

digzyme Spotlight

バイオインフォマティクスによる 酵素機能改良

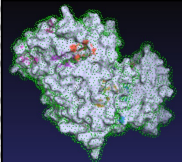
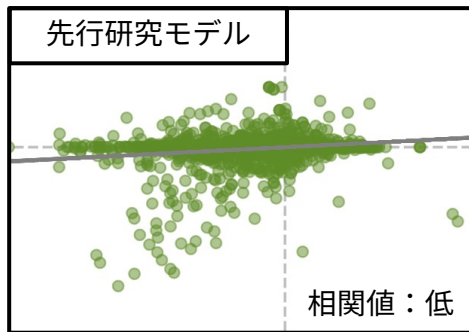
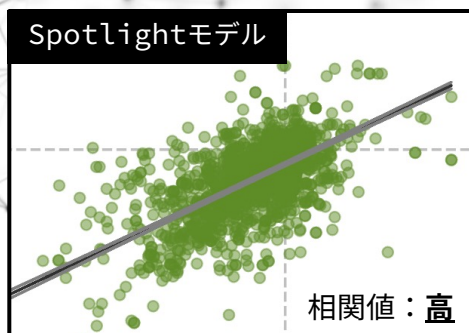
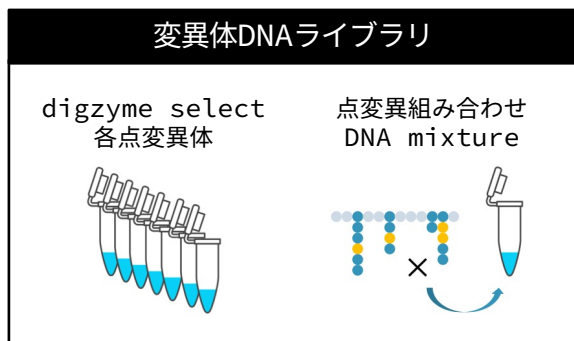
“digzyme Spotlight”は、対象酵素のアミノ酸配列を入力データとして、機械学習モデルを用いて変異体の各種プロパティ（活性、耐熱性、可溶性、安定性）を予測する酵素機能改良プラットフォームです。

各種プロパティに対する予測データや
変異体DNAライブラリを提案・提供

先行研究では全く予測できないデータ
に対しても高い予測性能を達成*

予測値テーブル + 解析データ

mutation	activity_predict1 (out_of_pocket)	activity up_probability1	thermostability predict	thermostability up_probability	solubility predict	solubility up_probability
A35V	up	0.679	up	0.718	up	0.6937
A35S	up	0.5261	down	0.0785	down	0.1667
V30A	up	0.5003	down	0.0238	down	0.0721
L235T	up	0.4347	up	0.7434	down	0.4195
V30I	stay	0.2983	down	0.0602	up	0.8693
V30V	stay	0.2293	down	0.1847	up	0.9795
V115A	stay	0.2218	up	0.8811	up	0.7068
V115L	stay	0.2086	down			
V115M	stay	0.175	down			
L73F	stay	0.1539	up			
H130H	stay	0.143	down			
V115I	stay	0.1087	down			
K221K	stay	0.0949	down			
G21G	stay	0.0784	down			
S186A	stay	0.0732	down			
A71A	stay	0.0665	down			

酵素活性変化の予測値

酵素活性変化の実測値

□ 主な特徴

- 自社アルゴリズムや公開ツールを組み合わせた独自の特徴量による高精度な予測
- 公開データベースから取得した多種多様な酵素の変異体のデータを学習、汎用性が高く、特殊な酵素にも対応
- 一回の解析で全ての単変異体について網羅的に予測
- 活性と耐熱性を同時に向上させたい等、複数のプロパティを考慮して機能改良したい場合にも有効
- 活性中心以外の変異点の提案も多く、人知の及ばない変異体の取得が可能

* 複数の酵素種の変異体に対するKcatの変化（先行研究：Li F. et al., Nat Catal 5, 662-672, 2022）