

平成23年度科学研究費助成事業（科学研究費補助金）実績報告書（研究実績報告書）

1. 機関番号 

1	4	6	0	3
---	---	---	---	---

      2. 研究機関名 奈良先端科学技術大学院大学
3. 研究種目名 若手研究(B)      4. 研究期間 平成22年度～平成23年度
5. 課題番号 

2	2	7	0	0	3	1	3
---	---	---	---	---	---	---	---
6. 研究課題名 ハイブリッド型最適化によるRNA間相互作用予測
7. 研究代表者

研究者番号								研究代表者名		所属部局名		職名	
1	0	5	1	1	2	8	0	カトウ 加藤	ユウキ 有己	情報科学研究科		助教	

8. 研究分担者(所属研究機関名については、研究代表者の所属研究機関と異なる場合のみ記入すること。)

研究者番号								研究分担者名		所属研究機関名・部局名		職名	

9. 研究実績の概要

下欄には、当該年度に実施した研究の成果について、その具体的内容、意義、重要性等を、交付申請書に記載した「研究の目的」、「研究実施計画」に照らし、600字～800字で、できるだけ分かりやすく記述すること。また、国立情報学研究所でデータベース化するため、図、グラフ等は記載しないこと。

生体内の遺伝子発現の転写後制御に関わるRNA間の相互作用が注目を集めている。これまでいくつかのRNA間相互作用予測アルゴリズムが提案されてきたが、その取り得る構造の複雑さやバリエーションの多さなどのため、1本鎖RNA配列の構造予測に関する研究ほど解析手法が確立されておらず、発展途上の研究課題と言える。昨年度では、超高速かつ高精度の相互作用予測アルゴリズムRactIPの開発に成功し、初等的なWebサーバーを公開するに至っていた。そこで、今年度では2つのRNA間のループ同士の相互作用による複雑な結合2次構造は、1つのRNAが形成するシュードノットと呼ばれる複雑な2次構造に類似である点に着目し、RactIPでの方法論が1本鎖RNA配列解析でそのまま適用できないかと考えた。まず、シュードノットを含む2次構造の事後確率分布を、シュードノットを含まない2次構造の確率分布の積へ分解を行った。次に、最適化における目的関数の設定において、予測2次構造の期待精度の最大化に主眼を置き、期待精度最大化問題を閾値カット付き整数計画問題として実現した。RactIPのときと同様に、従来整数計画問題では解けないサイズの問題も圧倒的な速さで解くことに成功した。さらに、多重配列アラインメントが与えられたとき、その共通2次構造を予測するようにモデルの拡張を行った。提案手法（IPknot）の性能評価を構造既知の配列データセットを用いて行ったところ、複数の既存手法と比べて精度の点では同等以上、速度の点では桁違いの高速性を実現した。最後に、研究成果を広く世界に向けて発信するため、IPknotのWebサーバーを開発し、今年度新たに補完したRactIPのサーバーと統合することで、世界最高レベルの高速性を実現する構造解析ツールセットを公開した。

10. キーワード

- |              |              |             |           |
|--------------|--------------|-------------|-----------|
| (1) RNA間相互作用 | (2) RNA 2次構造 | (3) シュードノット | (4) 整数計画法 |
| (5)          | (6)          | (7)         | (8)       |

11. 現在までの達成度

下欄には、交付申請書に記載した「研究の目的」の達成度について、以下の区分により自己点検による評価を行い、その理由を簡潔に記述すること。また、国立情報学研究所でデータベース化するため、図、グラフ等は記載しないこと。  
 <区分>①当初の計画以上に進展している。 ②おおむね順調に進展している。 ③やや遅れている。 ④遅れている。

(区分)
(理由)

12. 今後の研究の推進方策

本研究課題の今後の推進方策について簡潔に記述すること。研究計画の変更あるいは研究を遂行する上での問題点があれば、その対応策なども記述すること。また、国立情報学研究所でデータベース化するため、図、グラフ等は記載しないこと。

--

13. 研究発表（平成23年度の研究成果）

※ 「13. 研究発表」欄及び「14. 研究成果による産業財産権の出願・取得状況」欄において記入欄が不足する場合には、適宜記入欄を挿入し、それによりページ数が増加した場合は、左端を糊付けすること。

〔雑誌論文〕 計（ 2 ）件      うち査読付論文 計（ 2 ）件

著者名	論文標題				
Kengo Sato	IPknot: fast and accurate prediction of RNA secondary structures with pseudoknots using integer programming				
雑誌名	査読の有無	巻	発行年		最初と最後の頁
Bioinformatics	有り	27	2	0	1
掲載論文の DOI (デジタルオブジェクト識別子)					
10.1093/bioinformatics/btr215					

著者名	論文標題				
Unyane Poolap	Using binding profiles to predict binding sites of target RNAs				
雑誌名	査読の有無	巻	発行年		最初と最後の頁
Journal of Bioinformatics and Computational Biology	有り	9	2	0	1
掲載論文の DOI (デジタルオブジェクト識別子)					
10.1142/S0219720011005628					

〔学会発表〕 計（ 9 ）件      うち招待講演 計（ 1 ）件

発表者名	発表標題	
Yuki Kato	RactIP: fast and accurate prediction of RNA-RNA interaction using integer programming	
学会等名	発表年月日	発表場所
Sixteenth Annual Meeting of the RNA Society (RNA2011)	2011年6月15日	京都府京都市

発表者名	発表標 題	
Kengo Sato	IPknot: fast and accurate prediction of RNA secondary structures with pseudoknots using integer programming	
学会等名	発表年月日	発表場所
Sixteenth Annual Meeting of the RNA Society (RNA2011)	2011年6月17日	京都府京都市

発表者名	発表標 題	
Kengo Sato	IPknot: fast and accurate prediction of RNA secondary structures with pseudoknots using integer programming	
学会等名	発表年月日	発表場所
19th Annual International Conference on Intelligent Systems for Molecular Biology and 10th European Conference on Computational Biology (ISMB/ECCB2011)	2011年7月17日	オーストリア ウィーン

発表者名	発表標 題	
加藤 有己	複雑なRNA 2次構造予測のための高速計算ソフトウェアの開発と今後の展開	
学会等名	発表年月日	発表場所
次世代バイオインフォマティクス研究会 (招待講演)	2011年8月2日	北海道札幌市

発表者名	発表標 題	
Yuki Kato	Rtips: fast and accurate tools for RNA 2D structure prediction using integer programming	
学会等名	発表年月日	発表場所
ICR Symposium to Celebrate the Bioinformatics Center's 10 Year Anniversary and New Restructuring	2011年8月29日	京都府宇治市

発表者名	発表標 題	
Yuki Kato	Rtips: fast and accurate tools for RNA 2D structure prediction using integer programming	
学会等名	発表年月日	発表場所
CBI/JSBi2011合同大会	2011年11月8日	兵庫県神戸市

発表者名	発表標 題	
Kengo Sato	Simultaneous aligning and folding of RNA sequences by dual decomposition	
学会等名	発表年月日	発表場所
CBI/JSBi2011合同大会	2011年11月10日	兵庫県神戸市

発表者名	発表標 題	
Kengo Sato	Rtips: fast and accurate tools for RNA 2D structure prediction using integer programming	
学会等名	発表年月日	発表場所
第34回日本分子生物学会年会	2011年12月14日	神奈川県横浜市

発表者名	発表標 題	
佐藤 健吾	双対分解によるRNA構造アラインメント	
学会等名	発表年月日	発表場所
第28回情報処理学会バイオ情報学研究会	2012年3月28日	宮城県仙台市

〔図書〕 計（ 1 ）件

著者名	出版社				
加藤 有己	羊土社				
書名				発行年	総ページ数
実験医学増刊号、使えるデータベース・ウェブツール、第4章第8節「二次構造に基づくRNA配列解析ソフトウェアの進展」				2011	229-236

14. 研究成果による産業財産権の出願・取得状況

〔出願〕 計（ 0 ）件

産業財産権の名称	発明者	権利者	産業財産権の種類、番号	出願年月日	国内・外国の別

〔取得〕 計（ 0 ）件

産業財産権の名称	発明者	権利者	産業財産権の種類、番号	取得年月日	国内・外国の別
				出願年月日	

15. 備考

※ 研究者又は所属研究機関が作成した研究内容又は研究成果に関するwebページがある場合は、URLを記載すること。

<a href="http://rna.naist.jp/">http://rna.naist.jp/</a>
---