

## 論文内容の要旨

博士論文題目 Prediction of metabolite activities by repetitive clustering of the structural similarity based networks

(構造類似度ネットワークの繰り返しクラスタリングに基づく代謝物の生物活性予測)

氏名 若松 信孝

(論文内容の要旨)

さまざまな分析機器の進歩により、天然物化合物の化学構造決定が比較的容易になり、現在、約 10 万種の代謝物化合物の構造が決定されている。これらのデータを活用しネットワークアルゴリズムの一種である DPCLUS を活用して、各々の化合物における化学構造類似性と定性的活性の間を関係性を解明することを試みた。なお化学構造類似性の尺度には COMPLIG における立体構造を考慮した類似度により各々の化合物間の類似性度を用いた。その結果、FDR などの統計解析により化学構造と活性に有意な関係がある化合物グループを抽出することが可能になった。また活性情報が不明も 945 種についても活性を予測することができた。本研究は、天然物化合物の構造が決定されると、その情報を用いて、活性を予測できるため、新規ドラッグ開発、生物間の化学エコシステムの解明にも役に立つ新規方法と位置づけられる。

氏名	若松 信孝
----	-------

(論文審査結果の要旨)

令和2年6月30日に開催した公聴会の結果を参考に、令和2年8月31日に本博士論文の審査を実施した。

以下に述べる通り、本博士論文は、本学位申請者が情報科学のデータサイエンス分野で研究開発活動を続けていくために必要十分な素養を備えていることを示すものである。

若松 信孝君は、バイオインフォマティクスとして生物と代謝物の関係を考慮したうえで、情報科学的方法を活用しグラフクラスタリングにより代謝物と生物活性の関係づけに成功した。これは化学構造処理にもとづくバイオインフォマティクスである。

よって、本論文は、博士(理学)の学位論文として十分な価値があるものと認める。