

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30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	先端科学技術研究科		
	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～令和元年度

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 DPCLUSOST which we applied for function prediction of metabolites. It has been proposed that structural similarity between metabolites implies functional similarity between them. In light of this fact we propose a method for function prediction of secondary metabolites based on association philosophy. We are writing a manuscript on this now and will publish by this year. In parallel we have done several other works. Based on the research related to this project, we got five publications during last one year and submitted a paper to IEEE TRANSACTIONS ON Computational Biology and Bioinformatics, which is now under review.

6. キーワード

Metabolomics Metabolic Network Metabolite Activity Systems Biology Network Clustering Big data biology Network clustering Algorithms

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	We developed an algorithm and tool for our project. We performed some extra work on the algorithm by extending it for biclustering and also used it in other research and published the following papers: 1. Mohammad Bozlul Karim ; Shigehiko Kanaya; Md. Altaf-Ul-Amin; " Comparison of BiClus0 with five different biclustering algorithms using biological and Synthetic data ", Proceedings of the 7th International Conference on Complex Networks and Their Applications; December 11-13, 2018, Cambridge, United Kingdom. 2. 1. Eguchi, R., Karim, M. B., Hu, P., Sato, T., Ono, N., Kanaya, S., & Altaf-Ul-Amin, M. (2018). An integrative network-based approach to identify novel disease genes and pathways: a case study in the context of inflammatory bowel disease. BMC bioinformatics, 19(1), 264.

2 版

8. 今後の研究の推進方策

This year we are conducting some more experiments on prediction accuracy assessment. There is possibility that certain activity categories are similar and hence metabolites belonging to those categories are also structurally similar. We will utilize our results to determine function-function relations. Summarizing all findings, we are preparing the manuscript of a journal paper titled as follows: "Function prediction of metabolites by repetitive clustering of the structural similarity based networks". We hope to submit it within next 3 months.

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30年度の研究成果）

〔雑誌論文〕 計5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 Eguchi, R., Karim, M. B., Hu, P., Sato, T., Ono, N., Kanaya, S., & Altaf-UI-Amin, M.	4. 巻 19(1)
2. 論文標題 An integrative network-based approach to identify novel disease genes and pathways: a case study in the context of inflammatory bowel disease	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 BMC bioinformatics	6. 最初と最後の頁 264
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1186/s12859-018-2251-x	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., & Altaf-UI-Amin, M	4. 巻 CRCAM-130
2. 論文標題 Metabolite-Content-Guided Prediction of Medicinal/Edible Properties in Plants for Bioprospecting	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Current Research in Complementary & Alternative Medicine	6. 最初と最後の頁 2577-2201
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.29011/2577-2201/100030	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 -

1. 著者名 Watanabe, Satoshi, K. Y. O. Hoko, K. A. N. G. Liu, Ryohei Eguchi, Md Altaf-UI-Amin, Aki MORITA, Minako OHASHI et al.	4. 巻 15(1)
2. 論文標題 Data Intensive Study of Accessibility of Edible Species and Healthcare Across the Globe	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Japanese Journal of Complementary and Alternative Medicine	6. 最初と最後の頁 37-60
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1625/jcam.15.37	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 3.Antonio, V. A. A., Ono, N., Saito, A., Sato, T., Altaf-UI-Amin, M., & Kanaya, S.	4. 巻 13(12)
2. 論文標題 Classification of lung adenocarcinoma transcriptome subtypes from pathological images using deep convolutional networks	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 International journal of computer assisted radiology and surgery	6. 最初と最後の頁 1905-1913
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1007/s11548-018-1835-2	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 Hossain M. Mofazzal, M. S. A. Gazi, M. Mahbub, A. A. P. Sayed, S. Kanaya and M. Altaf-UI-Amin	4. 巻 7(2)
2. 論文標題 On the determination of important plants for ayurvedic formulas in Bangladesh using unsupervised machine learning approach	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Academia Journal of Medicinal Plants	6. 最初と最後の頁 036-041
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.15413/ajmp.2019.0106	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5件 (うち招待講演 3件 / うち国際学会 0件)

1. 発表者名 Md. Altaf-UI-Amin
2. 発表標題 Applications of KNApSack Database and DPCLus Algorithm: Plants to Metabolites to Target Proteins in the Context of Jamu Medicines and IBD Gene Prediction
3. 学会等名 ICBET 2019, Meiji University, Tokyo (招待講演)
4. 発表年 2019年

2 版

1. 発表者名 Md. Altaf-UI-Amin
2. 発表標題 Introduction to Big Data Science Focusing Health Care and Ecology: A Case Study based on Indonesian Traditional Medicines
3. 学会等名 Big data: Linking Ecosystem, health and wellbeing, BUET, Dhaka, Bangladesh (招待講演)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Md. Altaf-UI-Amin
2. 発表標題 Data-Intensive Science of Jamu Medicines
3. 学会等名 Universidade Federal de São Paulo, Brazil (招待講演)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Mohammand Bozlul Karim
2. 発表標題 Comparison of BiClus0 with five different biclustering algorithms using biological and Synthetic data
3. 学会等名 7th International Conference on Complex Networks and Their Applications, Cambridge, UK
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Shaikh Farhad Hossain
2. 発表標題 Prediction of Plant-Disease Relations Based on Unani Formulas by Network Analysis
3. 学会等名 18th IEEE International Conference on BioInformatics and BioEngineering, Taichung, Taiwan
4. 発表年 2018年

〔図書〕 計2件

1. 著者名 Azian Azamimi Abdullah, Md. Altaf-Ul-Amin, and Shigehiko Kanaya	4. 発行年 2018年
2. 出版社 Apple Academic Press	5. 総ページ数 20
3. 書名 Volatile Organic Compound Analysis in Biomedical Diagnosis Applications(Chapter 9)	
1. 著者名 Altaf-Ul-Amin, M., Mohamed-Hussein, Z.-A., & Kanaya, S	4. 発行年 2018年
2. 出版社 Elsevier	5. 総ページ数 16
3. 書名 Investigating Metabolic Pathways and Networks, In the book: Reference Module in Life Sciences	

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

-