

NO <sup>a)</sup>	VOCs	Cut off	Sensitivity	Specificity	Accuracy	AUC	p-value	95%	http://www.hmdb.ca <sup>#</sup>
1	Trimethylamine	< 7.998e+006	0.8182	0.9000	0.8571	0.8636	0.0049	0.6916 to 1.036	HMDB0000906
2	Methanethiol	< 61264	0.8182	0.7000	0.7619	0.8727	0.0039	0.7249 to 1.021	HMDB0003227
3	2-Butanone	> 597119	1.0000	0.6000	0.8095	0.8182	0.0137	0.6279 to 1.008	HMDB0000474
4	2-Pentanone	> 1.792e+006	0.9091	0.8000	0.8571	0.8727	0.0039	0.7046 to 1.041	HMDB0034235
5	Disulfide, dimethyl	< 50680	0.8182	0.9000	0.8571	0.9091	0.0015	0.7858 to 1.032	HMDB0005879
8	Methane, nitro-	< 692185	0.9091	0.6000	0.7619	0.8364	0.0092	0.6535 to 1.019	n.d.
9	2-Heptanone	< 197443	0.8182	0.9000	0.8571	0.8818	0.0031	0.7319 to 1.032	HMDB0003671
11	RI1227	< 232964	0.9091	0.9000	0.9048	0.9091	0.0015	0.7532 to 1.065	n.d.
15	2-Acetyl-1-pyrroline	< 6.068e+006	0.9091	0.8000	0.8571	0.8545	0.006	0.6865 to 1.023	HMDB0031308
16	Dimethyl trisulfide	< 10507	0.8182	0.6000	0.7143	0.8091	0.0167	0.6231 to 0.9951	HMDB0013780
18	3,4-dehydro-exo-brevicommin	> 7.457e+006	0.8182	0.7000	0.7619	0.7727	0.0346	0.5608 to 0.9847	n.d.
19	RI1449	< 325047	0.8182	0.8000	0.8095	0.8364	0.0092	0.6595 to 1.013	n.d.
21	Acetophenone	< 165962	0.9091	0.8000	0.8571	0.8455	0.0075	0.6607 to 1.030	HMDB0033910
22	2,3,5-Trithiahexane	< 7757	0.9091	1.0000	0.9524	0.9182	0.0012	0.7635 to 1.073	HMDB0031875
23	2-acetylpyrrole	< 62510	0.9091	0.8000	0.8571	0.8727	0.0039	0.7153 to 1.030	HMDB0035882

表2 てんかん vs コントロールマウス間で差のある VOCs における受信者動作特性曲線 (Receiver Operating Characteristic curve : ROC 曲線)

15 個の VOC の ROC 曲線を作製し、カットオフ値を設定した。てんかん発作における 15 個のバイオマーカー候補の能力を評価するために、カットオフ・ポイントの ROC 曲線下面積 (AUC) の感度、特異度、正確度及び面積を計算した表 2)。統計的に有意であった各

化合物の統計解析を行ったところ、ジスルフィド・ジメチルについてのROC曲線のAUCは、0.9091の正確さ（感度（Sensitivity） = 0.8182, 特異度（Specificity） = 0.9000）を伴って、良好な正確度（0.8571（95% CIは、0.7858 ~ 1.032））を示した。2,3,5-TrithiahexaneについてのAUCは、0.9182（95% CIは、0.7635 ~ 1.073）であり、0.9524の正確度（感度 = 0.9091, 特異度 = 1.0000）であった。15個のVOC中11個が、ヒトの尿, 便, 血液, 唾液中の存在が確認されている（表2の第10カラム）。