

**たった3ステップで簡単!**

1 ANCATの利用登録

2 クラウド上に配列UP!

3 48時間で解析結果提供!

**HIT率※ 40%**

人間が思いつかない変異箇所を多く予測!

※公共のデータベースBRENDAに登録されている単変異に対するkcatの予測



抽出 / アッセイが困難な酵素

酵素活性がポケット以外の予測

変異体数



A社 Iterative saturation (ISM)



B社 Library approach



C社 ランダム



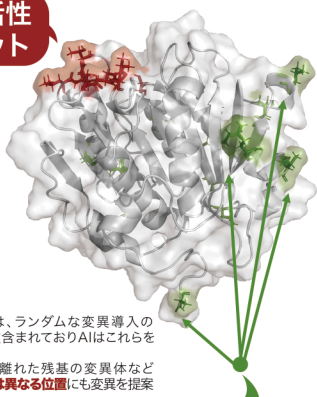
## 予測結果

| mutation | activity predict (red if pocket) | activity up probability | thermostability predict | thermostability up probability | solubility predict | solubility up probability | activity predict2 (in pocket) | activity up probability2 | activity ratio3 | up prob3 |
|----------|----------------------------------|-------------------------|-------------------------|--------------------------------|--------------------|---------------------------|-------------------------------|--------------------------|-----------------|----------|
| A35V     | up                               | 0.67                    | up                      | 0.71                           | up                 | 0.69                      | -                             | -                        | down            | 0.06     |
| A35S     | up                               | 0.52                    | down                    | 0.07                           | down               | 0.16                      | -                             | -                        | down            | 0.08     |
| V30A     | up                               | 0.50                    | down                    | 0.02                           | down               | 0.07                      | -                             | -                        | down            | 0.05     |
| L235T    | up                               | 0.43                    | up                      | 0.74                           | down               | 0.41                      | -                             | -                        | stay            | 0.32     |
| V30I     | stay                             | 0.29                    | down                    | 0.02                           | up                 | 0.86                      | -                             | -                        | down            | 0.05     |
| V115A    | stay                             | 0.22                    | up                      | 0.88                           | up                 | 0.70                      | -                             | -                        | up              | 0.44     |
| V115L    | stay                             | 0.20                    | down                    | 0.02                           | up                 | 0.65                      | -                             | -                        | down            | 0.37     |
| V115M    | stay                             | 0.17                    | down                    | 0.00                           | down               | 0.16                      | -                             | -                        | up              | 0.50     |
| L73F     | stay                             | 0.15                    | up                      | 0.66                           | up                 | 0.71                      | -                             | -                        | up              | 0.61     |
| V115I    | stay                             | 0.10                    | down                    | 0.07                           | up                 | 0.54                      | -                             | -                        | down            | 0.29     |
| S186A    | stay                             | 0.07                    | down                    | 0.25                           | down               | 0.23                      | -                             | -                        | down            | 0.13     |
| A140P    | stay                             | 0.06                    | down                    | 0.00                           | down               | 0.16                      | -                             | -                        | down            | 0.09     |
| Q175S    | stay                             | 0.03                    | down                    | 0.069                          | up                 | 0.59                      | -                             | -                        | down            | 0.23     |
| Q175R    | stay                             | 0.02                    | down                    | 0.07                           | up                 | 0.67                      | -                             | -                        | down            | 0.18     |
| A140N    | stay                             | 0.02                    | down                    | 0.02                           | down               | 0.17                      | -                             | -                        | down            | 0.02     |
| Q175D    | stay                             | 0.01                    | down                    | 0.30                           | up                 | 0.73                      | -                             | -                        | down            | 0.23     |
| A65S     | down                             | 0.18                    | down                    | 0.30                           | up                 | 0.85                      | up                            | 0.50                     | down            | 0.03     |
| V172I    | stay                             | 0.01                    | down                    | 0.35                           | down               | 0.39                      | -                             | -                        | down            | 0.02     |
| L210F    | down                             | 0.17                    | up                      | 0.85                           | up                 | 0.97                      | down                          | 0.12                     | down            | 0.07     |

## 予測傾向

AI独自の変異点を提案可能!

酵素活性ポケット



・教師データには、ランダムな変異導入の実験結果が多数含まれておりAIはこれらを広く学習  
・ポケット周辺と離れた残基の変異体など人間の経験則とは異なる位置にも変異を提案

ポケット外の残基を多数提案!

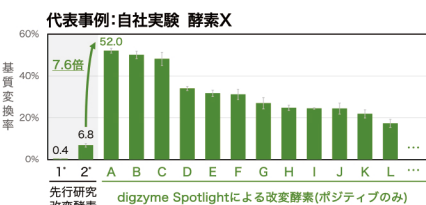
## PoC検証

8社とのPoCを実施!



PoC検証結果

| ケース | 実験数 | 機能向上した変異体の数 |
|-----|-----|-------------|
| 酵素A | 84  | 23          |
| 酵素B | 48  | 21          |
| 酵素C | 9   | 3           |
| 酵素D | 23  | 11          |
| 酵素E | 18  | 2           |
| 酵素F | 28  | 4           |
| 酵素G | 6   | 2           |
| 酵素H | 79  | 51          |
| 酵素I | 71  | 22          |
| 酵素J | 70  | 39          |



# 株式会社digzyme

〒105-0001 東京都港区虎ノ門二丁目2番1号  
住友不動産虎ノ門タワー6階 Room4

Official Website



Contact Form



Linkedin

