cit, Amino adipic acid, bABA, Ethylglycine, GABA, 0.9213; His, Amino adipic acid, bABA, bAiBA, GABA, Homoarginine, 0.9213; His, Amino adipic acid, bABA, Ethylglycine, GABA, Putrescine, 0.9213; Ser, His, Trp, bABA, Ethylglycine, GABA, 0.9213; His, Cit, Amino adipic acid, bABA, GABA, 3-Me-His, 0.9206; His, bABA, bAiBA, Ethylglycine, GABA, Putrescine, 0.9206; Ser, His, Met, bABA, bAiBA, GABA, 0.9206; His, Cit, bABA, bAiBA, Ethylglycine, Putrescine, 0.9206; His, Val, bABA, bAiBA, GABA, Hydroxyproline, 0.9206; His, Met, Amino adipic acid, bABA, Ethylglycine, GABA, 0.9206; Ser, His, Amino adipic acid, bABA, bAiBA, GABA, 0.9200; His, Tyr, bABA, bAiBA, Ethylglycine, GABA, 0.9200; Ser, His, Amino adipic acid, bABA, GABA, 3-Me-His, 0.9200; His, Val, Amino adipic acid, bABA, Ethylglycine, GABA, 0.9200; His, Trp, bABA, Ethylglycine, GABA, Hydroxyproline, 0.9200; His, Trp, Amino adipic acid, bABA, Ethylglycine, GABA, 0.9200; His, Amino adipic acid, bABA, bAiBA, GABA, Putrescine, 0.9200; His, bABA, bAiBA, Ethylglycine, GABA, N6-Acetyl-L-Lys, 0.9200; Ser, His, bABA, bAiBA, GABA, Putrescine, 0.9194; Ser, His, Amino adipic acid, bABA, GABA, Homoarginine, 0.9194; His, Tyr, Trp, bABA, Ethylglycine, GABA, 0.9194; His, Val, Trp, bABA, Ethylglycine, GABA, 0.9194; His, Ala, bABA, Ethylglycine, GABA, Hydroxyproline, 0.9194; His, Trp, bABA, Ethylglycine, GABA, Homoarginine, 0.9194; His, Amino adipic acid, bABA, Ethylglycine, GABA, N6-Acetyl-L-Lys, 0.9194; His, bABA, Ethylglycine, GABA, Putrescine, Hydroxyproline, 0.9194; His, Cit, bABA, bAiBA, GABA, 3-Me-His, 0.9188; His, Cit, Met, bABA, bAiBA, GABA, 0.9188; His, Cit, Tyr, bABA, bAiBA, GABA, 0.9188; Ser, His, bABA, Ethylglycine, GABA, Putrescine, 0.9188; Ser, His, bABA, GABA, 3-Me-His, Hydroxyproline, 0.9188; His, Met, bABA, bAiBA, Ethylglyci

ne, GABA, 0.9188; His, Cit, Amino adipic acid, bABA, GABA, Putrescine, 0.9188; His, Tyr, Amino adipic acid, bABA, Ethylglycine, GABA, 0.9188; His, Val, bABA, bAiBA, GABA, Homoarginine, 0.9181; His, Met, Trp, bABA, Ethylglycine, GABA, 0.9181; His, Trp, bABA, Ethylglycine, GABA, N6-Acetyl-L-Lys, 0.9181; Ser, His, bABA, Ethylglycine, GABA, Hydroxyproline, 0.9181; His, Cit, Amino adipic acid, bABA, GABA, N6-Acetyl-L-Lys, 0.9181; His, Trp, bABA, Ethylglycine, GABA, 3-Me-His, 0.9181; His, Amino adipic acid, bABA, GABA, Homoarginine, Hydroxyproline, 0.9181; Ser, His, Tyr, bABA, Ethylglycine, GABA, 0.9175; His, Ala, Trp, bABA, GABA, Hydroxyproline, 0.9175; His, Cit, Trp, bAiBA, Ethylglycine, Putrescine, 0.9175; His, Cit, Tyr, Amino adipic acid, bABA, GABA, 0.9175; His, Val, Amino adipic acid, bABA, bAiBA, GABA, 0.9175; His, Met, Amino adipic acid, bABA, GABA, 3-Me-His, 0.9175; His, Trp, bAiBA, Ethylglycine, Putrescine, Hydroxyproline, 0.9175; His, Trp, bABA, GABA, Homoarginine, Hydroxyproline, 0.9175; His, Trp, bABA, Ethylglycine, GABA, Putrescine, 0.9175; His, Trp, bABA, bAiBA, GABA, Putrescine, 0.9175; His, Amino adipic acid, bABA, bAiBA, GABA, 3-Me-His, 0.9175; His, Cit, Val, Amino adipic acid, bABA, GABA, 0.9175; His, Trp, Amino adipic acid, bABA, bAiBA, GABA, 0.9175; His, Cit, Amino adipic acid, bABA, GABA, Homoarginine, 0.9175; His, Cit, bABA, Ethylglycine, GABA, 3-Me-His, 0.9169; His, Cit, bABA, Ethylglycine, GABA, Homoarginine, 0.9169; His, Met, bABA, bAiBA, GABA, Hydroxyproline, 0.9169; His, Amino adipic acid, bABA, GABA, N6-Acetyl-L-Lys, 3-Me-His, 0.9169; His, bABA, bAiBA, Ethylglycine, GABA, 3-Me-His, 0.9169; Ser, His, Met, bABA, Ethylglycine, GABA, 0.9169; His, Ala, Amino adipic acid, bABA, bAiBA, GABA, 0.9169; His, Cit, bABA, Ethylglycine, GABA, Putrescine, 0.9169; His, Cit, Val, bABA, Ethylglycine, GABA, 0.9169; His, Trp, bABA, bAiBA, Ethylglycine, Putrescine, 0.9169; His, Amino adipic acid, bABA, bAiBA, GABA, N6-Acetyl-L-Lys, 0.9169; His, bABA, bAiBA, Ethylglycine, Putrescine, Hydroxyproline, 0.9169; Ser, His, Ala, bABA, bAiBA, GABA, 0.9163; Ser, His, Tyr, bABA, bAiBA, GABA, 0.9163; Ser, His, Met, bABA, GABA, Homoarginine, 0.9163; Ser, His, Met, bAiBA, Ethylgl

ycine, Putrescine, 0.9163; Ser, His, bABA, bAiBA, GABA, N6-Acetyl-L-Lys, 0.9163; Ser, His, bABA, bAiBA, GABA, 3-Me-His, 0.9163; Ser, His, bABA, GABA, Homoarginine, Hydroxyproline, 0.9163; His, Ala, Amino adipic acid, bABA, GABA, 3-Me-His, 0.9163; His, Val, bABA, bAiBA, GABA, N6-Acetyl-L-Lys, 0.9163; His, Val, Amino adipic acid, bABA, GABA, Hydroxyproline, 0.9163; His, Trp, bAiBA, Ethylglycine, GABA, Putrescine, 0.9163; His, Trp, Amino adipic acid, bABA, GABA, 3-Me-His, 0.9163; His, bABA, bAiBA, GABA, 3-Me-His, Hydroxyproline, 0.9163; Ser, His, Val, bABA, Ethylglycine, GABA, 0.9163; Ser, His, Trp, bABA, bAiBA, GABA, 0.9163; Ser, His, Trp, bABA, GABA, Homoarginine, 0.9163; Ser, His, bABA, Ethylglycine, GABA, N6-Acetyl-L-Lys, 0.9163; His, Met, Amino adipic acid, bABA, bAiBA, GABA, 0.9163; His, Trp, bABA, bAiBA, GABA, Hydroxyproline, 0.9163; Ser, His, bABA, GABA, Homoarginine, Putrescine, 0.9156; His, Ala, bABA, bAiBA, Ethylglycine, GABA, 0.9156; His, Ala, Cit, bABA, bAiBA, GABA, 0.9156; His, Cit, Amino adipic acid, bAiBA, Ethylglycine, Putrescine, 0.9156; His, Cit, Trp, Amino adipic acid, bABA, GABA, 0.9156; His, Cit, Tyr, bABA, Ethylglycine, GABA, 0.9156; His, Val, bABA, bAiBA, GABA, 3-Me-His, 0.9156; His, Amino adipic acid, bABA, GABA, N6-Acetyl-L-Lys, Hydroxyproline, 0.9156; His, bABA, bAiBA, GABA, Homoarginine, Putrescine, 0.9156; His, Cit, Amino adipic acid, bABA, GABA, Hydroxyproline, 0.9156; His, Tyr, Amino adipic acid, bABA, bAiBA, GABA, 0.9156; His, Tyr, Val, bABA, Ethylglycine, GABA, 0.9156; His, Val, bABA, Ethylglycine, GABA, 3-Me-His, 0.9156; His, Val, Trp, bABA, bAiBA, GABA, 0.9156; His, Amino adipic acid, bABA, GABA, Putrescine, Hydroxyproline, 0.9156; His, bABA, Ethylglycine, GABA, Homoarginine, Hydroxyproline, 0.9156; His, bABA, bAiBA, GABA, Homoarginine, Hydroxyproline, 0.9156; His, Amino adipic acid, bAiBA, Ethylglycine, GABA, Hydroxyproline, 0.9150; Ser, His, Cit, bABA, bAiBA, GABA, 0.9150; His, Ala, Amino adipic acid, bABA, GABA, Hydroxyproline, 0.9150; His, Ala, Cit, Amino adipic acid, bABA, GABA, 0.9150; His, Tyr, bABA, bAiBA, GABA, Putrescine, 0.9150; His, Tyr, Amino adipic acid, bABA, GABA, 3-Me-His, 0.9150; His, Val, bABA, bAiBA, GABA, Putrescine

, 0.9150; His, Val, Amino adipic acid, bABA, GABA, 3-Me-His, 0.9150; His, Val, Met, bABA, bAiBA, GABA, 0.9150; His, Met, bABA, bAiBA, GABA, Putrescine, 0.9150; His, Met, Amino adipic acid, bABA, GABA, Hydroxyproline, 0.9150; His, Trp, bAiBA, Ethylglycine, GABA, Hydroxyproline, 0.9150; His, Amino adipic acid, bABA, GABA, Putrescine, 3-Me-His, 0.9150; His, Ala, bABA, GABA, 3-Me-His, Hydroxyproline, 0.9150; His, Ala, bABA, Ethylglycine, GABA, Putrescine, 0.9150; His, Cit, bABA, Ethylglycine, GABA, N6-Acetyl-L-Lys, 0.9150; His, Cit, Met, bABA, Ethylglycine, GABA, 0.9150; His, Tyr, bAiBA, Ethylglycine, N6-Acetyl-L-Lys, Putrescine, 0.9150; His, Amino adipic acid, bABA, GABA, Homoarginine, 3-Me-His, , 0.9150; His, Amino adipic acid, bABA, GABA, Homoarginine, N6-Acetyl-L-Lys, 0.9150; His, bABA, bAiBA, Ethylglycine, N6-Acetyl-L-Lys, Hydroxyproline, 0.9150; His, Ala, Val, bABA, bAiBA, GABA, 0.9144; His, Cit, Tyr, bAiBA, Ethylglycine, Putrescine, 0.9144; His, Cit, bABA, GABA, 3-Me-His, Hydroxyproline, 0.9144; His, Tyr, bAiBA, Ethylglycine, Putrescine, Hydroxyproline, 0.9144; His, Trp, bABA, GABA, 3-Me-His, Hydroxyproline, 0.9144; His, bABA, bAiBA, GABA, Putrescine, 3-Me-His, 0.9144; Ser, His, Tyr, bABA, GABA, Homoarginine, 0.9144; His, Cit, bAiBA, Ethylglycine, N6-Acetyl-L-Lys, Putrescine, 0.9144; His, Cit, Met, Amino adipic acid, bABA, GABA, 0.9144; His, Tyr, bABA, Ethylglycine, GABA, Hydroxyproline, 0.9144; His, Tyr, bABA, Ethylglycine, GABA, Putrescine, 0.9144; His, Tyr, bABA, bAiBA, GABA, Hydroxyproline, 0.9144; His, Tyr, Amino adipic acid, bABA, GABA, Hydroxyproline, 0.9144; His, Met, bABA, Ethylglycine, GABA, Hydroxyproline, 0.9144; His, Met, Amino adipic acid, bABA, GABA, Homoarginine, 0.9144; His, Trp, Amino adipic acid, bABA, GABA, Homoarginine, 0.9144; His, bABA, Ethylglycine, GABA, Putrescine, 3-Me-His, 0.9144; Ser, His, Trp, bAiBA, Ethylglycine, Putrescine, 0.9144; His, Cit, Trp, bABA, GABA, N6-Acetyl-L-Lys, 0.9144; Ser, His, Cit, bAiBA, Ethylglycine, Putrescine, 0.9138; Ser, His, bAiBA, Ethylglycine, GABA, Hydroxyproline, 0.9138; His, bABA, Ethylglycine, GABA, N6-Acetyl-L-Lys, Putrescine, 0.9138; His, bABA, bAiBA, GABA, N6-Acetyl-L-Lys, Putrescine, 0.91

38; Ser, His, Cit, bABA, Ethylglycine, GABA, 0.9138; Ser, His, Trp, bAiBA, Ethylglycine, GABA, 0.9138; His, Ala, bABA, bAiBA, GABA, Hydroxyproline, 0.9138; His, Ala, Trp, bAiBA, Ethylglycine, GABA, 0.9138; His, Ala, Tyr, bABA, Ethylglycine, GABA, 0.9138; His, Cit, Trp, bABA, GABA, Homoarginine, 0.9138; His, Val, bABA, Ethylglycine, GABA, N6-Acetyl-L-Lys, 0.9138; His, Val, bABA, Ethylglycine, GABA, Homoarginine, 0.9138; His, Trp, bABA, GABA, Putrescine, Hydroxyproline, 0.9138; His, bABA, GABA, Putrescine, 3-Me-His, Hydroxyproline, 0.9138; Ser, His, Cit, Amino adipic acid, bABA, GABA, 0.9138; His, Ala, Amino adipic acid, bABA, GABA, Homoarginine, 0.9138; His, Ala, Cit, bABA, Ethylglycine, GABA, 0.9138; His, Ala, Cit, Trp, bABA, GABA, 0.9138; His, Cit, bABA, GABA, Putrescine, Hydroxyproline, 0.9138; His, Tyr, bABA, Ethylglycine, GABA, 3-Me-His, 0.9138; His, Val, bABA, Ethylglycine, GABA, Hydroxyproline, 0.9138; His, Val, Amino adipic acid, bABA, GABA, Homoarginine, 0.9138; His, Trp, bABA, bAiBA, GABA, N6-Acetyl-L-Lys, 0.9138; His, Trp, bABA, bAiBA, GABA, Homoarginine, 0.9138; His, bABA, Ethylglycine, GABA, N6-Acetyl-L-Lys, 3-Me-His, 0.9138; Ser, His, Tyr, bAiBA, Ethylglycine, Putrescine, 0.9131; Ser, His, bAiBA, Ethylglycine, GABA, Homoarginine, 0.9131; His, Cit, bAiBA, Ethylglycine, GABA, Putrescine, 0.9131; His, Tyr, bABA, bAiBA, GABA, Homoarginine, 0.9131; His, Met, Trp, Amino adipic acid, bABA, GABA, 0.9131; His, bAiBA, Ethylglycine, GABA, N6-Acetyl-L-Lys, Putrescine, 0.9131; Ser, His, Cit, bABA, bAiBA, Putrescine, 0.9131; Ser, His, Val, bABA, GABA, Homoarginine, 0.9131; Ser, His, Amino adipic acid, bAiBA, Ethylglycine, Putrescine, 0.9131; Ser, His, bABA, bAiBA, Ethylglycine, Putrescine, 0.9131; His, Cit, bABA, GABA, Homoarginine, Hydroxyproline, 0.9131; His, Cit, Met, bAiBA, Ethylglycine, Putrescine, 0.9131; His, Tyr, Amino adipic acid, bABA, GABA, Homoarginine, 0.9131; His, Tyr, Trp, bAiBA, Ethylglycine, Putrescine, 0.9131; His, Met, bABA, bAiBA, GABA, N6-Acetyl-L-Lys, 0.9131; His, Trp, bAiBA, Ethylglycine, Putrescine, 3-Me-His, 0.9131; His, Trp, Amino adipic acid, bABA, GABA, Hydroxyproline, 0.9131; His, Amino adipic a

cid, bABA, GABA, Homoarginine, Putrescine, 0.9131; Ser, His, Amino adipic acid, bABA, GABA, Hydroxyproline, 0.9131; His, Cit, Trp, bABA, GABA, Putrescine, 0.9131; His, Val, bAiBA, Ethylglycine, GABA, Hydroxyproline, 0.9125; Ser, His, bAiBA, Ethylglycine, GABA, Putrescine, 0.9125; His, Val, Trp, Amino adipic acid, bABA, GABA, 0.9125; His, bAiBA, Ethylglycine, GABA, Putrescine, Hydroxyproline, 0.9125; His, Tyr, bABA, bAiBA, GABA, N6-Acetyl-L-Lys, 0.9125; His, Met, bABA, Ethylglycine, GABA, Putrescine, 0.9125; Ser, His, Ala, bABA, GABA, Homoarginine, 0.9125; Ser, His, bABA, bAiBA, Ethylglycine, N6-Acetyl-L-Lys, 0.9125; Ser, His, bABA, GABA, Homoarginine, N6-Acetyl-L-Lys, 0.9125; Ser, His, bABA, GABA, Homoarginine, 3-Me-His, 0.9125; His, Ala, bABA, Ethylglycine, GABA, 3-Me-His, 0.9125; His, Ala, Met, bABA, Ethylglycine, GABA, 0.9125; His, Cit, Trp, bAiBA, Ethylglycine, N6-Acetyl-L-Lys, 0.9125; His, Tyr, bABA, bAiBA, Ethylglycine, Putrescine, 0.9125; His, Met, Trp, bAiBA, Ethylglycine, Putrescine, 0.9125; His, bABA, Ethylglycine, GABA, N6-Acetyl-L-Lys, Hydroxyproline, 0.9125; His, bABA, Ethylglycine, GABA, Homoarginine, Putrescine, 0.9125; Ser, His, bAiBA, Ethylglycine, GABA, N6-Acetyl-L-Lys, 0.9119; His, Tyr, bAiBA, Ethylglycine, GABA, Putrescine, 0.9119; His, Tyr, Val, bABA, bAiBA, GABA, 0.9119; His, Trp, bAiBA, GABA, Putrescine, Hydroxyproline, 0.9119; Ser, His, Val, Amino adipic acid, bABA, GABA, 0.9119; Ser, His, Val, bAiBA, Ethylglycine, Putrescine, 0.9119; His, Ala, bABA, Ethylglycine, GABA, Homoarginine, 0.9119; His, Ala, bABA, bAiBA, GABA, Putrescine, 0.9119; His, Ala, Val, bABA, Ethylglycine, GABA, 0.9119; His, Cit, bAiBA, Ethylglycine, Putrescine, Hydroxyproline, 0.9119; His, Cit, Val, bAiBA, Ethylglycine, Putrescine, 0.9119; His, Tyr, bABA, Ethylglycine, GABA, N6-Acetyl-L-Lys, 0.9119; His, Tyr, Trp, bABA, bAiBA, GABA, 0.9119; His, Val, Met, bABA, Ethylglycine, GABA, 0.9119; His, bABA, Ethylglycine, GABA, Homoarginine, N6-Acetyl-L-Lys, 0.9119; His, bAiBA, Ethylglycine, N6-Acetyl-L-Lys, Putrescine, Hydroxyproline, 0.9119; Cit, Trp, bABA, bAiBA, Ethylglycine, GABA, 0.9119; Ser, His, Trp, Amino adipic acid, bABA, GABA, 0.9119; Ser, His, bABA, bAiBA, Ethylglyci

ne, Homoarginine, 0.9119; Ser, His, bABA, bAiBA, Ethylglycine, Hydroxyproline, 0.9119; His, Met, bABA, Ethylglycine, GABA, 3-Me-His, 0.9119; His, Trp, bAiBA, Ethylglycine, N6-Acetyl-L-Lys, Putrescine, 0.9119; His, bABA, GABA, N6-Acetyl-L-Lys, 3-Me-His, Hydroxyproline, 0.9119; Ser, His, Trp, bABA, GABA, 3-Me-His, 0.9119; His, Cit, Tyr, bABA, GABA, Hydroxyproline, 0.9119; His, Trp, bABA, bAiBA, GABA, 3-Me-His, 0.9119; Ser, His, Val, bAiBA, Ethylglycine, GABA, 0.9113; His, Cit, bAiBA, Ethylglycine, GABA, N6-Acetyl-L-Lys, 0.9113; His, Cit, Trp, bAiBA, Ethylglycine, GABA, 0.9113; His, Met, bAiBA, Ethylglycine, GABA, Hydroxyproline, 0.9113; Ser, His, Cit, bABA, bAiBA, Ethylglycine, 0.9113; Ser, His, bAiBA, Ethylglycine, Putrescine, Hydroxyproline, 0.9113; His, Ala, Trp, Aminoadipic acid, bABA, GABA, 0.9113; His, Cit, bAiBA, Ethylglycine, Putrescine, 3-Me-His, 0.9113; His, Tyr, Aminoadipic acid, bAiBA, Ethylglycine, Putrescine, 0.9113; His, Tyr, Trp, bABA, GABA, Hydroxyproline, 0.9113; His, Met, bABA, bAiBA, GABA, Homoarginine, 0.9113; Ser, His, Ala, Aminoadipic acid, bABA, GABA, 0.9113; His, Ala, Trp, bAiBA, Ethylglycine, Putrescine, 0.9113; His, Cit, bAiBA, Ethylglycine, Homoarginine, Putrescine, 0.9113; His, Cit, bABA, bAiBA, N6-Acetyl-L-Lys, Putrescine, 0.9113; His, Tyr, bABA, GABA, 3-Me-His, Hydroxyproline, 0.9113; His, Tyr, Aminoadipic acid, bABA, GABA, Putrescine, 0.9113; His, Val, bABA, GABA, 3-Me-His, Hydroxyproline, 0.9113; His, Val, Trp, Ethylglycine, GABA, Putrescine, 0.9113; His, Met, bABA, GABA, 3-Me-His, Hydroxyproline, 0.9113; His, Met, bABA, Ethylglycine, GABA, Homoarginine, 0.9113; His, Cit, Met, Trp, bABA, GABA, 0.9113; His, Ala, Tyr, bAiBA, Ethylglycine, Putrescine, 0.9106; His, Cit, Aminoadipic acid, bAiBA, Ethylglycine, GABA, 0.9106; His, Ala, Aminoadipic acid, bABA, GABA, Putrescine, 0.9106; His, Ala, Tyr, Aminoadipic acid, bABA, GABA, 0.9106; His, Ala, Cit, bAiBA, Ethylglycine, Putrescine, 0.9106; His, Tyr, Aminoadipic acid, bABA, GABA, N6-Acetyl-L-Lys, 0.9106; His, Val, Trp, bAiBA, Ethylglycine, Putrescine, 0.9106; His, Trp, bAiBA, Ethylglycine, GABA, N6-Acetyl-L-Lys, 0.9106; His, Trp, Aminoadipic acid, bAiBA, Ethylglycine, Putrescine

e, 0.9106; His, Trp, Amino adipic acid, bABA, GABA, N6-Acetyl-L-Lys, 0.9106; His, Amino adipic acid, bAiBA, Ethylglycine, Putrescine, Hydroxyproline, 0.9106; Trp, Amino adipic acid, bABA, bAiBA, GABA, Hydroxyproline, 0.9106; Ser, His, Ala, Trp, bABA, GABA, 0.9106; Ser, His, Trp, bAiBA, GABA, Hydroxyproline, 0.9106; Ser, His, Amino adipic acid, bABA, bAiBA, Ethylglycine, 0.9106; His, Ala, bABA, GABA, N6-Acetyl-L-Lys, Hydroxyproline, 0.9106; His, Cit, bABA, bAiBA, Ethylglycine, Homoarginine, 0.9106; His, Tyr, bABA, Ethylglycine, GABA, Homoarginine, 0.9106; His, Tyr, Met, bABA, Ethylglycine, GABA, 0.9106; His, Met, bABA, Ethylglycine, GABA, N6-Acetyl-L-Lys, 0.9106; His, Trp, Amino adipic acid, Ethylglycine, GABA, 3-Me-His, 0.9106; Ser, His, Cit, bABA, GABA, 3-Me-His, 0.9106; Ser, His, Amino adipic acid, bAiBA, Ethylglycine, GABA, 0.9100; His, Ala, bABA, bAiBA, GABA, N6-Acetyl-L-Lys, 0.9100; His, Ala, Met, bABA, bAiBA, GABA, 0.9100; His, Met, Amino adipic acid, bAiBA, Ethylglycine, GABA, 0.9100; His, Amino adipic acid, bAiBA, Ethylglycine, GABA, Putrescine, 0.9100; Ser, His, Cit, bAiBA, Ethylglycine, GABA, 0.9100; His, Ala, Cit, Trp, Ethylglycine, Putrescine, 0.9100; His, Cit, bABA, bAiBA, Putrescine, Hydroxyproline, 0.9100; His, Cit, Trp, bABA, GABA, Hydroxyproline, 0.9100; His, Tyr, Trp, Amino adipic acid, bABA, GABA, 0.9100; His, Trp, Amino adipic acid, bAiBA, Ethylglycine, GABA, 0.9100; His, Trp, Amino adipic acid, bABA, GABA, Putrescine, 0.9100; His, bABA, bAiBA, GABA, N6-Acetyl-L-Lys, 3-Me-His, 0.9100; Ser, His, Cit, bABA, bAiBA, Homoarginine, 0.9100; Ser, His, Met, Amino adipic acid, bABA, GABA, 0.9100; Ser, His, Trp, Ethylglycine, GABA, Homoarginine, 0.9100; Ser, His, Amino adipic acid, bABA, GABA, N6-Acetyl-L-Lys, 0.9100; Ser, His, bAiBA, Ethylglycine, Homoarginine, Putrescine, 0.9100; His, Ala, bABA, Ethylglycine, GABA, N6-Acetyl-L-Lys, 0.9100; His, Cit, bABA, bAiBA, Ethylglycine, N6-Acetyl-L-Lys, 0.9100; His, Cit, Amino adipic acid, bABA, bAiBA, Ethylglycine, 0.9100; His, Cit, Trp, bABA, GABA, 3-Me-His, 0.9100; His, Tyr, bABA, GABA, Putrescine, Hydroxyproline, 0.9100; His, Tyr, Val, Amino adipic acid, bABA, GABA, 0.9100; His, Val, Met, Amino adipic ac

id, bABA, GABA, 0.9100;His, Met, Amino adipic acid, bABA, GABA, N6-Acetyl-L-Lys, 0.9100;His, Met, Trp, bABA, GABA, Hydroxyproline, 0.9100;His, Trp, bAiBA, GABA, N6-Acetyl-L-Lys, Hydroxyproline, 0.9100;His, Trp, bAiBA, Ethylglycine, N6-Acetyl-L-Lys, Hydroxyproline, 0.9100;His, bABA, Ethylglycine, GABA, Homarginine, 3-Me-His, 0.9100;His, Met, Trp, bABA, bAiBA, GABA, 0.9100;His, Tyr, bABA, bAiBA, Putrescine, Hydroxyproline, 0.9094;His, bAiBA, Ethylglycine, GABA, 3-Me-His, Hydroxyproline, 0.9094;His, bAiBA, Ethylglycine, GABA, N6-Acetyl-L-Lys, Hydroxyproline, 0.9094;Ser, His, bAiBA, Ethylglycine, N6-Acetyl-L-Lys, Putrescine, 0.9094;His, Ala, Amino adipic acid, bABA, GABA, N6-Acetyl-L-Lys, 0.9094;His, Ala, Val, Amino adipic acid, bABA, GABA, 0.9094;His, Ala, Cit, bABA, Ethylglycine, Putrescine, 0.9094;His, Cit, bABA, Ethylglycine, Homarginine, Putrescine, 0.9094;His, Tyr, bAiBA, Ethylglycine, Putrescine, 3-Me-His, 0.9094;His, Val, Amino adipic acid, bABA, GABA, Putrescine, 0.9094;His, Val, Amino adipic acid, bABA, GABA, N6-Acetyl-L-Lys, 0.9094;His, Met, bABA, bAiBA, GABA, 3-Me-His, 0.9094;His, Trp, bAiBA, Ethylglycine, GABA, Homarginine, 0.9094;His, Amino adipic acid, bAiBA, Ethylglycine, GABA, N6-Acetyl-L-Lys, 0.9094;His, bAiBA, Ethylglycine, GABA, Putrescine, 3-Me-His, 0.9094;Ser, His, Ala, bABA, GABA, Hydroxyproline, 0.9094;Ser, His, Met, bABA, bAiBA, Ethylglycine, 0.9094;Ser, His, bABA, bAiBA, Putrescine, Hydroxyproline, 0.9094;Ser, His, bAiBA, Ethylglycine, N6-Acetyl-L-Lys, Hydroxyproline, 0.9094;His, Ala, bABA, GABA, Putrescine, Hydroxyproline, 0.9094;His, Ala, Trp, bABA, GABA, Putrescine, 0.9094;His, Cit, bABA, GABA, N6-Acetyl-L-Lys, Hydroxyproline, 0.9094;His, Cit, Met, bABA, bAiBA, Ethylglycine, 0.9094;His, Val, bAiBA, Ethylglycine, Putrescine, Hydroxyproline, 0.9094;His, Met, bAiBA, Ethylglycine, Putrescine, Hydroxyproline, 0.9094;His, Amino adipic acid, bABA, bAiBA, Ethylglycine, Putrescine, 0.9094;His, bABA, bAiBA, N6-Acetyl-L-Lys, Putrescine, Hydroxyproline, 0.9094;His, bAiBA, Ethylglycine, N6-Acetyl-L-Lys, 3-Me-His, Hydroxyproline, 0.9094;Ser, His, Ala, Cit, bABA, GABA, 0.9094;Ser, His, Ala, Trp, Eth

ylglycine, GABA, 0.9094; His, Ala, Trp, bABA, bAiBA, GABA, 0.9094; His, Ala, Cit, Val, bABA, GABA, 0.9094; His, Cit, Val, Trp, bABA, GABA, 0.9094; Ser, His, Ala, bAiBA, Ethylglycine, GABA, 0.9088; His, Cit, Trp, bAiBA, GABA, Hydroxyproline, 0.9088; His, Trp, Amino adipic acid, bAiBA, GABA, Hydroxyproline, 0.9088; Ser, His, Cit, bAiBA, Ethylglycine, N6-Acetyl-L-Lys, 0.9088; His, Ala, Trp, Ethylglycine, Homoarginine, Putrescine, 0.9088; His, Ala, Tyr, bABA, bAiBA, GABA, 0.9088; His, Cit, Trp, bAiBA, GABA, Putrescine, 0.9088; His, Tyr, bAiBA, Ethylglycine, Homoarginine, Putrescine, 0.9088; His, Tyr, Met, bAiBA, Ethylglycine, Putrescine, 0.9088; His, Val, bAiBA, Ethylglycine, GABA, N6-Acetyl-L-Lys, 0.9088; His, Met, bAiBA, Ethylglycine, GABA, Putrescine, 0.9088; His, Amino adipic acid, bABA, GABA, N6-Acetyl-L-Lys, Putrescine, 0.9088; Ser, His, Tyr, bABA, bAiBA, Ethylglycine, 0.9088; Ser, His, bAiBA, Ethylglycine, Putrescine, 3-Me-His, 0.9088; His, Ala, bABA, GABA, Homoarginine, Hydroxyproline, 0.9088; His, Cit, bABA, GABA, Homoarginine, Putrescine, 0.9088; His, Cit, Val, Trp, bAiBA, Ethylglycine, 0.9088; His, Tyr, Met, bABA, bAiBA, GABA, 0.9088; His, Val, bABA, bAiBA, Ethylglycine, Putrescine, 0.9088; His, Val, Trp, bABA, GABA, Hydroxyproline, 0.9088; His, Met, bABA, bAiBA, Ethylglycine, Putrescine, 0.9088; His, Met, Amino adipic acid, bABA, GABA, Putrescine, 0.9088; Cit, Trp, Amino adipic acid, bABA, Ethylglycine, GABA, 0.9088; Met, Amino adipic acid, bABA, bAiBA, Ethylglycine, GABA, 0.9088; Trp, Amino adipic acid, bABA, bAiBA, Ethylglycine, GABA, 0.9088; His, Ala, Amino adipic acid, bAiBA, Ethylglycine, GABA, 0.9081; His, Val, bAiBA, Ethylglycine, GABA, Putrescine, 0.9081; His, Amino adipic acid, bAiBA, GABA, Putrescine, Hydroxyproline, 0.9081; Ser, His, Trp, Ethylglycine, GABA, 3-Me-His, 0.9081; Ser, His, bAiBA, Ethylglycine, GABA, 3-Me-His, 0.9081; His, Ala, Met, Amino adipic acid, bABA, GABA, 0.9081; His, Tyr, Met, Amino adipic acid, bABA, GABA, 0.9081; His, Tyr, Val, bAiBA, Ethylglycine, Putrescine, 0.9081; His, Val, Trp, Ethylglycine, GABA, Hydroxyproline, 0.9081; His, Met, bAiBA, Ethylglycine, GABA, N6-Acetyl-L-Lys, 0.9

081;His, Met, Aminoadipic acid, bAiBA, GABA, Hydroxyproline, 0.9081;Ser, His, Ala, bAiBA, Ethylglycine, Putrescine, 0.9081;Ser, His, Met, bABA, bAiBA, Putrescine, 0.9081;Ser, His, bABA, GABA, Putrescine, Hydroxyproline, 0.9081;His, Ala, bABA, bAiBA, GABA, Homoarginine, 0.9081;His, Ala, Met, bABA, GABA, Hydroxyproline, 0.9081;His, Cit, Trp, bAiBA, Ethylglycine, Homoarginine, 0.9081;His, Cit, Tyr, bABA, GABA, N6-Acetyl-L-Lys, 0.9081;His, Cit, Tyr, Trp, bABA, GABA, 0.9081;His, Trp, bABA, GABA, N6-Acetyl-L-Lys, Hydroxyproline, 0.9081;His, Aminoadipic acid, bABA, bAiBA, Ethylglycine, Hydroxyproline, 0.9081;Ser, His, Ala, bABA, Ethylglycine, Putrescine, 0.9081;Ser, His, Cit, Trp, bAiBA, Ethylglycine, 0.9081;Ser, His, Cit, bABA, Ethylglycine, Homoarginine, 0.9081;Ser, His, Trp, bABA, GABA, Putrescine, 0.9081;His, Ala, Trp, Ethylglycine, GABA, 3-Me-His, 0.9081;His, Ala, Cit, bABA, GABA, Hydroxyproline, 0.9081;His, Cit, bABA, GABA, N6-Acetyl-L-Lys, Putrescine, 0.9081;His, Cit, Trp, bABA, bAiBA, Ethylglycine, 0.9081;His, Cit, Met, bABA, GABA, Hydroxyproline, 0.9081;His, Tyr, bABA, GABA, N6-Acetyl-L-Lys, Hydroxyproline, 0.9081;His, Met, bABA, GABA, N6-Acetyl-L-Lys, Hydroxyproline, 0.9081;His, Trp, Ethylglycine, GABA, 3-Me-His, Hydroxyproline, 0.9081;His, bABA, bAiBA, Ethylglycine, Putrescine, 3-Me-His, 0.9081;His, bABA, bAiBA, Ethylglycine, N6-Acetyl-L-Lys, Putrescine, 0.9081;His, Cit, Val, bAiBA, Ethylglycine, GABA, 0.9075;His, Val, Aminoadipic acid, bAiBA, Ethylglycine, GABA, 0.9075;His, Val, Met, bAiBA, Ethylglycine, GABA, 0.9075;His, bAiBA, Ethylglycine, GABA, Homoarginine, Hydroxyproline, 0.9075;His, Ala, bAiBA, Ethylglycine, GABA, Putrescine, 0.9075;His, Cit, Tyr, bABA, bAiBA, Ethylglycine, 0.9075;His, Tyr, Trp, bAiBA, Ethylglycine, GABA, 0.9075;His, bABA, bAiBA, GABA, Homoarginine, 3-Me-His, 0.9075;Ser, His, Cit, Trp, bABA, GABA, 0.9075;Ser, His, Met, bAiBA, Ethylglycine, Hydroxyproline, 0.9075;Ser, His, Trp, bABA, GABA, Hydroxyproline, 0.9075;His, Cit, bABA, bAiBA, Ethylglycine, 3-Me-His, 0.9075;His, Cit, Aminoadipic acid, bABA, bAiBA, Putrescine, 0.9075;His, Cit, Trp, Ethylglycine, Homoarginine, Putrescine, 0.9075;His, Cit, Met,

bABA, GABA, Putrescine, 0.9075; His, Trp, bAiBA, GABA, 3-Me-His, Hydroxyproline, 0.9075; His, Trp, bAiBA, Ethylglycine, GABA, 3-Me-His, 0.9075; His, Trp, bABA, GABA, Homoarginine, Putrescine, 0.9075; His, bABA, GABA, Homoarginine, 3-Me-His, Hydroxyproline, 0.9075; His, bABA, GABA, Homoarginine, Putrescine, Hydroxyproline, 0.9075; Trp, bABA, bAiBA, Ethylglycine, GABA, Hydroxyproline, 0.9075; Ser, His, Val, Trp, Ethylglycine, GABA, 0.9075; Ser, His, Amino adipic acid, bABA, GABA, Putrescine, 0.9075; His, Amino adipic acid, bABA, bAiBA, Ethylglycine, N6-Acetyl-L-Lys, 0.9075; His, bABA, GABA, N6-Acetyl-L-Lys, Putrescine, Hydroxyproline, 0.9075; His, Cit, bAiBA, Ethylglycine, GABA, Hydroxyproline, 0.9069; His, Tyr, Amino adipic acid, bAiBA, Ethylglycine, GABA, 0.9069; Cit, Val, bABA, bAiBA, Ethylglycine, GABA, 0.9069; Ser, His, Cit, bABA, Ethylglycine, Putrescine, 0.9069; Ser, His, Tyr, bAiBA, Ethylglycine, N6-Acetyl-L-Lys, 0.9069; Ser, His, Met, bAiBA, Ethylglycine, GABA, 0.9069; Ser, His, Trp, bABA, bAiBA, Ethylglycine, 0.9069; Ser, His, Trp, bAiBA, GABA, N6-Acetyl-L-Lys, 0.9069; Ser, His, bABA, Ethylglycine, Homoarginine, Putrescine, 0.9069; His, Ala, Tyr, bABA, GABA, Hydroxyproline, 0.9069; His, Cit, bABA, GABA, Putrescine, 3-Me-His, 0.9069; His, Cit, bABA, GABA, N6-Acetyl-L-Lys, 3-Me-His, 0.9069; His, Cit, Amino adipic acid, bAiBA, Ethylglycine, N6-Acetyl-L-Lys, 0.9069; His, Cit, Met, bABA, GABA, N6-Acetyl-L-Lys, 0.9069; His, Cit, Val, bAiBA, Ethylglycine, N6-Acetyl-L-Lys, 0.9069; His, Tyr, bABA, bAiBA, GABA, 3-Me-His, 0.9069; His, Val, Trp, bAiBA, Ethylglycine, GABA, 0.9069; His, Met, Trp, bAiBA, Ethylglycine, GABA, 0.9069; Ala, Cit, Trp, bABA, Ethylglycine, GABA, 0.9069; Trp, Amino adipic acid, bABA, Ethylglycine, GABA, Homoarginine, 0.9069; Ser, His, Cit, Tyr, bABA, GABA, 0.9069; Ser, His, Cit, bABA, GABA, Putrescine, 0.9069; Ser, His, Cit, bABA, GABA, Hydroxyproline, 0.9069; Ser, His, Tyr, Amino adipic acid, bABA, GABA, 0.9069; Ser, His, Val, Trp, bABA, GABA, 0.9069; Ser, His, Val, bABA, bAiBA, Ethylglycine, 0.9069; Ser, His, Val, bAiBA, Ethylglycine, Homoarginine, 0.9069; Ser, His, Met, Trp, bABA, GABA, 0.9069; Ser, His, Met, bAiBA, Ethylglycine, N6-Acetyl-L-Lys, 0

. 9069; Ser, His, Trp, bAiBA, GABA, Putrescine, 0. 9069; Ser, His, bABA, bAiBA, Ethylglycine, 3-Me-His, 0. 9069; Ser, Met, bABA, bAiBA, Ethylglycine, GABA, 0. 9069; His, Cit, Met, bABA, GABA, Homoarginine, 0. 9069; His, Cit, Met, bABA, bAiBA, Putrescine, 0. 9069; His, Cit, Val, bABA, GABA, Hydroxyproline, 0. 9069; His, Cit, Val, bABA, GABA, Homoarginine, 0. 9069; His, Cit, Val, bABA, bAiBA, Ethylglycine, 0. 9069; His, Cit, Tyr, Val, bABA, GABA, 0. 9069; His, Val, bABA, GABA, Homoarginine, Hydroxyproline, 0. 9069; His, Trp, bAiBA, Ethylglycine, Homoarginine, Putrescine, 0. 9069; Cit, Amino adipic acid, bABA, bAiBA, Ethylglycine, GABA, 0. 9069; His, Val, bAiBA, Ethylglycine, GABA, Homoarginine, 0. 9063; Ser, His, Amino adipic acid, Ethylglycine, GABA, Homoarginine, 0. 9063; His, Ala, bAiBA, Ethylglycine, GABA, N6-Acetyl-L-Lys, 0. 9063; His, Ala, Val, bAiBA, Ethylglycine, GABA, 0. 9063; His, Val, bAiBA, Ethylglycine, GABA, 3-Me-His, 0. 9063; His, bAiBA, Ethylglycine, GABA, N6-Acetyl-L-Lys, 3-Me-His, 0. 9063; His, bAiBA, Ethylglycine, GABA, Homoarginine, Putrescine, 0. 9063; Ser, His, Trp, bAiBA, Ethylglycine, Homoarginine, 0. 9063; Ser, His, bABA, Ethylglycine, Putrescine, Hydroxyproline, 0. 9063; Ser, His, bABA, GABA, N6-Acetyl-L-Lys, Hydroxyproline, 0. 9063; Ser, His, bAiBA, Ethylglycine, N6-Acetyl-L-Lys, 3-Me-His, 0. 9063; His, Ala, bABA, bAiBA, GABA, 3-Me-His, 0. 9063; His, Ala, Cit, bABA, GABA, N6-Acetyl-L-Lys, 0. 9063; His, Cit, bAiBA, Ethylglycine, N6-Acetyl-L-Lys, 3-Me-His, 0. 9063; His, Cit, bABA, GABA, Homoarginine, N6-Acetyl-L-Lys, 0. 9063; His, Cit, Trp, bABA, Ethylglycine, Putrescine, 0. 9063; His, Met, Amino adipic acid, bAiBA, Ethylglycine, Putrescine, 0. 9063; His, Amino adipic acid, bAiBA, Ethylglycine, Putrescine, 3-Me-His, 0. 9063; His, Amino adipic acid, bAiBA, Ethylglycine, N6-Acetyl-L-Lys, Putrescine, 0. 9063; His, bAiBA, Ethylglycine, Putrescine, 3-Me-His, Hydroxyproline, 0. 9063; Ser, His, Trp, bABA, GABA, N6-Acetyl-L-Lys, 0. 9063; Ser, His, Trp, bAiBA, Ethylglycine, N6-Acetyl-L-Lys, 0. 9063; Ser, His, Trp, bAiBA, Ethylglycine, 3-Me-His, 0. 9063; Ser, His, bABA, bAiBA, Homoarginine, Hydroxyproline, 0. 9063; His, Cit, Val, bABA, GABA, N6-Acetyl-L-Lys, 0. 9063; His, Met, bAB

A, GABA, Putrescine, Hydroxyproline, 0.9063; Ser, His, Cit, Val, bABA, GABA, 0.9063; His, Cit, bABA, GABA, Homoarginine, 3-Me-His, 0.9063; His, Cit, bAiBA, Ethylglycine, GABA, Homoarginine, 0.9056; His, Trp, bAiBA, GABA, Homoarginine, Hydroxyproline, 0.9056; Ser, His, Cit, Trp, bAiBA, GABA, 0.9056; Ser, His, bABA, Ethylglycine, Putrescine, 3-Me-His, 0.9056; His, Ala, bAiBA, Ethylglycine, Putrescine, Hydroxyproline, 0.9056; His, Ala, Trp, Ethylglycine, GABA, Putrescine, 0.9056; His, Cit, bABA, bAiBA, Ethylglycine, Hydroxyproline, 0.9056; His, Cit, Amino adipic acid, bABA, Ethylglycine, Putrescine, 0.9056; His, Cit, Trp, bAiBA, Ethylglycine, Hydroxyproline, 0.9056; His, Cit, Tyr, bABA, GABA, Putrescine, 0.9056; His, Met, bAiBA, Ethylglycine, N6-Acetyl-L-Lys, Hydroxyproline, 0.9056; His, Trp, bABA, bAiBA, Ethylglycine, N6-Acetyl-L-Lys, 0.9056; His, Trp, Amino adipic acid, Ethylglycine, GABA, Homoarginine, 0.9056; His, bABA, bAiBA, GABA, Homoarginine, N6-Acetyl-L-Lys, 0.9056; Val, Met, bABA, bAiBA, Ethylglycine, GABA, 0.9056; Trp, Amino adipic acid, bABA, Ethylglycine, GABA, 3-Me-His, 0.9056; Ser, His, Cit, bABA, GABA, N6-Acetyl-L-Lys, 0.9056; Ser, His, Tyr, Trp, bABA, GABA, 0.9056; Ser, His, Tyr, bABA, bAiBA, Putrescine, 0.9056; Ser, His, Tyr, bABA, GABA, 3-Me-His, 0.9056; Ser, His, Val, bABA, GABA, 3-Me-His, 0.9056; Ser, His, Val, bABA, GABA, Hydroxyproline, 0.9056; His, Ala, Met, Trp, bABA, GABA, 0.9056; His, Ala, Tyr, Trp, bABA, GABA, 0.9056; His, Ala, Cit, bABA, GABA, Putrescine, 0.9056; His, Cit, bABA, bAiBA, Homoarginine, Putrescine, 0.9056; His, Cit, Trp, bAiBA, Ethylglycine, 3-Me-His, 0.9056; His, Cit, Val, bABA, GABA, Putrescine, 0.9056; His, Tyr, bABA, GABA, Homoarginine, Hydroxyproline, 0.9056; His, Tyr, bABA, bAiBA, Ethylglycine, N6-Acetyl-L-Lys, 0.9056; His, Tyr, Trp, bAiBA, Putrescine, Hydroxyproline, 0.9056; His, Tyr, Trp, bAiBA, GABA, Hydroxyproline, 0.9056; His, Tyr, Met, bABA, GABA, Hydroxyproline, 0.9056; His, Val, bABA, bAiBA, Ethylglycine, Hydroxyproline, 0.9056; His, Val, Amino adipic acid, bAiBA, Ethylglycine, Putrescine, 0.9056; His, Trp, Ethylglycine, GABA, Homoarginine, Putrescine, 0.9056; His, Trp, bABA, GABA, Putrescine, 3-Me-His, 0.9056; His, Trp,

bABA, bAiBA, Ethylglycine, Hydroxyproline, 0.9056;His, Trp, Amino adipic acid, bAiBA, Ethylglycine, N6-Acetyl-L-Lys, 0.9056;His, bABA, bAiBA, Ethylglycine, Homoarginine, Putrescine, 0.9056;His, Ala, bAiBA, Ethylglycine, GABA, Hydroxyproline, 0.9050;His, Ala, Cit, bAiBA, Ethylglycine, GABA, 0.9050;His, Amino adipic acid, bAiBA, Ethylglycine, GABA, 3-Me-His, 0.9050;His, Amino adipic acid, bAiBA, Ethylglycine, GABA, Homoarginine, 0.9050;Ser, His, Tyr, bABA, GABA, Hydroxyproline, 0.9050;Ser, His, Val, Met, bAiBA, Ethylglycine, 0.9050;Ser, His, Trp, bAiBA, Ethylglycine, Hydroxyproline, 0.9050;Ser, His, Trp, Ethylglycine, Homoarginine, Putrescine, 0.9050;Ser, His, bAiBA, Ethylglycine, Homoarginine, Hydroxyproline, 0.9050;His, Ala, bABA, bAiBA, Ethylglycine, Putrescine, 0.9050;His, Ala, Cit, Trp, bAiBA, GABA, 0.9050;His, Ala, Cit, Trp, bAiBA, Ethylglycine, 0.9050;His, Cit, Tyr, bABA, bAiBA, Putrescine, 0.9050;His, Tyr, bAiBA, Ethylglycine, GABA, N6-Acetyl-L-Lys, 0.9050;His, Met, bAiBA, Ethylglycine, N6-Acetyl-L-Lys, Putrescine, 0.9050;His, Met, Trp, bAiBA, GABA, Hydroxyproline, 0.9050;His, Trp, bABA, GABA, N6-Acetyl-L-Lys, Putrescine, 0.9050;His, Trp, Amino adipic acid, bAiBA, GABA, Putrescine, 0.9050;Ser, His, Ala, Met, bABA, GABA, 0.9050;Ser, His, Cit, Met, bABA, GABA, 0.9050;Ser, His, Val, bAiBA, Ethylglycine, N6-Acetyl-L-Lys, 0.9050;Ser, His, Amino adipic acid, bAiBA, Ethylglycine, Homoarginine, 0.9050;Ser, His, bABA, bAiBA, N6-Acetyl-L-Lys, Hydroxyproline, 0.9050;Ser, His, Ethylglycine, GABA, Homoarginine, 3-Me-His, 0.9050;His, Ala, bABA, bAiBA, Ethylglycine, Hydroxyproline, 0.9050;His, Ala, Trp, bABA, GABA, 3-Me-His, 0.9050;His, Ala, Trp, bABA, GABA, N6-Acetyl-L-Lys, 0.9050;His, Cit, bABA, bAiBA, Putrescine, 3-Me-His, 0.9050;Ala, Trp, Amino adipic acid, bABA, Ethylglycine, GABA, 0.9050;Met, Trp, bABA, bAiBA, Ethylglycine, GABA, 0.9050;Ser, His, Ala, Val, bABA, GABA, 0.9050;Ser, His, Cit, Met, bABA, bAiBA, 0.9050;Ser, His, Met, Amino adipic acid, bAiBA, Ethylglycine, 0.9050;His, Tyr, Trp, bAiBA, Ethylglycine, N6-Acetyl-L-Lys, 0.9050;His, Met, Trp, Amino adipic acid, Ethylglycine, GABA, 0.9050;His, bABA, GABA, Homoarginine, N6-

Acetyl-L-Lys, Hydroxyproline, 0.9050; His, Tyr, bAiBA, GABA, Putrescine, Hydroxyproline, 0.9044; His, Ala, Amino adipic acid, bAiBA, GABA, Hydroxyproline, 0.9044; His, Ala, Met, bAiBA, Ethylglycine, GABA, 0.9044; His, Cit, Met, bAiBA, Ethylglycine, GABA, 0.9044; His, Tyr, bAiBA, Ethylglycine, GABA, Hydroxyproline, 0.9044; Met, Amino adipic acid, bABA, bAiBA, GABA, Hydroxyproline, 0.9044; Ser, His, Tyr, bABA, Ethylglycine, Putrescine, 0.9044; Ser, His, Met, bABA, Ethylglycine, Putrescine, 0.9044; His, Cit, Trp, bAiBA, GABA, N6-Acetyl-L-Lys, 0.9044; His, Tyr, bABA, bAiBA, Ethylglycine, Hydroxyproline, 0.9044; His, Val, Trp, bAiBA, GABA, Hydroxyproline, 0.9044; His, Met, bAiBA, Ethylglycine, Putrescine, 3-Me-His, 0.9044; His, Amino adipic acid, bAiBA, GABA, N6-Acetyl-L-Lys, Hydroxyproline, 0.9044; Ser, His, Ala, bABA, bAiBA, Ethylglycine, 0.9044; Ser, His, Ala, bABA, GABA, 3-Me-His, 0.9044; Ser, His, Cit, Trp, bAiBA, Putrescine, 0.9044; Ser, His, Met, bABA, GABA, 3-Me-His, 0.9044; Ser, His, Met, bABA, GABA, Hydroxyproline, 0.9044; Ser, His, Amino adipic acid, bAiBA, Ethylglycine, Hydroxyproline, 0.9044; Ser, His, bAiBA, Ethylglycine, 3-Me-His, Hydroxyproline, 0.9044; Ser, His, Ethylglycine, GABA, Putrescine, 3-Me-His, 0.9044; His, Ala, Amino adipic acid, bAiBA, Ethylglycine, Putrescine, 0.9044; His, Ala, Trp, bABA, GABA, Homoarginine, 0.9044; His, Ala, Cit, bABA, bAiBA, Putrescine, 0.9044; His, Cit, bAiBA, GABA, N6-Acetyl-L-Lys, Hydroxyproline, 0.9044; His, Cit, Trp, bAiBA, GABA, Homoarginine, 0.9044; His, Cit, Val, bABA, bAiBA, Putrescine, 0.9044; His, Cit, Tyr, Trp, bAiBA, Ethylglycine, 0.9044; His, Tyr, bAiBA, Ethylglycine, N6-Acetyl-L-Lys, Hydroxyproline, 0.9044; His, Tyr, Trp, bABA, GABA, Putrescine, 0.9044; His, Tyr, Val, bABA, GABA, Putrescine, 0.9044; His, Val, bABA, GABA, Putrescine, Hydroxyproline, 0.9044; His, Val, bABA, GABA, N6-Acetyl-L-Lys, Hydroxyproline, 0.9044; His, Met, Trp, bABA, GABA, Putrescine, 0.9044; His, Trp, Ethylglycine, GABA, Homoarginine, Hydroxyproline, 0.9044; His, Trp, bABA, GABA, Homoarginine, N6-Acetyl-L-Lys, 0.9044; His, Amino adipic acid, bABA, bAiBA, N6-Acetyl-L-Lys, Hydroxyproline

, 0.9044; His, bABA, bAiBA, Ethylglycine, 3-Me-His, Hydroxyproline, 0.9044; His, bAiBA, Ethylglycine, N6-Acetyl-L-Lys, Putrescine, 3-Me-His, 0.9044; Cit, Trp, Amino adipic acid, bABA, bAiBA, GABA, 0.9044; Ser, His, bABA, GABA, Putrescine, 3-Me-His, 0.9044; His, Met, bABA, GABA, Homoarginine, Hydroxyproline, 0.9044; His, bAiBA, Ethylglycine, GABA, Homoarginine, N6-Acetyl-L-Lys, 0.9038; Ser, His, Ala, Trp, Ethylglycine, Putrescine, 0.9038; Ser, His, Cit, bAiBA, Ethylglycine, Homoarginine, 0.9038; Ser, His, Trp, bABA, Ethylglycine, Putrescine, 0.9038; Ser, His, Ethylglycine, GABA, Homoarginine, Putrescine, 0.9038; His, Ala, Val, bABA, GABA, Hydroxyproline, 0.9038; His, Ala, Cit, bAiBA, Ethylglycine, N6-Acetyl-L-Lys, 0.9038; His, Cit, Trp, Amino adipic acid, bAiBA, GABA, 0.9038; His, Cit, Met, bAiBA, Ethylglycine, N6-Acetyl-L-Lys, 0.9038; His, Val, bAiBA, Ethylglycine, Homoarginine, Putrescine, 0.9038; His, Val, Trp, bABA, GABA, N6-Acetyl-L-Lys, 0.9038; His, Val, Met, bAiBA, Ethylglycine, Putrescine, 0.9038; His, Met, bAiBA, GABA, Putrescine, Hydroxyproline, 0.9038; Ser, His, Cit, Met, bAiBA, Ethylglycine, 0.9038; Ser, His, Trp, Amino adipic acid, Ethylglycine, GABA, 0.9038; His, Ala, Trp, bABA, Ethylglycine, Putrescine, 0.9038; His, Ala, Cit, Tyr, bABA, GABA, 0.9038; His, Cit, Ethylglycine, N6-Acetyl-L-Lys, Putrescine, 3-Me-His, 0.9038; His, Cit, Met, Trp, bAiBA, Ethylglycine, 0.9038; His, Cit, Tyr, Met, bABA, GABA, 0.9038; His, Met, Trp, bAiBA, GABA, Putrescine, 0.9038; His, Trp, bAiBA, GABA, N6-Acetyl-L-Lys, Putrescine, 0.9038; Ser, His, Ala, Cit, bAiBA, Ethylglycine, 0.9038; Ser, His, Tyr, Trp, bAiBA, Ethylglycine, 0.9038; Ser, His, Tyr, Amino adipic acid, bAiBA, Ethylglycine, 0.9038; Ser, His, Amino adipic acid, bABA, Ethylglycine, 3-Me-His, 0.9038; Ser, His, bABA, GABA, N6-Acetyl-L-Lys, 3-Me-His, 0.9038; Ser, His, Ethylglycine, GABA, 3-Me-His, Hydroxyproline, 0.9038; His, Ala, Cit, bABA, GABA, 3-Me-His, 0.9038; His, Cit, Trp, Ethylglycine, GABA, N6-Acetyl-L-Lys, 0.9038; His, Cit, Val, bABA, GABA, 3-Me-His, 0.9038; His, Cit, Val, Met, bABA, GABA, 0.9038; His, Cit, Tyr, bABA, GABA, 3-Me-His, 0.9038; His, Cit, Tyr, bABA, GABA, Homoarginine, 0.9038; His, Tyr, Trp, bABA, GABA

, N6-Acetyl-L-Lys, 0.9038; His, Met, bABA, bAiBA, N6-Acetyl-L-Lys, Hydroxyproline, 0.9038; Met, Trp, Amino adipic acid, bABA, bAiBA, GABA, 0.9038; Ser, His, Ala, bAiBA, Ethylglycine, N6-Acetyl-L-Lys, 0.9031; His, Ala, Trp, Ethylglycine, Putrescine, Hydroxyproline, 0.9031; His, Cit, Amino adipic acid, bAiBA, GABA, Homoarginine, 0.9031; His, Val, Amino adipic acid, bAiBA, GABA, Hydroxyproline, 0.9031; His, Val, Trp, Amino adipic acid, Ethylglycine, GABA, 0.9031; His, Amino adipic acid, Ethylglycine, GABA, 3-Me-His, Hydroxyproline, 0.9031; His, Amino adipic acid, bAiBA, GABA, Homoarginine, Hydroxyproline, 0.9031; Ala, Trp, bABA, bAiBA, GABA, Hydroxyproline, 0.9031; Trp, bABA, bAiBA, GABA, Putrescine, Hydroxyproline, 0.9031; Ser, His, Ala, Amino adipic acid, bAiBA, Ethylglycine, 0.9031; Ser, His, Cit, Val, bAiBA, Ethylglycine, 0.9031; Ser, His, Cit, Amino adipic acid, bAiBA, Ethylglycine, 0.9031; Ser, His, Tyr, Trp, Ethylglycine, GABA, 0.9031; Ser, His, Val, bABA, Ethylglycine, Putrescine, 0.9031; Ser, His, Met, bABA, bAiBA, Hydroxyproline, 0.9031; Ser, His, Met, bAiBA, Ethylglycine, Homoarginine, 0.9031; Ser, His, bABA, bAiBA, N6-Acetyl-L-Lys, Putrescine, 0.9031; Ser, His, bAiBA, Ethylglycine, Homoarginine, N6-Acetyl-L-Lys, 0.9031; Ser, Cit, Trp, bABA, Ethylglycine, GABA, 0.9031; His, Ala, Met, bAiBA, Ethylglycine, Putrescine, 0.9031; His, Ala, Cit, bABA, bAiBA, Ethylglycine, 0.9031; His, Cit, bABA, Ethylglycine, Putrescine, 3-Me-His, 0.9031; His, Cit, Trp, bAiBA, Putrescine, Hydroxyproline, 0.9031; His, Cit, Trp, bAiBA, N6-Acetyl-L-Lys, Hydroxyproline, 0.9031; His, Cit, Tyr, Trp, bAiBA, GABA, 0.9031; His, Tyr, Amino adipic acid, bABA, bAiBA, Ethylglycine, 0.9031; His, Tyr, Trp, bAiBA, Ethylglycine, Hydroxyproline, 0.9031; His, Tyr, Trp, bABA, GABA, Homoarginine, 0.9031; His, Tyr, Met, Trp, bABA, GABA, 0.9031; His, Val, bAiBA, Ethylglycine, N6-Acetyl-L-Lys, Hydroxyproline, 0.9031; His, Val, bABA, GABA, Homoarginine, 3-Me-His, 0.9031; His, Met, bABA, bAiBA, Ethylglycine, Hydroxyproline, 0.9031; His, Met, Trp, bAiBA, Ethylglycine, Hydroxyproline, 0.9031; His, Met, Trp, bAiBA, Ethylglycine, N6-Acetyl-L-Lys, 0.9031; His, Trp, bABA, GABA, Homoarginine, 3-Me-His,

0.9031;His,Trp,Aminoadipic acid,bAiBA,GABA,N6-Acetyl-L-Lys,0.9031;His,Aminoadipic acid,bABA,bAiBA,Ethylglycine,3-Me-His,0.9031;His,bABA,bAiBA,N6-Acetyl-L-Lys,3-Me-His,Hydroxyproline,0.9031;His,bAiBA,Ethylglycine,Homoarginine,N6-Acetyl-L-Lys,Hydroxyproline,0.9031;His,Ethylglycine,GABA,N6-Acetyl-L-Lys,3-Me-His,Hydroxyproline,0.9031;Ser,His,Cit,Ethylglycine,GABA,Homoarginine,0.9031;Ser,His,Ethylglycine,N6-Acetyl-L-Lys,3-Me-His,Hydroxyproline,0.9031;His,Tyr,Met,bAiBA,Ethylglycine,N6-Acetyl-L-Lys,0.9031;His,Val,Trp,bABA,GABA,Homoarginine,0.9031;His,Trp,bAiBA,Ethylglycine,Homoarginine,N6-Acetyl-L-Lys,0.9031;His,Cit,bAiBA,Ethylglycine,GABA,3-Me-His,0.9025;Ser,His,Tyr,bAiBA,Putrescine,Hydroxyproline,0.9025;Ser,Met,Aminoadipic acid,bABA,bAiBA,GABA,0.9025;His,Ala,Trp,Ethylglycine,GABA,Homoarginine,0.9025;His,Val,bAiBA,Ethylglycine,Putrescine,3-Me-His,0.9025;His,Val,bAiBA,Ethylglycine,N6-Acetyl-L-Lys,Putrescine,0.9025;His,Met,Trp,Ethylglycine,Homoarginine,Putrescine,0.9025;His,Aminoadipic acid,bAiBA,GABA,3-Me-His,Hydroxyproline,0.9025;His,bAiBA,Ethylglycine,Homoarginine,Putrescine,3-Me-His,0.9025;Trp,bABA,bAiBA,Ethylglycine,GABA,Putrescine,0.9025;Ser,His,Trp,Aminoadipic acid,bAiBA,Ethylglycine,0.9025;Ser,His,Trp,bAiBA,GABA,Homoarginine,0.9025;Ser,His,Aminoadipic acid,bAiBA,GABA,Hydroxyproline,0.9025;Ser,His,bABA,Ethylglycine,N6-Acetyl-L-Lys,Putrescine,0.9025;His,Ala,bAiBA,Ethylglycine,Homoarginine,Putrescine,0.9025;His,Ala,Trp,Ethylglycine,GABA,Hydroxyproline,0.9025;His,Ala,Trp,bAiBA,GABA,Putrescine,0.9025;His,Ala,Val,Trp,bABA,GABA,0.9025;His,Cit,Val,Trp,Ethylglycine,GABA,0.9025;His,Tyr,bAiBA,N6-Acetyl-L-Lys,Putrescine,Hydroxyproline,0.9025;His,Val,Trp,bABA,GABA,Putrescine,0.9025;His,bAiBA,Ethylglycine,Homoarginine,Putrescine,Hydroxyproline,0.9025;Tyr,Aminoadipic acid,bABA,bAiBA,Ethylglycine,GABA,0.9025;Trp,bABA,bAiBA,GABA,3-Me-His,Hydroxyproline,0.9025;Trp,bABA,bAiBA,Ethylglycine,GABA,3-Me-His,0.9025;S

er, His, Ala, Val, bABA, Ethylglycine, 0.9025; Ser, His, Ala, Met, bAiBA, Ethylglycine, 0.9025; Ser, His, Ala, bABA, GABA, Putrescine, 0.9025; Ser, His, Cit, bABA, bAiBA, N6-Acetyl-L-Lys, 0.9025; Ser, His, Cit, bABA, bAiBA, Hydroxyproline, 0.9025; Ser, His, Val, Trp, bAiBA, Ethylglycine, 0.9025; Ser, His, Val, Trp, bAiBA, GABA, 0.9025; Ser, His, Val, bABA, Ethylglycine, Hydroxyproline, 0.9025; Ser, His, Val, bAiBA, Ethylglycine, 3-Me-His, 0.9025; Ser, His, Met, Trp, bAiBA, Ethylglycine, 0.9025; Ser, His, Met, Trp, bAiBA, GABA, 0.9025; Ser, His, Met, Trp, Ethylglycine, GABA, 0.9025; Ser, His, Trp, Ethylglycine, GABA, Hydroxyproline, 0.9025; His, Ala, bABA, bAiBA, N6-Acetyl-L-Lys, Hydroxyproline, 0.9025; His, Ala, Val, bABA, GABA, 3-Me-His, 0.9025; His, Ala, Val, bABA, GABA, N6-Acetyl-L-Lys, 0.9025; His, Ala, Cit, bABA, GABA, Homoarginine, 0.9025; His, Cit, bABA, Ethylglycine, N6-Acetyl-L-Lys, Putrescine, 0.9025; His, Cit, Trp, bABA, bAiBA, Putrescine, 0.9025; His, Cit, Trp, Amino adipic acid, bAiBA, Ethylglycine, 0.9025; His, Tyr, bAiBA, Ethylglycine, N6-Acetyl-L-Lys, 3-Me-His, 0.9025; His, Tyr, Amino adipic acid, bABA, bAiBA, Putrescine, 0.9025; His, Val, Met, bABA, GABA, 3-Me-His, 0.9025; His, Trp, bAiBA, N6-Acetyl-L-Lys, Putrescine, Hydroxyproline, 0.9025; His, Trp, Amino adipic acid, Ethylglycine, GABA, Hydroxyproline, 0.9025; His, Trp, Amino adipic acid, bAiBA, Ethylglycine, Hydroxyproline, 0.9025; His, bAiBA, Ethylglycine, GABA, Homoarginine, 3-Me-His, 0.9019; Ser, His, Val, bABA, Ethylglycine, N6-Acetyl-L-Lys, 0.9019; Ser, His, Trp, bABA, Ethylglycine, Homoarginine, 0.9019; His, Ala, Cit, Trp, Ethylglycine, GABA, 0.9019; His, Ala, Cit, Trp, bABA, Ethylglycine, 0.9019; His, Cit, bAiBA, Ethylglycine, Homoarginine, N6-Acetyl-L-Lys, 0.9019; His, Cit, Tyr, bAiBA, Putrescine, Hydroxyproline, 0.9019; His, Tyr, Amino adipic acid, bAiBA, Putrescine, Hydroxyproline, 0.9019; His, Trp, bAiBA, GABA, Putrescine, 3-Me-His, 0.9019; Ala, Cit, Trp, bABA, bAiBA, GABA, 0.9019; Val, Trp, bABA, bAiBA, Ethylglycine, GABA, 0.9019; Trp, bABA, bAiBA, GABA, N6-Acetyl-L-Lys, Hydroxyproline, 0.9019; Ser, His, Cit, Tyr, bAiBA, Putrescine, 0.9019; Ser, His, Cit, bAiBA, GABA, Putrescine, 0.9019; Ser

, His, Trp, bABA, Ethylglycine, 3-Me-His, 0.9019; Ser, His, Amino adipic acid, bABA, Ethylglycine, Putrescine, 0.9019; Ser, His, Amino adipic acid, bAiBA, Ethylglycine, N6-Acetyl-L-Lys, 0.9019; Ser, His, bAiBA, Ethylglycine, Homoarginine, 3-Me-His, 0.9019; His, Ala, bABA, bAiBA, Ethylglycine, N6-Acetyl-L-Lys, 0.9019; His, Ala, Trp, bAiBA, GABA, N6-Acetyl-L-Lys, 0.9019; His, Ala, Trp, bAiBA, Ethylglycine, N6-Acetyl-L-Lys, 0.9019; His, Ala, Cit, Met, bABA, GABA, 0.9019; His, Cit, bABA, bAiBA, N6-Acetyl-L-Lys, Hydroxyproline, 0.9019; His, Cit, Trp, Ethylglycine, GABA, Putrescine, 0.9019; His, Cit, Met, bAiBA, Ethylglycine, Hydroxyproline, 0.9019; His, Cit, Met, bABA, GABA, 3-Me-His, 0.9019; His, Cit, Val, Ethylglycine, Homoarginine, Putrescine, 0.9019; His, Tyr, bAiBA, Putrescine, 3-Me-His, Hydroxyproline, 0.9019; His, Tyr, Amino adipic acid, bAiBA, GABA, Putrescine, 0.9019; His, Tyr, Amino adipic acid, bAiBA, Ethylglycine, N6-Acetyl-L-Lys, 0.9019; His, Met, bABA, bAiBA, Putrescine, Hydroxyproline, 0.9019; His, Met, Trp, bABA, GABA, Homoarginine, 0.9019; His, Trp, Ethylglycine, GABA, N6-Acetyl-L-Lys, Hydroxyproline, 0.9019; His, bAiBA, Ethylglycine, Homoarginine, N6-Acetyl-L-Lys, Putrescine, 0.9019; Tyr, Trp, Amino adipic acid, bABA, Ethylglycine, GABA, 0.9019; Val, Trp, bABA, bAiBA, GABA, Hydroxyproline, 0.9019; Ser, His, Ala, bABA, GABA, N6-Acetyl-L-Lys, 0.9019; Ser, His, Val, Amino adipic acid, bAiBA, Ethylglycine, 0.9019; His, Ala, Tyr, bAiBA, Ethylglycine, N6-Acetyl-L-Lys, 0.9019; His, Ala, Tyr, Val, bABA, GABA, 0.9019; His, Cit, bAiBA, N6-Acetyl-L-Lys, Putrescine, Hydroxyproline, 0.9019; His, Tyr, Trp, bAiBA, GABA, Putrescine, 0.9019; His, Val, bABA, GABA, Putrescine, 3-Me-His, 0.9019; His, Val, bABA, GABA, Homoarginine, Putrescine, 0.9019; His, Val, Trp, bAiBA, Ethylglycine, Hydroxyproline, 0.9019; His, Met, bABA, bAiBA, Ethylglycine, N6-Acetyl-L-Lys, 0.9019; His, Trp, bAiBA, Ethylglycine, 3-Me-His, Hydroxyproline, 0.9019; His, Trp, bABA, bAiBA, Putrescine, Hydroxyproline, 0.9019; His, bABA, bAiBA, Ethylglycine, N6-Acetyl-L-Lys, 3-Me-His, 0.9019; Cit, Trp, bABA, Ethylglycine, GABA, Putrescine, 0.9019; S

er, His, Val, bAiBA, Ethylglycine, Hydroxyproline, 0.9019; His, Met, Trp, Ethylglycine, GABA, 3-Me-His, 0.9019; Ser, His, Amino adipic acid, bAiBA, GABA, Homoarginine, 0.9013; Ser, His, Met, bABA, Ethylglycine, N6-Acetyl-L-Lys, 0.9013; Ser, His, bABA, Ethylglycine, Homoarginine, N6-Acetyl-L-Lys, 0.9013; His, Cit, Amino adipic acid, bAiBA, GABA, Hydroxyproline, 0.9013; His, Tyr, bAiBA, GABA, N6-Acetyl-L-Lys, Hydroxyproline, 0.9013; His, Tyr, Trp, bABA, GABA, 3-Me-His, 0.9013; His, Tyr, Trp, bABA, bAiBA, Ethylglycine, 0.9013; His, Val, Trp, Ethylglycine, GABA, N6-Acetyl-L-Lys, 0.9013; His, Amino adipic acid, Ethylglycine, N6-Acetyl-L-Lys, 3-Me-His, Hydroxyproline, 0.9013; Ser, His, Cit, Trp, Ethylglycine, GABA, 0.9013; Ser, His, Tyr, bAiBA, Ethylglycine, Homoarginine, 0.9013; Ser, His, Val, Ethylglycine, Homoarginine, Putrescine, 0.9013; Ser, His, Trp, bABA, bAiBA, Putrescine, 0.9013; Ser, His, Amino adipic acid, bAiBA, Ethylglycine, 3-Me-His, 0.9013; His, Ala, bAiBA, Ethylglycine, N6-Acetyl-L-Lys, Putrescine, 0.9013; His, Cit, Ethylglycine, GABA, Homoarginine, Putrescine, 0.9013; His, Cit, bAiBA, Ethylglycine, N6-Acetyl-L-Lys, Hydroxyproline, 0.9013; His, Cit, Trp, bAiBA, N6-Acetyl-L-Lys, Putrescine, 0.9013; His, Cit, Trp, bAiBA, Homoarginine, Putrescine, 0.9013; His, Tyr, Val, bAiBA, Ethylglycine, GABA, 0.9013; His, Met, Amino adipic acid, bAiBA, Ethylglycine, Hydroxyproline, 0.9013; Cit, Amino adipic acid, bABA, Ethylglycine, GABA, 3-Me-His, 0.9013; Val, Amino adipic acid, bABA, bAiBA, Ethylglycine, GABA, 0.9013; Ser, His, Ala, Tyr, bAiBA, Ethylglycine, 0.9013; Ser, His, Ala, Val, bAiBA, Ethylglycine, 0.9013; Ser, His, Ala, Trp, bAiBA, Ethylglycine, 0.9013; Ser, His, Ala, bAiBA, Ethylglycine, Hydroxyproline, 0.9013; Ser, His, Tyr, bAiBA, Ethylglycine, Hydroxyproline, 0.9013; Ser, His, Val, bABA, GABA, N6-Acetyl-L-Lys, 0.9013; Ser, His, Trp, bAiBA, Putrescine, Hydroxyproline, 0.9013; Ser, His, Trp, Ethylglycine, GABA, Putrescine, 0.9013; Ser, His, bABA, Ethylglycine, 3-Me-His, Hydroxyproline, 0.9013; Ser, His, Ethylglycine, GABA, Homoarginine, Hydroxyproline, 0.9013; Ser, His, Ethylglycine, Homoarginine, Putrescine, 3-Me-His, 0.9013; His, Ala, Trp,

bAiBA, Ethylglycine, Hydroxyproline, 0.9013; His, Cit, bABA, Ethylglycine, Putrescine, Hydroxyproline, 0.9013; His, Cit, Val, bABA, Ethylglycine, Putrescine, 0.9013; His, Tyr, Val, bABA, GABA, 3-Me-His, 0.9013; His, Tyr, Val, bABA, GABA, Homoarginine, 0.9013; His, Val, bABA, GABA, N6-Acetyl-L-Lys, Putrescine, 0.9013; His, Val, bABA, bAiBA, Ethylglycine, N6-Acetyl-L-Lys, 0.9013; His, Val, Trp, Ethylglycine, GABA, Homoarginine, 0.9013; His, Val, Met, Trp, bABA, GABA, 0.9013; His, Met, Amino adipic acid, bABA, bAiBA, Ethylglycine, 0.9013; His, Met, Trp, Ethylglycine, GABA, Hydroxyproline, 0.9013; His, Trp, Ethylglycine, GABA, Putrescine, Hydroxyproline, 0.9013; His, Trp, bAiBA, GABA, Homoarginine, N6-Acetyl-L-Lys, 0.9013; His, Ala, Val, bABA, GABA, Putrescine, 0.9013; His, Val, bABA, GABA, N6-Acetyl-L-Lys, 3-Me-His, 0.9013; Ser, His, Cit, Amino adipic acid, bAiBA, GABA, 0.9006; His, Cit, bAiBA, GABA, Putrescine, Hydroxyproline, 0.9006; His, Cit, Amino adipic acid, Ethylglycine, Putrescine, 3-Me-His, 0.9006; His, Cit, Val, Amino adipic acid, Ethylglycine, Putrescine, 0.9006; Ser, His, Cit, bAiBA, GABA, N6-Acetyl-L-Lys, 0.9006; Ser, His, Tyr, bABA, Ethylglycine, N6-Acetyl-L-Lys, 0.9006; Ser, His, Val, Met, bABA, Ethylglycine, 0.9006; Ser, His, Val, Trp, bABA, Ethylglycine, 0.9006; Ser, His, Val, bABA, Ethylglycine, 3-Me-His, 0.9006; His, Ala, bAiBA, Ethylglycine, Putrescine, 3-Me-His, 0.9006; His, Ala, Cit, Trp, bAiBA, Putrescine, 0.9006; His, Cit, Trp, Amino adipic acid, Ethylglycine, GABA, 0.9006; His, Tyr, bAiBA, Ethylglycine, Homoarginine, N6-Acetyl-L-Lys, 0.9006; His, Tyr, bAiBA, Ethylglycine, GABA, Homoarginine, 0.9006; His, Tyr, bABA, bAiBA, N6-Acetyl-L-Lys, Hydroxyproline, 0.9006; His, Tyr, Met, bAiBA, Putrescine, Hydroxyproline, 0.9006; His, Val, bABA, bAiBA, Putrescine, Hydroxyproline, 0.9006; His, Met, bAiBA, GABA, N6-Acetyl-L-Lys, Hydroxyproline, 0.9006; His, Met, bAiBA, Ethylglycine, Homoarginine, Putrescine, 0.9006; His, Trp, bABA, GABA, N6-Acetyl-L-Lys, 3-Me-His, 0.9006; His, Amino adipic acid, bAiBA, Ethylglycine, Homoarginine, Putrescine, 0.9006; His, bABA, bAiBA, Ethylglycine, Homoarginine, Hydroxyproline, 0.9006; His, bABA, bAiBA, Ethylgly

cine, Homoarginine, N6-Acetyl-L-Lys, 0.9006; His, bAiBA, GABA, N6-Acetyl-L-Lys, Putrescine, Hydroxyproline, 0.9006; Cit, Trp, bABA, Ethylglycine, GABA, Hydroxyproline, 0.9006; Met, Trp, bABA, bAiBA, GABA, Hydroxyproline, 0.9006; Trp, Amino adipic acid, bABA, Ethylglycine, GABA, Hydroxyproline, 0.9006; Ser, His, Ala, Cit, bABA, bAiBA, 0.9006; Ser, His, Ala, bAiBA, Ethylglycine, 3-Me-His, 0.9006; Ser, His, Cit, bAiBA, Ethylglycine, 3-Me-His, 0.9006; Ser, His, Tyr, Val, bABA, Ethylglycine, 0.9006; Ser, His, Tyr, bABA, bAiBA, Hydroxyproline, 0.9006; Ser, His, Val, bABA, bAiBA, Hydroxyproline, 0.9006; Ser, His, Val, Ethylglycine, GABA, 3-Me-His, 0.9006; Ser, His, Met, bAiBA, Ethylglycine, 3-Me-His, 0.9006; Ser, His, Trp, bAiBA, GABA, 3-Me-His, 0.9006; His, Ala, Val, Trp, Ethylglycine, GABA, 0.9006; His, Tyr, Trp, Amino adipic acid, Ethylglycine, GABA, 0.9006; His, Tyr, Val, bABA, GABA, N6-Acetyl-L-Lys, 0.9006; His, Tyr, Val, Trp, Ethylglycine, GABA, 0.9006; His, Met, Trp, Ethylglycine, GABA, Homoarginine, 0.9006; His, Met, Trp, bABA, GABA, 3-Me-His, 0.9006; His, Amino adipic acid, bABA, bAiBA, Putrescine, Hydroxyproline, 0.9006; His, bAiBA, GABA, N6-Acetyl-L-Lys, 3-Me-His, Hydroxyproline, 0.9006; Ala, Met, Trp, bABA, Ethylglycine, GABA, 0.9006; Ser, His, Cit, Amino adipic acid, bABA, bAiBA, 0.9006; Ser, His, Tyr, bAiBA, Ethylglycine, GABA, 0.9006; Ser, His, Ethylglycine, GABA, N6-Acetyl-L-Lys, 3-Me-His, 0.9006; His, Ala, Val, Met, bABA, GABA, 0.9006; His, Cit, Met, bABA, Ethylglycine, Putrescine, 0.9006; His, Tyr, bABA, bAiBA, N6-Acetyl-L-Lys, Putrescine, 0.9006; His, Tyr, Trp, Ethylglycine, GABA, Hydroxyproline, 0.9006; His, Tyr, Val, bAiBA, Ethylglycine, N6-Acetyl-L-Lys, 0.9006; His, Val, Met, bABA, GABA, N6-Acetyl-L-Lys, 0.9006; His, Tyr, Val, bAiBA, GABA, Hydroxyproline, 0.9000; His, Met, bAiBA, Ethylglycine, GABA, 3-Me-His, 0.9000; Ala, Val, Met, bABA, bAiBA, GABA, 0.9000; Ser, His, Cit, bAiBA, GABA, Homoarginine, 0.9000; Ser, Val, Met, bABA, bAiBA, GABA, 0.9000; His, Ala, bAiBA, Ethylglycine, GABA, 3-Me-His, 0.9000; His, Cit, Amino adipic acid, bAiBA, GABA, Putrescine, 0.9000; His, Cit, Met, Amino adipic acid, bAiBA, GABA, 0.9000; His, Cit, Tyr, bAiBA, Ethylglycine, GABA, 0.9

000;His, Met, bAiBA, Ethylglycine, GABA, Homoarginine, 0.9000;His, Trp, Amino adipic acid, Ethylglycine, Homoarginine, Putrescine, 0.9000;Cit, Amino adipic acid, bABA, bAiBA, GABA, Hydroxyproline, 0.9000;Ser, His, Ala, Cit, bABA, Ethylglycine, 0.9000;Ser, His, Ala, bABA, Ethylglycine, 3-Me-His, 0.9000;Ser, His, Ala, bAiBA, Ethylglycine, Homoarginine, 0.9000;Ser, His, Cit, Tyr, bAiBA, Ethylglycine, 0.9000;Ser, His, Cit, bAiBA, Ethylglycine, Hydroxyproline, 0.9000;Ser, His, Val, bABA, Ethylglycine, Homoarginine, 0.9000;Ser, His, Val, Ethylglycine, N6-Acetyl-L-Lys, 3-Me-His, 0.9000;Ser, His, Trp, bABA, Ethylglycine, Hydroxyproline, 0.9000;Ser, His, bABA, Ethylglycine, N6-Acetyl-L-Lys, 3-Me-His, 0.9000;Ser, His, bAiBA, GABA, N6-Acetyl-L-Lys, Hydroxyproline, 0.9000;Ser, Ala, Trp, bABA, Ethylglycine, GABA, 0.9000;His, Cit, Amino adipic acid, bAiBA, Ethylglycine, Homoarginine, 0.9000;His, Cit, Val, Trp, Ethylglycine, Putrescine, 0.9000;His, Cit, Tyr, bAiBA, Ethylglycine, N6-Acetyl-L-Lys, 0.9000;His, Tyr, Amino adipic acid, bAiBA, GABA, Hydroxyproline, 0.9000;His, Tyr, Amino adipic acid, bAiBA, Ethylglycine, Hydroxyproline, 0.9000;His, Tyr, Trp, Ethylglycine, Homoarginine, Putrescine, 0.9000;His, Tyr, Trp, Amino adipic acid, bAiBA, GABA, 0.9000;His, Val, bAiBA, GABA, 3-Me-His, Hydroxyproline, 0.9000;His, Val, Trp, bAiBA, GABA, Putrescine, 0.9000;His, Trp, Ethylglycine, Homoarginine, Putrescine, 3-Me-His, 0.9000;His, Trp, bAiBA, GABA, N6-Acetyl-L-Lys, 3-Me-His, 0.9000;Ala, Trp, bABA, bAiBA, Ethylglycine, GABA, 0.9000;Met, Trp, Amino adipic acid, bABA, Ethylglycine, GABA, 0.9000;Ser, His, Ala, bABA, bAiBA, Hydroxyproline, 0.9000;Ser, His, Ala, bABA, Ethylglycine, Hydroxyproline, 0.9000;Ser, His, Cit, Met, bAiBA, Putrescine, 0.9000;Ser, His, Cit, bABA, bAiBA, 3-Me-His, 0.9000;Ser, His, Cit, bABA, Ethylglycine, 3-Me-His, 0.9000;Ser, His, Tyr, bABA, GABA, N6-Acetyl-L-Lys, 0.9000;Ser, His, Val, Ethylglycine, N6-Acetyl-L-Lys, Putrescine, 0.9000;Ser, His, Met, bABA, GABA, N6-Acetyl-L-Lys, 0.9000;Ser, His, bABA, bAiBA, 3-Me-His, Hydroxyproline, 0.9000;Ser, His, bABA, GABA, N6-Acetyl-L-Lys, Putrescine, 0.9000;His, Ala, Trp, Amino adipic

acid, Ethylglycine, GABA, 0.9000; His, Cit, Trp, Ethylglycine, GABA, Homoarginine, 0.9000; His, Tyr, bABA, GABA, Putrescine, 3-Me-His, 0.9000; His, Val, bABA, GABA, Homoarginine, N6-Acetyl-L-Lys, 0.9000; His, Val, Trp, bAiBA, GABA, N6-Acetyl-L-Lys, 0.9000; His, Val, Trp, bABA, GABA, 3-Me-His, 0.9000; His, Val, Met, bABA, GABA, Hydroxyproline, 0.9000; His, Val, Met, bABA, GABA, Putrescine, 0.9000; His, Val, Met, bABA, GABA, Homoarginine, 0.9000; His, Met, Trp, bABA, GABA, N6-Acetyl-L-Lys, 0.9000; His, Trp, bABA, Ethylglycine, Homoarginine, Putrescine, 0.9000; His, Amino adipic acid, bAiBA, Ethylglycine, N6-Acetyl-L-Lys, 3-Me-His, 0.9000; Cit, Trp, bABA, Ethylglycine, GABA, Homoarginine, 0.9000; Ser, His, Tyr, Val, bABA, GABA, 0.9000; Ser, His, Tyr, bAiBA, Ethylglycine, 3-Me-His, 0.9000; His, Ala, Trp, bAiBA, Ethylglycine, Homoarginine, 0.9000; His, Tyr, Met, Trp, Ethylglycine, GABA, 0.9000; His, Val, Amino adipic acid, bABA, bAiBA, Ethylglycine, 0.9000; His, Val, Met, Trp, Ethylglycine, GABA, 0.9000; His, bABA, GABA, N6-Acetyl-L-Lys, Putrescine, 3-Me-His, 0.9000; His, Ala, bAiBA, Ethylglycine, GABA, Homoarginine, 0.8994; Ala, Trp, bABA, Ethylglycine, GABA, Putrescine, 0.8994; Cit, Amino adipic acid, bABA, Ethylglycine, GABA, Putrescine, 0.8994; Cit, Trp, bABA, bAiBA, GABA, Putrescine, 0.8994; Ser, His, Ala, Val, Ethylglycine, Putrescine, 0.8994; Ser, His, Cit, Ethylglycine, Homoarginine, Putrescine, 0.8994; Ser, His, Met, bABA, Ethylglycine, Hydroxyproline, 0.8994; Ser, His, Met, bAiBA, GABA, N6-Acetyl-L-Lys, 0.8994; Ser, His, bABA, bAiBA, Homoarginine, Putrescine, 0.8994; Ser, His, bABA, Ethylglycine, Homoarginine, 3-Me-His, 0.8994; Ser, Trp, bABA, bAiBA, Ethylglycine, GABA, 0.8994; His, Cit, bAiBA, Ethylglycine, 3-Me-His, Hydroxyproline, 0.8994; His, Cit, Val, Trp, bAiBA, Putrescine, 0.8994; His, Cit, Tyr, Trp, Ethylglycine, GABA, 0.8994; His, Tyr, Val, Trp, bABA, GABA, 0.8994; His, Trp, Amino adipic acid, bAiBA, GABA, Homoarginine, 0.8994; His, bAiBA, GABA, Homoarginine, N6-Acetyl-L-Lys, Hydroxyproline, 0.8994; Tyr, Trp, bABA, bAiBA, Ethylglycine, GABA, 0.8994; Trp, bABA, bAiBA, GABA, Homoarginine, Hydroxyproline, 0.8994;

Trp, bABA, bAiBA, Ethylglycine, GABA, N6-Acetyl-L-Lys, 0.8994; Ser, His, Ala, Trp, bAiBA, GABA, 0.8994; Ser, His, Cit, Trp, bAiBA, N6-Acetyl-L-Lys, 0.8994; Ser, His, Cit, Ethylglycine, GABA, 3-Me-His, 0.8994; Ser, His, Tyr, bABA, Ethylglycine, 3-Me-His, 0.8994; Ser, His, Val, bABA, GABA, Putrescine, 0.8994; Ser, His, Met, bABA, bAiBA, Homoarginine, 0.8994; His, Ala, bABA, bAiBA, Putrescine, Hydroxyproline, 0.8994; His, Ala, Trp, Ethylglycine, GABA, N6-Acetyl-L-Lys, 0.8994; His, Ala, Val, bABA, GABA, Homoarginine, 0.8994; His, Cit, Amino adipic acid, bAiBA, Ethylglycine, Hydroxyproline, 0.8994; His, Cit, Trp, Amino adipic acid, bAiBA, Putrescine, 0.8994; His, Cit, Met, Trp, Ethylglycine, GABA, 0.8994; His, Tyr, Val, bAiBA, Putrescine, Hydroxyproline, 0.8994; His, Tyr, Val, bABA, GABA, Hydroxyproline, 0.8994; His, Met, bAiBA, Ethylglycine, Homoarginine, Hydroxyproline, 0.8994; His, Met, Trp, bAiBA, GABA, N6-Acetyl-L-Lys, 0.8994; His, Trp, bAiBA, Ethylglycine, Homoarginine, Hydroxyproline, 0.8994; His, Trp, Amino adipic acid, bAiBA, Putrescine, Hydroxyproline, 0.8994; His, Trp, Amino adipic acid, bABA, bAiBA, Ethylglycine, 0.8994; Cit, Trp, bAiBA, Ethylglycine, GABA, Putrescine, 0.8994; Trp, Amino adipic acid, bABA, Ethylglycine, GABA, N6-Acetyl-L-Lys, 0.8994; Ser, His, Cit, Ethylglycine, Putrescine, 3-Me-His, 0.8994; His, Cit, Tyr, bABA, Ethylglycine, Putrescine, 0.8994; His, Cit, bAiBA, GABA, Homoarginine, N6-Acetyl-L-Lys, 0.8988; His, Cit, Amino adipic acid, Ethylglycine, GABA, Putrescine, 0.8988; His, Cit, Tyr, Amino adipic acid, bAiBA, GABA, 0.8988; Cit, Val, Amino adipic acid, bABA, bAiBA, GABA, 0.8988; Ser, His, Ala, Tyr, bABA, Ethylglycine, 0.8988; Ser, His, Ala, Ethylglycine, Homoarginine, Putrescine, 0.8988; Ser, His, Cit, bAiBA, GABA, Hydroxyproline, 0.8988; Ser, His, Val, Ethylglycine, Putrescine, 3-Me-His, 0.8988; Ser, His, Amino adipic acid, bABA, Ethylglycine, N6-Acetyl-L-Lys, 0.8988; Ser, His, bAiBA, N6-Acetyl-L-Lys, 3-Me-His, Hydroxyproline, 0.8988; Ser, Trp, bABA, bAiBA, GABA, Hydroxyproline, 0.8988; His, Ala, Trp, bAiBA, Putrescine, Hydroxyproline, 0.8988; His, Ala, Val, bAiBA, Ethylglycine, Putrescine, 0.8988; His, Ala, Val, Trp, Ethylglyci

ne, Putrescine, 0.8988; His, Cit, bAiBA, GABA, N6-Acetyl-L-Lys, Putrescine, 0.8988; His, Val, bAiBA, GABA, Putrescine, Hydroxyproline, 0.8988; His, Val, Trp, Ethylglycine, Homoarginine, Putrescine, 0.8988; His, Val, Met, bAiBA, GABA, Hydroxyproline, 0.8988; His, Met, Amino adipic acid, bAiBA, Ethylglycine, N6-Acetyl-L-Lys, 0.8988; His, Trp, Ethylglycine, GABA, Homoarginine, N6-Acetyl-L-Lys, 0.8988; His, Trp, bABA, bAiBA, N6-Acetyl-L-Lys, Hydroxyproline, 0.8988; His, Amino adipic acid, bAiBA, Ethylglycine, N6-Acetyl-L-Lys, Hydroxyproline, 0.8988; His, Amino adipic acid, bABA, Ethylglycine, Putrescine, Hydroxyproline, 0.8988; Cit, Amino adipic acid, bABA, Ethylglycine, GABA, N6-Acetyl-L-Lys, 0.8988; Cit, Trp, bABA, Ethylglycine, GABA, N6-Acetyl-L-Lys, 0.8988; Cit, Met, Amino adipic acid, bABA, Ethylglycine, GABA, 0.8988; Tyr, Amino adipic acid, bABA, bAiBA, GABA, Hydroxyproline, 0.8988; Met, Trp, bABA, bAiBA, GABA, 3-Me-His, 0.8988; Ser, His, Ala, Tyr, bABA, GABA, 0.8988; Ser, His, Ala, Trp, bABA, Ethylglycine, 0.8988; Ser, His, Ala, Ethylglycine, GABA, Homoarginine, 0.8988; Ser, His, Tyr, bABA, bAiBA, Homoarginine, 0.8988; Ser, His, Val, Met, bABA, GABA, 0.8988; Ser, His, Val, bAiBA, GABA, Hydroxyproline, 0.8988; Ser, His, Val, Ethylglycine, GABA, Homoarginine, 0.8988; Ser, His, Trp, Amino adipic acid, bAiBA, GABA, 0.8988; Ser, His, Amino adipic acid, bABA, bAiBA, Hydroxyproline, 0.8988; Ser, His, bAiBA, N6-Acetyl-L-Lys, Putrescine, Hydroxyproline, 0.8988; Ser, His, Ethylglycine, Putrescine, 3-Me-His, Hydroxyproline, 0.8988; His, Ala, Trp, bAiBA, GABA, Hydroxyproline, 0.8988; His, Ala, Tyr, bAiBA, Ethylglycine, GABA, 0.8988; His, Cit, Amino adipic acid, Ethylglycine, Homoarginine, Putrescine, 0.8988; His, Cit, Amino adipic acid, bABA, Homoarginine, Putrescine, 0.8988; His, Cit, Tyr, Trp, bAiBA, Putrescine, 0.8988; His, Tyr, Trp, bAiBA, GABA, N6-Acetyl-L-Lys, 0.8988; His, Tyr, Trp, Amino adipic acid, bAiBA, Ethylglycine, 0.8988; His, Val, bAiBA, GABA, Homoarginine, Hydroxyproline, 0.8988; His, Val, Trp, Ethylglycine, N6-Acetyl-L-Lys, Putrescine, 0.8988; His, Met, bAiBA, N6-Acetyl-L-Lys, Putrescine, Hydroxyproline, 0.8988; His, Trp, bABA, Ethylglyc

ine, Putrescine, Hydroxyproline, 0.8988; His, Trp, Amino adipic acid, bAiBA, GABA, 3-Me-His, 0.8988; His, bABA, bAiBA, Putrescine, 3-Me-His, Hydroxyproline, 0.8988; Val, Trp, Amino adipic acid, bABA, Ethylglycine, GABA, 0.8988; Ser, His, Tyr, Met, bAiBA, Ethylglycine, 0.8988; His, Ala, Amino adipic acid, bABA, bAiBA, Ethylglycine, 0.8988; His, Ala, Val, bABA, Ethylglycine, Putrescine, 0.8988; His, Ala, Tyr, Trp, bAiBA, Ethylglycine, 0.8988; His, Cit, Trp, Ethylglycine, GABA, 3-Me-His, 0.8988; His, Cit, Val, Ethylglycine, N6-Acetyl-L-Lys, Putrescine, 0.8988; His, Tyr, Trp, Ethylglycine, GABA, 3-Me-His, 0.8988; His, Met, Trp, Ethylglycine, GABA, Putrescine, 0.8988; His, Trp, Ethylglycine, GABA, N6-Acetyl-L-Lys, 3-Me-His, 0.8988; His, Trp, bAiBA, Ethylglycine, N6-Acetyl-L-Lys, 3-Me-His, 0.8988; His, Trp, bABA, Ethylglycine, N6-Acetyl-L-Lys, Putrescine, 0.8988; His, Amino adipic acid, bABA, Ethylglycine, 3-Me-His, Hydroxyproline, 0.8988; Ser, His, bAiBA, GABA, Homoarginine, N6-Acetyl-L-Lys, 0.8981; His, Ala, Tyr, Trp, Ethylglycine, Putrescine, 0.8981; His, Cit, bAiBA, GABA, Homoarginine, Putrescine, 0.8981; His, Cit, Amino adipic acid, bAiBA, GABA, N6-Acetyl-L-Lys, 0.8981; His, Amino adipic acid, Ethylglycine, GABA, Homoarginine, 3-Me-His, 0.8981; Val, Amino adipic acid, bABA, bAiBA, GABA, Hydroxyproline, 0.8981; Ser, His, Ala, bABA, Ethylglycine, N6-Acetyl-L-Lys, 0.8981; Ser, His, Tyr, Met, bABA, Ethylglycine, 0.8981; Ser, His, Met, Trp, bAiBA, Putrescine, 0.8981; Ser, His, Met, bAiBA, GABA, Hydroxyproline, 0.8981; Ser, His, bABA, bAiBA, Homoarginine, N6-Acetyl-L-Lys, 0.8981; Ser, His, bABA, Ethylglycine, Homoarginine, Hydroxyproline, 0.8981; His, Ala, Met, Trp, Ethylglycine, Putrescine, 0.8981; His, Cit, Amino adipic acid, bABA, Ethylglycine, 3-Me-His, 0.8981; His, Cit, Met, bAiBA, GABA, Hydroxyproline, 0.8981; His, Trp, bABA, bAiBA, Ethylglycine, Homoarginine, 0.8981; His, Amino adipic acid, Ethylglycine, GABA, Homoarginine, Putrescine, 0.8981; Ala, Cit, Trp, bABA, GABA, Hydroxyproline, 0.8981; Cit, Amino adipic acid, bABA, bAiBA, GABA, Homoarginine, 0.8981; Cit, Tyr, Amino adipic acid, bABA, Ethylglycine, GABA, 0.8981; Val, bABA, bAiBA, Ethylglyc

ine, GABA, Hydroxyproline, 0.8981; Val, Met, bABA, bAiBA, GABA, Hydroxyproline, 0.8981; Trp, bABA, bAiBA, Ethylglycine, GABA, Homoarginine, 0.8981; Ser, His, Ala, Ethylglycine, GABA, 3-Me-His, 0.8981; Ser, His, Cit, Trp, Ethylglycine, Homoarginine, 0.8981; Ser, His, Tyr, Trp, bAiBA, GABA, 0.8981; Ser, His, Tyr, bABA, GABA, Putrescine, 0.8981; Ser, His, Tyr, Ethylglycine, GABA, Homoarginine, 0.8981; Ser, His, Val, Ethylglycine, N6-Acetyl-L-Lys, Hydroxyproline, 0.8981; Ser, His, Met, bABA, Ethylglycine, 3-Me-His, 0.8981; Ser, His, Met, bABA, GABA, Putrescine, 0.8981; Ser, His, Trp, bABA, bAiBA, Hydroxyproline, 0.8981; Ser, His, Trp, bABA, Ethylglycine, N6-Acetyl-L-Lys, 0.8981; Ser, His, Trp, Ethylglycine, GABA, N6-Acetyl-L-Lys, 0.8981; Ser, Met, Trp, bABA, bAiBA, GABA, 0.8981; His, Ala, bAiBA, Ethylglycine, N6-Acetyl-L-Lys, Hydroxyproline, 0.8981; His, Ala, bABA, GABA, N6-Acetyl-L-Lys, Putrescine, 0.8981; His, Ala, Tyr, bABA, GABA, Putrescine, 0.8981; His, Ala, Tyr, Trp, Ethylglycine, GABA, 0.8981; His, Cit, Ethylglycine, Homoarginine, N6-Acetyl-L-Lys, Putrescine, 0.8981; His, Cit, Ethylglycine, GABA, N6-Acetyl-L-Lys, 3-Me-His, 0.8981; His, Cit, Ethylglycine, GABA, Homoarginine, N6-Acetyl-L-Lys, 0.8981; His, Cit, Amino adipic acid, Ethylglycine, GABA, Homoarginine, 0.8981; His, Cit, Amino adipic acid, bABA, Ethylglycine, Homoarginine, 0.8981; His, Cit, Trp, Ethylglycine, GABA, Hydroxyproline, 0.8981; His, Cit, Trp, bABA, Ethylglycine, Homoarginine, 0.8981; His, Cit, Tyr, Amino adipic acid, bAiBA, Ethylglycine, 0.8981; His, Tyr, Amino adipic acid, bAiBA, GABA, N6-Acetyl-L-Lys, 0.8981; His, Tyr, Trp, Ethylglycine, GABA, Homoarginine, 0.8981; His, Tyr, Trp, bAiBA, N6-Acetyl-L-Lys, Putrescine, 0.8981; His, Tyr, Met, bABA, GABA, Putrescine, 0.8981; His, Tyr, Val, bABA, bAiBA, Ethylglycine, 0.8981; His, Val, bABA, bAiBA, N6-Acetyl-L-Lys, Hydroxyproline, 0.8981; His, Val, bABA, bAiBA, Ethylglycine, 3-Me-His, 0.8981; His, Val, Amino adipic acid, bAiBA, Ethylglycine, Hydroxyproline, 0.8981; His, Val, Trp, Ethylglycine, GABA, 3-Me-His, 0.8981; His, Val, Trp, bAiBA, Ethylglycine, N6-Acetyl-L-Lys, 0.8981; His, Val, Met, bABA, Ethylglycine, Putrescine, 0.8981; His, Met, bAi

BA, Ethylglycine, 3-Me-His, Hydroxyproline, 0.8981; His, Met, Trp, bAiBA, Putrescine, Hydroxyproline, 0.8981; His, Met, Trp, Amino adipic acid, bAiBA, GABA, 0.8981; His, Trp, Ethylglycine, GABA, Homoarginine, 3-Me-His, 0.8981; His, Trp, bAiBA, GABA, Homoarginine, 3-Me-His, 0.8981; His, bABA, GABA, Homoarginine, N6-Acetyl-L-Lys, Putrescine, 0.8981; His, bABA, bAiBA, Homoarginine, N6-Acetyl-L-Lys, Hydroxyproline, 0.8981; Ala, Trp, bABA, Ethylglycine, GABA, Hydroxyproline, 0.8981; Ala, Trp, bABA, Ethylglycine, GABA, N6-Acetyl-L-Lys, 0.8981; Trp, Amino adipic acid, bABA, bAiBA, GABA, Homoarginine, 0.8981; Ser, His, Cit, Val, bABA, bAiBA, 0.8981; Ser, His, Cit, Trp, bABA, bAiBA, 0.8981; Ser, His, bAiBA, GABA, Putrescine, Hydroxyproline, 0.8981; His, Cit, Trp, Ethylglycine, N6-Acetyl-L-Lys, Putrescine, 0.8981; His, Tyr, Val, Met, bABA, GABA, 0.8981; His, Met, bABA, GABA, Putrescine, 3-Me-His, 0.8981; His, Cit, Amino adipic acid, Ethylglycine, GABA, 3-Me-His, 0.8981; His, Cit, Met, bAiBA, GABA, Putrescine, 0.8975; His, Cit, Val, Amino adipic acid, bABA, Ethylglycine, 0.8975; His, Cit, Tyr, bAiBA, Ethylglycine, Hydroxyproline, 0.8975; His, Met, Amino adipic acid, bAiBA, GABA, Homoarginine, 0.8975; Ser, His, Ala, Met, bABA, bAiBA, 0.8975; Ser, His, Ala, bABA, Ethylglycine, Homoarginine, 0.8975; Ser, His, Amino adipic acid, bABA, Ethylglycine, Homoarginine, 0.8975; Ser, His, Amino adipic acid, Ethylglycine, Homoarginine, Putrescine, 0.8975; Ser, Trp, Amino adipic acid, bABA, bAiBA, GABA, 0.8975; His, Ala, Amino adipic acid, bAiBA, Ethylglycine, N6-Acetyl-L-Lys, 0.8975; His, Ala, Trp, bABA, bAiBA, Ethylglycine, 0.8975; His, Ala, Tyr, bABA, bAiBA, Ethylglycine, 0.8975; His, Ala, Cit, Amino adipic acid, bAiBA, GABA, 0.8975; His, Cit, Amino adipic acid, bABA, bAiBA, Homoarginine, 0.8975; His, Cit, Val, bABA, bAiBA, Hydroxyproline, 0.8975; His, Tyr, Amino adipic acid, bABA, Ethylglycine, Putrescine, 0.8975; His, Val, Trp, bAiBA, Putrescine, Hydroxyproline, 0.8975; His, Met, Amino adipic acid, bAiBA, GABA, Putrescine, 0.8975; His, Trp, bAiBA, GABA, Homoarginine, Putrescine, 0.8975; His, Trp, Amino adipic acid, Ethylglycine, GABA, N6-Acetyl-L-Lys, 0.8975; Cit, Amino adipic

ic acid, bABA, Ethylglycine, GABA, Hydroxyproline, 0.8975; Tyr, Amino adipic acid, bABA, bAiBA, GABA, Homoarginine, 0.8975; Ser, His, Ala, Met, bABA, Ethylglycine, 0.8975; Ser, His, Ala, bAiBA, GABA, Hydroxyproline, 0.8975; Ser, His, Cit, Val, bABA, Ethylglycine, 0.8975; Ser, His, Cit, bAiBA, Putrescine, Hydroxyproline, 0.8975; Ser, His, Tyr, Val, bAiBA, Ethylglycine, 0.8975; Ser, His, Val, Trp, Ethylglycine, Putrescine, 0.

8975; Ser, His, Met, Amino adipic acid, bAiBA, GABA, 0.8975; Ser, His, Met, Ethylglycine, Homoarginine, Putrescine, 0.8975; Ser, His, Trp, Amino adipic acid, bABA, Ethylglycine, 0.8975; Ser, His, Amino adipic acid, Ethylglycine, Homoarginine, 3-Me-His, 0.8975; Ser, Cit, Trp, bABA, bAiBA, GABA, 0.8975; His, Ala, Trp, Ethylglycine, N6-Acetyl-L-Lys, Putrescine, 0.8975; His, Ala, Met, Trp, Ethylglycine, GABA, 0.8975; His, Ala, Tyr, bAiBA, Putrescine, Hydroxyproline, 0.8975; His, Cit, bABA, bAiBA, N6-Acetyl-L-Lys, 3-Me-His, 0.8975; His, Cit, Trp, Ethylglycine, Putrescine, 3-Me-His, 0.8975; His, Cit, Trp, bAiBA, GABA, 3-Me-His, 0.8975; His, Cit, Trp, bABA, bAiBA, Hydroxyproline, 0.8975; His, Tyr, Met, bAiBA, Ethylglycine, GABA, 0.8975; His, Val, Amino adipic acid, bAiBA, Ethylglycine, N6-Acetyl-L-Lys, 0.8975; His, Trp, GABA, N6-Acetyl-L-Lys, 3-Me-His, Hydroxyproline, 0.8975; Tyr, Trp, Amino adipic acid, bABA, bAiBA, GABA, 0.8975; Ser, His, Cit, bABA, Ethylglycine, N6-Acetyl-L-Lys, 0.8975; Ser, His, Val, Met, bABA, bAiBA, 0.8975; Ser, His, Met, Trp, bABA, Ethylglycine, 0.8975; Ser, His, Met, bAiBA, Putrescine, Hydroxyproline, 0.8975; Ser, His, Amino adipic acid, bABA, bAiBA, Putrescine, 0.8975; His, Ala, bABA, GABA, N6-Acetyl-L-Lys, 3-Me-His, 0.8975; His, Ala, bABA, Ethylglycine, Putrescine, Hydroxyproline, 0.8975; His, Ala, bABA, Ethylglycine, Putrescine, 3-Me-His, 0.8975; His, Ala, Met, bABA, Ethylglycine, Putrescine, 0.8975; His, Ala, Tyr, bABA, GABA, N6-Acetyl-L-Lys, 0.8975; His, Cit, bAiBA, N6-Acetyl-L-Lys, 3-Me-His, Hydroxyproline, 0.8975; His, Cit, Amino adipic acid, bABA, bAiBA, Hydroxyproline, 0.8975; His, Tyr, bABA, GABA, N6-Acetyl-L-Lys, 3-Me-His, 0.8975; His, Tyr, Trp, bAiBA, Ethylglycine, 3-M

e-His, 0.8975; His, Val, Trp, bABA, Ethylglycine, Putrescine, 0.8975; His, Met, Trp, Ethylglycine, GABA, N6-Acetyl-L-Lys, 0.8975; His, Amino adipic acid, bABA, bAiBA, Ethylglycine, Homoarginine, 0.8975; His, bABA, bAiBA, Homoarginine, Putrescine, Hydroxyproline, 0.8975; Cit, Amino adipic acid, bABA, Ethylglycine, GABA, Homoarginine, 0.8975; Cit, Tyr, Trp, bABA, Ethylglycine, GABA, 0.8975; Tyr, Amino adipic acid, bABA, bAiBA, GABA, Putrescine, 0.8975; Val, Trp, Amino adipic acid, bABA, bAiBA, GABA, 0.8975; Ser, His, bAiBA, GABA, N6-Acetyl-L-Lys, 3-Me-His, 0.8969; Tyr, Met, Amino adipic acid, bABA, bAiBA, GABA, 0.8969; Val, Met, Amino adipic acid, bABA, bAiBA, GABA, 0.8969; Ser, His, Cit, Trp, bAiBA, Homoarginine, 0.8969; Ser, His, Cit, Amino adipic acid, bABA, Ethylglycine, 0.8969; Ser, His, Cit, bABA, Ethylglycine, Hydroxyproline, 0.8969; Ser, His, Trp, Ethylglycine, N6-Acetyl-L-Lys, 3-Me-His, 0.8969; His, Ala, Trp, Ethylglycine, Putrescine, 3-Me-His, 0.8969; His, Ala, Trp, bAiBA, GABA, Homoarginine, 0.8969; His, Ala, Trp, Amino adipic acid, Ethylglycine, Putrescine, 0.8969; His, Cit, Met, bAiBA, GABA, N6-Acetyl-L-Lys, 0.8969; His, Cit, Val, Ethylglycine, Putrescine, 3-Me-His, 0.8969; His, Cit, Val, bAiBA, GABA, N6-Acetyl-L-Lys, 0.8969; His, Cit, Val, Amino adipic acid, bAiBA, GABA, 0.8969; His, Val, Amino adipic acid, Ethylglycine, GABA, 3-Me-His, 0.8969; His, Trp, Ethylglycine, Homoarginine, Putrescine, Hydroxyproline, 0.8969; Ala, Cit, Amino adipic acid, bABA, Ethylglycine, GABA, 0.8969; Ala, Cit, Trp, Amino adipic acid, bABA, GABA, 0.8969; Cit, Met, Amino adipic acid, bABA, bAiBA, GABA, 0.8969; Ser, His, Cit, Val, Ethylglycine, Putrescine, 0.8969; Ser, His, Cit, Ethylglycine, N6-Acetyl-L-Lys, 3-Me-His, 0.8969; Ser, His, Tyr, Ethylglycine, GABA, 3-Me-His, 0.8969; Ser, His, Val, Trp, Ethylglycine, N6-Acetyl-L-Lys, 0.8969; Ser, His, Met, bABA, bAiBA, N6-Acetyl-L-Lys, 0.8969; Ser, His, Met, Ethylglycine, GABA, 3-Me-His, 0.8969; Ser, His, Trp, Ethylglycine, Putrescine, Hydroxyproline, 0.8969; Ser, His, Amino adipic acid, Ethylglycine, Putrescine, 3-Me-His, 0.8969; Ser, His, bAiBA, GABA, Homoarginine, Hydroxyproline, 0.8969; Ser, Ala, Met, bABA, bAiBA, GA

BA, 0.8969; Ser, Met, Trp, bAiBA, Ethylglycine, GABA, 0.8969; Ser, Trp, Amino adipic acid, bABA, Ethylglycine, GABA, 0.8969; His, Ala, Amino adipic acid, bABA, Ethylglycine, Putrescine, 0.8969; His, Cit, Ethylglycine, Homoarginine, Putrescine, 3-Me-His, 0.8969; His, Cit, bABA, Ethylglycine, Homoarginine, N6-Acetyl-L-Lys, 0.8969; His, Cit, bABA, bAiBA, Homoarginine, Hydroxyproline, 0.8969; His, Cit, bABA, bAiBA, Homoarginine, N6-Acetyl-L-Lys, 0.8969; His, Cit, Amino adipic acid, bABA, bAiBA, 3-Me-His, 0.8969; His, Cit, Trp, bABA, bAiBA, N6-Acetyl-L-Lys, 0.8969; His, Cit, Met, Ethylglycine, Homoarginine, Putrescine, 0.8969; His, Cit, Val, Amino adipic acid, bAiBA, Ethylglycine, 0.8969; His, Tyr, bAiBA, Homoarginine, Putrescine, Hydroxyproline, 0.8969; His, Tyr, bAiBA, Ethylglycine, GABA, 3-Me-His, 0.8969; His, Tyr, bABA, GABA, Homoarginine, Putrescine, 0.8969; His, Tyr, Trp, Ethylglycine, GABA, Putrescine, 0.8969; His, Tyr, Trp, bABA, bAiBA, Putrescine, 0.8969; His, Val, bAiBA, GABA, N6-Acetyl-L-Lys, Hydroxyproline, 0.8969; His, Val, bABA, Ethylglycine, Putrescine, Hydroxyproline, 0.8969; His, Val, Trp, bAiBA, GABA, 3-Me-His, 0.8969; His, Val, Met, bAiBA, Ethylglycine, Hydroxyproline, 0.8969; His, Met, bAiBA, Ethylglycine, N6-Acetyl-L-Lys, 3-Me-His, 0.8969; His, Met, bABA, GABA, N6-Acetyl-L-Lys, 3-Me-His, 0.8969; His, Amino adipic acid, Ethylglycine, Putrescine, 3-Me-His, Hydroxyproline, 0.8969; His, Amino adipic acid, bAiBA, N6-Acetyl-L-Lys, 3-Me-His, Hydroxyproline, 0.8969; Tyr, Amino adipic acid, bABA, bAiBA, GABA, 3-Me-His, 0.8969; Ser, His, bAiBA, GABA, 3-Me-His, Hydroxyproline, 0.8969; His, Ala, bABA, GABA, Homoarginine, Putrescine, 0.8969; His, Ala, Met, bABA, GABA, Putrescine, 0.8969; His, Cit, Val, Ethylglycine, N6-Acetyl-L-Lys, 3-Me-His, 0.8969; His, Met, bABA, GABA, Homoarginine, Putrescine, 0.8969; His, Trp, Amino adipic acid, Ethylglycine, GABA, Putrescine, 0.8969; Ala, Met, Trp, bABA, GABA, Hydroxyproline, 0.8969; Ala, Tyr, Amino adipic acid, bABA, bAiBA, GABA, 0.8969; Cit, Trp, bABA, bAiBA, GABA, Hydroxyproline, 0.8969; Ser, His, Amino adipic acid, bAiBA, GABA, Putrescine, 0.8963; His, Cit, Val, bAiBA, GABA, Hydroxyproline, 0.8963; His

, Cit, Val, Met, Ethylglycine, Putrescine, 0.8963; Tyr, Val, Amino adipic acid, bABA, bAiBA, GABA, 0.8963; Ser, His, Ala, Amino adipic acid, bAiBA, GABA, 0.8963; Ser, His, Cit, bAiBA, N6-Acetyl-L-Lys, Putrescine, 0.8963; Ser, His, Tyr, bABA, Ethylglycine, Homoarginine, 0.8963; Ser, His, Val, Trp, bAiBA, Putrescine, 0.8963; Ser, His, Val, Amino adipic acid, Ethylglycine, Putrescine, 0.8963; Ser, His, bABA, Ethylglycine, N6-Acetyl-L-Lys, Hydroxyproline, 0.8963; His, Cit, bABA, bAiBA, 3-Me-His, Hydroxyproline, 0.8963; His, Cit, Val, bAiBA, GABA, Putrescine, 0.8963; His, Cit, Val, bAiBA, GABA, Homoarginine, 0.8963; His, Cit, Val, bAiBA, Ethylglycine, Hydroxyproline, 0.8963; His, Tyr, bAiBA, Ethylglycine, 3-Me-His, Hydroxyproline, 0.8963; His, Tyr, bABA, bAiBA, Putrescine, 3-Me-His, 0.8963; His, Trp, Amino adipic acid, GABA, 3-Me-His, Hydroxyproline, 0.8963; Ser, His, Cit, Tyr, bABA, bAiBA, 0.8963; Ser, His, Cit, bABA, Homoarginine, N6-Acetyl-L-Lys, 0.8963; Ser, His, Tyr, bABA, Ethylglycine, Hydroxyproline, 0.8963; Ser, His, Tyr, Ethylglycine, Homoarginine, Putrescine, 0.8963; Ser, His, Val, Amino adipic acid, bABA, Ethylglycine, 0.8963; Ser, His, bABA, N6-Acetyl-L-Lys, 3-Me-His, Hydroxyproline, 0.8963; Ser, His, bAiBA, Putrescine, 3-Me-His, Hydroxyproline, 0.8963; Ser, His, Ethylglycine, Homoarginine, N6-Acetyl-L-Lys, Putrescine, 0.8963; Ser, Cit, Trp, Amino adipic acid, bABA, GABA, 0.8963; Ser, Val, bABA, bAiBA, Ethylglycine, GABA, 0.8963; His, Ala, bAiBA, GABA, N6-Acetyl-L-Lys, Hydroxyproline, 0.8963; His, Ala, Trp, Amino adipic acid, bAiBA, GABA, 0.8963; His, Ala, Met, bABA, bAiBA, Ethylglycine, 0.8963; His, Cit, bAiBA, GABA, Homoarginine, Hydroxyproline, 0.8963; His, Cit, bAiBA, Ethylglycine, Homoarginine, Hydroxyproline, 0.8963; His, Cit, Met, bAiBA, Ethylglycine, 3-Me-His, 0.8963; His, Cit, Met, bABA, bAiBA, Hydroxyproline, 0.8963; His, Cit, Met, Amino adipic acid, bAiBA, Ethylglycine, 0.8963; His, Tyr, Amino adipic acid, bAiBA, Ethylglycine, Homoarginine, 0.8963; His, Tyr, Met, bABA, bAiBA, Ethylglycine, 0.8963; His, Tyr, Met, Amino adipic acid, bAiBA, GABA, 0.8963; His, Val, Trp, bABA, bAiBA, Ethylglycine, 0.8963; His, Trp, bABA, bAiBA, Ethylglycine, 3-M

e-His, 0.8963;Ala,Trp,Aminoadipic acid,bABA,bAiBA,GABA,0.8963;Cit,Trp, bABA,bAiBA,GABA,3-Me-His,0.8963;Cit,Tyr,Aminoadipic acid,bABA,bAiBA, GABA,0.8963;Met,Trp,bABA,bAiBA,GABA,Putrescine,0.8963;Trp,Aminoadipi c acid,bABA,Ethylglycine,GABA,Putrescine,0.8963;Trp,Aminoadipic aci d,bABA,bAiBA,GABA,N6-Acetyl-L-Lys,0.8963;Ser,His,Met,bAiBA,GABA,Putre scine,0.8963;His,Ala,bABA,GABA,Putrescine,3-Me-His,0.8963;His,Cit,Eth ylglycine,Homoarginine,N6-Acetyl-L-Lys,3-Me-His,0.8963;His,Cit,Trp,bA iBA,Putrescine,3-Me-His,0.8963;His,Tyr,bABA,GABA,N6-Acetyl-L-Lys,Putr escine,0.8963;His,Tyr,bABA,bAiBA,Ethylglycine,3-Me-His,0.8963;His,Tyr ,Met,bABA,GABA,N6-Acetyl-L-Lys,0.8963;His,Val,Trp,Ethylglycine,Putres cine,Hydroxyproline,0.8963;His,Met,bABA,Ethylglycine,Putrescine,Hydro xyproline,0.8963;His,Met,bABA,bAiBA,Ethylglycine,3-Me-His,0.8963;His, Met,Trp,bAiBA,GABA,3-Me-His,0.8963;His,Trp,bAiBA,N6-Acetyl-L-Lys,3-Me -His,Hydroxyproline,0.8963;His,Aminoadipic acid,Ethylglycine,GABA,N6 -Acetyl-L-Lys,3-Me-His,0.8963;His,Aminoadipic acid,Ethylglycine,GABA ,Homoarginine,Hydroxyproline,0.8963;His,Aminoadipic acid,bABA,bAiBA, N6-Acetyl-L-Lys,Putrescine,0.8963;His,bABA,Ethylglycine,N6-Acetyl-L-L ys,3-Me-His,Hydroxyproline,0.8963;Ser,His,Ala,bAiBA,GABA,N6-Acetyl-L- Lys,0.8956;Ser,His,Cit,Trp,bABA,Putrescine,0.8956;Ser,His,Val,Aminoad ipic acid,bAiBA,GABA,0.8956;Ser,His,Val,bAiBA,GABA,N6-Acetyl-L-Lys,0 .8956;Ser,His,Trp,Ethylglycine,Homoarginine,Hydroxyproline,0.8956;His ,Ala,Val,Trp,bAiBA,GABA,0.8956;His,Ala,Tyr,bAiBA,Ethylglycine,Hydroxy proline,0.8956;His,Ala,Cit,Val,Ethylglycine,Putrescine,0.8956;His,Cit ,bAiBA,GABA,N6-Acetyl-L-Lys,3-Me-His,0.8956;His,Cit,bAiBA,Ethylglycin e,Homoarginine,3-Me-His,0.8956;His,Cit,Met,bAiBA,Ethylglycine,Homoarg inine,0.8956;His,Tyr,Val,bABA,bAiBA,Hydroxyproline,0.8956;His,Aminoad ipic acid,bABA,Ethylglycine,Homoarginine,Putrescine,0.8956;Ala,Amino adipic acid,bABA,bAiBA,GABA,Hydroxyproline,0.8956;Cit,Trp,bABA,bAiBA

, GABA, N6-Acetyl-L-Lys, 0.8956; Trp, Amino adipic acid, bABA, GABA, 3-Me-His, Hydroxyproline, 0.8956; Ser, His, Ala, Amino adipic acid, bABA, Ethylglycine, 0.8956; Ser, His, Cit, Trp, Ethylglycine, Putrescine, 0.8956; Ser, His, Tyr, bAiBA, GABA, Hydroxyproline, 0.8956; Ser, His, Val, bABA, bAiBA, Putrescine, 0.8956; Ser, His, Met, bAiBA, N6-Acetyl-L-Lys, Putrescine, 0.8956; Ser, His, Trp, Ethylglycine, Putrescine, 3-Me-His, 0.8956; Ser, His, Trp, Ethylglycine, 3-Me-His, Hydroxyproline, 0.8956; Ser, Trp, bABA, Ethylglycine, GABA, Hydroxyproline, 0.8956; His, Ala, bAiBA, GABA, Putrescine, Hydroxyproline, 0.8956; His, Ala, bABA, Ethylglycine, Homoarginine, Putrescine, 0.8956; His, Ala, Amino adipic acid, bAiBA, Ethylglycine, Hydroxyproline, 0.8956; His, Ala, Met, bAiBA, Ethylglycine, Hydroxyproline, 0.8956; His, Ala, Cit, Amino adipic acid, bABA, bAiBA, 0.8956; His, Cit, Met, Amino adipic acid, bABA, bAiBA, 0.8956; His, Cit, Met, Trp, bAiBA, Putrescine, 0.8956; His, Cit, Val, Ethylglycine, GABA, N6-Acetyl-L-Lys, 0.8956; His, Tyr, Met, bABA, GABA, 3-Me-His, 0.8956; His, Val, bAiBA, Ethylglycine, 3-Me-His, Hydroxyproline, 0.8956; His, Val, Met, bAiBA, Ethylglycine, N6-Acetyl-L-Lys, 0.8956; His, Val, Met, Trp, bAiBA, GABA, 0.8956; His, Met, bAiBA, Ethylglycine, Homoarginine, N6-Acetyl-L-Lys, 0.8956; His, Met, bABA, bAiBA, N6-Acetyl-L-Lys, Putrescine, 0.8956; His, Trp, Ethylglycine, Homoarginine, N6-Acetyl-L-Lys, Putrescine, 0.8956; His, Trp, Ethylglycine, GABA, N6-Acetyl-L-Lys, Putrescine, 0.8956; His, Amino adipic acid, bAiBA, N6-Acetyl-L-Lys, Putrescine, Hydroxyproline, 0.8956; Ala, Amino adipic acid, bABA, bAiBA, Ethylglycine, GABA, 0.8956; Ala, Met, Trp, bAiBA, Ethylglycine, GABA, 0.8956; Ala, Tyr, Trp, bABA, Ethylglycine, GABA, 0.8956; Ala, Cit, Trp, bAiBA, Ethylglycine, GABA, 0.8956; Tyr, Amino adipic acid, bABA, bAiBA, GABA, N6-Acetyl-L-Lys, 0.8956; Ser, His, Ala, bABA, bAiBA, Putrescine, 0.8956; Ser, His, Tyr, Met, bABA, GABA, 0.8956; Ser, His, Tyr, Trp, bABA, Ethylglycine, 0.8956; Ser, His, Tyr, bABA, bAiBA, N6-Acetyl-L-Lys, 0.8956; Ser, His, Val, Ethylglycine, GABA, Putrescine, 0.8956; Ser, His, Met, Amino adi

pic acid, bABA, bAiBA, 0.8956; Ser, His, Met, bABA, bAiBA, 3-Me-His, 0.8956; Ser, His, Trp, GABA, 3-Me-His, Hydroxyproline, 0.8956; Ser, His, Amino adipic acid, bABA, bAiBA, N6-Acetyl-L-Lys, 0.8956; Ser, His, Ethylglycine, GABA, Homoarginine, N6-Acetyl-L-Lys, 0.8956; His, Cit, Amino adipic acid, bAiBA, Ethylglycine, 3-Me-His, 0.8956; His, Cit, Amino adipic acid, bABA, Ethylglycine, N6-Acetyl-L-Lys, 0.8956; His, Cit, Amino adipic acid, bABA, bAiBA, N6-Acetyl-L-Lys, 0.8956; His, Cit, Val, bABA, bAiBA, Homoarginine, 0.8956; His, Val, Trp, Amino adipic acid, bAiBA, GABA, 0.8956; His, Trp, Ethylglycine, GABA, Putrescine, 3-Me-His, 0.8956; His, bABA, bAiBA, Ethylglycine, Homoarginine, 3-Me-His, 0.8956; His, Ethylglycine, GABA, Putrescine, 3-Me-His, Hydroxyproline, 0.8956; Cit, Val, Trp, bABA, Ethylglycine, GABA, 0.8956; Ser, His, Ala, Ethylglycine, Putrescine, 3-Me-His, 0.8956; Ser, His, Amino adipic acid, Ethylglycine, GABA, 3-Me-His, 0.8956; His, Ala, bABA, GABA, Homoarginine, 3-Me-His, 0.8956; His, Ala, Tyr, bABA, GABA, 3-Me-His, 0.8956; His, Cit, Trp, bABA, bAiBA, Homoarginine, 0.8956; His, Tyr, Val, Amino adipic acid, bAiBA, Ethylglycine, 0.8956; His, Met, bABA, GABA, N6-Acetyl-L-Lys, Putrescine, 0.8956; His, Met, bABA, GABA, Homoarginine, 3-Me-His, 0.8956; His, bABA, GABA, Homoarginine, Putrescine, 3-Me-His, 0.8956; His, bABA, Ethylglycine, Putrescine, 3-Me-His, Hydroxyproline, 0.8956; Ser, His, bAiBA, GABA, Putrescine, 3-Me-His, 0.8950; His, Cit, Amino adipic acid, bAiBA, GABA, 3-Me-His, 0.8950; His, Cit, Tyr, bAiBA, GABA, Hydroxyproline, 0.8950; His, Amino adipic acid, bAiBA, GABA, Homoarginine, N6-Acetyl-L-Lys, 0.8950; Ser, His, Cit, Met, bAiBA, GABA, 0.8950; Ser, His, Trp, GABA, Homoarginine, Hydroxyproline, 0.8950; Ser, Trp, bABA, Ethylglycine, GABA, N6-Acetyl-L-Lys, 0.8950; Ser, Amino adipic acid, bABA, bAiBA, GABA, Hydroxyproline, 0.8950; His, Ala, Cit, bAiBA, GABA, N6-Acetyl-L-Lys, 0.8950; His, Cit, Val, Ethylglycine, GABA, Homoarginine, 0.8950; His, Cit, Val, Amino adipic acid, Ethylglycine, GABA, 0.8950; Cit, Amino adipic acid, bABA, bAiBA, GABA, 3-Me-His, 0.8950; Cit, Trp, Amino adipic acid, bABA, GABA, 3-Me-His, 0.8950; Cit, Val, Met, bABA

, bAiBA, GABA, 0.8950; Met, Aminoadipic acid, bABA, bAiBA, GABA, Homoarginine, 0.8950; Ser, His, Ala, Val, Trp, Ethylglycine, 0.8950; Ser, His, Cit, Ethylglycine, 3-Me-His, Hydroxyproline, 0.8950; Ser, His, Tyr, Met, bAiBA, Putrescine, 0.8950; Ser, His, Ethylglycine, Homoarginine, Putrescine, Hydroxyproline, 0.8950; His, Ala, Val, bAiBA, Ethylglycine, N6-Acetyl-L-Lys, 0.8950; His, Ala, Cit, Ethylglycine, Homoarginine, Putrescine, 0.8950; His, Ala, Cit, AiBA, Ethylglycine, Homoarginine, 0.8950; His, Ala, Cit, Trp, bAiBA, N6-Acetyl-L-Lys, 0.8950; His, Cit, Aminoadipic acid, bABA, Ethylglycine, Hydroxyproline, 0.8950; His, Cit, Met, Ethylglycine, GABA, Homoarginine, 0.8950; His, Cit, Met, Trp, bAiBA, GABA, 0.8950; His, Cit, Val, Trp, bAiBA, GABA, 0.8950; His, Cit, Tyr, Ethylglycine, Homoarginine, Putrescine, 0.8950; His, Cit, Tyr, bAiBA, GABA, Putrescine, 0.8950; His, Tyr, Trp, bAiBA, GABA, Homoarginine, 0.8950; His, Val, bAiBA, Ethylglycine, Homoarginine, N6-Acetyl-L-Lys, 0.8950; His, Val, Trp, bAiBA, GABA, Homoarginine, 0.8950; His, Met, bAiBA, GABA, Homoarginine, Hydroxyproline, 0.8950; His, Trp, Ethylglycine, N6-Acetyl-L-Lys, 3-Me-His, Hydroxyproline, 0.8950; His, Aminoadipic acid, Ethylglycine, GABA, Putrescine, 3-Me-His, 0.8950; His, bABA, Ethylglycine, N6-Acetyl-L-Lys, Putrescine, Hydroxyproline, 0.8950; Ala, Val, bABA, bAiBA, Ethylglycine, GABA, 0.8950; Cit, Aminoadipic acid, bABA, bAiBA, GABA, Putrescine, 0.8950; Cit, Val, Trp, bABA, bAiBA, GABA, 0.8950; Tyr, Trp, Aminoadipic acid, bABA, GABA, 3-Me-His, 0.8950; Trp, bABA, Ethylglycine, GABA, Putrescine, Hydroxyproline, 0.8950; Trp, Aminoadipic acid, bABA, GABA, Homoarginine, Hydroxyproline, 0.8950; Ser, His, Met, Aminoadipic acid, bAiBA, Putrescine, 0.8950; Ser, His, bABA, bAiBA, N6-Acetyl-L-Lys, 3-Me-His, 0.8950; Ser, His, bABA, bAiBA, Putrescine, 3-Me-His, 0.8950; Ser, Cit, Aminoadipic acid, bABA, Ethylglycine, GABA, 0.8950; Ser, Met, bABA, bAiBA, GABA, Hydroxyproline, 0.8950; Ser, Aminoadipic acid, bABA, bAiBA, Ethylglycine, GABA, 0.8950; His, Ala, bAiBA, Ethylglycine, Homoarginine, Hydroxyproline, 0.8950; His, Ala, Trp, bABA, Ethylglycine, N6-Acetyl-L-Lys, 0.8950; His, Ala, Tyr, Met, b

ABA, GABA, 0.8950;His,Cit,Ethylglycine,Homoarginine,Putrescine,Hydroxyproline, 0.8950;His,Cit,Ethylglycine,GABA,N6-Acetyl-L-Lys,Putrescine, 0.8950;His,Tyr,bABA,Ethylglycine,Putrescine,Hydroxyproline, 0.8950;His,Tyr,Trp,Ethylglycine,GABA,N6-Acetyl-L-Lys, 0.8950;His,Val,bAiBA,Ethylglycine,N6-Acetyl-L-Lys,3-Me-His, 0.8950;His,Val,bABA,bAiBA,Ethylglycine,Homoarginine, 0.8950;His,Val,Trp,Aminoadipic acid,bAiBA,Ethylglycine, 0.8950;His,Val,Met,bABA,bAiBA,Ethylglycine, 0.8950;His,Val,Met,Trp,Ethylglycine,Putrescine, 0.8950;His,Met,Trp,bABA,Ethylglycine,Putrescine, 0.8950;His,Met,Trp,Aminoadipic acid,bAiBA,Ethylglycine, 0.8950;His,Trp,bAiBA,Homoarginine,Putrescine,Hydroxyproline, 0.8950;His,Trp,bAiBA,Homoarginine,N6-Acetyl-L-Lys,Hydroxyproline, 0.8950;His,Trp,Aminoadipic acid,bAiBA,Ethylglycine,3-Me-His, 0.8950;His,Aminoadipic acid,Ethylglycine,Homoarginine,Putrescine,3-Me-His, 0.8950;His,bABA,Ethylglycine,Homoarginine,N6-Acetyl-L-Lys,Putrescine, 0.8950;His,bABA,bAiBA,N6-Acetyl-L-Lys,Putrescine,3-Me-His, 0.8950;His,Ethylglycine,N6-Acetyl-L-Lys,Putrescine,3-Me-His,Hydroxyproline, 0.8950;Cit,Trp,bABA,Ethylglycine,GABA,3-Me-His, 0.8950;Val,Met,Trp,bABA,bAiBA,GABA, 0.8950;Ser,His,Ala,bAiBA,GABA,Putrescine, 0.8944;Ser,His,Val,bAiBA,GABA,Homoarginine, 0.8944;Ser,His,bAiBA,GABA,Homoarginine,Putrescine, 0.8944;Val,Aminoadipic acid,bABA,bAiBA,GABA,Homoarginine, 0.8944;Ser,His,Ala,Cit,Trp,Ethylglycine, 0.8944;Ser,His,Ala,bAiBA,GABA,Homoarginine, 0.8944;Ser,His,Cit,Tyr,bABA,Ethylglycine, 0.8944;Ser,His,Aminoadipic acid,bAiBA,GABA,3-Me-His, 0.8944;His,Ala,Aminoadipic acid,bAiBA,GABA,Putrescine, 0.8944;His,Ala,Met,Aminoadipic acid,bAiBA,GABA, 0.8944;His,Ala,Cit,Ethylglycine,Putrescine,3-Me-His, 0.8944;His,Ala,Cit,Aminoadipic acid,bABA,Ethylglycine, 0.8944;His,Ala,Cit,Met,Ethylglycine,Putrescine, 0.8944;His,Cit,bAiBA,GABA,Putrescine,3-Me-His, 0.8944;His,Cit,Met,bAiBA,GABA,Homoarginine, 0.8944;His,Aminoadipic acid,Ethylglycine,GABA,Homoarginine,N6

-Acetyl-L-Lys, 0.8944;Cit, Tyr, Trp, bABA, bAiBA, GABA, 0.8944;Ser, His, Cit, Val, bAiBA, GABA, 0.8944;Ser, His, Cit, Met, bABA, Homoarginine, 0.8944;Ser, His, Met, Amino adipic acid, bABA, Ethylglycine, 0.8944;Ser, His, Trp, Ethylglycine, Homoarginine, 3-Me-His, 0.8944;Ser, Tyr, Amino adipic acid, bABA, bAiBA, GABA, 0.8944;Ser, Met, Trp, bABA, Ethylglycine, GABA, 0.8944;His, Ala, bAiBA, Ethylglycine, Homoarginine, N6-Acetyl-L-Lys, 0.8944;His, Ala, Cit, bABA, bAiBA, Hydroxyproline, 0.8944;His, Cit, bAiBA, GABA, 3-Me-His, Hydroxyproline, 0.8944;His, Cit, Met, Amino adipic acid, Ethylglycine, Putrescine, 0.8944;His, Cit, Val, bAiBA, Ethylglycine, 3-Me-His, 0.8944;His, Cit, Val, Amino adipic acid, bABA, bAiBA, 0.8944;His, Cit, Tyr, Ethylglycine, GABA, Homoarginine, 0.8944;His, Tyr, bABA, bAiBA, Homoarginine, Putrescine, 0.8944;His, Tyr, Met, bAiBA, Ethylglycine, Hydroxyproline, 0.8944;His, Tyr, Val, bABA, bAiBA, Putrescine, 0.8944;His, Met, Amino adipic acid, bABA, Ethylglycine, Putrescine, 0.8944;His, Met, Trp, bABA, bAiBA, Ethylglycine, 0.8944;His, Trp, Ethylglycine, N6-Acetyl-L-Lys, Putrescine, Hydroxyproline, 0.8944;His, Amino adipic acid, bAiBA, Ethylglycine, Homoarginine, Hydroxyproline, 0.8944;His, Amino adipic acid, bAiBA, Ethylglycine, Homoarginine, N6-Acetyl-L-Lys, 0.8944;His, Amino adipic acid, bABA, Ethylglycine, N6-Acetyl-L-Lys, Putrescine, 0.8944;His, bAiBA, N6-Acetyl-L-Lys, Putrescine, 3-Me-His, Hydroxyproline, 0.8944;His, Ethylglycine, GABA, Homoarginine, Putrescine, Hydroxyproline, 0.8944;His, Ethylglycine, GABA, Homoarginine, Putrescine, 3-Me-His, 0.8944;Ala, Val, bABA, bAiBA, GABA, Hydroxyproline, 0.8944;Cit, Met, Trp, bABA, bAiBA, GABA, 0.8944;Tyr, Trp, bABA, Ethylglycine, GABA, Hydroxyproline, 0.8944;Val, bABA, bAiBA, GABA, Homoarginine, Hydroxyproline, 0.8944;Val, Trp, bABA, Ethylglycine, GABA, Hydroxyproline, 0.8944;Trp, Amino adipic acid, bABA, bAiBA, GABA, 3-Me-His, 0.8944;Ser, His, Cit, Trp, bAiBA, Hydroxyproline, 0.8944;Ser, His, Tyr, Met, bABA, bAiBA, 0.8944;Ser, His, Tyr, Trp, Ethylglycine, Putrescine, 0.8944;Ser, His, Val, Met, Ethylglycine, Putrescine, 0.8944;Ser, His, Met, Ethylglycine,

GABA, Homoarginine, 0.8944; Ser, His, Amino adipic acid, Ethylglycine, 3-Me-His, Hydroxyproline, 0.8944; Ser, His, Ethylglycine, N6-Acetyl-L-Lys, Putrescine, 3-Me-His, 0.8944; Ser, Cit, Met, bABA, bAiBA, GABA, 0.8944; His, Ala, bAiBA, Ethylglycine, 3-Me-His, Hydroxyproline, 0.8944; His, Cit, Trp, Amino adipic acid, bABA, bAiBA, 0.8944; His, Cit, Met, bABA, bAiBA, N6-Acetyl-L-Lys, 0.8944; His, Cit, Val, Met, bAiBA, Ethylglycine, 0.8944; His, Tyr, bABA, GABA, Homoarginine, 3-Me-His, 0.8944; His, Tyr, Met, bABA, bAiBA, Hydroxyproline, 0.8944; His, Tyr, Met, Amino adipic acid, bAiBA, Ethylglycine, 0.8944; His, Tyr, Val, Trp, bAiBA, Ethylglycine, 0.8944; His, Met, Amino adipic acid, bABA, bAiBA, Putrescine, 0.8944; His, Amino adipic acid, bABA, Ethylglycine, Putrescine, 3-Me-His, 0.8944; His, Amino adipic acid, bABA, bAiBA, 3-Me-His, Hydroxyproline, 0.8944; His, bABA, Ethylglycine, Homoarginine, Putrescine, Hydroxyproline, 0.8944; His, bAiBA, Homoarginine, N6-Acetyl-L-Lys, Putrescine, Hydroxyproline, 0.8944; Cit, Met, Trp, bABA, Ethylglycine, GABA, 0.8944

[0142] [14. 2変数の式]

Gln, N-Me-bABA, 1.0000; Ala, N-Me-bABA, 0.9809; Pro, N-Me-bABA, 0.9844; Met, N-Me-bABA, 0.9878; Trp, N-Me-bABA, 0.9931; Amino adipic acid, N-Me-bABA, 0.9844; Cadaverine, N-Me-bABA, 0.9844; Homoarginine, N-Me-bABA, 0.9913; N6-Acetyl-L-Lys, N-Me-bABA, 0.9844; Spermidine, N-Me-bABA, 0.9878; Homocitrulline, N-Me-bABA, 0.9896; Asn, N-Me-bABA, 0.9826; His, N-Me-bABA, 1.0000; Cit, N-Me-bABA, 0.9809; Tyr, N-Me-bABA, 0.9913; Orn, N-Me-bABA, 0.9809; Leu, N-Me-bABA, 0.9861; X1. Me. His, N-Me-bABA, 0.9809; bABA, N-Me-bABA, 0.9931; Ethylglycine, N-Me-bABA, 0.9965; Putrescine, N-Me-bABA, 0.9826; Spermine, N-Me-bABA, 0.9809; 3-Me-His, N-Me-bABA, 0.9965; Thr, N-Me-bABA, 0.9809; Arg, N-Me-bABA, 0.9861; Val, N-Me-bABA, 0.9948; Lys, N-Me-bABA, 0.9931; GABA, N-Me-bABA, 0.9931; Serotonin, N-Me-bABA, 0.9826; ADMA, N-Me-bABA, 0.9826; Hydroxyproline, N-Me-bABA, 0.9844

[0143] [15. 1変数追加]

aABA, 0.9306; Amino adipic acid, 0.9444; bABA, 0.9392; bAiBA, 0.9566; Cadaverine, 0.9340; GABA, 0.9462; Hypotaurine, 0.9323; N6-Acetyl-L-Lys, 0.9444; Putrescine, 0.9358; Spermidine, 0.9306; Spermine, 0.9340; ADMA, 0.9323; N-Me-bABA, 1.0000; AC(13:1), 0.9809; EPA, 0.9462

[0144] [16. 2変数追加]

X1.Me.His, aABA, 0.9340; X1.Me.His, Amino adipic acid, 0.9427; X1.Me.His, bABA, 0.9392; X1.Me.His, bAiBA, 0.9514; X1.Me.His, GABA, 0.9531; X1.Me.His, Hypotaurine, 0.9323; X1.Me.His, N6-Acetyl-L-Lys, 0.9531; X1.Me.His, Spermine, 0.9323; X1.Me.His, ADMA, 0.9306; X1.Me.His, N-Me-bABA, 1.0000; X1.Me.His, AC(13:1), 0.9826; X1.Me.His, EPA, 0.9497; aABA, Amino adipic acid, 0.9410; aABA, bABA, 0.9444; aABA, bAiBA, 0.9549; aABA, Ethylglycine, 0.9427; aABA, GABA, 0.9479; aABA, Homoarginine, 0.9444; aABA, Hypotaurine, 0.9531; aABA, Kynurenine, 0.9323; aABA, N6-Acetyl-L-Lys, 0.9444; aABA, Putrescine, 0.9358; aABA, Serotonin, 0.9323; aABA, Spermidine, 0.9323; aABA, Spermine, 0.9410; aABA, ADMA, 0.9340; aABA, Homocitrulline, 0.9323; aABA, Hydroxyproline, 0.9358; aABA, Phosphoethanolamine, 0.9306; aABA, N-Me-bABA, 1.0000; aABA, AC(13:1), 0.9809; aABA, EPA, 0.9531; Amino adipic acid, bABA, 0.9410; Amino adipic acid, bAiBA, 0.9514; Amino adipic acid, Cadaverine, 0.9444; Amino adipic acid, Ethylglycine, 0.9514; Amino adipic acid, GABA, 0.9583; Amino adipic acid, Homoarginine, 0.9479; Amino adipic acid, Hypotaurine, 0.9566; Amino adipic acid, Kynurenine, 0.9514; Amino adipic acid, N6-Acetyl-L-Lys, 0.9444; Amino adipic acid, Putrescine, 0.9479; Amino adipic acid, Serotonin, 0.9358; Amino adipic acid, Spermidine, 0.9444; Amino adipic acid, Spermine, 0.9479; Amino adipic acid, ADMA, 0.9549; Amino adipic acid, Homocitrulline, 0.9444; Amino adipic acid, 3-Me-His, 0.9392; Amino adipic acid, Hydroxyproline, 0.9444; Amino adipic acid, Phosphoethanolamine, 0.9462; Amino adipic acid, N-Me-bABA, 1.0000; Amino adipic acid, AC(13:1), 0.9826; Amino adipic acid, EPA, 0.9497; bABA, bAiBA, 0.9497; bABA, Cadaverine, 0.9427; bABA, Ethylglycine, 0.9392; bABA, GABA, 0.

9618;bABA, Homoarginine, 0.9323;bABA, Hypotaurine, 0.9410;bABA, Kynurenine, 0.9358;bABA, N6-Acetyl-L-Lys, 0.9514;bABA, Putrescine, 0.9392;bABA, Serotonin, 0.9444;bABA, Spermidine, 0.9392;bABA, Spermine, 0.9514;bABA, ADMA, 0.9410;bABA, Homocitrulline, 0.9340;bABA, 3-Me-His, 0.9375;bABA, Hydroxyproline, 0.9358;bABA, Phosphoetanolamine, 0.9375;bABA, N-Me-bABA, 1.0000;bABA, AC(13:1), 0.9809;bABA, EPA, 0.9618;bAiBA, Cadaverine, 0.9549;bAiBA, Ethylglycine, 0.9531;bAiBA, GABA, 0.9653;bAiBA, Homoarginine, 0.9531;bAiBA, Hypotaurine, 0.9566;bAiBA, Kynurenine, 0.9566;bAiBA, N6-Acetyl-L-Lys, 0.9618;bAiBA, Putrescine, 0.9549;bAiBA, Serotonin, 0.9583;bAiBA, Spermidine, 0.9601;bAiBA, Spermine, 0.9514;bAiBA, ADMA, 0.9531;bAiBA, Homocitrulline, 0.9479;bAiBA, 3-Me-His, 0.9531;bAiBA, Hydroxyproline, 0.9531;bAiBA, Phosphoetanolamine, 0.9601;bAiBA, N-Me-bABA, 1.0000;bAiBA, AC(13:1), 0.9983;bAiBA, EPA, 0.9635;Cadaverine, Ethylglycine, 0.9306;Cadaverine, GABA, 0.9479;Cadaverine, Homoarginine, 0.9358;Cadaverine, Hypotaurine, 0.9444;Cadaverine, Kynurenine, 0.9340;Cadaverine, N6-Acetyl-L-Lys, 0.9497;Cadaverine, Putrescine, 0.9358;Cadaverine, Serotonin, 0.9323;Cadaverine, Spermidine, 0.9323;Cadaverine, Spermine, 0.9375;Cadaverine, ADMA, 0.9358;Cadaverine, Phosphoetanolamine, 0.9306;Cadaverine, N-Me-bABA, 1.0000;Cadaverine, AC(13:1), 0.9826;Cadaverine, EPA, 0.9531;Ethylglycine, GABA, 0.9497;Ethylglycine, Homoarginine, 0.9358;Ethylglycine, Hypotaurine, 0.9375;Ethylglycine, Kynurenine, 0.9340;Ethylglycine, N6-Acetyl-L-Lys, 0.9497;Ethylglycine, Putrescine, 0.9323;Ethylglycine, Serotonin, 0.9306;Ethylglycine, Spermine, 0.9340;Ethylglycine, ADMA, 0.9479;Ethylglycine, Homocitrulline, 0.9323;Ethylglycine, 3-Me-His, 0.9323;Ethylglycine, N-Me-bABA, 1.0000;Ethylglycine, AC(13:1), 0.9861;Ethylglycine, EPA, 0.9479;GABA, Homoarginine, 0.9549;GABA, Hypotaurine, 0.9618;GABA, Kynurenine, 0.9531;GABA, N6-Acetyl-L-Lys, 0.9497;GABA, Putrescine, 0.9444;GABA, Serotonin, 0.9497;GABA, Spermidine, 0.9635;GABA, Spermine, 0.9549;GABA, ADMA, 0.9531;GABA, Homocitrulline, 0.9462;GABA, 3-Me-His, 0.9444;

GABA, Hydroxyproline, 0.9514; GABA, Phosphoetanolamine, 0.9462; GABA, N-Me-bABA, 1.0000; GABA, AC(13:1), 0.9983; GABA, EPA, 0.9826; Homoarginine, Hypotaurine, 0.9375; Homoarginine, Kynurenine, 0.9306; Homoarginine, N6-Acetyl-L-Lys, 0.9514; Homoarginine, Serotonin, 0.9375; Homoarginine, Spermine, 0.9358; Homoarginine, ADMA, 0.9358; Homoarginine, Homocitrulline, 0.9323; Homoarginine, 3-Me-His, 0.9306; Homoarginine, Phosphoetanolamine, 0.9288; Homoarginine, N-Me-bABA, 1.0000; Homoarginine, AC(13:1), 0.9896; Homoarginine, EPA, 0.9566; Hypotaurine, Kynurenine, 0.9340; Hypotaurine, N6-Acetyl-L-Lys, 0.9670; Hypotaurine, Putrescine, 0.9427; Hypotaurine, Serotonin, 0.9323; Hypotaurine, Spermidine, 0.9323; Hypotaurine, Spermine, 0.9392; Hypotaurine, ADMA, 0.9410; Hypotaurine, Homocitrulline, 0.9358; Hypotaurine, 3-Me-His, 0.9323; Hypotaurine, Hydroxyproline, 0.9306; Hypotaurine, Phosphoetanolamine, 0.9306; Hypotaurine, N-Me-bABA, 1.0000; Hypotaurine, AC(13:1), 0.9861; Hypotaurine, EPA, 0.9583; Kynurenine, N6-Acetyl-L-Lys, 0.9566; Kynurenine, Putrescine, 0.9375; Kynurenine, Spermine, 0.9340; Kynurenine, ADMA, 0.9340; Kynurenine, 3-Me-His, 0.9323; Kynurenine, Hydroxyproline, 0.9306; Kynurenine, N-Me-bABA, 1.0000; Kynurenine, AC(13:1), 0.9826; Kynurenine, EPA, 0.9444; N6-Acetyl-L-Lys, Putrescine, 0.9514; N6-Acetyl-L-Lys, Serotonin, 0.9497; N6-Acetyl-L-Lys, Spermidine, 0.9618; N6-Acetyl-L-Lys, Spermine, 0.9670; N6-Acetyl-L-Lys, ADMA, 0.9549; N6-Acetyl-L-Lys, Homocitrulline, 0.9462; N6-Acetyl-L-Lys, 3-Me-His, 0.9497; N6-Acetyl-L-Lys, Hydroxyproline, 0.9444; N6-Acetyl-L-Lys, Phosphoetanolamine, 0.9462; N6-Acetyl-L-Lys, N-Me-bABA, 1.0000; N6-Acetyl-L-Lys, AC(13:1), 0.9896; N6-Acetyl-L-Lys, EPA, 0.9688; Putrescine, Serotonin, 0.9375; Putrescine, Spermidine, 0.9514; Putrescine, Spermine, 0.9444; Putrescine, ADMA, 0.9340; Putrescine, Homocitrulline, 0.9323; Putrescine, 3-Me-His, 0.9375; Putrescine, Hydroxyproline, 0.9410; Putrescine, Phosphoetanolamine, 0.9375; Putrescine, N-Me-bABA, 1.0000; Putrescine, AC(13:1), 0.9809; Putrescine, EPA, 0.9583; Serotonin, Spermine, 0.9340; Serotonin, ADMA, 0.9427; Serotonin, H

omocitrulline, 0.9323; Serotonin, 3-Me-His, 0.9306; Serotonin, Phosphoetanolamine, 0.9306; Serotonin, N-Me-bABA, 1.0000; Serotonin, AC(13:1), 0.9826; Serotonin, EPA, 0.9462; Spermidine, Spermine, 0.9306; Spermidine, ADMA, 0.9358; Spermidine, N-Me-bABA, 1.0000; Spermidine, AC(13:1), 0.9844; Spermidine, EPA, 0.9549; Spermine, ADMA, 0.9427; Spermine, Homocitrulline, 0.9358; Spermine, 3-Me-His, 0.9358; Spermine, Phosphoetanolamine, 0.9323; Spermine, N-Me-bABA, 1.0000; Spermine, AC(13:1), 0.9809; Spermine, EPA, 0.9583; ADMA, Homocitrulline, 0.9410; ADMA, 3-Me-His, 0.9392; ADMA, Hydroxyproline, 0.9392; ADMA, Phosphoetanolamine, 0.9323; ADMA, N-Me-bABA, 1.0000; ADMA, AC(13:1), 0.9861; ADMA, EPA, 0.9531; Homocitrulline, N-Me-bABA, 1.0000; Homocitrulline, AC(13:1), 0.9844; Homocitrulline, EPA, 0.9514; 3-Me-His, N-Me-bABA, 1.0000; 3-Me-His, AC(13:1), 0.9826; 3-Me-His, EPA, 0.9479; Hydroxyproline, N-Me-bABA, 1.0000; Hydroxyproline, AC(13:1), 0.9826; Hydroxyproline, EPA, 0.9497; Phosphoetanolamine, N-Me-bABA, 1.0000; Phosphoetanolamine, AC(13:1), 0.9861; Phosphoetanolamine, EPA, 0.9479; N-Me-bABA, AC(13:1), 1.0000; N-Me-bABA, EPA, 1.0000; AC(13:1), EPA, 0.9861

請求の範囲

[請求項1] 評価対象の血液中のN-Me-bABA, bABA, GABA, N6-Acetyl-L-Lys, 1-Me-His, aABA, Aminoadipic acid, bAIBA, Cadaverine, Ethylglycine, Homoarginine, Hypotaurine, Kinurenine, Putrescine, Serotonin, Spermidine, Spermine, ADMA, Homocitrulline, 3-Me-His, Hydroxyproline, Phosphoethanolamine, Acylcarnitine (13:1), EPAのうちの少なくとも1つの代謝物の濃度値、または、前記代謝物の濃度値が代入される変数を含む式および前記代謝物の濃度値を用いて算出された前記式の値を用いて、前記評価対象について、膵臓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、前記代謝物の濃度値および前記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つのアミノ酸の濃度値、または、前記アミノ酸の濃度値が代入される変数を含む前記式、前記代謝物の濃度値および前記アミノ酸の濃度値を用いて算出された前記式の値を用いること、

を特徴とする請求項1に記載の評価方法。

[請求項3] 前記評価ステップは、制御部を備えた情報処理装置の前記制御部において実行されること、

を特徴とする請求項1または2に記載の評価方法。

[請求項4] 評価対象の血液中のN-Me-bABA, bABA, GABA, N6-Acetyl-L-Lys, 1-Me-His, aABA, Am

inoadipic acid, bAiBA, Cadaverine, Ethylglycine, Homoarginine, Hypotaurine, Kinurenine, Putrescine, Serotonin, Spermidine, Spermine, ADMA, Homocitrulline, 3-Me-His, Hydroxyproline, Phosphoethanolamine, Acylcarnitine (13:1), EPAのうちの少なくとも1つの代謝物の濃度値、および、前記代謝物の濃度値が代入される変数を含む式を用いて、前記式の値を算出することで、前記評価対象について、膵臓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N-Me-bABA, bABA, GABA, N6-Acetyl-L-Lys, 1-Me-His, aABA, Aminoadipic acid, bAiBA, Cadaverine, Ethylglycine, Homoarginine, Hypotaurine, Kinurenine, Putrescine, Serotonin, Spermidine, Spermine, ADMA, Homocitrulline, 3-Me-His, Hydroxyproline, Phosphoethanolamine, Acylcarnitine (13:1), EPAのうちの少なくとも1つの代謝物の濃度値、または、前記代謝物の濃度値が代入される変数を含む式および前記代謝物の濃度値を用いて算出された前記式の値を用いて、前記評価対象について、膵臓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] 前記代謝物の濃度値に関する濃度データまたは前記式の値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、

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または前記式の値を受信するデータ受信手段と、

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、

をさらに備え、

前記評価手段は、前記データ受信手段で受信した前記濃度データに含まれている前記代謝物の濃度値または前記式の値を用いること、

を特徴とする請求項5に記載の評価装置。

[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N-Me-bABA, bABA, GABA, N6-Acetyl-L-Lys, 1-Me-His, aABA, Aminoadipic acid, bAiBA, Cadaverine, Ethylglycine, Homoarginine, Hypotaaurine, Kinurenine, Putrescine, Serotonin, Spermidine, Spermine, ADMA, Homocitrulline, 3-Me-His, Hydroxyproline, Phosphoethanolamine, Acylcarnitine (13:1), EPAのうちの少なくとも1つの代謝物の濃度値、または、前記代謝物の濃度値が代入される変数を含む式および前記代謝物の濃度値を用いて算出された前記式の値を用いて、前記評価対象について、膀胱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N-Me-bABA, bABA, GABA, N6-Acetyl-L-Lys, 1-Me-His, aABA, Amino adipic acid, bAIBA, Cadaverine, Ethylglycine, Homoarginine, Hypotaurine, Kinurenine, Putrescine, Serotonin, Spermidine, Spermine, ADMA, Homocitrulline, 3-Me-His, Hydroxyproline, Phosphoethanolamine, Acylcarnitine (13:1), EPAのうちの少なくとも1つの代謝物の濃度値に関する濃度データ、または、前記代謝物の濃度値が代入される変数を含む式および前記代謝物の濃度値を用いて算出された前記式の値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または前記式の値を前記評価装置へ送信するデータ送信手段と、

前記評価装置から送信された、前記評価対象における膵臓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または前記式の値を受信するデータ受信手段と、

前記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前記代謝物の濃度値または前記式の値を用いて、前記評価対象について、膵臓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、

評価対象における膵臓癌の状態に関する評価結果を取得する結果取得手段

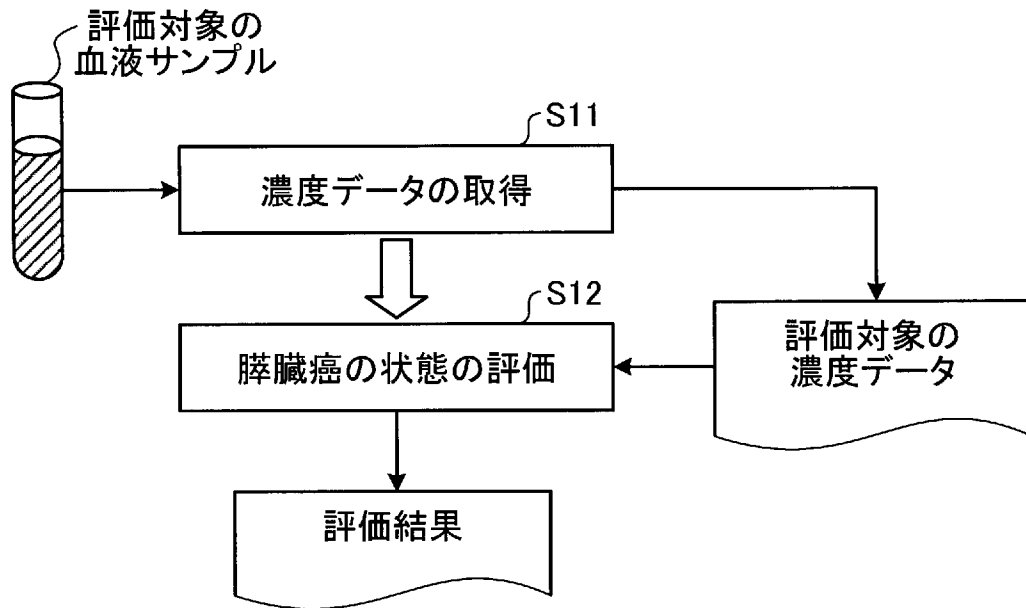
を備え、

前記評価結果は、前記評価対象の血液中のN-Me-bABA, bABA, GABA, N6-Acetyl-L-Lys, 1-Me-His, aABA, Amino adipic acid, bAiBA, Cadaverine, Ethylglycine, Homoarginine, Hypotaurine, Kinurenine, Putrescine, Serotonin, Spermidine, Spermine, ADMA, Homocitrulline, 3-Me-His, Hydroxyproline, Phosphoethanolamine, Acylcarnitine (13:1), EPAのうちの少なくとも1つの代謝物の濃度値、または、前記代謝物の濃度値が代入される変数を含む式および前記代謝物の濃度値を用いて算出された前記式の値を用いて、前記評価対象について、膵臓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。

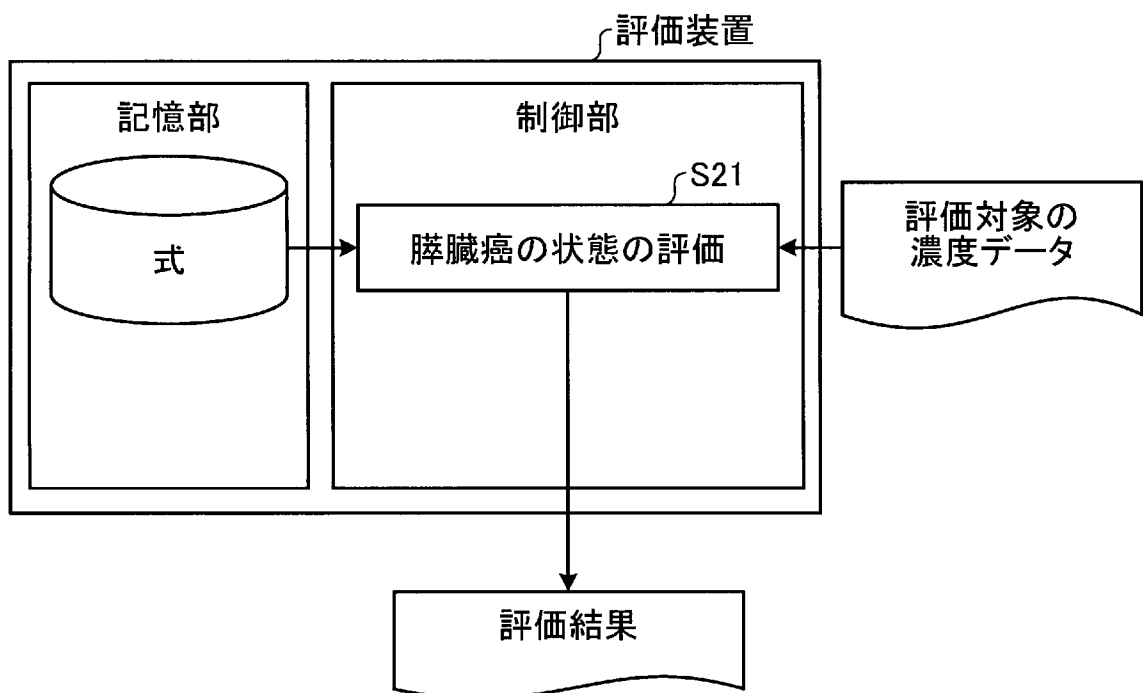
[図1]

(本発明の基本原理)

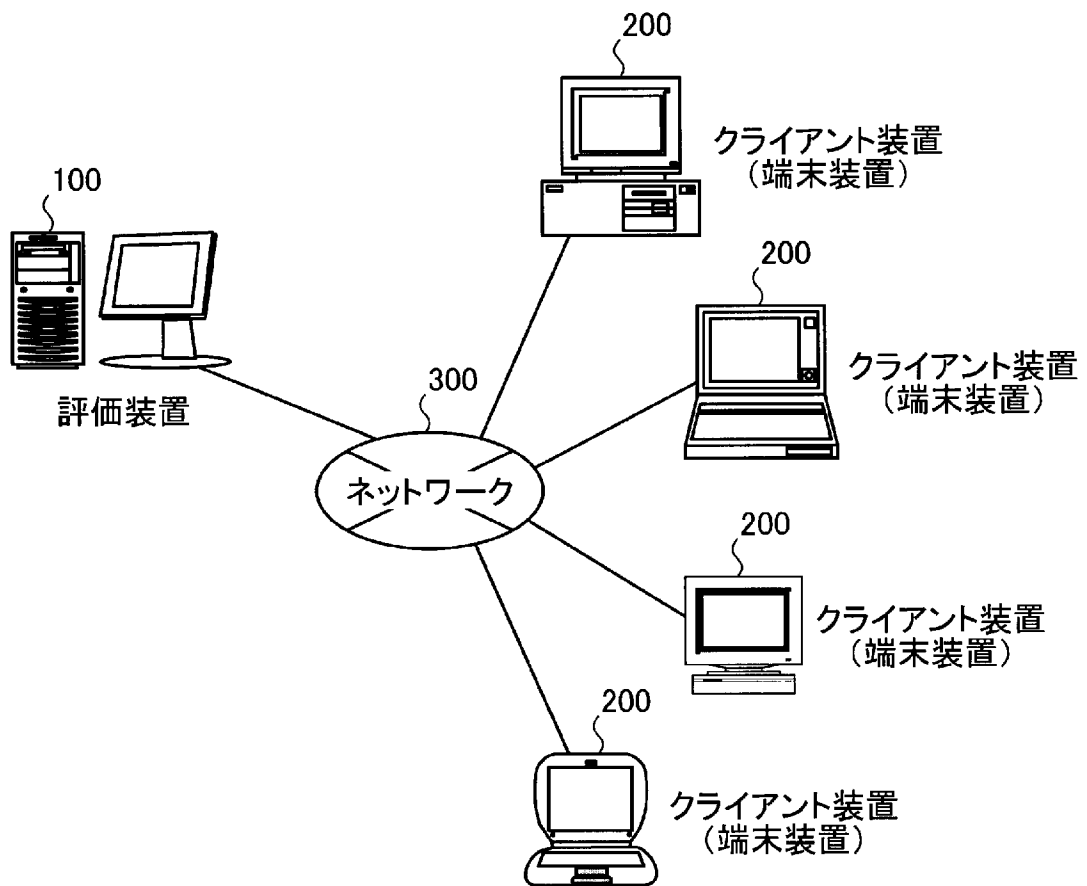


[図2]

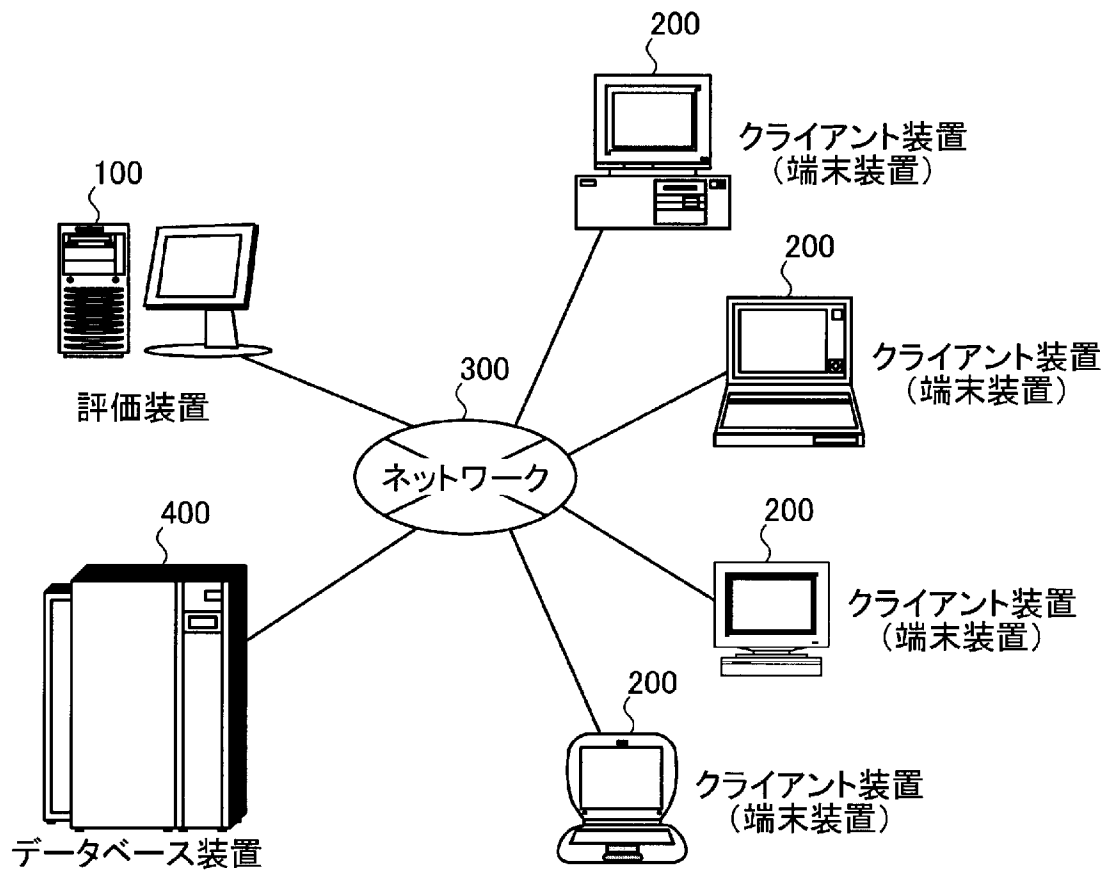
(本発明の基本原理)



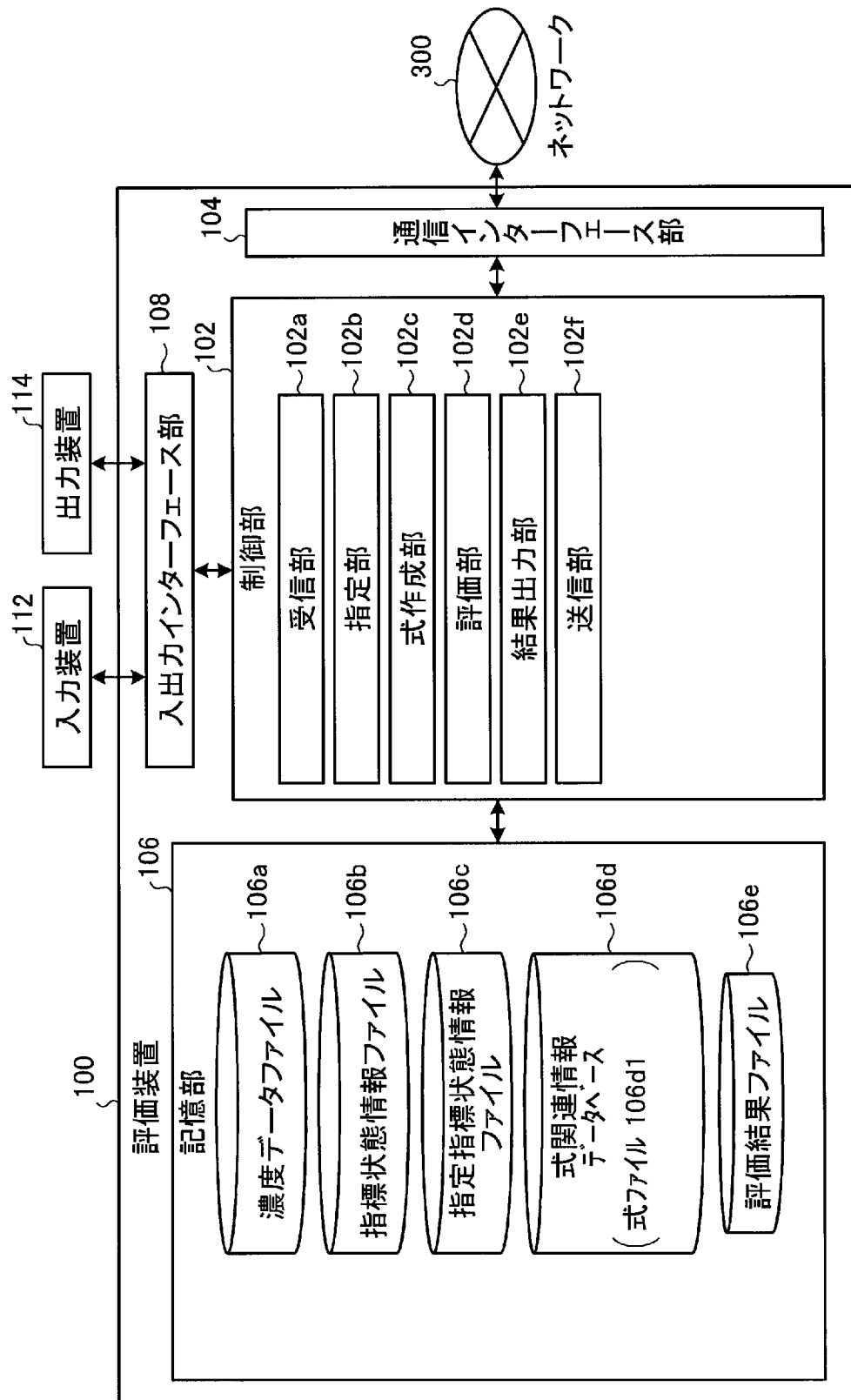
[図3]



[図4]



[図5]



[図6]

106a

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7]

[illegible]

[図8]

106c

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9]

106d1

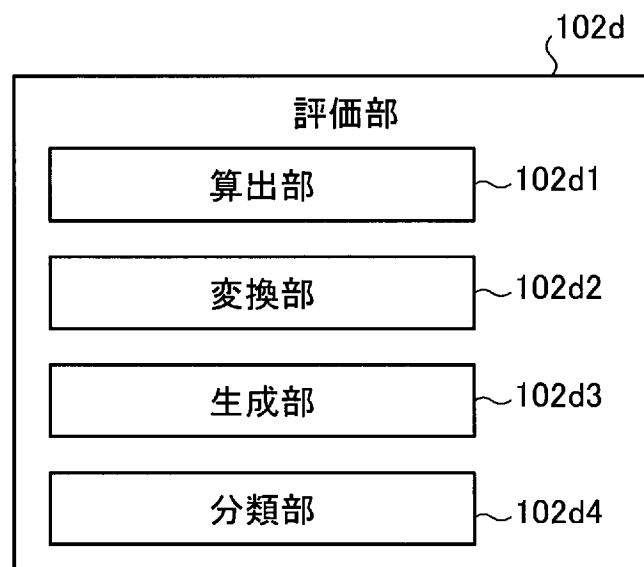
ランク	式	閾値	検証結果
1	$F_p(\text{His}, \dots)$	0.23	0.62
2	$F_p(\text{His}, \text{Homo}, \text{GABA})$	-2.12	1.02
3	$F_k(\text{His}, \text{Homo}, \text{GABA}, \dots)$	1.23	1.22
⋮	⋮	⋮	⋮

[図10]

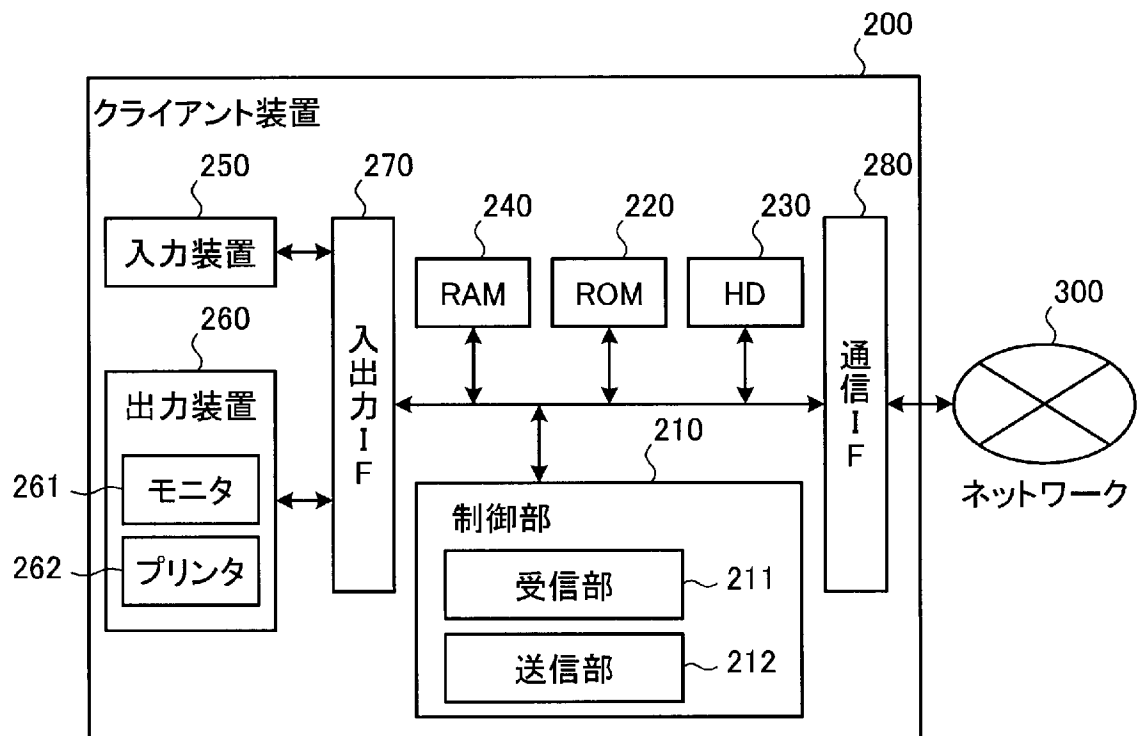
106e

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	...	
⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮

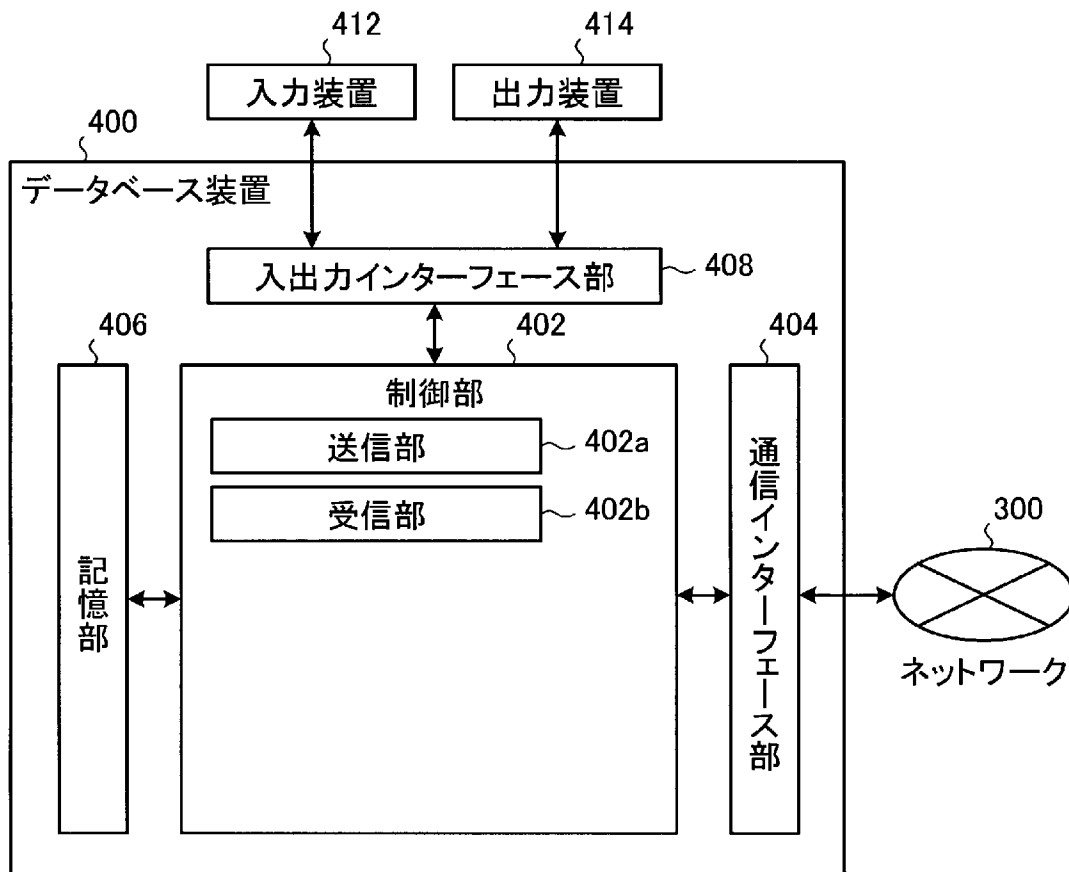
[図11]



[図12]



[図13]



INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.

PCT/JP2017/036198

A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER

Int.Cl. G01N33/68 (2006.01) i, G01N33/48 (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)

Int.Cl. G01N33/68, G01N33/48

Documentation searched other than minimum documentation to the extent that such documents are included in the fields searched

Published examined utility model applications of Japan	1922-1996
Published unexamined utility model applications of Japan	1971-2017
Registered utility model specifications of Japan	1996-2017
Published registered utility model specifications of Japan	1994-2017

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.
A/X	WO 2013/146621 A1 (AJINOMOTO CO., INC.) 03 October 2013, see entire text, all drawings (Family: none)	1-8/9
A	WO 2008/075664 A1 (AJINOMOTO CO., INC.) 26 June 2008, see entire text, all drawings & JP 2014-25946 A & US 2010/0017145 A1, see entire text, all drawings & EP 2103941 A1	1-9
A	WO 2009/110517 A1 (AJINOMOTO CO., INC.) 11 September 2009, see entire text, all drawings & US 2011/0091924 A1, see entire text, all drawings	1-9

☒ Further documents are listed in the continuation of Box C.

☐ See patent family annex.

* Special categories of cited documents:

"A" document defining the general state of the art which is not considered to be of particular relevance

"E" earlier application or patent but published on or after the international filing date

"L" document which may throw doubts on priority claim(s) or which is cited to establish the publication date of another citation or other special reason (as specified)

"O" document referring to an oral disclosure, use, exhibition or other means

"P" document published prior to the international filing date but later than the priority date claimed

"T" later document published after the international filing date or priority date and not in conflict with the application but cited to understand the principle or theory underlying the invention

"X" document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered novel or cannot be considered to involve an inventive step when the document is taken alone

"Y" document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered to involve an inventive step when the document is combined with one or more other such documents, such combination being obvious to a person skilled in the art

"&" document member of the same patent family

Date of the actual completion of the international search
21 December 2017 (21.12.2017)

Date of mailing of the international search report
09 January 2018 (09.01.2018)

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/JP2017/036198

C (Continuation). DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
A	WO 2004/052191 A1 (AJINOMOTO CO., INC.) 24 June 2004, see entire text, all drawings & JP 4581994 B2 & JP 2010-281826 A & JP 2013-257333 A & US 2005/0283347 A1, see entire text, all drawings & US 2008/0154515 A1 & US 2012/0239366 A1 & EP 1570779 A1 & EP 2357581 A2	1-9
A	WO 2008/016111 A1 (AJINOMOTO CO., INC.) 07 February 2008, see entire text, all drawings & JP 8-16111 A & JP 2014-38114 A & US 2010/0017144 A1, see entire text, all drawings & EP 2081027 A1	1-9
A	WO 2006/129513 A1 (AJINOMOTO CO., INC.) 07 December 2006, see entire text, all drawings & US 2008/0154515 A1, see entire text, all drawings & EP 1887362 A1	1-9
A	東江咲乃、外 2 名、がんのバイオマーカー1. 血漿アミノ酸プロファイルに基づくがんスクリーニング, 血液フロンティア, 30 September 2016, vol. 26, no. 10, pp. 1369-1377, Hematology Frontier, non-official translation (TOUE, Sakino, et al., Biomarker 1 for Cancer 1. Screening of Cancer on the Basis of Plasma Amino Acid Profile)	1-9
A	FUKUTAKE, Nobuyoshi、外 11 名、血漿中アミノ酸のプロファイルによる新規膵臓がんスクリーニングマーカーの検討, 日本癌学会学術総会抄録集 (Web), 2014, vol. 73, pp. J-1089, (FUKUTAKE, Nobuyoshi, et al., Investigation of novel pancreatic cancer screening marker based on the plasma free amino acid profile, Annual Meeting of the Japanese Cancer Association Abstracts (Web))	1-9

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.

PCT/JP2017/036198

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:
See 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.:
Regarding the parts related to evaluating the state of pancreatic cancer on the basis of the metabolite N-Me-bABA, in the inventions in claims 1-9.

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.
- ☐

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.

PCT/JP2017/036198

The technical features of the inventions in claims 1-9 are considered to be an evaluation of the state of pancreatic cancer, and a device, a program, and a system which are used for the evaluation, wherein the evaluation involves evaluating the state of pancreatic cancer in an evaluation subject by using: a concentration value of at least 24 metabolites including N-Me-bABA; or a value obtained by using the concentration value of the metabolites, and a formula including a variable into which the concentration value of the metabolites is substituted.

All of the 24 marker materials specified in the inventions in claims 1-9 are completely different materials with respect to structure, physiological activity, etc., and do not share a common structure. If the marker materials shared common properties and shared an important structure elements essential for exhibiting the common properties, it would be determined that there is a single general inventive concept. However, since the 24 marker materials specified do not share a common structure as indicated above, the 24 marker materials are not considered to constitute a single general inventive concept.

Accordingly, in claims 1-9, a separate invention is considered to exist for each of the 24 marker materials.

As described above, since claims 1-9 are considered to include 24 inventions, the international search report has been written regarding the evaluation of the state of pancreatic cancer in an evaluation subject, and a device, program, and system used for the evaluation, wherein the evaluation is performed on the basis of N-Me-bABA, which is the first metabolite described in claims 1-9.

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, G01N33/48(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, G01N33/48

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	1971-2017年
日本国実用新案登録公報	1996-2017年
日本国登録実用新案公報	1994-2017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), CAlus/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
A/X	WO 2013/146621 A1 (味の素株式会社) 2013.10.03, 全文・全図参照 (ファ ミリーなし)	1-8/9
A	WO 2008/075664 A1 (味の素株式会社) 2008.06.26, 全文・全図参照 & JP 2014-25946 A & US 2010/0017145 A1, 全文・全図参照 & EP 2103941 A1	1-9
A	WO 2009/110517 A1 (味の素株式会社) 2009.09.11, 全文・全図参照 & US 2011/0091924 A1, 全文・全図参照	1-9

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

21.12.2017

国際調査報告の発送日

09.01.2018

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)

草川 貴史

2 J

4075

電話番号 03-3581-1101 内線 3252

C (続き) . 関連すると認められる文献		
引用文献の カテゴリー*	引用文献名 及び一部の箇所が関連するときは、その関連する箇所の表示	関連する 請求項の番号
A	WO 2004/052191 A1 (味の素株式会社) 2004.06.24, 全文・全図参照 & JP 4581994 B2 & JP 2010-281826 A & JP 2013-257333 A & US 2005/0283347 A1, 全文・全図参照 & US 2008/0154515 A1 & US 2012/0239366 A1 & EP 1570779 A1 & EP 2357581 A2	1-9
A	WO 2008/016111 A1 (味の素株式会社) 2008.02.07, 全文・全図参照 & JP 8-16111 A & JP 2014-38114 A & US 2010/0017144 A1, 全文・全図参 照 & EP 2081027 A1	1-9
A	WO 2006/129513 A1 (味の素株式会社) 2006.12.07, 全文・全図参照 & US 2008/0154515 A1, 全文・全図参照 & EP 1887362 A1	1-9
A	東江咲乃、外2名, がんのバイオマーカー1. 血漿アミノ酸プロファイル に基づくがんスクリーニング, 血液フロンティア, 2016.09.30, Vol. 26, No. 10, Page. 1369-1377	1-9
A	FUKUTAKE Nobuyoshi、外11名, 血漿中アミノ酸のプロファイルによる新 規膵臓がんスクリーニングマーカーの検討, 日本癌学会学術総会抄録集 (Web), 2014, Vol. 73, Page. J-1089	1-9

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。
別紙参照

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。

請求項1-9に係る発明のうち、N-Me-bABAの代謝物に基づく膵臓癌の状態の評価に関する部分について。

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。

第 III 欄の続き

請求項 1－9 に係る発明の技術的特徴は、N－Me－b A B A をはじめとする少なくとも 24 個からなる代謝産物の濃度値、または、前記代謝産物の濃度値が代入される変数を含む式および前記代謝物の濃度値を用いて算出された前記式の値を用いて、評価対象について膵臓癌の状態を評価することならびに当該評価に用いられる装置、プログラム、システムであると認められる。

当該請求項 1－9 に係る発明で特定されている 24 個のマーカー物質のいずれも、構造、生理学的活性等において、全く異なる物質であり、共通する構造を有しているものではない。当該マーカー物質が、共通の性質を有し、かつ、その共通の性質を発揮するために不可欠である重要な構造要素を共有している場合には、単一の一般的発明概念が存在すると判断される判断される場所、当該特定されている 24 個のマーカー物質は、上記のように共通する構造を有しているものではなく、単一の一般的な発明概念を形成しているとはいえない。

これより、請求項 1－9 に係る発明には、マーカー物質 24 個それぞれについて発明が存在するものであると認められる。

上記より、当該請求項 1－9 に係る発明は、24 個の発明が含まれていると認められるので、請求の範囲 1－9 に係る発明の最初に記載されている代謝物である、N－Me－b A B A をもとに、評価対象について膵臓癌の状態を評価することならびに当該評価に用いられる装置、プログラム、システムに関して国際調査報告を作成する。