

平成22年度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
10511280	カトウ 加藤 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調節に関わるRNA間の相互作用が注目を集めている。生体生命情報学において、これまでいくつかのRNA-RNA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。本研究では、計算効率の良い動的計画法により導出されたRNAの構造に関する情報を、モデル記述能力の高い整数計画法に組み込む、ハイブリッド型の最適化に基づく相互作用予測法を提案する。本年度はまず、最適化における目的関数の設定において、予測構造の期待精度を最大化することに着目し、期待精度最大化問題が閾値カットを用いた整数計画問題として実現できることを理論的に示した。また、結合2次構造の事後確率分布を厳密に計算する際に要する計算量は大きく実用的でないため、その確率分布を個々の構造の確率分布の積で近似することを提案した。これらにより、従来整数計画問題では解けないサイズの問題も予想を覆す速さで解くことに成功した。既知のRNA-RNA相互作用データを用いて提案手法（RactIP）の評価を行ったところ、複数の最新の既存手法と比べて精度の面では同等以上の性能をあげた。特筆すべきはRactIPの計算速度であり、結合2次構造を予測する他のモデルと比較して、桁違いの高速性を実現した。また、成果を広く世界に発信するため、開発途中ではあるものの、RactIPのWebサーバーを構築し、最低限使用できるものを公開済みである。

10. キーワード

- | | | |
|-----------------|--------------|-----------|
| (1) RNA-RNA相互作用 | (2) RNA 2次構造 | (3) 整数計画法 |
| (4) | (5) | (6) |
| (7) | (8) | (裏面に続く) |

11.研究発表（平成22年度の研究成果）

〔雑誌論文〕 計（ 2 ）件 うち査読付論文 計（ 2 ）件

著 者 名	論 文 標 題				
Yusuke Ishida	Branch-and-bound algorithms for enumerating treelike chemical graphs with given path frequency using detachment-cut				
雑 誌 名	査読の有無	巻	発 行 年	最初と最後の頁	
Journal of Chemical Information and Modeling	有	50	2010	934-946	

著 者 名	論 文 標 題				
Yuki Kato	RactIP: fast and accurate prediction of RNA-RNA interaction using integer programming				
雑 誌 名	査読の有無	巻	発 行 年	最初と最後の頁	
Bioinformatics	有	26	2010	i460-i466	

〔学会発表〕 計（ 7 ）件 うち招待講演 計（ 7 ）件

発 表 者 名	発 表 標 題		
Yuki Kato	RNA-RNA interaction prediction using integer programming with threshold cut		
学 会 等 名	発表年月日	発 表 場 所	
情報処理学会バイオ情報学研究会	2010年6月19日	沖縄（琉球大学）	

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	
18th Annual International Conference on Intelligent Systems for Molecular Biology (ISMB2010)	2010年7月11日	アメリカ（ボストン）	

発 表 者 名	発 表 標 題		
佐藤 健吾	期待精度最大化に基づくRNAシェードノット予測		
学 会 等 名	発表年月日	発 表 場 所	
情報処理学会バイオ情報学研究会	2010年7月29日	東京（港区）	

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	
Computational Biology Research Center Workshop 2010 (CBRC2010)	2010年7月29日	東京（港区）	

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	
9th European Conference on Computational Biology (ECCB2010)	2010年9月27日	ベルギー（アントワープ）	

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	
9th European Conference on Computational Biology (ECCB2010)	2010年9月27日	ベルギー（アントワープ）	

発 表 者 名	発 表 標 題	
Nobuyoshi Mizoguchi	A grammar-based approach to RNA pseudoknotted structure prediction for aligned sequences	
学 会 等 名	発表年月日	発 表 場 所
The 1st IEEE International Conference on Computational Advances in Bio and medical Sciences (ICCABS2011)	2011年2月3日	アメリカ（オーランド）

〔図 書〕 計（ 0 ）件

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

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

13. 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。

http://rna.naist.jp/ractip/
