

様式 F - 7 - 1

科学研究費助成事業（学術研究助成基金助成金）実施状況報告書（研究実施状況報告書）（平成29年度）

所属研究機関名称		奈良先端科学技術大学院大学	機関番号	14603
研究 代表者	部局	情報科学研究科		
	職	准教授		
	氏名	AMIN MD. ALTAFUL		

1. 研究種目名 基盤研究(C)(一般) 2. 課題番号 17K004063. 研究課題名 A big data approach to function prediction of metabolites by clustering of structural similarity networks4. 補助事業期間 平成29年度～平成31年度

## 5. 研究実績の概要

Under this project, we collected metabolite activity data and structural information of metabolites from KNApSack database and constructed the structural similarity based network of metabolites. Also we developed a network clustering tool called DPPlusOST which we will apply for function prediction of metabolites. Based on the research related to this project, we got the six publications during last one year.

## 6. キーワード

Metabolomics Metabolic Network Metabolite Activity Systems Biology Network Clustering

## 7. 現在までの進捗状況

区分 (2) おおむね順調に進展している。

## 理由

The research is going on according to plan. We completed data collection and initial steps of the work. Also we developed a software tool called DPPlusOST which will be used for function prediction of metabolites. These works resulted in the following publications

I. Nobutaka Wakamatsu, Tsuyoshi Shirai, Ryohei Eguchi, Mohammad Bozlul Karim, Naoaki Ono, Shigehiko Kanaya and Md. Altaf-UI-Amin, "A Network based Approach to Predict Functions of Metabolites", International Conference on Metabolomics, 2018, Bangkok (Poster).

II. Mohammad Bozlul Karim, Nobutaka Wakamatsu and Md. Altaf-UI-Amin, "DPPlusOST: A Software Tool for General Purpose Graph Clustering", Journal of Computer Aided Chemistry, Vol. 18, 76-93,(2017).

2 版

## 8. 今後の研究の推進方策

This year we are conducting experiments and preparing the manuscript of a journal paper titled as follows: "An approach to function prediction of metabolites by clustering the 3D-chemical structural similarity based network". We hope to submit it within next 6 months. After that we will proceed to development of iterative function prediction step and validation of our predictions and eventually will write another journal paper.

## 9. 次年度使用が生じた理由と使用計画

次年度使用額が無いため、記入しない。

## 10. 研究発表（平成29年度の研究成果）

〔雑誌論文〕 計4件（うち査読付論文 0件 / うち国際共著 0件 / うちオープンアクセス 0件）

1. 著者名 Sony Hartono Wijaya, Irmanida Batubara, Takaaki Nishioka, Md. Altaf-Ul-Amin, and Shigehiko Kanaya	4. 巻 36
2. 論文標題 Metabolomic Studies of Indonesian Jamu Medicines: Prediction of Jamu Efficacy and Identification of Important Metabolites	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Molecular Informatics	6. 最初と最後の頁 1-16
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1002/minf.201700050	査読の有無 無
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Eguchi, R., Ono, N., Horai, H., Amin, M. A. U., Hirai, A. M., Kawahara, J., ... & Kanaya, S.	4. 巻 18
2. 論文標題 Classification of Alkaloid Compounds Based on Subring Skeleton (SRS) Profiling: On Finding Relationship of Compounds with Metabolic Pathways	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Journal of Computer Aided Chemistry	6. 最初と最後の頁 58-75
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） <a href="https://doi.org/10.2751/jcac.18.58">https://doi.org/10.2751/jcac.18.58</a>	査読の有無 無
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Mohammad Bozlul Karim, Nobutaka Wakamatsu and Md. Altaf-UI-Amin	4. 巻 18
2. 論文標題 DPCLUSOST: A Software Tool for General Purpose Graph Clustering	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Journal of Computer Aided Chemistry	6. 最初と最後の頁 76-93
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.2751/jcac.18.76	査読の有無 無
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Liu, K., Morita, A. H., Kanaya, S., & Atlaf-UI-Amin, M.	4. 巻 130
2. 論文標題 Metabolite-Content-Guided Prediction of Medicinal/Edible Prop-erties in Plants for Bioprospecting	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Curr Res Complement Altern Med	6. 最初と最後の頁 1-15
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.29011. CRCAM-130/100030	査読の有無 無
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

〔学会発表〕 計2件 (うち招待講演 0件/うち国際学会 2件)

1. 発表者名 Md. Altaf-UI-Amin
2. 発表標題 A Network based Approach to Predict Functions of Metabolites
3. 学会等名 International Conference on Metabolomics, (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Yasue Aoyama
2. 発表標題 Multifaceted analysis of sequence similarity based network of allergens
3. 学会等名 International Conference on Computational Mathematics , Physics and It's Applications (国際学会)
4. 発表年 2018年

【研究代表者・所属研究機関控】

日本学術振興会に紙媒体で提出する必要はありません。

2 版

〔図書〕 計0件

1 1 . 研究成果による産業財産権の出願・取得状況

計0件（うち出願0件 / うち取得0件）

1 2 . 科研費を使用して開催した国際研究集会

計0件

1 3 . 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

-

1 4 . 備考

-