



NPO 法人
mRNA ターゲット
創薬研究機構

2025 年度 第 1 回講演会

計算機による RNA 立体構造予測の現状

演者 岩切淳一 博士（東京大学大学院 新領域創成科学研究科）

要旨

計算機による生体分子の立体構造予測は、2020 年にタンパク質の構造を圧倒的な高精度で予測する AlphaFold2 が登場して以来、予測構造への信頼性が大きく向上し、分子生物学や構造生物学の研究の大きな転換点となった。AlphaFold2 が有名になるきっかけとなったのが、立体構造予測の国際的なコンペティションである Critical Assessment of protein Structure Prediction (CASP14)であり、隔年で開催されている。2022 年に開催された CASP15 では、RNA 分子の立体構造も予測の対象として扱われるようになり、RNA がタンパク質の次のターゲット分子として注目されるようになった。さらに 2024 年に開催された CASP16 では、数多くの新しい RNA 構造が予測のターゲットとして出題されると同時に、RNA 分子にも対応した AlphaFold3 が突如発表・公開されたことで、RNA 分子の立体構造も高精度に予測できるようになることが期待された。一方、日本国内でも、演者をはじめとした有志メンバーによる RNA 構造予測のオンライングループが結成され、CASP16 の RNA 構造予測部門に実際に参加し、AlphaFold3 を含め、海外の様々なグループと RNA 立体構造予測の精度を競ってきた。本発表では、実際に CASP16 に参加したことで分かった RNA 立体構造予測の現状を紹介する。

日時: 2025年6月11日(水) 14:20~15:20

場所: ペリエホール Room A (JR千葉駅直結)およびWebex会議室

※講演終了後, オンサイトでの交流会を行います。

参加資格: 正会員、学生会員、賛助会員 ※賛助会員(団体) 1口5名まで

参加登録: 必要、参加費:無料 (事前に年会費をお支払ください)

入会および参加登録の情報はホームページで <http://www.mrna-target.org/>
お問い合わせ npo_support@mrna-target.org

※正会員の主催する研究室の学生については特別参加が可能です。詳細はお問い合わせください。



NPO 法人
mRNA ターゲット
創薬研究機構

2025 年度 第 1 回講演会 機械学習および深層学習による RNA 二次構造予測の最新動向

演者 佐藤健吾 博士（東京科学大学 生命理工学院）

要旨

RNA 二次構造予測は、RNA 機能解析において極めて重要な計算課題である。本発表では、動的計画法に基づく古典的アルゴリズム (Nussinov アルゴリズムおよび Zuker モデル) から、近年注目を集めている機械学習・深層学習手法に至るまで、RNA 二次構造予測技術の進展を概観する。特に、確率的文脈自由文法 (SCFG) を用いたモデル構築、最小自由エネルギー (MFE) や最大期待精度 (MEA) といった推論手法の数理的基盤を整理し、それぞれの利点と限界を論じる。また、熱力学的パラメータに基づくモデルと、学習により最適化される機械学習モデルとの比較、過剰適合に対する懸念、ならびに化学プロービングデータ (SHAPE 等) との統合による予測精度向上についても検討する。さらに、最新の深層学習モデルである MXfold2 におけるスコアリング関数の構成、熱力学正則化を含む学習戦略、そして RNA 修飾やシュードノットを含む将来の課題についても展望する。

日時: 2025年6月11日(水) 15:30~16:30

場所: ペリエホール Room A (JR千葉駅直結) およびWebex会議室

※講演終了後, オンサイトでの交流会を行います。

参加資格: 正会員、学生会員、賛助会員 ※賛助会員(団体) 1口5名まで

参加登録: 必要、参加費: 無料 (事前に年会費をお支払ください)

入会および参加登録の情報はホームページで <http://www.mrna-target.org/>
お問い合わせ npo_support@mrna-target.org

※正会員の主催する研究室の学生については特別参加が可能です。詳細はお問い合わせください。