

平成24年8月27日

報道関係者各位

国立大学法人 奈良先端科学技術大学院大学

## コンピューターを使い超高速で生体高分子構造の謎に迫る！ ～RNAの複雑な構造予測のための超高速・高精度ウェブツールを開発～

### 【概要】

RNA（リボ核酸）は人間を含めた生物の細胞の中に存在し、DNAのゲノム（遺伝情報）からタンパク質の情報をコピーしている鎖状の高分子。近年、遺伝子の働きを抑制など重要な生命活動の機能を発揮するRNAが相次いでみつき、注目を集めている。このRNAの未知の機能を解明するには、強い相関関係がある構造の解析が不可欠で、コンピューターによりRNAの塩基配列データから、その折り畳み構造を予測するアプローチは、時間とコストがかかる構造解析実験技術を補完する有力なツールとされている。

奈良先端科学技術大学院大学（奈良先端大、学長：磯貝彰）情報科学研究科の加藤有己助教は、慶應義塾大学、東京大学、京都大学からなるグループとの共同研究により、従来の常識を打ち破る超高速の構造予測ツールセットの開発に成功した。

このツールは、2種類の予測ができ、1つは、従来法で無視されることが多い複雑な部分構造を含めたRNA全体の構造予測で、精度の向上と新たなRNA遺伝子の発見につながる。もう1つは、RNAが部分的に結合したさいの相互作用の予測で、RNAによる生体内制御機構の解明が期待されている。

従来法では、複雑な構造解析のさいに計算効率が極端に悪くなるという欠点があり、高性能なコンピューターを使っても膨大な計算時間がかかってしまう例もある。本研究では、ソフトウェア改良の観点からこれらの問題に対処した。両ツールとも計算速度は世界最速レベルであり、予測精度も他の手法と比べて勝るとも劣らないことを実証している。例えば、従来法と比べて構造予測では最大で1万2千倍、相互作用予測では最大で4万倍の高速化を実現した。

両ツールを広く公開するため、それらを実装したウェブサーバーを開発し、商用目的以外であれば誰でも自由に利用することが可能（<http://rna.naist.jp/>）。開発したツールの高速性は、RNAの大規模な遺伝子領域の予測や、相互作用のための標的RNAの探索に真価を発揮し、生命科学の発展だけでなく、医学や薬学の分野に貢献することが期待される。この研究成果は、平成24年7月発行のNucleic Acids Research誌に掲載（電子版のみ）された。

つきましては、関係資料を配付するとともに、下記のとおり記者発表を行いますので、是非ともご出席くださいますよう、お願い申し上げます。

### 記

<日時> 平成24年8月30日（木）15時00分～（1時間程度）

<場所> 奈良先端科学技術大学院大学 附属図書館 マルチメディアホール（3階）  
奈良県生駒市高山町8916-5（けいはんな学研都市）  
※アクセスについては、<http://www.naist.jp/>をご覧ください。

<説明者>

奈良先端科学技術大学院大学 情報科学研究科 計算メカニズム学研究室 助教 加藤 有己

<ご連絡事項>

- (1) 本件につきましては、奈良県文化教育記者クラブをメインとし、学研都市記者クラブ、大阪科学・大学記者クラブ、文部科学記者会及び科学記者会に同時にご連絡しております。
- (2) 取材希望がございましたら、恐れ入りますが下記までご連絡願います。
- (3) 記者発表に関する問合せ先

奈良先端科学技術大学院大学 企画総務課 広報渉外係 瀬戸克昭

TEL : 0743-72-5026 FAX : 0743-72-5011 E-mail : [s-kikaku@ad.naist.jp](mailto:s-kikaku@ad.naist.jp)

# コンピューターを使い超高速で生体高分子構造の謎に迫る！ ～RNAの複雑な構造予測のための超高速・高精度ウェブツールを開発～

## 【概要】

RNA（リボ核酸）は人間を含めた生物の細胞の中に存在し、DNAのゲノム（遺伝情報）からタンパク質の情報をコピーしている鎖状の高分子。近年、遺伝子の働きや抑制など重要な生命活動の機能を発揮するRNAが相次いでみつかるとともに、注目を集めている。このRNAの未知の機能を解明するには、強い相関関係がある構造の解析が不可欠で、コンピューターによりRNAの塩基配列データから、その折り畳み構造を予測するアプローチは、時間とコストがかかる構造解析実験技術を補完する有力なツールとされている。

奈良先端科学技術大学院大学（奈良先端大、学長：磯貝彰）情報科学研究科の加藤有己助教は、慶應義塾大学、東京大学、京都大学からなるグループとの共同研究により、従来の常識を打ち破る超高速の構造予測ツールセットの開発に成功した。

このツールは、2種類の予測ができ、1つは、従来法で無視されることが多い複雑な部分構造を含めたRNA全体の構造予測で、精度の向上と新たなRNA遺伝子の発見につながる。もう1つは、RNAが部分的に結合したさいの相互作用の予測で、RNAによる生体内制御機構の解明が期待されている。

従来法では、複雑な構造解析のさいに計算効率が極端に悪くなるという欠点があり、高性能なコンピューターを使っても膨大な計算時間がかかってしまう例もある。本研究では、ソフトウェア改良の観点からこれらの問題に対処した。両ツールとも計算速度は世界最速レベルであり、予測精度も他の手法と比べて勝るとも劣らないことを実証している。例えば、従来法と比べて構造予測では最大で1万2千倍、相互作用予測では最大で4万倍の高速化を実現した。

両ツールを広く公開するため、それらを実装したウェブサーバーを開発し、商用目的以外であれば誰でも自由に利用することが可能（<http://rna.naist.jp/>）。開発したツールの高速性は、RNAの大規模な遺伝子領域の予測や、相互作用のための標的RNAの探索に真価を発揮し、生命科学の発展だけでなく、医学や薬学の分野に貢献することが期待される。この研究成果は、平成24年7月発行のNucleic Acids Research誌の電子版に掲載された。

## 【解説】

RNA（リボ核酸）は通常1本鎖で存在し、4種類の塩基A（アデニン）、C（シトシン）、G（グアニン）、U（ウラシル）からなる文字列（塩基配列）で表現される。RNAの多くは、選択的に塩基同士で水素結合することにより**2次構造**と呼ばれる折り畳み構造を形成する。RNAの2次構造の中には図1のような複雑な部分構造を含むものが少なからず存在することが分かっている。複雑な2次構造を含めてRNAの構造を解析できることは、より精度の高い機能推定につながると期待されている。

また、RNAは生体内制御に関わっていることが知られている。一例を挙げると、あるRNAがタンパク質の鋳型である別のRNAと結合することで、タンパク質の合成を抑制する現象が見つかっている（図2）。このような現象はRNA間相互作用と呼ばれているが、相互作用の仕組みを解明するためには、2つのRNAから構成される結合構造を解析することが重要になる。

これまでいくつかの研究グループにより、RNA 2次構造予測問題およびRNA間相互作用予測問題に対して、コンピューターを利用した様々なアプローチが提案されてきた。複雑な構造を解析するときには計算効率が極端に悪くなるという欠点があり、従来法ではそれらを考慮せずに解析するか、あるいは考慮す



## Results

The maximum expected accuracy (MEA) structure in dot-bracket representation is shown below. (Click [Help](#) for interpretations of the output.)

```
>MIDV
1 UUCUUUUUUUAGUGGCGAUAAGCCUGGGAAUGGGGGCCACCCAGGCGUAUGAACUAUGUGUAACGCCUCCCC
1 .....[[.....(((((((.[[[[[[.]]]]]])).....]]]]]]].
```

## Graphics

A 2D diagram of the predicted secondary structure is given below using [VARNA](#) version 3.7.

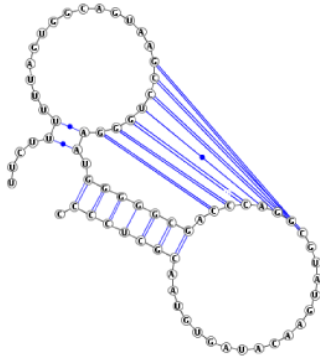


図3 ウェブサーバーの出力のスナップショット。

### 【研究の位置づけ】

昨今の実験技術の革新により、大量の生物配列データがこれまでにない速度で得られる時代となった。この膨大なデータを高速に処理するための情報科学的アプローチは、生命科学にとって避けては通れない技術となっている。本研究で開発したツールはまさにそのような時代のニーズに合ったものであると確信している。本研究の特徴の1つは、大規模なハードウェアの能力に依存するのではなく、斬新なソフトウェアの開発だけで高速性を実現したこと。したがって、開発手法は個人用の標準的なパソコンでも高速に動作することが可能だ。開発ツールの高速性は RNA の大規模な遺伝子領域予測、相互作用のための標的 RNA の探索に真価を発揮し、生命科学の発展のみならず、医学や薬学の分野に貢献されることが期待される。現在、こうした問題に応用する研究を着々と進めている。

### 【用語解説】

- 1) 2次構造: 立体構造の骨格を成す塩基対の集合で、A-U、G-C、G-Uの規則で結合する。
- 2) 整数計画法: 考えている問題を、整数値を取る変数に関する線形の不等式制約の下で、線形の目的関数を最大化または最小化する問題（整数計画問題）として定式化し解く方法。

### 【本研究内容についてコメント出来る方】

慶應義塾大学 理工学部 生命情報学科 佐藤 健吾 専任講師

E-mail : satoken@bio.keio.ac.jp

### 【本プレスリリースに関するお問い合わせ先】

奈良先端科学技術大学院大学 情報科学研究科 計算メカニズム学研究室 助教 加藤 有己

TEL 0743-72-5232

FAX 0743-72-5239

E-mail ykato@is.naist.jp