

【公報種別】 特許法第 17 条の 2 の規定による補正の掲載
【部門区分】 第 6 部門第 1 区分
【発行日】 令和 6 年 8 月 5 日(2024.8.5)

【国際公開番号】 WO2023/090015
【出願番号】 特願 2023-561463(P2023-561463)
【国際特許分類】

G 0 1 N 21/65(2006.01)
G 0 1 N 33/483(2006.01)
C 1 2 M 3/00(2006.01)
C 1 2 M 1/34(2006.01)
G 0 6 N 3/02(2006.01)
G 0 6 N 20/00(2019.01)

【F I】

G 0 1 N 21/65
G 0 1 N 33/483 C
C 1 2 M 3/00 Z
C 1 2 M 1/34 Z
G 0 6 N 3/02
G 0 6 N 20/00

【手続補正書】
【提出日】 令和 6 年 5 月 13 日(2024.5.13)
【手続補正 1】
【補正対象書類名】 特許請求の範囲
【補正対象項目名】 全文
【補正方法】 変更
【補正の内容】
【特許請求の範囲】
【請求項 1】

生物学的分子が成分として液体中に分散された懸濁液から発せられる電磁波のスペクトルを測定したスペクトル測定データに基づいて、前記懸濁液中の成分の状態を予測する情報処理装置であって、

プロセッサを備え、

前記プロセッサは、

第 1 校正データと第 2 校正データの少なくとも 2 種類の校正データを用いて校正された校正済み状態予測モデルであり、

前記第 1 校正データは、第 1 成分を含む第 1 懸濁液から得られた前記スペクトル測定データである第 1 スペクトル測定データ、および前記第 1 成分に関する第 1 成分関連情報を説明変数とし、かつ、前記第 1 成分の状態に関する第 1 状態関連情報を目的変数とし、

前記第 2 校正データは、第 2 成分を含む第 2 懸濁液から得られた前記スペクトル測定データである第 2 スペクトル測定データ、および前記第 2 成分に関する第 2 成分関連情報を説明変数とし、かつ、前記第 2 成分の状態に関する第 2 状態関連情報を目的変数とする、校正済み状態予測モデルを用い、

前記状態の予測の対象である対象成分に関する対象成分関連情報、および前記対象成分を含む対象懸濁液から得られた前記スペクトル測定データである対象スペクトル測定データを取得し、

前記対象成分関連情報および前記対象スペクトル測定データを前記校正済み状態予測モデルに適用し、前記校正済み状態予測モデルから前記対象懸濁液中の前記対象成分の状態を予測した対象状態予測結果を出力させる、

情報処理装置。

【請求項 2】

前記校正済み状態予測モデルは、

前記対象スペクトル測定データに応じて、前記対象成分の状態の仮の予測結果を出力する第 1 モデルと、

前記対象成分関連情報および前記仮の予測結果に応じて、前記対象状態予測結果を出力する第 2 モデルと

を備える請求項 1 に記載の情報処理装置。

【請求項 3】

前記対象成分は、前記校正データを得るために用いた成分とは異なる請求項 1 に記載の情報処理装置。

10

【請求項 4】

前記プロセッサは、

ノイズ除去、ピーク分離、およびピーク強調のうちの少なくともいずれか 1 つを目的とした前処理を前記対象スペクトル測定データに施したうえで、前記校正済み状態予測モデルに適用する請求項 1 に記載の情報処理装置。

【請求項 5】

前記第 1 成分、前記第 2 成分、および前記対象成分はタンパク質である請求項 1 に記載の情報処理装置。

【請求項 6】

20

前記第 1 成分関連情報、前記第 2 成分関連情報、および前記対象成分関連情報は、前記タンパク質のアミノ酸の組成比の情報を含む請求項 5 に記載の情報処理装置。

【請求項 7】

前記タンパク質は抗体である請求項 5 に記載の情報処理装置。

【請求項 8】

前記第 1 成分関連情報、前記第 2 成分関連情報、および前記対象成分関連情報は、前記抗体のサブクラスの情報を含む請求項 7 に記載の情報処理装置。

【請求項 9】

前記スペクトルはラマンスペクトルである請求項 1 に記載の情報処理装置。

【請求項 10】

30

前記校正済み状態予測モデルは、前記校正データを教師データとして用いて学習された機械学習モデルである請求項 1 に記載の情報処理装置。

【請求項 11】

前記状態は濃度であり、

前記第 1 状態関連情報は前記第 1 成分の濃度の測定値であり、

前記第 2 状態関連情報は前記第 2 成分の濃度の測定値であり、

前記対象状態予測結果は前記対象成分の濃度の予測値である請求項 1 に記載の情報処理装置。

【請求項 12】

生物学的分子が成分として液体中に分散された懸濁液から発せられる電磁波のスペクトルを測定したスペクトル測定データに基づいて、前記懸濁液中の成分の状態を予測する情報処理装置の作動方法であって、

40

第 1 校正データと第 2 校正データの少なくとも 2 種類の校正データを用いて校正された校正済み状態予測モデルであり、

前記第 1 校正データは、第 1 成分を含む第 1 懸濁液から得られた前記スペクトル測定データである第 1 スペクトル測定データ、および前記第 1 成分に関する第 1 成分関連情報を説明変数とし、かつ、前記第 1 成分の状態に関する第 1 状態関連情報を目的変数とし、

前記第 2 校正データは、第 2 成分を含む第 2 懸濁液から得られた前記スペクトル測定データである第 2 スペクトル測定データ、および前記第 2 成分に関する第 2 成分関連情報を説明変数とし、かつ、前記第 2 成分の状態に関する第 2 状態関連情報を目的変数とする、

50

校正済み状態予測モデルを用いること、

前記状態の予測の対象である対象成分に関する対象成分関連情報、および前記対象成分を含む対象懸濁液から得られた前記スペクトル測定データである対象スペクトル測定データを取得すること、並びに、

前記対象成分関連情報および前記対象スペクトル測定データを前記校正済み状態予測モデルに適用し、前記校正済み状態予測モデルから前記対象懸濁液中の前記対象成分の状態を予測した対象状態予測結果を出力させること、

を含む情報処理装置の作動方法。

【請求項 13】

生物学的分子が成分として液体中に分散された懸濁液から発せられる電磁波のスペクトルを測定したスペクトル測定データに基づいて、前記懸濁液中の成分の状態を予測する情報処理装置の作動プログラムであって、

第1校正データと第2校正データの少なくとも2種類の校正データを用いて校正された校正済み状態予測モデルであり、

前記第1校正データは、第1成分を含む第1懸濁液から得られた前記スペクトル測定データである第1スペクトル測定データ、および前記第1成分に関する第1成分関連情報を説明変数とし、かつ、前記第1成分の状態に関する第1状態関連情報を目的変数とし、

前記第2校正データは、第2成分を含む第2懸濁液から得られた前記スペクトル測定データである第2スペクトル測定データ、および前記第2成分に関する第2成分関連情報を説明変数とし、かつ、前記第2成分の状態に関する第2状態関連情報を目的変数とする、校正済み状態予測モデルを用いること、

前記状態の予測の対象である対象成分に関する対象成分関連情報、および前記対象成分を含む対象懸濁液から得られた前記スペクトル測定データである対象スペクトル測定データを取得すること、並びに、

前記対象成分関連情報および前記対象スペクトル測定データを前記校正済み状態予測モデルに適用し、前記校正済み状態予測モデルから前記対象懸濁液中の前記対象成分の状態を予測した対象状態予測結果を出力させること、

を含む処理をコンピュータに実行させるための情報処理装置の作動プログラム。

【請求項 14】

生物学的分子が成分として液体中に分散された懸濁液から発せられる電磁波のスペクトルを測定したスペクトル測定データに基づいて、前記懸濁液中の成分の状態を予測する校正済み状態予測モデルの生成方法であって、

第1校正データと第2校正データの少なくとも2種類の校正データであり、

前記第1校正データは、第1成分を含む第1懸濁液から得られた前記スペクトル測定データである第1スペクトル測定データ、および前記第1成分に関する第1成分関連情報を説明変数とし、かつ、前記第1成分の状態に関する第1状態関連情報を目的変数とし、

前記第2校正データは、第2成分を含む第2懸濁液から得られた前記スペクトル測定データである第2スペクトル測定データ、および前記第2成分に関する第2成分関連情報を説明変数とし、かつ、前記第2成分の状態に関する第2状態関連情報を目的変数とする、校正データを取得すること、並びに、

前記校正データを用いて前記校正済み状態予測モデルを生成すること、を含む校正済み状態予測モデルの生成方法。

【請求項 15】

前記校正データの前記説明変数を学習用入力データとして機械学習モデルに入力し、前記機械学習モデルから前記状態を予測した学習用状態予測結果を出力させること、並びに、

前記学習用状態予測結果と前記校正データの前記目的変数との比較結果に基づいて、前記機械学習モデルを更新すること、

を含み、

前記説明変数の前記機械学習モデルへの入力、前記学習用状態予測結果の前記機械学習

10

20

30

40

50

モデルからの出力、および前記機械学習モデルの更新を、前記校正データを変更しつつ繰り返すことで、前記機械学習モデルを前記校正済み状態予測モデルとする請求項 14 に記載の校正済み状態予測モデルの生成方法。

【請求項 16】

生物学的分子が成分として液体中に分散された懸濁液から発せられる電磁波のスペクトルを測定したスペクトル測定データに基づいて、前記懸濁液中の成分の状態を予測する校正済み状態予測モデルであって、

第 1 校正データと第 2 校正データの少なくとも 2 種類の校正データであり、

前記第 1 校正データは、第 1 成分を含む第 1 懸濁液から得られた前記スペクトル測定データである第 1 スペクトル測定データ、および前記第 1 成分に関する第 1 成分関連情報を説明変数とし、かつ、前記第 1 成分の状態に関する第 1 状態関連情報を目的変数とし、

前記第 2 校正データは、第 2 成分を含む第 2 懸濁液から得られた前記スペクトル測定データである第 2 スペクトル測定データ、および前記第 2 成分に関する第 2 成分関連情報を説明変数とし、かつ、前記第 2 成分の状態に関する第 2 状態関連情報を目的変数とする、校正データを用いて生成され、

前記状態の予測の対象である対象成分に関する対象成分関連情報、および前記対象成分を含む対象懸濁液から得られた前記スペクトル測定データである対象スペクトル測定データが適用された場合に、前記対象懸濁液中の前記対象成分の状態を予測した対象状態予測結果を出力する機能をコンピュータに実行させるための校正済み状態予測モデル。

【請求項 17】

請求項 16 に記載の校正済み状態予測モデルを記憶した情報処理装置。

【手続補正 2】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】0057

【補正方法】変更

【補正の内容】

【0057】

抗体 19A は、本開示の技術に係る「第 1 成分」の一例であり、第 1 精製液 28A は、本開示の技術に係る「第 1 懸濁液」の一例である。教師データ 111A は、本開示の技術に係る「第 1 校正データ」の一例である。そして、スペクトル測定データ 46A は、本開示の技術に係る「第 1 スペクトル測定データ」の一例であり、成分関連情報 47A は、本開示の技術に係る「第 1 成分関連情報」の一例である。さらに、濃度測定値 113A は、本開示の技術に係る「第 1 状態関連情報」の一例である。また、抗体 19B は、本開示の技術に係る「第 2 成分」の一例であり、第 1 精製液 28B は、本開示の技術に係る「第 2 懸濁液」の一例である。教師データ 111B は、本開示の技術に係る「第 2 校正データ」の一例である。そして、スペクトル測定データ 46B は、本開示の技術に係る「第 2 スペクトル測定データ」の一例であり、成分関連情報 47B は、本開示の技術に係る「第 2 成分関連情報」の一例である。さらに、濃度測定値 113B は、本開示の技術に係る「第 2 状態関連情報」の一例である。

【手続補正 3】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】0107

【補正方法】変更

【補正の内容】

【0107】

生成した学習済み濃度予測モデルの予測精度を検証するため、サブクラスが IgG2 の抗体 mAbA および mAbB とは異なる抗体 mAbC を生産する CHO 細胞の培養上清液を使用して、上記の抗体 mAbA 等と同様に試験を実施し、スペクトル測定データおよび濃度測定値を取得した。但し、クロマト溶出ステップは 10CV の 1 条件のみ実施した。加えて、抗体 mAbC の成分関連情報として、抗体 mAbC のアミノ酸配列情報から、抗

体 m A b C の アミノ酸組成比情報を取得した。

10

20

30

40

50