

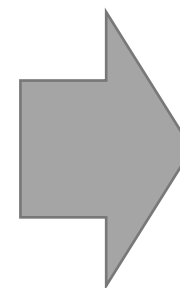
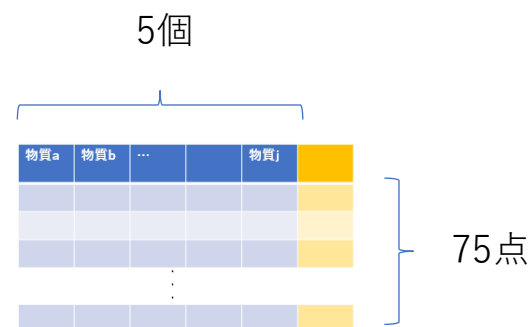
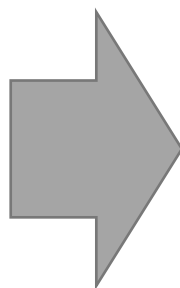
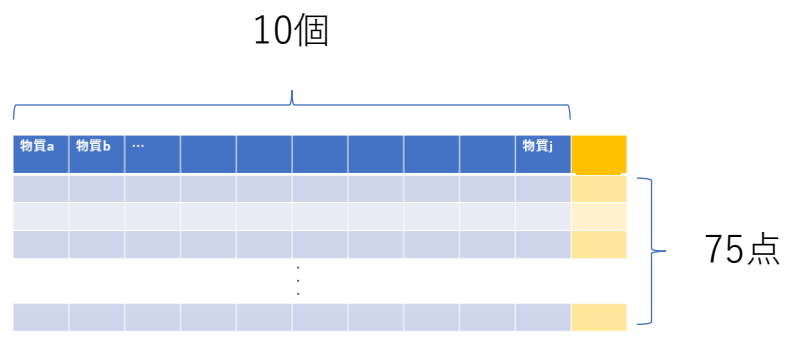
- ① 説明変数の数に対して蓄積すべきデータの最低量
- ② 解析目標「当りを付けた数種類の物質について、有効に作用する混合比を特定する」

について

①説明変数を10点にして、実験を行い、データを蓄積する

物質a	物質b	...							物質j	有効成分

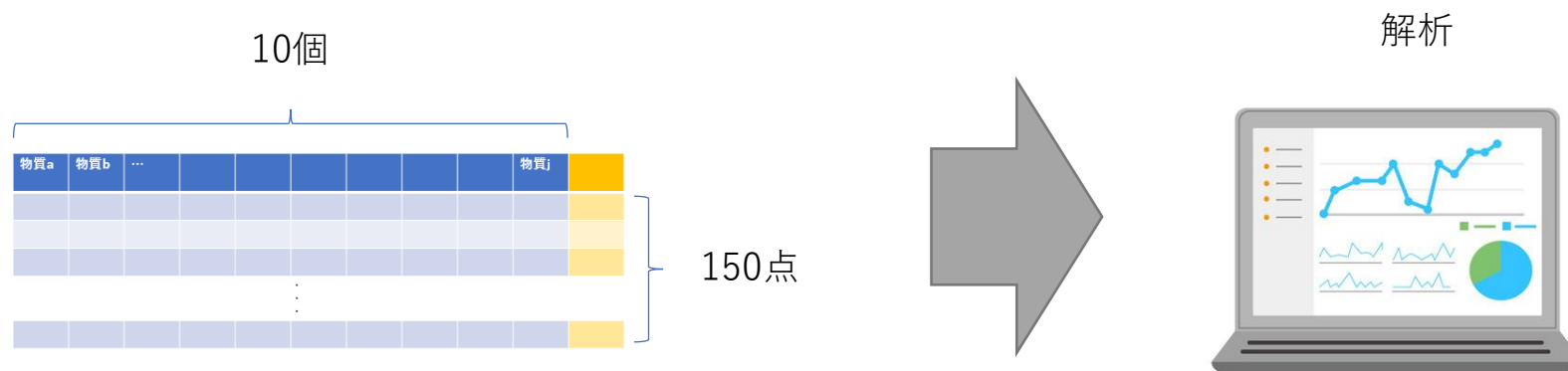
②蓄積データが75点に達した時、説明変数を5点に絞って、解析をかける（蓄積開始から1～2か月後）



解析



③蓄積データが150点に達した時、説明変数を10点を使って、解析にかける（蓄積開始から3～4か月後）



④データ解析によって、以下が期待できる

- ・有効成分に対する、10変数それぞれの寄与度などが分かる。
- ・10変数のパラメータを調整した時の、有効成分の値をシミュレーションできる。
- ・有効成分を最大化する10変数のパラメータを探索できる。

補足：

- ・説明変数の数… 10個（候補物質9点＋細胞活性の値 or 候補物質10点）
- ・目的変数の数… 1個（有効成分単体 or 有効成分に細胞活性の寄与率をかけて、バイアスを除いた値）

③分析案「抗炎症作用が高い分画に頻出した物質を見出す」
について

①ヒストグラムの色分けをする

相対活性の閾値：

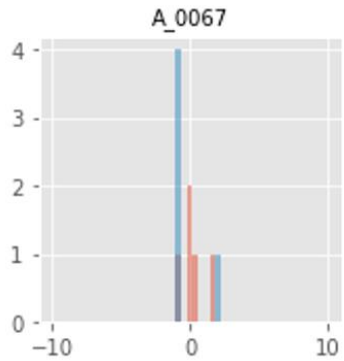
高い群 (80 ≤ 相対活性)
低い群 (80 > 相対活性)

相対活性（有効成分）が高い群

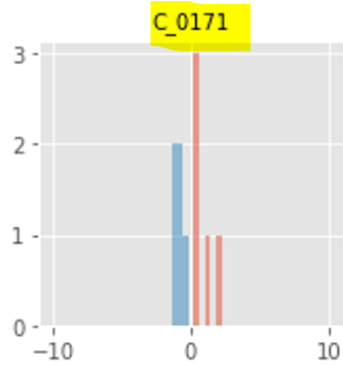
相対活性（有効成分）が高い群

群名	Control	C-T-1	C2-T-1	C-T-1A	C-T-2	C-T-3A	C-T-3B	C-T-3C	C-T-3D	C-T-3E
	100	95	76	91	0	97	89	53	20	0
	68	65	52	62	0	66	61	36	13	0
	0.0200	0.0171	0.0093	0.0148	0.0000	0.0184	0.0141	0.0045	0.0015	0.0000
	0.01	0.01	0.025	0.01	0.01	0.005	0.005	0.005	0.005	0.005
	2.00	1.71	0.37	1.48	0.00	3.68	2.81	0.90	0.31	0.00
補正後推定Y相対含有量	100	86	19	74	0	184	141	45	15	0

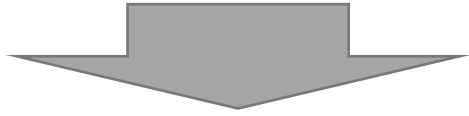
②ヒストグラムを見て、赤い群と青い群がハッキリ分かれていた物質を「相対活性に寄与していそうな物質」とする



✕：この物質の分布は相対活性度で分けない



○：この物質の分布は相対活性度合で分かれてる



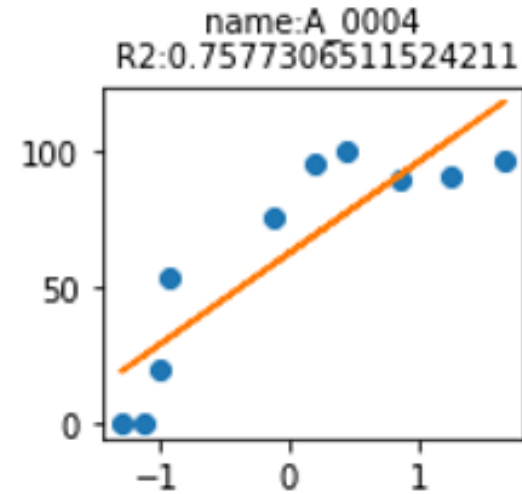
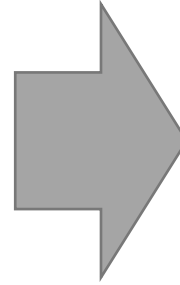
③ヒストグラムを見て抽出した、相対活性に寄与していそうな物質が62点みつかった（まだまだ多い）

	相対活性	A_0004	A_0006	A_0026	A_0041	A_0042	A_0047	A_0051	A_0074	A_0077	C_0003	C_0009	C_0024	C_0029	C_0033	C_0037	C_0042	C_0049	C_0056	C_0061	C_0073	C_0097	C_0101	C_0110	C_0111	C_0113	C_0116	C_0117	C_0118	C_0119	C_0126	C_0128	C_0129	C_0131	C_0132	C_0133	C_0138	C_0140	C_0141	C_0152	C_0158	C_0157	C_0164	C_0163	C_0164	C_0166	C_0170	C_0171	C_0173	C_0177	C_0181	C_0183	C_0189	C_0192	C_0193	C_0194	C_0196	C_0197	C_0201	C_0206	C_0209		
Control	100	0.45222	0.79059	1.03164	0.932083	1.174091	0.777097	1.115806	1.163671	1.225002	1.143083	1.293286	0.922885	0.801188	0.828163	0.767859	0.960107	0.833722	0.371248	0.920809	1.451278	1.183728	0.778345	0.424894	0.988558	0.965077	1.161587	1.063283	1.134419	1.28879	1.03617	0.721348	0.924359	1.100137	0.866967	1.057626	1.209675	0.803515	0.57256	1.345911	1.538729	1.553421	1.187693	1.756697	0.797326	0.85711	0.991572	1.180361	0.533217	0.954723	1.223071	1.223071	1.391364	1.0296	1.45222	1.552009	1.006847	0.695798	1.161324	1.265355	1.062597	1.1588	1.201825
C-1	95	0.18823	0.79059	0.621749	0.391745	0.401945	-0.71747	0.509938	0.303	0.278722	0.17141	0.755279	0.34215	0.508427	0.32445	0.423012	-0.11673	0.356628	0.412498	0.382226	-0.02117	0.464092	0.657982	0.183933	0.424441	0.670847	0.653953	0.269788	0.763492	0.47783	0.376329	-0.71467	-0.17574	0.396049	0.545868	0.707998	0.860922	-0.74713	0.050291	0.805819	-0.88612	0.824115	0.70717	1.290534	0.349893	0.731976	0.611488	0.599122	0.23332	1.27781	0.350625	0.313763	0.57908	0.504736	0.534881	0.825738	0.42789	0.355277	0.523234	0.584286	0.458463	0.544704	0.22192
C2-T-1	76	-0.11881	-0.79057	-0.81261	-0.28368	-0.7048	-0.71747	-0.75229	-0.49147	-0.57293	-0.46198	-0.77597	-0.1418	-0.84803	0.028149	-0.35864	-0.34581	0.094226	0.061875	-0.42565	-1.1255	-0.87238	-0.22468	-0.61124	-0.77149	-0.80031	-0.54048	-0.85134	-0.47293	-0.45327	-0.77682	-0.71467	-0.39576	-0.46206	-0.73853	-0.86533	-0.42448	-0.74713	-0.8007	-0.92248	-0.10777	-0.78036	-0.47812	-0.69679	-0.7623	-0.84472	-0.69645	-0.7422	-1.08623	0.2547	-0.75228	-0.92981	-0.70485	-0.83017	-0.80585	-0.65838	-0.83858	-0.83276	-0.79549	0.17206	-0.78236	-0.85895	-1.16148
C-T-1A	91	1.25619	1.58119	0.76811	0.481801	0.46629	1.786443	0.762383	0.435411	0.278722	0.423326	1.914064	0.34215	0.703801	0.531861	0.882808	-0.06466	0.356628	1.670618	0.48321	0.254917	0.552211	0.497499	0.103613	0.537264	0.332481	0.56437	0.551351	0.485297	0.357687	0.627697	0.353995	1.089374	0.63808	0.759934	0.445776	0.561991	0.34537	0.418951	0.6978	0.341275	0.605324	0.26669	-0.3533	0.445771	0.569408	0.27612	0.509701	0.23332	0.739331	0.893846	0.313763	0.081228	0.417258	0.393752	-0.45313	0.319335	0.24177	0.395616	0.42298	0.357775	0.369248	0.394844
C-T-2	0	-1.28023	-0.79057	-0.81261	-0.77899	-0.67906	-0.71747	-0.75229	-0.72539	-0.71057	-0.74268	-0.77597	-1.12711	-1.15055	-1.03854	-0.84143	-1.10595	-1.07465	-1.01062	-0.99789	-1.1255	-0.87238	-0.98697	-1.10119	-0.92944	-0.80031	-0.89881	-0.90766	-0.93659	-0.75363	-0.88051	-0.71467	-0.64878	-1.03413	-0.73853	-0.86533	-0.83302	-0.74713	-0.96352	-0.92248	-0.88612	-0.78036	-0.77444	-0.69679	-0.99241	-1.14505	-0.84177	-0.7422	-1.08623	-1.46843	-0.75228	-1.0528	-0.70485	-0.89394	-0.80585	-0.65838	-0.83936	-1.00681	-0.79549	-0.88539	-0.78095	-0.85895	-1.16148
C-T-3A	97	1.656687	1.581139	2.114648	2.372983	2.267964	1.786443	2.125585	2.311232	2.343332	2.366672	0.693202	2.084355	1.484295	2.22078	2.262194	1.60139	2.145732	1.670618	2.233606	1.635334	2.064916	2.182575	2.031296	2.229614	2.289117	2.087274	2.163938	2.030827	2.189856	2.230168	2.357739	2.24448	2.046255	2.258397	2.106511	1.957003	2.072222	2.016478	1.669967	1.478856	1.692822	2.188782	1.486813	2.171584	1.545351	2.288328	2.163995	1.972721	1.170114	2.046133	2.021965	2.177445	2.254284	2.016743	2.025664	2.345687	2.209226	2.224807	1.98227	2.33799	2.211537	2.066447
C-T-3B	89	0.85571	-0.79057	-0.5433	-0.77899	-0.73096	0.004815	-0.75229	-0.66139	-0.71057	-0.61672	-0.77597	0.535728	1.289122	0.057779	-0.61153	1.913776	0.356628	-0.14437	0.180257	0.899112	0.096931	0.056169	1.388735	0.040842	-0.25598	-0.42104	0.269788	-0.19474	-0.76835	-0.15783	0.854931	-0.69554	0.154019	-0.73853	0.008741	-0.83302	1.261659	1.279158	0.092896	1.179493	-0.78036	-0.77444	-0.69679	0.637528	1.044812	-0.10396	-0.7422	1.312948	0.093157	-0.75228	1.065372	-0.70485	-0.08136	-0.36835	-0.65838	-0.11488	0.809305	-0.32755	-0.88539	-0.41417	-0.25362	0.279561
C-T-3C	53	-0.90644	-0.79057	-0.74235	-0.77899	-0.73161	-0.71747	-0.75229	-0.77836	-0.71057	-0.73908	-0.77597	-0.77093	-0.69189	-0.93483	-0.84143	-0.56448	-0.9196	-1.01062	-0.88008	-0.11319	-0.87238	-0.98697	-0.49879	-0.79405	-0.80031	-0.80923	-0.80271	-0.93659	-0.7776	-0.77368	-0.71467	-0.7808	-0.7701	-0.73853	-0.86533	-0.83302	-0.74713	-0.76383	-0.92248	-0.88612	-0.78036	-0.77444	-0.69679	-0.77828	-0.7759	-0.84177	-0.7422	-0.42645	-0.60687	-0.75228	-0.6155	-0.70485	-0.7112	-0.80585	-0.65838	-0.72279	-0.70412	-0.79549	-0.88539	-0.7196	-0.69226	-0.29685
C-T-3D	20	-0.98654	-0.79057	-0.81261	-0.77899	-0.73182	-0.71747	-0.75229	-0.77836	-0.71057	-0.76751	-0.77597	-1.04194	-0.94562	-0.97928	-0.84143	-0.84563	-1.07465	-1.01062	-0.92384	-0.72978	-0.87238	-0.98697	-0.82007	-0.8279	-0.80031	-0.89881	-0.84878	-0.93659	-0.78006	-0.81767	-0.71467	-0.7808	-1.03413	-0.73853	-0.86533	-0.83302	-0.74713	-0.87443	-0.92248	-0.88612	-0.78036	-0.77444	-0.69679	-0.89972	-0.98863	-0.84177	-0.7422	-0.72635	-1.0915	-0.75228	-0.84782	-0.70485	-0.81442	-0.80585	-0.65838	-0.76983	-0.76088	-0.79549	-0.88539	-0.74645	-0.78701	-0.66576
C-T-3E	0	-1.12003	-0.79057	-0.81261	-0.77899	-0.73204	-0.71747	-0.75229	-0.77836	-0.71057	-0.77651	-0.77597	-1.1455	-1.15055	-1.03854	-0.84143	-1.03202	-1.07465	-1.01062	-0.97265	-1.1255	-0.87238	-0.98697	-1.10119	-0.89785	-0.80031	-0.89881	-0.90766	-0.93659	-0.7821	-0.86386	-0.71467	-0.7808	-1.03413	-0.73853	-0.86533	-0.83302	-0.74713	-0.93495	-0.92248	-0.88612	-0.78036	-0.77444	-0.69679	-0.9694	-1.09437	-0.84177	-0.7422	-0.96027	-1.32304	-0.75228	-0.99267	-0.70485	-0.87478	-0.80585	-0.65838	-0.81832	-1.00681	-0.79549	-0.88539	-0.7733	-0.8335	-0.87903

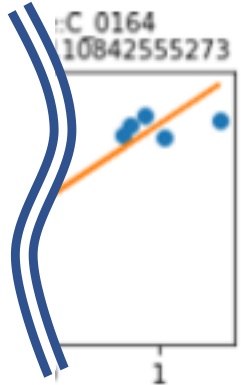
※ご参考：「XXX.xlsx」のタブ「XXX」

④ここから更に、物質を厳選する（62の物質毎に、相対活性との相関係数R2を回帰分析によって算出する）

TNF-a	A_0004	A_0005	A_0026	A_0041	C_0209
100	0.455222	0.790569	1.031564	0.932083	1.201825
95	0.18823	0.790569	0.621749	0.391745	0.22192
76	-0.11881	-0.79057	-0.81261	-0.28368	-1.16148
91	1.256198	1.581139	0.768111	0.481801	0.394844
0	-1.28023	-0.79057	-0.81261	-0.77899	-1.16148
97	1.656687	1.581139	2.114648	2.372983	2.066447
89	0.85571	-0.79057	-0.5433	-0.77899	0.279561
53	-0.90644	-0.79057	-0.74235	-0.77899	-0.29685
20	-0.98654	-0.79057	-0.81261	-0.77899	-0.66576
0	-1.12003	-0.79057	-0.81261	-0.77899	-0.87903

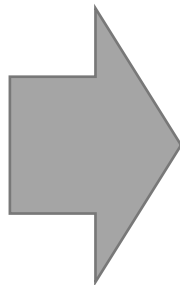


...



⑤62物質について、相関係数R2が高かった順に並び替える

物質名	相関係数
C_0173	0.915611938
A_0004	0.757730651
C_0164	0.740711084
C_0024	0.737866072
C_0029	0.728186251
...	...
C_0193	0.358106028



相関係数の高かった物質TOP 10（説明変数の候補？）

物質名	C_0173	A_0004	C_0164	C_0024	C_0029	C_0049	C_0131	C_0033	C_0101
相関係数	0.915612	0.757731	0.740711	0.737866	0.728186	0.70804	0.685556	0.66153	0.651488

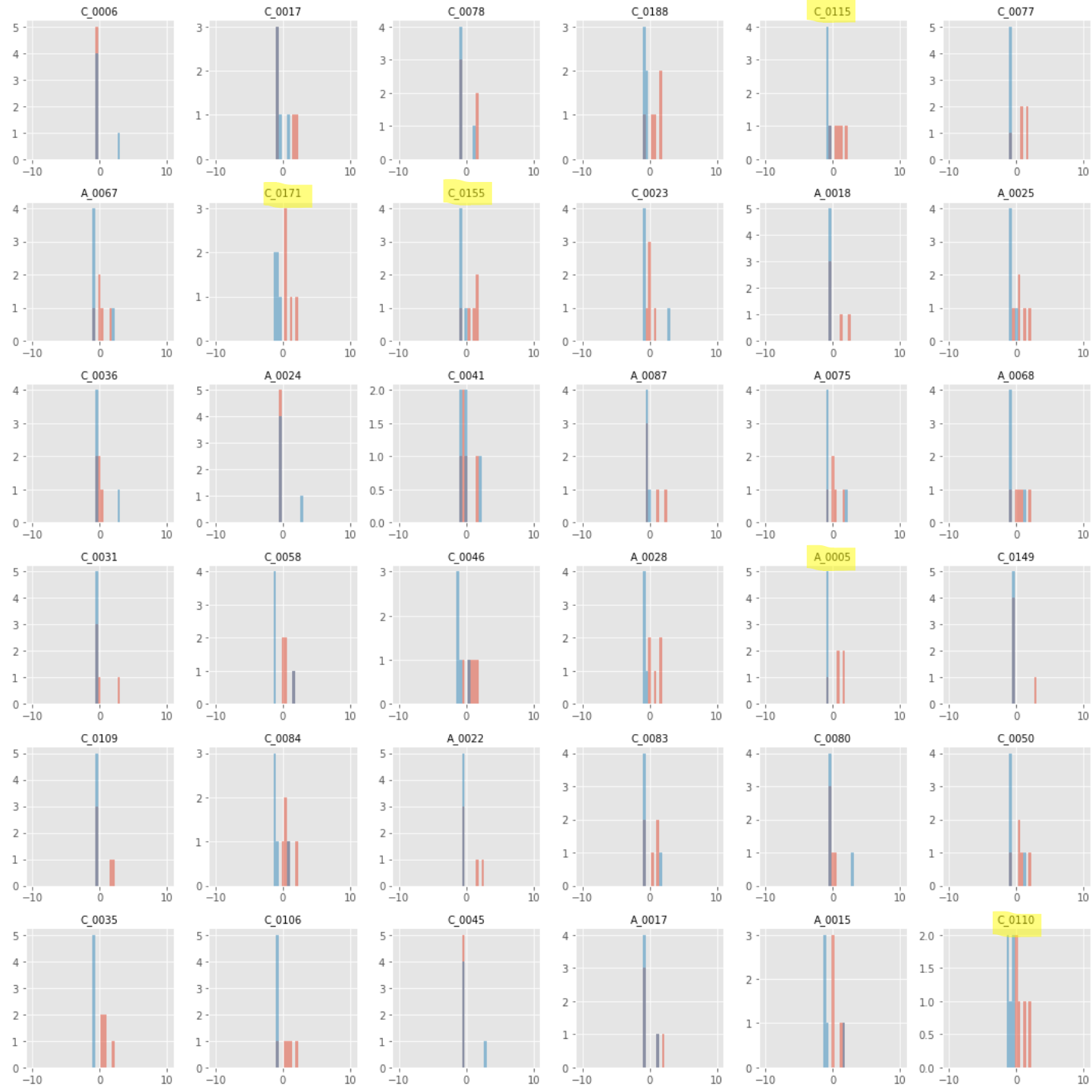
※ご参考：「XXX.xlsx」のタブ「YYY」

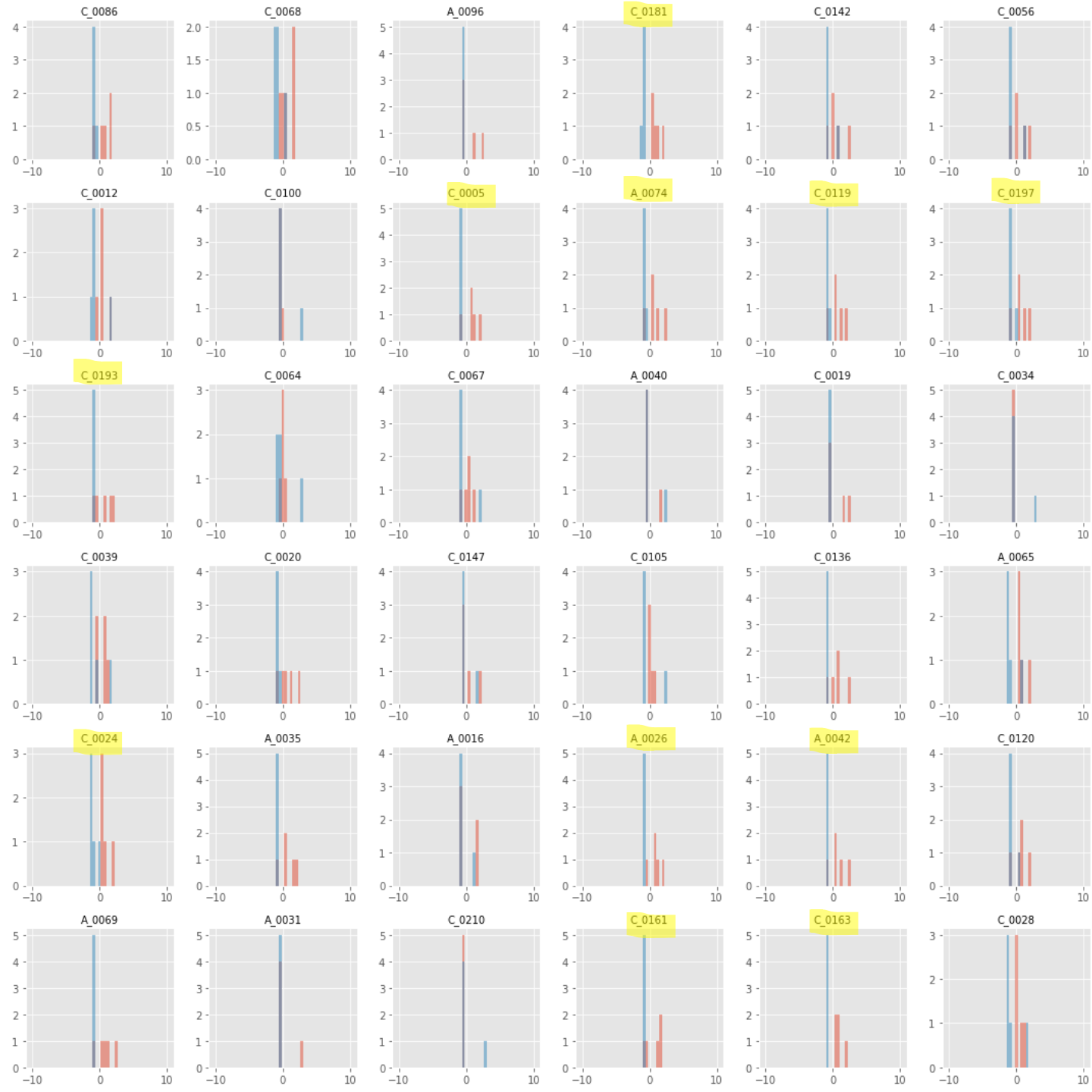
参考：

エタノール抽出からXXXに寄与していそうな物質を特定
(機密事項により割愛)

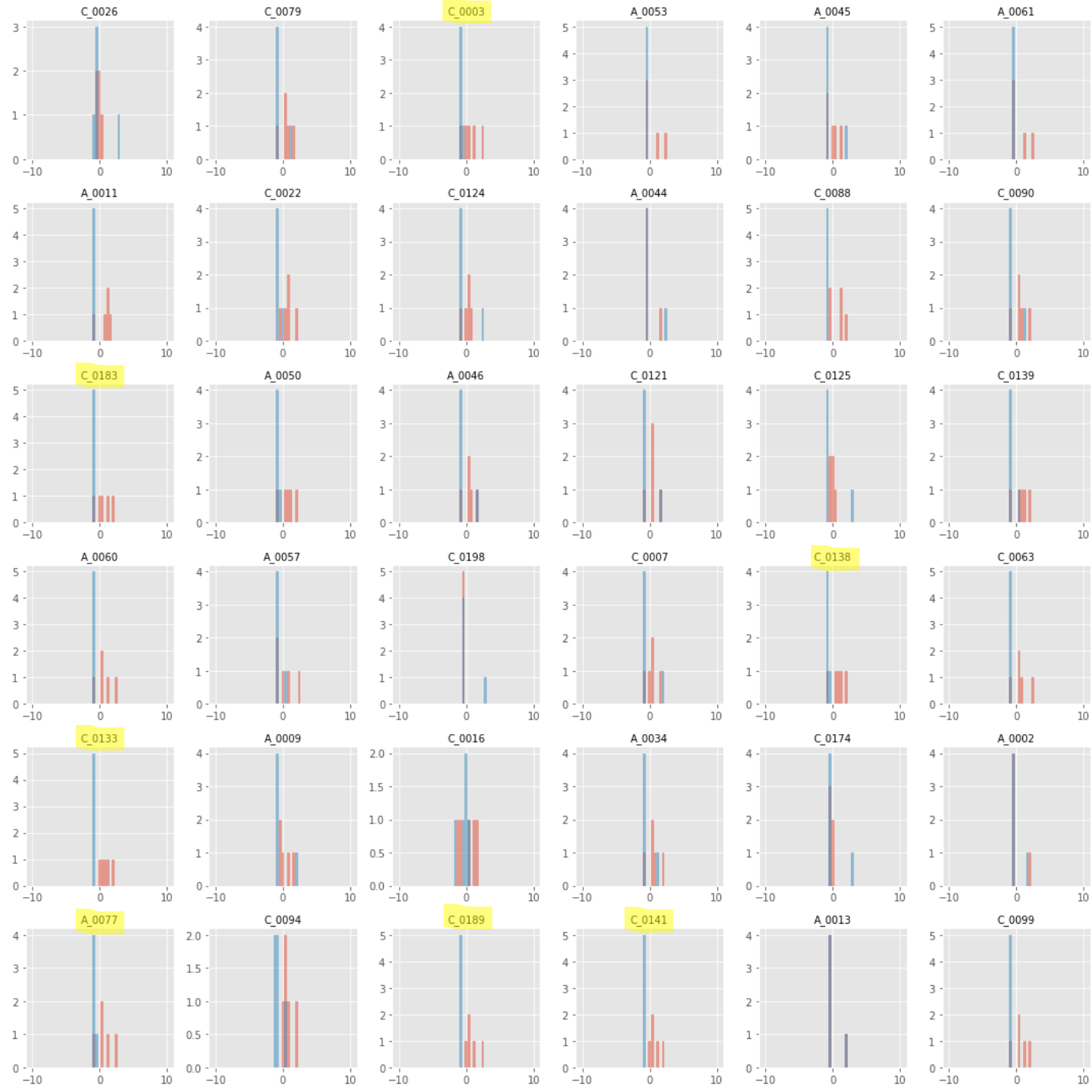
Appendix

参考：
262物質の
ヒストグラム

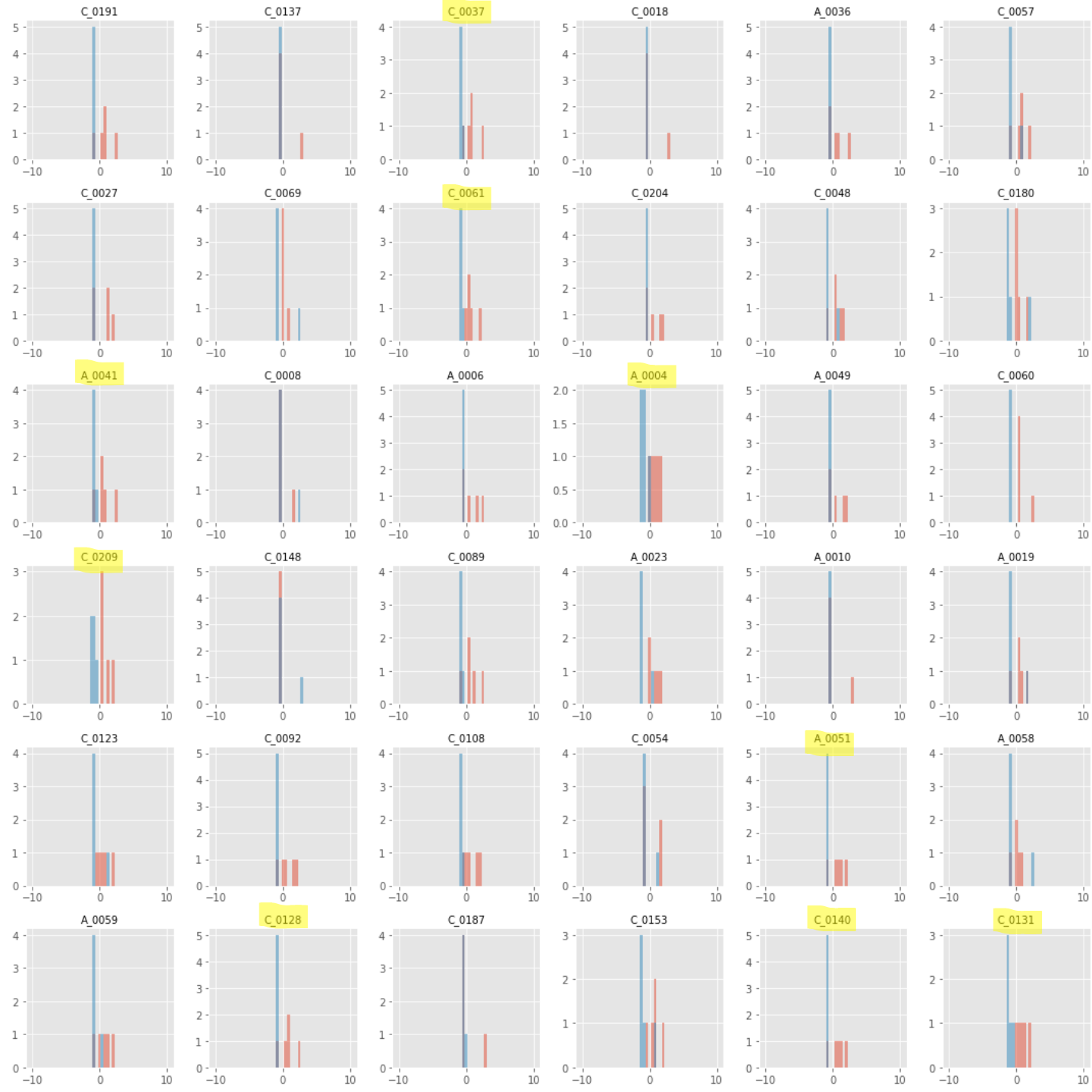




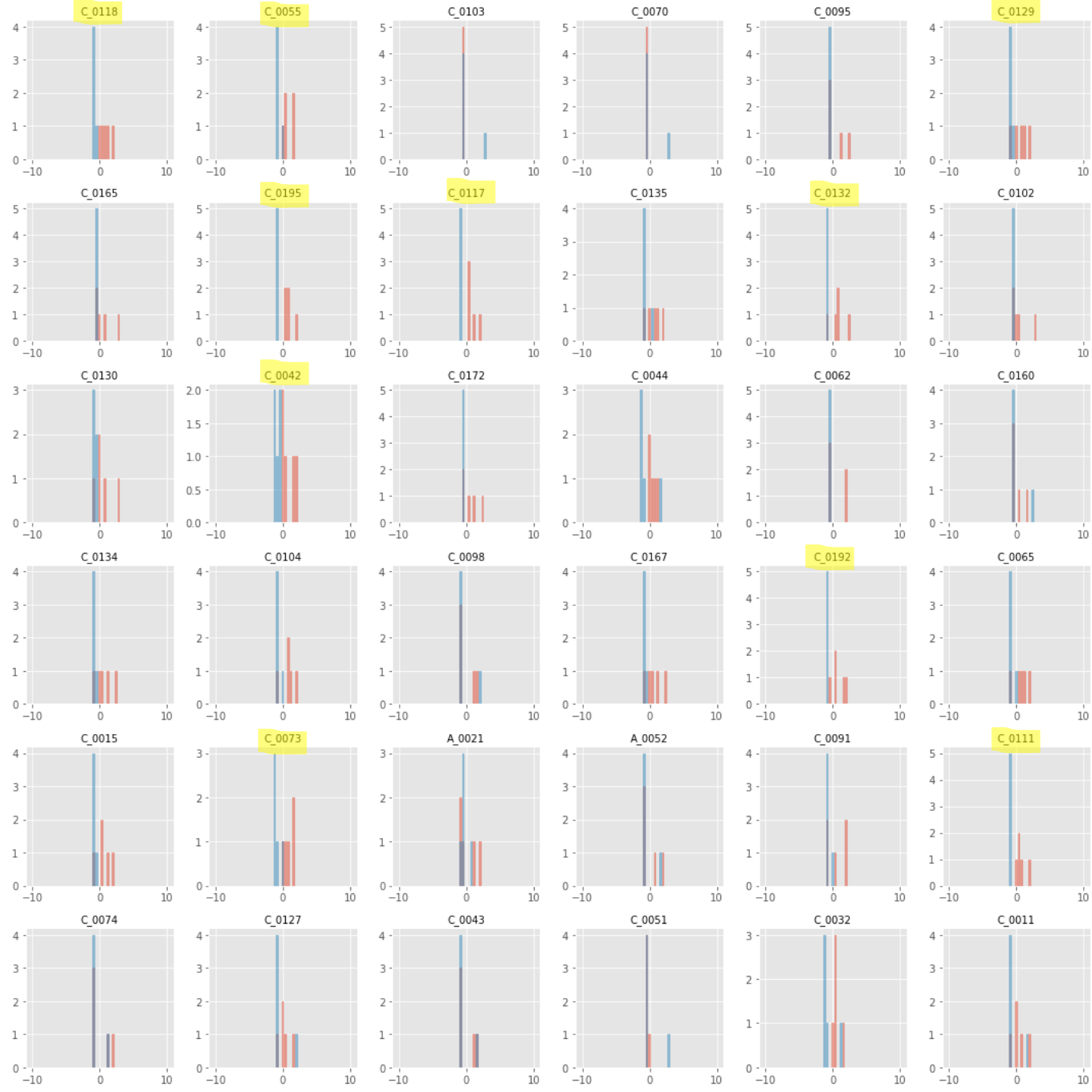
参考：
262物質の
ヒストグラム



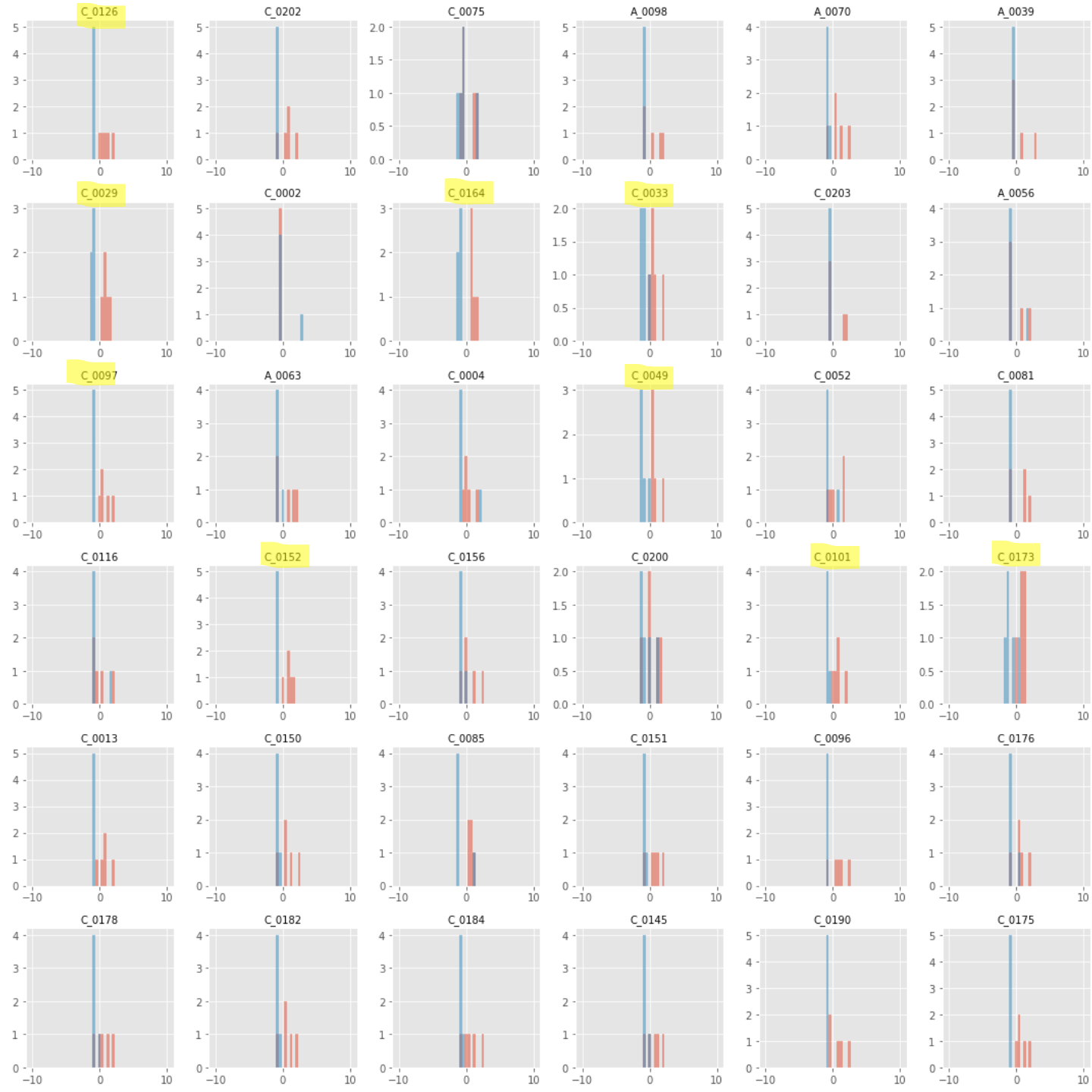
参考：
262物質の
ヒストグラム



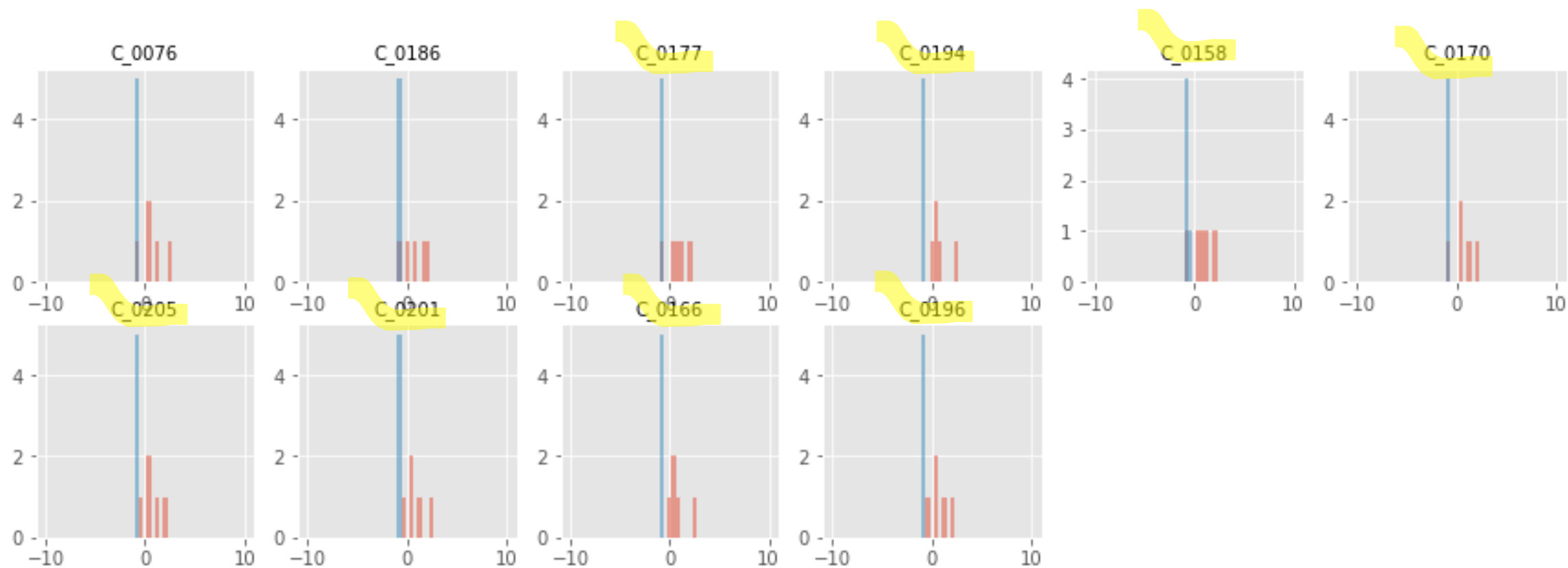
参考：
262物質の
ヒストグラム



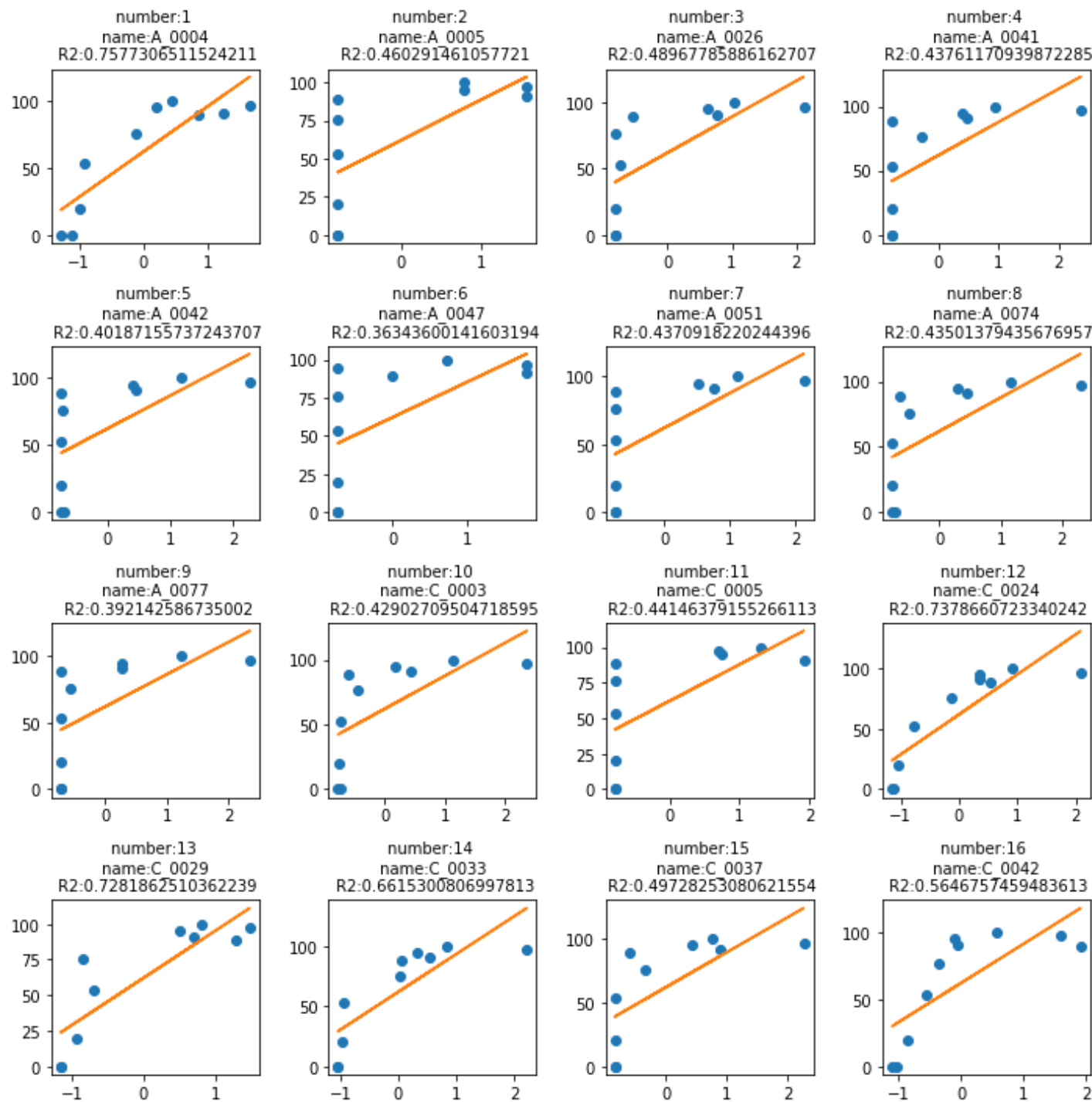
参考：
262物質の
ヒストグラム



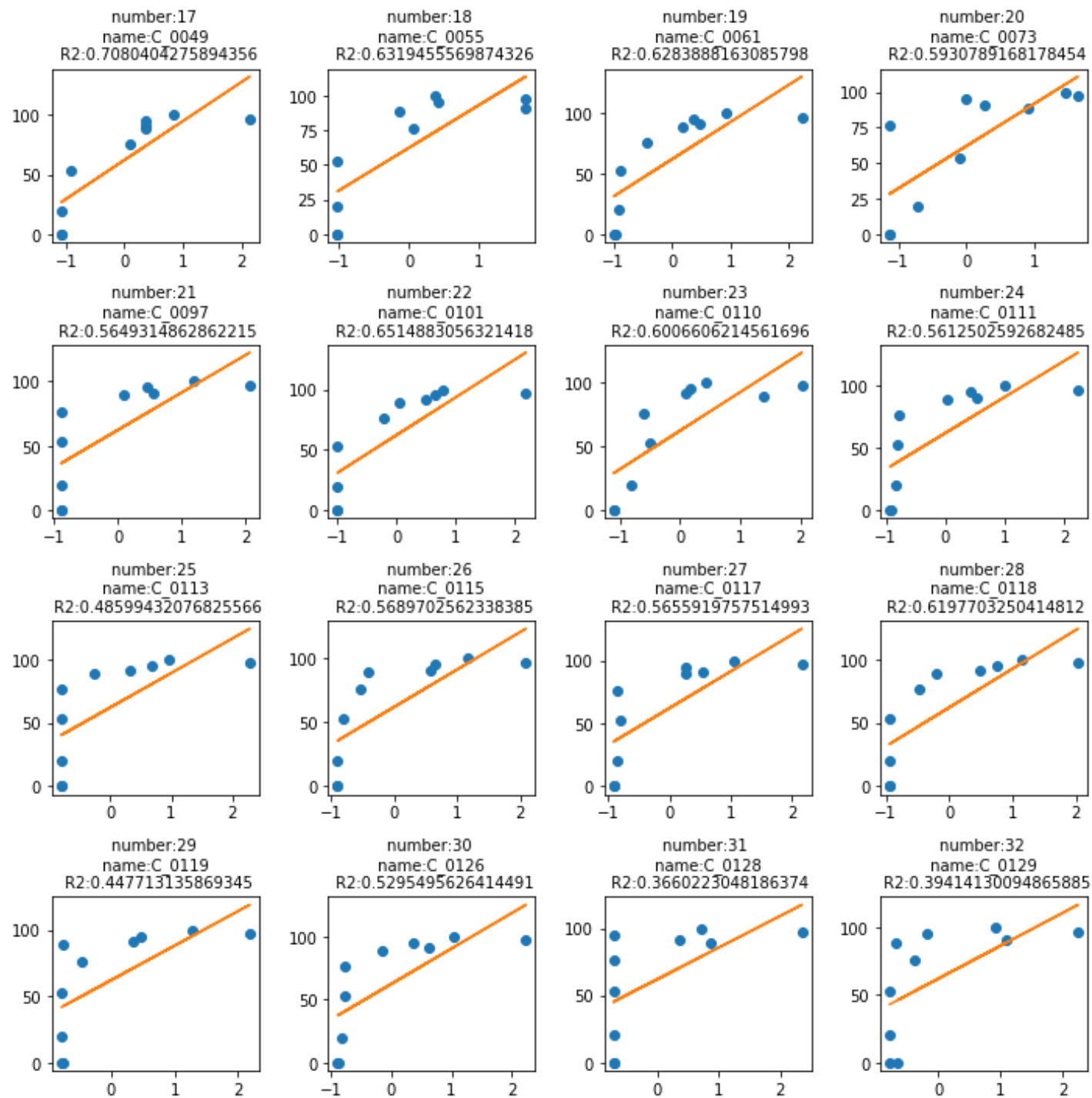
参考：
262物質の
ヒストグラム



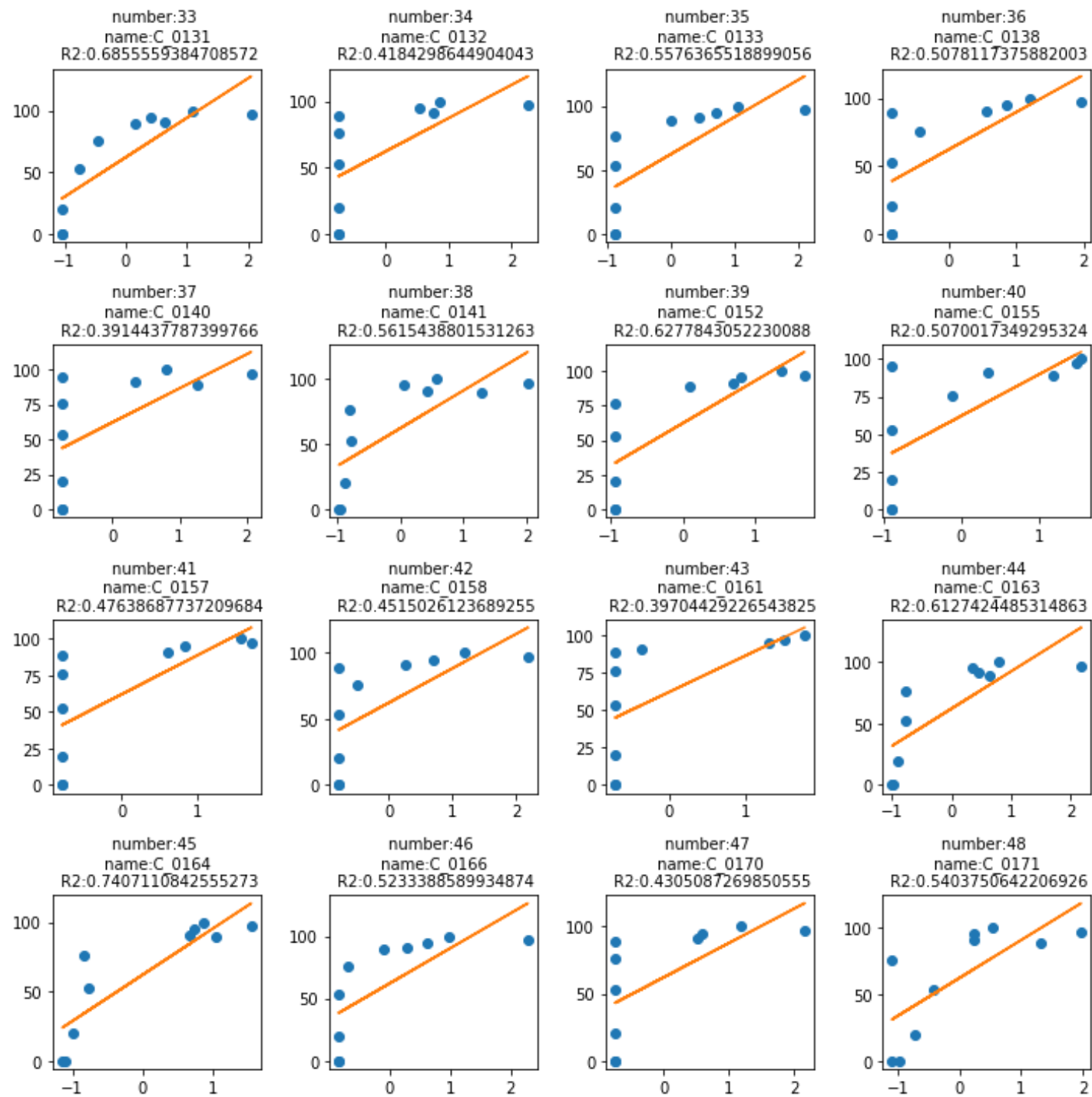
参考：
62物質の
線形回帰係数



参考：
62物質の
線形回帰係数



参考：
62物質の
線形回帰係数



参考：
62物質の
線形回帰係数

