

## タンパク質のドメインリンカー領域の予測方法

### 【技術分野】

情報・通信、有機材料

### 【特許番号/公開番号】

特許第 4213034 号

### 【利用分野・適用製品】

バックプロパゲーション法、階層型ニューラルネットワーク、アミノ酸残基

### 【ライセンス情報】

実施許諾 【可】 権利譲渡 【否】

### 【事業化情報】

実施実績 【無】 許諾実績 【無】

### 【目的】

ドメインリンカー領域を識別学習させた階層型ニューラルネットワークに、立体構造未知のタンパク質のアミノ酸配列を入力することにより、ドメインリンカー領域を予測させる方法の提供。

### 【技術概要】

この技術は、2以上の構造ドメインから構成されるタンパク質のドメインリンカー領域をニューラルネットワークに識別学習させる方法であって、データセットの2以上の構造ドメインから構成されるタンパク質のアミノ酸配列をドメインリンカー領域とノンリンカー領域に分ける。次に、データセットの2以上の構造ドメインから構成されるタンパク質のアミノ酸配列内に5～35残基の範囲のウィンドウをとる。ウィンドウの中央に位置するアミノ酸残基がドメインリンカー領域の一部をなす場合に、そのウィンドウ内のアミノ酸配列をポジティブ配列と分類する数値を付与し、ウィンドウの中央に位置するアミノ酸残基がノンリンカー領域の一部をなす場合には、そのウィンドウ内のアミノ酸配列をネガティブ配列と分類する数値を付与する。そして、階層型ニューラルネットワークの重みパラメータをバックプロパゲーション法で最適化するための学習を繰り返し行う。

### 【効果】

本技術によれば、ドメインリンカー領域を識別学習させた階層型ニューラルネットワークに、立体構造未知のタンパク質のアミノ酸配列を入力することにより、ドメインリンカー領域を予測させることができる。

### 【特記事項・図面・その他】

