



Pep2TCR: 通过迁移学习和集成方法准确预测 CD4 T细胞受体结合特异性

刁凯旋^{1,2,3#}, 吴涛¹, 赵翔宇¹, 王南¹, 邱蝶¹,
王卫亮⁴, 李心翔⁵, 刘雪松^{1,6*}

¹上海科技大学生命科学与技术学院;

²中国科学院上海生物化学与细胞生物学研究所;

³中国科学院大学; ⁴广东医科大学附属阳江人民医院皮肤科;

⁵复旦大学上海癌症中心结直肠外科;

⁶上海临床研究中心;

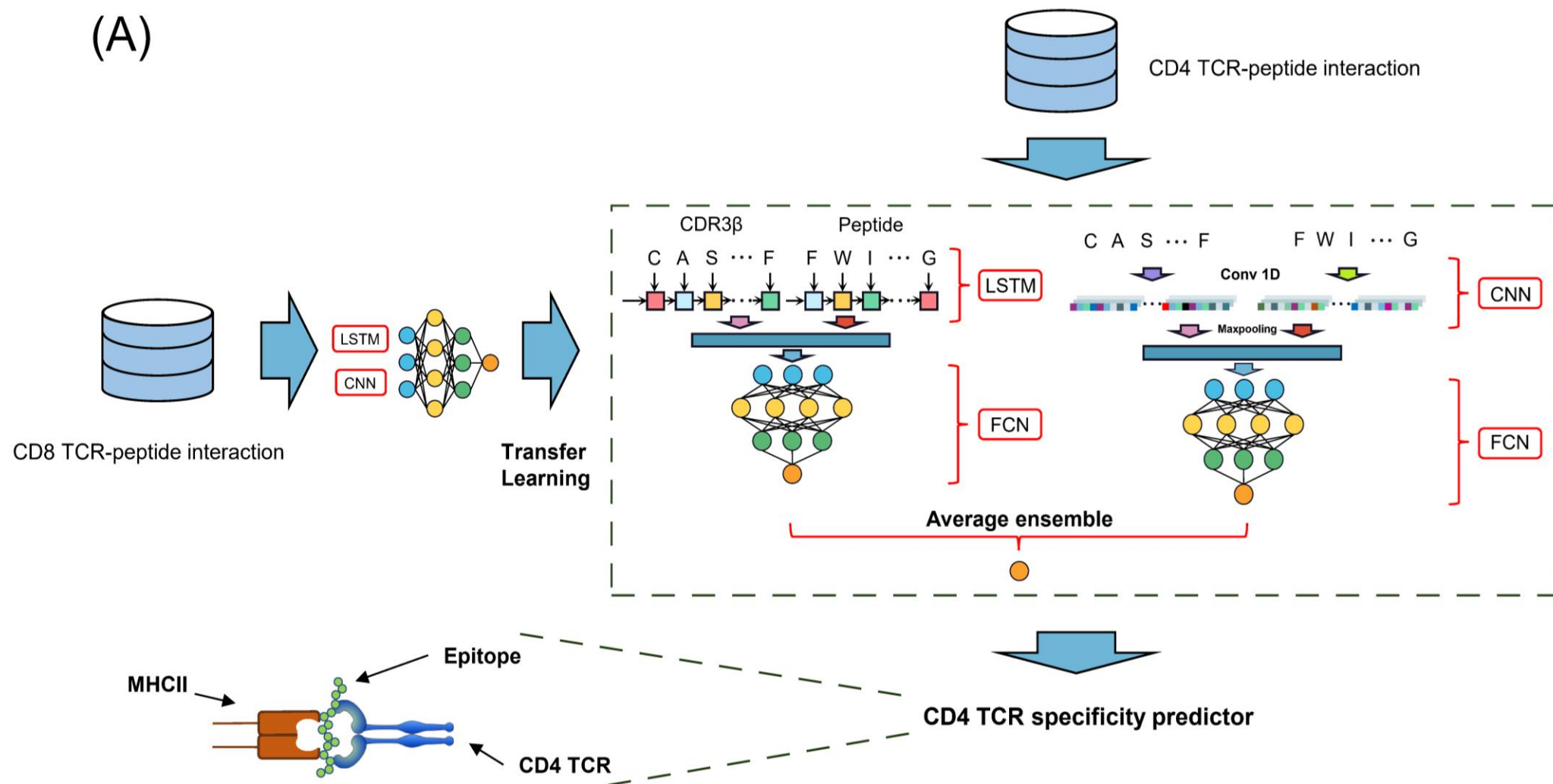


Kaixuan Diao, Tao Wu, Xiangyu Zhao, Nan Wang, Die Qiu, Wei-Liang Wang, Xinxiang Li, Xue-Song Liu. 2024.
Pep2TCR: accurate prediction of CD4 T cell receptor binding specificity through transfer learning and ensemble
approach. *iMetaOmics* 1: e43. <https://doi.org/10.1002/imo2.43>



简介

(A)



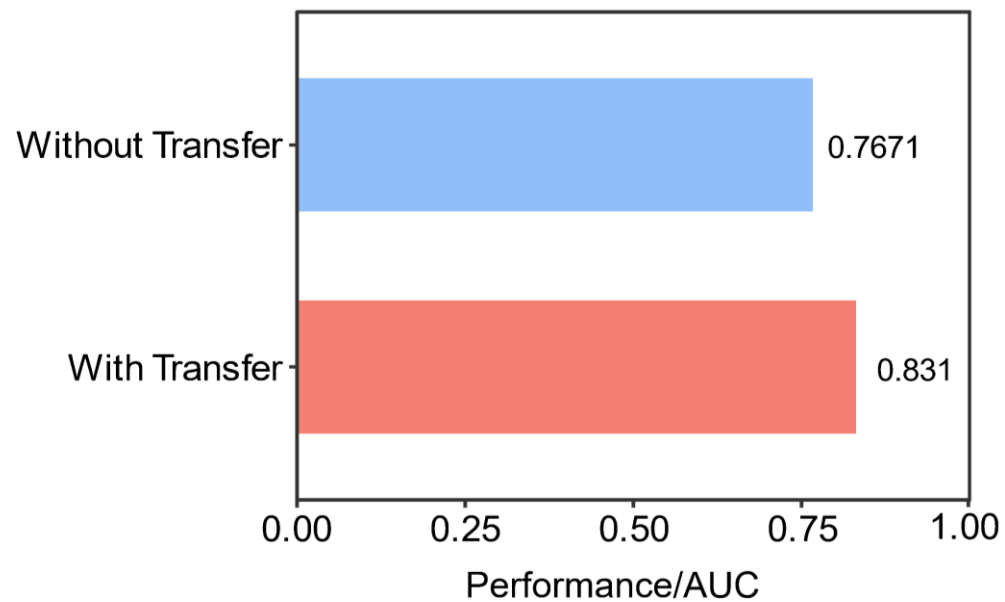
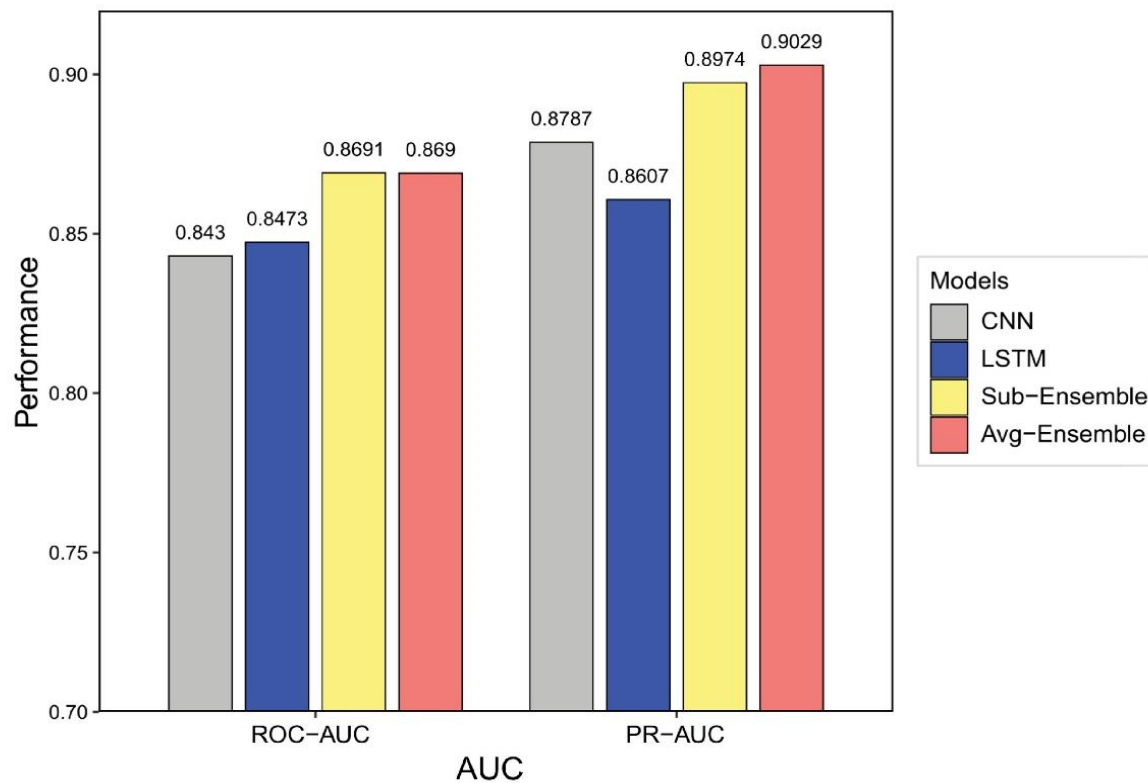


亮点

1. 结合迁移学习和集成方法，构建了一个名为Pep2TCR的新型深度学习模型，
用于预测CD4 TCR的特异性;
2. 与现有模型相比，Pep2TCR展示了更优秀的性能;
3. Pep2TCR能够识别新抗原反应性CD4+ T细胞的特征;
4. 开发了用户友好的网站和便于使用的Docker容器。



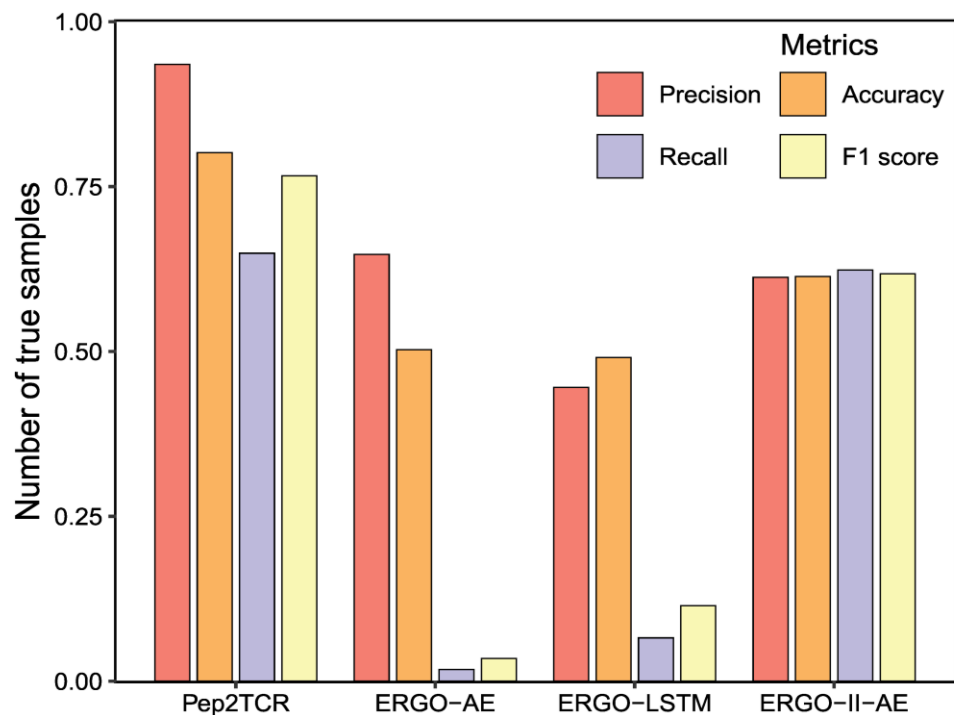
迁移学习和集成方法提高了预测效果





Pep2TCR优于现有方法

Performance for predictions on CD4 independent I data



Performance of different classifiers encoding with AAindex11

Model	CD4 independent validation dataset I				CD4 independent validation dataset II			
	Accuracy	F1 score	ROC-AUC	PR-AUC	Accuracy	F1 score	ROC-AUC	PR-AUC
Pep2TCR	0.8016	0.7663	0.869	0.9029	0.653	0.5	0.7957	0.7851
DET	0.6402	0.6885	0.5143	0.4428	0.6689	0.6214	0.6759	0.7383
XGB	0.5124	0.3293	0.5678	0.5318	0.5	0.2576	0.5639	0.5154
AdaBoost	0.4867	0.318	0.4576	0.5259	0.5183	0.3587	0.5711	0.5444
SVM	0.5108	0.0499	0.5467	0.5309	0.5	0	0.5595	0.4943
RF	0.4289	0.305	0.5004	0.4618	0.5	0	0.3226	0.3824
LR	0.4803	0.4933	0.4647	0.4425	0.3927	0.0432	0.4482	0.4362

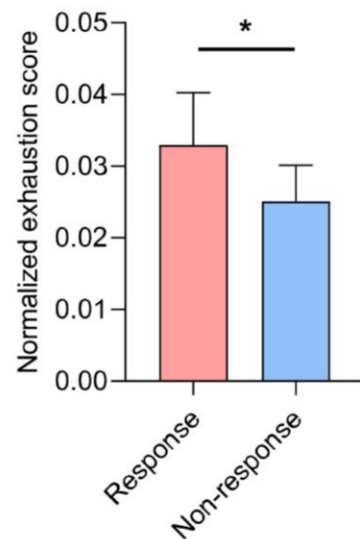
Performance of different classifiers encoding with BLOSUM50

Model	CD4 independent validation dataset I				CD4 independent validation dataset II			
	Accuracy	F1 score	ROC-AUC	PR-AUC	Accuracy	F1 score	ROC-AUC	PR-AUC
Pep2TCR	0.8016	0.7663	0.869	0.9029	0.653	0.5	0.7957	0.7851
DET	0.4144	0.3244	0.3172	0.4837	0.5708	0.3649	0.4206	0.5628
XGB	0.5124	0.3409	0.6172	0.5491	0.6142	0.5101	0.6713	0.6221
AdaBoost	0.5020	0.3446	0.5356	0.5188	0.4109	0.1224	0.3140	0.3889
SVM	0.4996	0.0032	0.4905	0.4881	0.5	0	0.4326	0.4239
RF	0.4129	0.3136	0.5078	0.4644	0.3676	0.0281	0.5282	0.4596
LR	0.4458	0.4062	0.5061	0.4844	0.3173	0.0508	0.2521	0.357

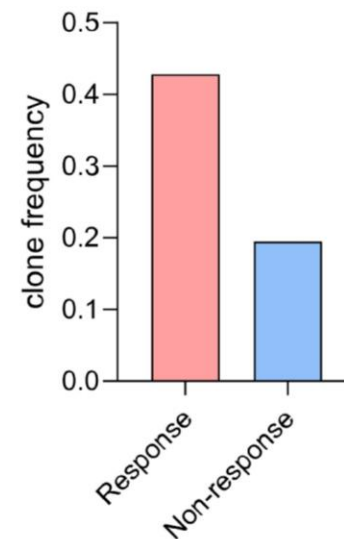
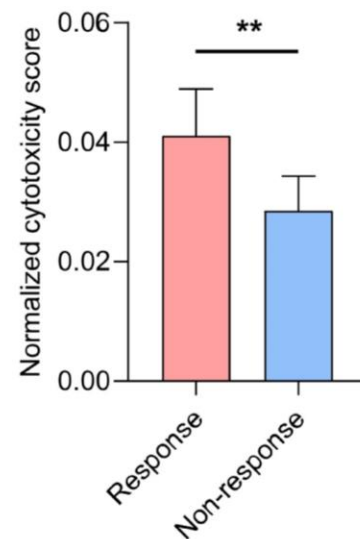


Pep2TCR识别新抗原反应性CD4+ T细胞特征

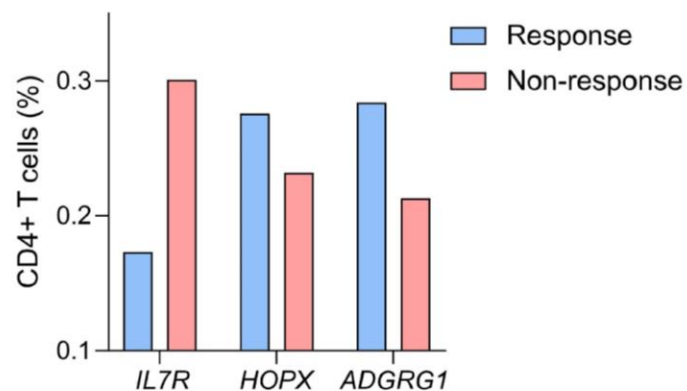
(A)



(B)

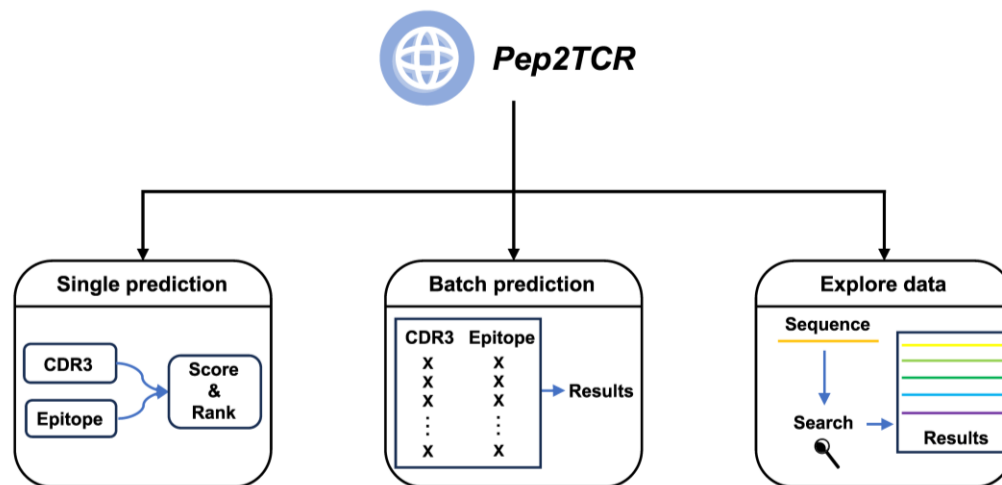


(C)





Pep2TCR网站使用



CD4 TCR specificity prediction

Home Search Help About

Single mode

Batch mode

Deep learning-based prediction of CD4 T-cell receptor specificity

Single Mode

Please input sequences:

CDR3

Peptide

RUN

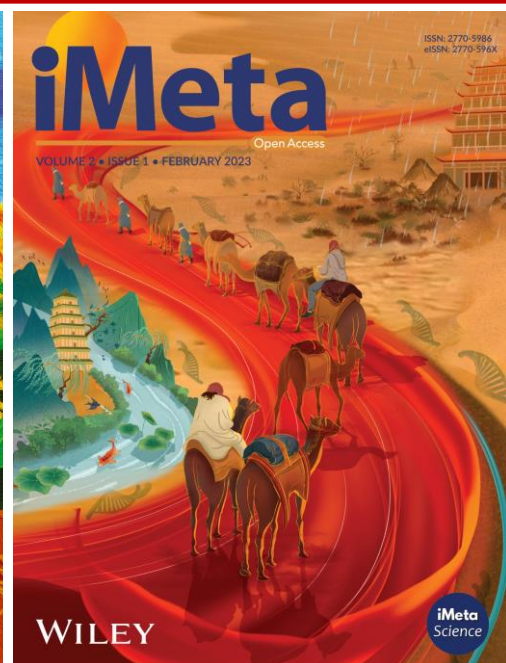
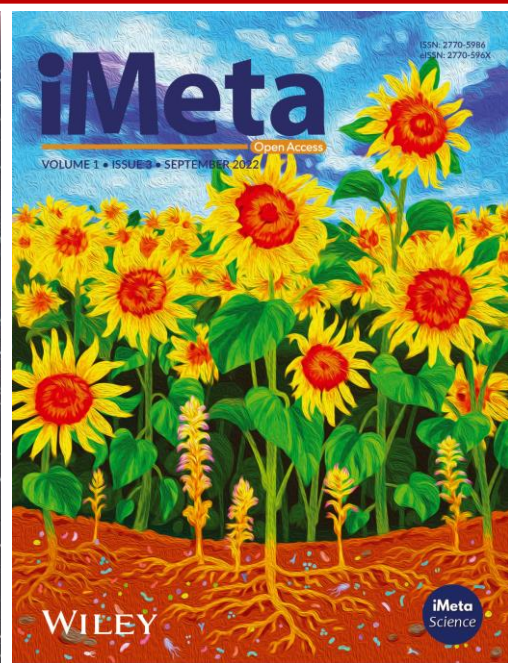
This is single mode, the run result is as below



总结

- ❑ Pep2TCR是一个新型深度学习工具，专门预测CD4 T细胞受体结合特异性，提升了预测准确性；
- ❑ 本研究通过迁移学习和集成方法，缓解了CD4 TCR数据不足的问题；
- ❑ Pep2TCR在识别新抗原反应性CD4+ T细胞特征方面表现出色；
- ❑ 该工具提供用户友好的网站和Docker容器，方便研究人员进行CD4 TCR特异性预测。

Kaixuan Diao, Tao Wu, Xiangyu Zhao, Nan Wang, Die Qiu, Wei-Liang Wang, Xinxiang Li, Xue-Song Liu. 2024. Pep2TCR: accurate prediction of CD4 T cell receptor binding specificity through transfer learning and ensemble approach. *iMetaOmics* 1: e43. <https://doi.org/10.1002/imo2.43>



“**iMeta**”(影响因子**23.8**)由威立、宏科学和千名华人科学家出版的期刊，主编刘双江和傅静远教授。
收稿范围：任何领域高影响力的研究、方法和综述，重点关注生物技术、生物信息和微生物组等；
影响力：[ESCI/WOS](#)、[PubMed](#)、[Google](#)、[Scopus](#)收录，**IF 23.8**位列JCR微生物学研究期刊全球第一；
时效性：外审平均21天；投稿至发表中位数57天；
“**iMetaOmics**”主编赵方庆和于君教授，定位IF>10的高水平交叉学科综合期刊，欢迎投稿！



主页: <http://www.imeta.science>

出版社: <https://wileyonlinelibrary.com/journal/imeta>



投稿: <https://wiley.atyponrex.com/journal/IMT2>
<https://wiley.atyponrex.com/journal/IMO2>



office@imeta.science

imetaomics@imeta.science



宣传片



iMeta

