

# P 021 改良型双対尺度法を用いた医薬学データの数量化

山崎 広之<sup>1</sup>, 岡本 晃典<sup>1</sup>, 日高 伸之介<sup>1</sup>, 川下 理日人<sup>1</sup>, 高木 達也<sup>1</sup> ttakagi@phs.osaka-u.ac.jp

<sup>1</sup>: 大阪大学大学院薬学研究科

## Introduction

順序カテゴリーデータの数量化



カテゴリカル解析と比べた場合の、定量的構造活性相関  
( QSAR : Quantitative Structure-Activity Relationship ) 解析の簡易化及び精度向上



## Method

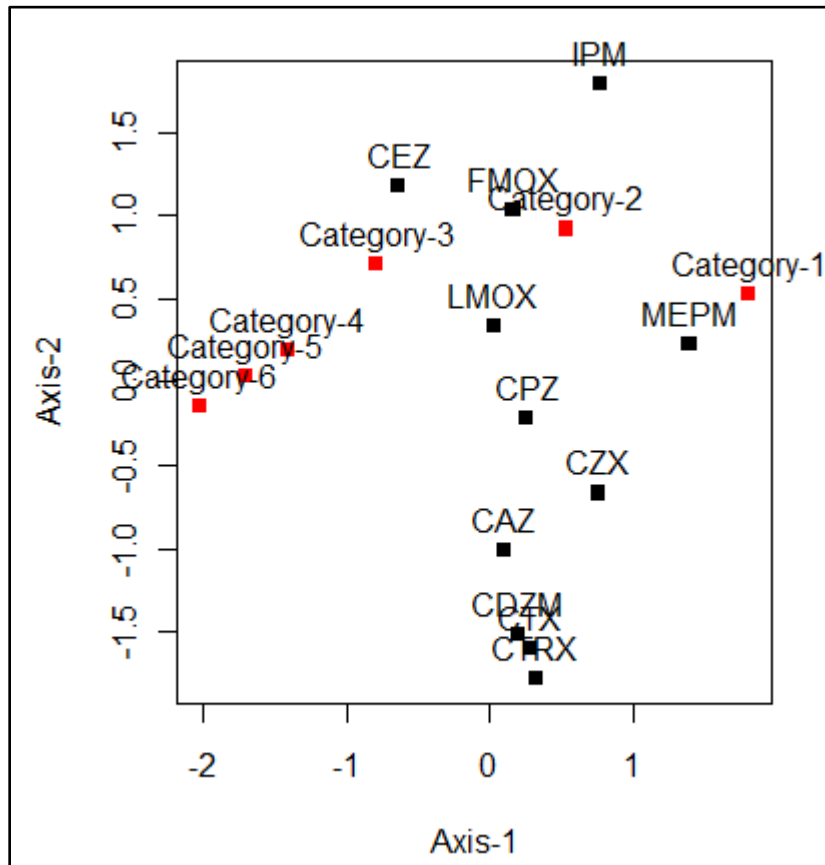
外的基準のない順序カテゴリーデータの数量化の代表例として、双対尺度法が挙げられる[1]。  
QSAR解析に適切な数量化を行うことを可能とするため、以下の2点の改良を行った。

- ▶境界値ではなくカテゴリー値を得るようにした。
- ▶焼きなまし法による、最適なカテゴリー化を可能とした。

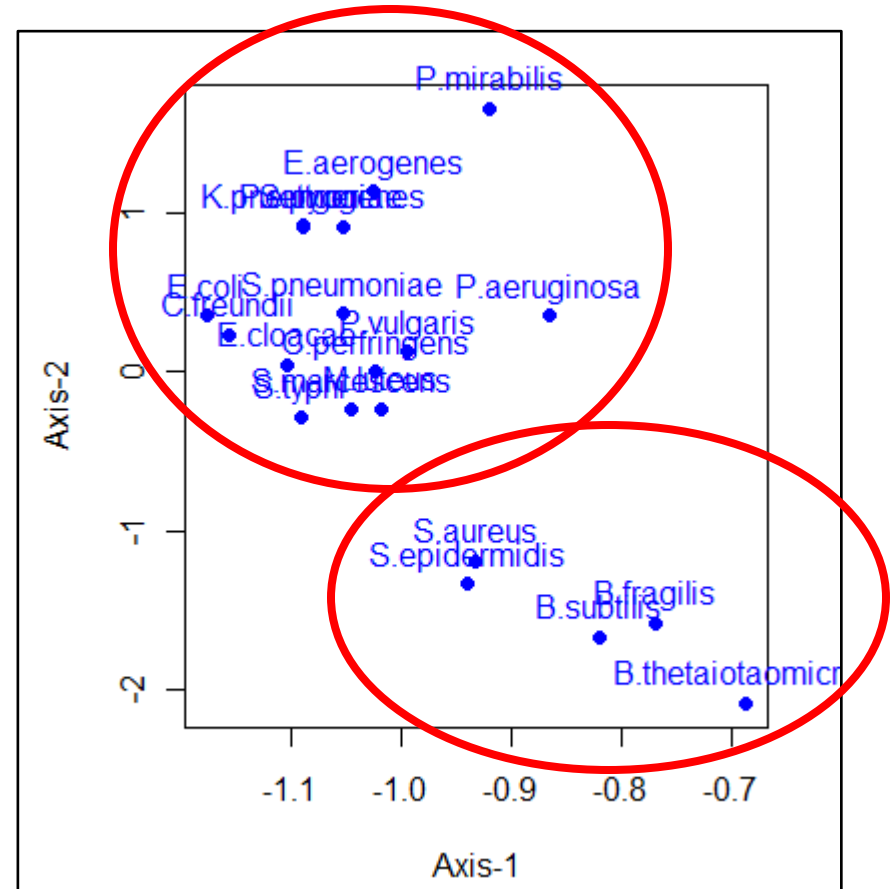
## Dataset

医薬品医療機器総合機構添付文書データベース[2]により、抗生物質製剤 11種の、計20種の菌種に対する抗菌スペクトルを Datasetとした。

## Results



各抗生物質製剤及びカテゴリー値に対する重みの値



菌種に対する重みの値

- Reference
1. 西里静彦著 「質的データの数量化 - 双対尺度法とその応用 -」
  2. [http://www.info.pmda.go.jp/psearch/html/menu\\_tenpu\\_base.html](http://www.info.pmda.go.jp/psearch/html/menu_tenpu_base.html)