

テーマ

AlphaFold を活用した好中球による NETs の分子機構の解明

テーマ(英文)

Molecular Mechanism Elucidation of Neutrophil NETs using AlphaFold

研究代表者

兵庫県立大学先端医療工学研究所 准教授 八木直美

研究内容(概要)

好中球 NETs (Neutrophil extracellular traps) は、感染防御システムの役割を果たしている。本来有益な免疫反応であるが、過剰に形成される等の制御を失うことで、様々な疾患を引き起こす。そこで本研究では、好中球 NETs 形成プロセスにおける翻訳後修飾の情報を用いて AlphaFold2 (Google DeepMind) で予測したタンパク質立体構造から、NETs 形成の制御に関連する部位を同定することを目的とする。タンパク質の情報を低次元に圧縮する主成分分析により構造安定性の可視化を行い、深層学習のひとつであるグラフ畳み込みネットワーク (Graph Convolution Network: GCN) を用いて分子結合情報に基づいた特徴を解析する。生化学の理解に基づき、深層学習を用いた予測モデルの構築した上でシミュレーション研究へと繋げ、分野横断的な研究として推進する。