



バイオインフォマティクスの事例

KOTAIバイオテクノロジー(株)「免疫実体の効率的クラスタリング」特許第6500144号 2019/3/22登録 2018/3/28出願

【概要】複数の免疫実体の特徴量に基づいて、抗原特異性または結合モードの分類または異動の決定を行う。

【効果】抗原特異性または結合モードをあらかじめ特定せずに免疫実体を分類できる。

【請求項1】

- (i) 少なくとも2つの免疫実体 (immunological entity) の特徴量を提供するステップであって、該ステップは該少なくとも2つの免疫実体の三次元構造モデルから特徴量を計算することを除く、ステップと、
- (ii) 該特徴量に基づいて、抗原特異性または結合モードを特定せずに該免疫実体の抗原特異性または結合モードの分析を機械学習させるステップと、
- (iii) 該抗原特異性または結合モードの分類または異動の決定を行うステップとを含む、免疫実体の集合を解析する方法。

【請求項2】

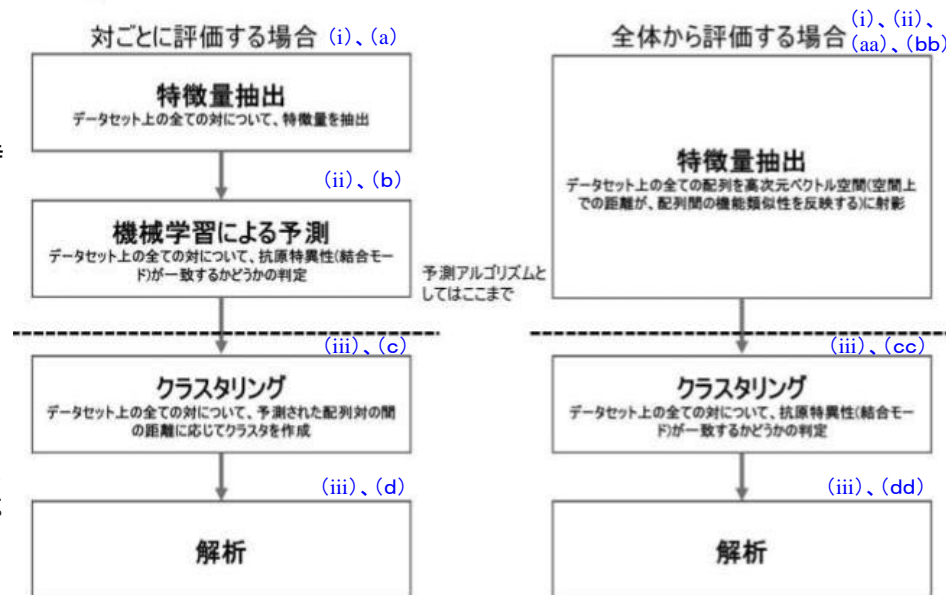
免疫実体の集合を解析する方法であって、該方法は:

- (a) 該免疫実体の集合のメンバーの少なくとも1つの対について特徴量を抽出するステップであって、該ステップは該少なくとも1つの対の三次元構造モデルから特徴量を計算することを除く、ステップと、
- (b) 該特徴量を用いた機械学習により該対について抗原特異性または結合モードの間の距離を算出し、または該抗原特異性または結合モードが一致するかどうかを判定するステップと、
- (c) 該距離に基づいて該免疫実体の集合をクラスタリングするステップと、
- (d) 必要に応じて該クラスタリングによる分類に基づいて解析するステップとを含む、方法。

【請求項3】

免疫実体の集合を解析する方法であって、該方法は:

- (aa) 該免疫実体の集合のメンバーの少なくとも1つの対をなす配列それぞれについて特徴量を抽出するステップであって、該ステップは該少なくとも1つの対をなす配列の免疫実体の三次元構造モデルから特徴量を計算することを除く、ステップと、
- (bb) 該特徴量を高次元ベクトル空間に射影し、ここで、該メンバーの空間上の距離は該メンバーの機能類似性を反映する、ステップと、
- (cc) 該距離に基づいて該免疫実体の集合をクラスタリングするステップと、
- (dd) 必要に応じて該クラスタリングによる分類に基づいて解析するステップとを含む、方法。



EBV由来エピトープ(FLRGRAYGL)特異的TCRのクラスタリング結果(右)と対応する結晶構造(左:PDBより得た構造を重ね書きしたもの)

