

DACARI(Deep-learning Assisted Circular dichroism Analysis and Recognition Inference)について

- リンク：
https://insightkk.net/web_app/DACARI/
- 論文情報
Nakandakari et al., Anal. Chem. 97, 26342 (2025). (DOI: 10.1021/acs.analchem.5c04550)
BeStSel の開発者である József Kardos 先生も共著者です。
- AI を用いて、CD スペクトルを画像として認識し、その特徴を抽出することで、2次構造パラメータを高精度に抽出するツール
- 得られるパラメータは、PCDDDB データベースにおいて与えられている以下の8つの DSSP (define secondary structure of proteins) パラメータ

α helix, 3-10 helix, π helix, β strand, β bridge, bonded turn, bend, loop-or-irregular

- DSSP パラメータを予測するツールは初めて。
- 入力する CD データは $\Delta \epsilon$ 値のみ。mean residue ellipticity など、 $\Delta \epsilon$ 以外のデータは、あらかじめ $\Delta \epsilon$ 値に換算しておく必要あり。

- BeStSel は特に β 構造の解析に有効であるが、例えば、3-10 helix の予測ができない。一方で、DACARI は BeStSel では評価困難なパラメータも評価することができる。BeStSel と DACARI は相補的。

- 例えば、右図は、DACARI と BeStSel の比較例。
 α シヌクレイン溶液に SDS を加えていき、ランダムコイル構造から α helix 構造への移行を CD スペクトルで解析。DACARI において特定された bend や 3-10-helix 構造は、BeStSel では others として分類され、区別不可。一番下の図は、DSSP パラメータと BeStSel パラメータを4種類に統合し、等価なパラメータ同士で比較した結果。SDS を十分に加えて構造を持たせた後では両者ともほぼ同様の傾向を示している。

