

様 式 F - 7 - 2

科学研究費助成事業（学術研究助成基金助成金）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 挑戦的萌芽研究 4. 補助事業期間 平成23年度～平成24年度
5. 課題番号

2	3	6	5	0	1	5	3
---	---	---	---	---	---	---	---
6. 研究課題 機械学習と最適化に基づくRNAタンパク質相互作用予測

7. 研究代表者

研究者番号	研究代表者名	所属部局名	職名
8 0 1 9 6 9 4 8	セキ ヒロユキ 関 浩之	情報科学研究科	教授

8. 研究分担者

研究者番号	研究分担者名	所属研究機関名・部局名	職名
1 0 5 1 1 2 8 0	カトウ ユウキ 加藤 有己	情報科学研究科	助教

9. 研究実績の概要

生体内に存在する機能性RNAは多くの場合、タンパク質と結合することでその機能を発揮することが知られている。また、両者とも折り畳み構造を取ることが多く、その構造が相互作用の形成に大きな影響を与えると考えられている。RNAとタンパク質の相互作用予測は、その取り得る結合構造の複雑さやバリエーションの多さなどのため未だ確立された予測手法がなく、発展途上かつ挑戦的研究課題であると言える。本研究では、離散最適化法に基づくRNAおよびタンパク質の2次構造予測法を発展させ、RNA-タンパク質相互作用のモデル化を組織的に行い、精度の良い相互作用予測法の開発を目指す。

今年度は、昨年度末に課題に挙げた、塩基アミノ酸間のスコア関数の定量化のためには、進化の過程での配列間の保存情報が有力な手掛かりを与えると考え、まずはRNA配列のみに焦点を絞り、RNA配列の構造アラインメント問題を効率的に解く手法の開発に着手した。具体的には、2本以上の複数のRNA配列同士で、各配列が取り得る構造を考慮しながら同時に配列間の対応付けをとる、いわゆる同時構造アラインメント問題に対して、効率の良い計算手法DAFSを開発した。DAFSでは、構造アラインメント空間上で定義される確率分布を、各2次構造上で定義される確率分布とアラインメント空間上で定義される確率分布の積で近似することで、計算効率の改善に寄与している。また、予測構造アラインメントの精度が最大となるように整数計画問題として定式化を行い、さらにそれを双対分解と呼ばれる最適化法の技術を用いて、整数計画問題を直接解くことよりも高速に解くことが可能となった。既存の構造アラインメントデータ上で網羅的に計算機実験を行った結果、DAFSの予測精度は既存の手法と比べて同等以上、そしてより高速に動作することを実証した。

10. キーワード

- (1) RNA-タンパク質相互作用 (2) RNA 2次構造 (3) RNA構造アラインメント (4) 機械学習
- (5) 最適化 (6) (7) (8)

11.研究発表

〔雑誌論文〕計(2)件 うち査読付論文 計(2)件 (最終年度分)

著者名		論文標題			
Yuki Kato, Kengo Sato, Kiyoshi Asai and Tatsuya Akutsu		Rtips: fast and accurate tools for RNA 2D structure prediction using integer programming			
雑誌名	査読の有無	巻	発行年	最初と最後の頁	
Nucleic Acids Research	有	40	2 0 1 2	W29-W34	
掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子)					
10.1093/nar/gks412					

著者名		論文標題			
Kengo Sato, Yuki Kato, Tatsuya Akutsu, Kiyoshi Asai and Yasubumi Sakakibara		DAFS: simultaneous aligning and folding of RNA sequences via dual decomposition			
雑誌名	査読の有無	巻	発行年	最初と最後の頁	
Bioinformatics	有	28	2 0 1 2	3218-3224	
掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子)					
10.1093/bioinformatics/bts612					

〔学会発表〕計(4)件 うち招待講演 計(0)件 (最終年度分)

発表者名		発表標題	
Yuki Kato		Fast and accurate prediction of RNA pseudoknotted structures using integer programming	
学会等名	発表年月日	発表場所	
International Workshop on RNA (Benasque2012)	2012年07月27日	スペイン ベナスケ	

発表者名	発表標題	
Yuki Kato	Fast and accurate prediction of RNA-RNA interactions using integer programming	
学会等名	発表年月日	発表場所
International Workshop on RNA (Benasque2012)	2012年07月27日	スペイン ベナスケ

発表者名	発表標題	
Yuki Kato	RNA structural alignment using dual decomposition	
学会等名	発表年月日	発表場所
Herbstseminar der Bioinformatik (2012)	2012年10月04日	チェコ ドウピツェ

発表者名	発表標題	
Kengo Sato, Yuki Kato, Tatsuya Akutsu, Kiyoshi Asai and Yasubumi Sakakibara	DAFS: simultaneous aligning and folding of RNA sequences via dual decomposition	
学会等名	発表年月日	発表場所
International Symposium on Genome Science "Expanding Frontiers of Genome Science"	2013年01月09日	東京都文京区

〔図書〕計(0)件 (最終年度分)

著者名	出版社	
書名	発行年	総ページ数

12. 研究成果による産業財産権の出願・取得状況

〔出願〕 計(0)件 (最終年度分)

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 (最終年度分)

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	

13. 備考

Rtips: RNA structure prediction using IP scheme
<http://rna.naist.jp/>