

Supplemental Table 3. PSCL-derived matrices describing 9-mer binding to six common Chinese rhesus MHC class I alleles

a) Mamu-A2*01:02^a

Residue	Position								
	1	2	3	4	5	6	7	8	9
A	1.000	0.012	0.257	0.388	0.126	0.485	0.333	0.357	0.022
C	0.203	0.014	0.088	0.156	0.096	0.437	0.213	0.192	0.033
D	0.098	0.013	0.193	0.246	0.031	0.172	0.085	0.068	0.009
E	0.037	0.004	0.007	0.023	0.021	0.113	0.102	0.048	0.018
F	0.287	0.018	0.396	0.469	1.000	1.000	0.683	0.161	0.144
G	0.755	0.004	0.165	0.434	0.144	0.313	0.217	0.085	0.015
H	0.443	1.000	0.041	0.218	0.098	0.262	0.286	0.044	0.014
I	0.275	0.062	1.000	0.412	0.144	0.394	1.000	1.000	0.062
K	0.386	0.041	0.033	0.448	0.029	0.128	0.156	0.133	0.044
L	0.067	0.007	0.155	0.209	0.122	0.633	0.395	0.175	0.225
M	0.486	0.050	0.501	0.713	0.114	0.584	0.647	0.214	0.201
N	0.333	0.021	0.190	0.516	0.036	0.188	0.575	0.061	0.015
P	0.031	0.004	0.047	0.578	0.053	0.360	0.110	0.216	0.008
Q	0.180	0.075	0.140	0.467	0.104	0.370	0.278	0.135	0.004
R	0.819	0.069	0.032	0.463	0.057	0.143	0.057	0.143	0.004
S	0.588	0.019	0.316	0.492	0.081	0.690	0.301	0.129	0.016
T	0.722	0.019	0.178	0.364	0.112	0.476	0.133	0.213	0.016
V	0.412	0.025	0.174	0.901	0.330	0.851	0.261	0.115	0.050
W	0.109	0.012	0.038	1.000	0.378	0.013	0.580	0.214	0.307
Y	0.129	0.022	0.096	0.409	0.194	0.866	0.437	0.701	1.000
Geomean	0.250	0.022	0.118	0.365	0.102	0.311	0.264	0.157	0.034
SD	2.8	3.6	3.2	2.2	2.5	2.7	2.2	2.2	4.4
SF	0.518	5.950	1.096	0.355	1.268	0.418	0.491	0.827	3.865

b) Mamu A7*01:03^a

Residue	Position								
	1	2	3	4	5	6	7	8	9
A	0.178	0.309	0.014	0.790	0.240	0.276	0.096	0.425	0.102
C	0.131	0.019	0.050	0.989	0.287	0.091	0.061	0.652	0.122
D	0.006	0.006	0.072	0.665	0.273	0.448	0.931	0.337	0.011
E	0.005	0.019	0.002	0.061	0.046	0.072	0.309	0.023	0.022
F	0.418	0.022	0.057	1.000	1.000	0.260	1.000	0.215	0.222
G	0.192	0.032	0.031	0.361	0.354	0.160	0.182	0.305	0.021
H	0.916	0.010	0.027	0.146	0.110	0.168	0.339	0.055	0.018
I	0.232	0.382	0.125	0.926	0.388	0.698	0.345	0.210	0.585
K	0.677	0.037	0.008	0.265	0.026	0.035	0.019	0.031	0.049
L	1.000	0.352	0.051	0.806	0.161	0.486	0.183	0.087	1.000
M	0.235	0.260	1.000	0.649	0.503	1.000	0.350	0.123	0.514
N	0.027	0.029	0.072	0.576	0.093	0.823	0.161	0.280	0.017
P	0.013	0.004	0.006	0.409	0.050	0.065	0.301	0.200	0.029
Q	0.173	0.035	0.812	0.450	0.235	0.376	0.222	1.000	0.032
R	0.274	0.019	0.009	0.275	0.054	0.047	0.054	0.167	0.040
S	0.083	1.000	0.073	0.698	0.750	0.232	0.399	0.103	0.016
T	0.006	0.362	0.029	0.173	0.206	0.266	0.578	0.288	0.029
V	0.041	0.579	0.009	0.304	0.644	0.339	0.684	0.280	0.415
W	0.262	0.022	0.023	0.724	0.900	0.263	0.476	0.149	0.655
Y	0.460	0.022	0.030	0.349	0.500	0.303	0.545	0.149	0.053
Geomean	0.111	0.054	0.036	0.435	0.220	0.224	0.251	0.177	0.073
SD	5.373	5.169	4.451	2.079	2.895	2.552	2.748	2.537	4.286
SF	1.215	2.482	3.780	0.311	0.613	0.602	0.538	0.762	1.863

c) Mamu-B*010:01 ^a

Residue	Position								
	1	2	3	4	5	6	7	8	9
A	0.153	0.132	0.347	0.529	0.456	1.000	0.227	1.000	0.013
C	0.395	0.035	0.137	0.173	0.119	0.115	0.134	0.112	0.003
D	0.323	0.065	0.193	0.099	0.223	0.305	0.060	0.052	0.003
E	0.089	0.043	0.082	0.240	0.922	0.089	0.051	0.531	0.003
F	0.096	0.057	0.292	0.197	0.880	0.248	0.388	0.318	1.000
G	0.385	0.039	0.157	0.321	0.330	0.293	0.053	0.118	0.003
H	1.000	1.000	0.536	0.165	0.178	0.388	1.000	0.039	0.003
I	0.106	0.097	0.155	0.105	0.567	0.563	0.184	0.347	0.258
K	0.103	0.030	0.055	0.233	0.138	0.067	0.169	0.103	0.008
L	0.121	0.036	0.077	0.654	0.268	0.350	0.199	0.248	0.288
M	0.248	0.047	0.117	0.352	0.113	0.809	0.784	0.147	0.504
N	0.144	0.030	0.212	0.459	0.221	0.239	0.125	0.052	0.007
P	0.107	0.040	0.123	0.720	0.373	0.296	0.062	0.814	0.006
Q	0.516	0.051	0.129	0.305	0.126	0.491	0.094	0.702	0.004
R	0.336	0.062	0.125	0.836	0.092	0.397	0.439	0.094	0.003
S	0.199	0.066	1.000	1.000	0.695	0.779	0.046	0.589	0.003
T	0.152	0.046	0.266	0.803	0.228	0.456	0.064	0.830	0.006
V	0.108	0.042	0.140	0.482	0.442	0.199	0.056	0.621	0.034
W	0.109	0.026	0.095	0.221	1.000	0.084	0.027	0.048	0.010
Y	0.367	0.042	0.101	0.239	0.642	0.073	0.282	0.189	0.003
Geomean	0.197	0.056	0.164	0.329	0.308	0.274	0.135	0.215	0.013
SD	1.988	2.192	1.997	1.979	2.143	2.265	2.718	2.938	6.971
SF	0.703	2.484	0.840	0.420	0.448	0.504	1.026	0.642	10.922

d) Mamu-B*066:01 ^a

Residue	Position								
	1	2	3	4	5	6	7	8	9
A	0.099	0.547	0.231	0.308	0.055	0.337	0.674	0.103	0.058
C	0.265	0.075	0.019	0.340	0.336	0.410	0.655	0.111	0.001
D	0.004	0.004	0.011	1.000	0.090	0.324	0.494	0.025	0.002
E	0.001	0.002	0.053	0.189	0.059	0.228	0.925	0.024	0.001
F	1.000	0.056	1.000	0.471	1.000	0.590	1.000	0.635	0.005
G	0.027	1.000	0.034	0.774	0.145	0.268	0.222	0.216	0.004
H	0.053	0.010	0.057	0.250	0.093	0.269	0.205	0.225	0.072
I	0.086	0.210	0.202	0.326	0.230	0.295	0.489	0.094	0.004
K	0.720	0.010	0.036	0.150	0.016	0.075	0.054	0.072	1.000
L	0.144	0.198	0.034	0.388	0.085	0.462	0.272	0.280	0.044
M	0.249	0.788	0.349	0.123	0.201	0.330	0.356	0.149	0.013
N	0.276	0.016	0.109	0.264	0.034	0.373	0.558	0.185	0.005
P	0.003	0.007	0.101	0.783	0.078	0.279	0.281	0.272	0.001
Q	0.016	0.283	0.039	0.161	0.056	0.703	0.409	0.173	0.007
R	0.254	0.005	0.015	0.186	0.042	0.204	0.166	0.157	0.455
S	0.109	0.409	0.193	0.187	0.128	0.588	0.546	0.054	0.009
T	0.049	0.371	0.102	0.157	0.074	1.000	0.234	0.176	0.001
V	0.067	0.106	0.172	0.146	0.222	0.728	0.441	1.000	0.017
W	0.106	0.008	0.080	0.481	0.083	0.978	0.293	0.096	0.001
Y	0.637	0.028	0.334	0.382	0.064	0.465	0.654	0.347	0.378
Geomean	0.075	0.053	0.083	0.292	0.097	0.382	0.373	0.148	0.011
SD	6.266	7.177	3.196	1.846	2.465	1.822	1.973	2.525	8.929
SF	1.454	2.034	1.304	0.372	1.117	0.285	0.291	0.734	10.250

e) Mamu-B*087:01 ^a

Residue	Position								
	1	2	3	4	5	6	7	8	9
A	0.106	0.047	0.005	0.338	0.480	0.179	0.094	0.041	0.010
C	0.083	0.058	0.006	0.179	0.231	0.155	0.080	0.021	0.010
D	0.255	1.000	1.000	1.000	0.968	1.000	1.000	0.032	0.010
E	1.000	0.132	0.077	0.486	0.371	0.714	0.405	0.036	0.010
F	0.355	0.136	0.211	0.254	0.225	0.286	0.034	1.000	0.708
G	0.114	0.036	0.020	0.078	0.113	0.068	0.106	0.032	0.010
H	0.071	0.023	0.010	0.085	0.085	0.060	0.050	0.009	0.010
I	0.139	0.227	0.057	0.097	0.124	0.068	0.122	0.020	0.403
K	0.093	0.044	0.005	0.122	0.061	0.032	0.011	0.017	0.019
L	0.081	0.466	0.035	0.473	0.155	0.178	0.259	0.118	1.000
M	0.190	0.630	0.071	0.267	0.092	0.518	0.676	0.025	0.678
N	0.078	0.038	0.012	0.183	0.105	0.074	0.098	0.018	0.017
P	0.087	0.057	0.010	0.164	0.155	0.182	0.032	0.035	0.010
Q	0.209	0.169	0.012	0.346	0.041	0.066	0.065	0.071	0.015
R	0.087	0.021	0.003	0.084	0.050	0.034	0.010	0.033	0.010
S	0.271	0.041	0.110	0.341	0.234	0.156	0.087	0.041	0.010
T	0.054	0.065	0.018	0.118	0.351	0.098	0.039	0.015	0.010
V	0.065	0.040	0.017	0.196	0.663	0.055	0.079	0.032	0.144
W	0.264	0.152	0.046	0.391	0.796	0.194	0.327	0.144	0.010
Y	0.342	0.104	0.018	0.143	1.000	0.068	0.166	0.171	0.010
Geomean	0.143	0.091	0.025	0.210	0.203	0.129	0.095	0.041	0.028
SD	2.108	2.961	4.189	1.998	2.663	2.602	3.359	2.889	5.714
SF	0.582	0.916	3.352	0.397	0.412	0.649	0.877	2.015	2.988

f) to Mamu-B*090:01 ^a

Residue	Position								
	1	2	3	4	5	6	7	8	9
A	0.525	0.106	0.262	0.368	0.200	0.415	0.466	0.495	0.003
C	0.100	0.087	0.143	0.307	0.194	0.435	0.342	0.116	0.003
D	0.044	0.728	0.656	0.233	0.124	0.218	0.241	0.059	0.002
E	0.061	0.090	0.078	0.057	0.201	0.137	0.211	0.046	0.005
F	0.128	0.097	1.000	0.262	1.000	0.314	0.551	0.358	0.008
G	0.059	0.072	0.111	0.236	0.591	0.226	0.825	0.639	0.003
H	0.188	0.101	0.170	0.130	0.192	0.179	1.000	0.090	0.005
I	0.295	0.308	0.431	0.171	0.135	0.261	0.689	0.047	0.010
K	0.495	1.000	0.022	0.100	0.211	0.143	0.127	0.070	0.505
L	0.138	0.285	0.114	0.927	0.365	0.179	0.262	0.179	0.026
M	0.453	0.732	0.349	1.000	0.132	0.210	0.789	0.097	0.010
N	0.081	0.103	0.122	0.236	0.368	0.508	0.497	0.112	0.005
P	0.086	0.033	0.253	0.179	0.394	1.000	0.485	0.223	0.002
Q	0.125	0.537	0.118	0.171	0.319	0.292	0.665	0.290	0.004
R	1.000	0.096	0.029	0.127	0.115	0.206	0.190	0.612	1.000
S	0.165	0.100	0.242	0.535	0.298	0.368	0.365	0.124	0.045
T	0.204	0.094	0.640	0.197	0.129	0.616	0.223	0.110	0.008
V	0.195	0.116	0.402	0.364	0.491	0.415	0.245	0.087	0.010
W	0.175	0.073	0.288	0.737	0.579	0.020	0.237	0.136	0.004
Y	0.212	0.064	0.426	0.507	0.183	0.246	0.727	1.000	0.069
Geomean	0.170	0.148	0.200	0.263	0.257	0.255	0.391	0.160	0.011
SD	2.24	2.58	2.68	2.11	1.84	2.18	1.80	2.48	5.5
SF	0.930	1.068	0.787	0.599	0.613	0.618	0.403	0.983	14.245

a) The PSCL was tested for binding, the data analyzed, and primary and secondary anchor positions defined, as described in the Materials and Methods. Values shown represent the average relative binding (ARB) of the corresponding library relative to other pools with the same fixed position. Values have been normalized to the optimal residue at the corresponding position. SD indicates the standard deviation between the ARB of pools at the same position. SF is the specificity factor, calculated as described in the Materials and Methods, representing the ratio of the average binding of the entire library to the average of pools at the indicated position. At the primary anchor positions (SF>2.4; blue shading), the most preferred residues, associated with an ARB >0.1 are highlighted by bold yellow font. Green shading highlights dominant secondary anchor positions; yellow indicates weak secondary anchors. The library average binding for Mamu-A2*0102 was 4233 nM, 2076 nM for A7*0103, 167 nM for B*6601, and 5641 nM for B*9001.