

様式 F - 7 - 2

## 科学研究費助成事業（学術研究助成基金助成金）実績報告書（研究実績報告書）

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	A MIN MD . A L T A F U L	

1. 研究種目名 基盤研究(C) (一般) 2. 課題番号 17K00406

3. 研究課題名 A big data approach to function prediction of metabolites by clustering of structural similarity networks

4. 補助事業期間 平成29年度～令和元年度

## 5. 研究実績の概要

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 DPClusterSBO which we applied for function prediction of metabolites. Structural similarity between metabolites implies functional similarity between them. In light of this fact we propose a method for function prediction of secondary metabolites and published a paper. Also, we have done several other works utilizing the tool DPClusterSBO. Based on the research related to this project, we got several publications during last year in good journals including IEEE TRANSACTIONS ON Computational Biology and Bioinformatics, BMC medical genomics, Applied Network Science etc.

## 6. キーワード

Metabolomics Metabolic Network Metabolite Activity Systems Biology Network Clustering Algorithms

## 7. 研究発表

〔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 Mohammad Bozlul Karim, Ming Huang, Naoaki ONO, Shigehiko Kanaya, Md. Altaf-Ul Amin	4. 卷 2019
2. 論文標題 BiClus0: A novel biclustering approach and its application to species-VOC relationship data	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 IEEE/ACM transactions on computational biology and bioinformatics	6. 最初と最後の頁 1-12
掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子) DOI 10.1109/TCBB.2019.2914901	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, Shigehiko Kanaya, Md. Altaf-Ui-Amin	4.巻 4(1)
2.論文標題 Implementation of BiClus0 and its comparison with other biclustering algorithms	5.発行年 2019年
3.雑誌名 Applied Network Science	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) s41109-019-0180-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 Altaf-Ui-Amin, M., Karim, M. B., Hu, P., Naoaki, O. N. O., & Kanaya, S.	4.巻 13(3)
2.論文標題 Discovery of inflammatory bowel disease-associated miRNAs using a novel bipartite clustering approach	5.発行年 2020年
3.雑誌名 BMC Medical Genomics	6.最初と最後の頁 1-10
掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子) <a href="https://doi.org/10.1186/s12920-020-0660-y">https://doi.org/10.1186/s12920-020-0660-y</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 Afiqah-Aleng, N., Altaf-Ui-Amin, M., Kanaya, S., & Mohamed-Hussein, Z. A.	4.巻 40(2)
2.論文標題 Graph cluster approach in identifying novel proteins and significant pathways involved in polycystic ovary syndrome	5.発行年 2020年
3.雑誌名 Reproductive biomedicine online	6.最初と最後の頁 319-330
掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子) <a href="https://doi.org/10.1016/j.rbmo.2019.11.012">https://doi.org/10.1016/j.rbmo.2019.11.012</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 Wakamatsu, N., Huang, M., Ono, N., Altaf-Ui-Amin, M., & Kanaya, S.	4.巻 20
2.論文標題 Prediction of Metabolite Activities by Repetitive Clustering of the Structural Similarity Based Networks	5.発行年 2019年
3.雑誌名 Journal of Computer Aided Chemistry	6.最初と最後の頁 76-83
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.20.76">https://doi.org/10.2751/jcac.20.76</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 -

[学会発表] 計5件 (うち招待講演 2件 / うち国際学会 3件)

1. 発表者名

Md. Altaf-UI-Amin

2. 発表標題

Inter Disease Relations Based on Human Biomarkers by Network Analysis

3. 学会等名

IEEE 19th International Conference on Bioinformatics and Bioengineering (BIBE) (国際学会)

4. 発表年

2019年

1. 発表者名

Md. Altaf-UI-Amin

2. 発表標題

Discovery of inflammatory bowel disease-associated miRNAs using a novel bipartite clustering approach

3. 学会等名

International Conference on Genome Informatics (GIW 2019) (国際学会)

4. 発表年

2019年

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

Asian Regional Conference on Systems Biology (国際学会)

4. 発表年

2020年

1. 発表者名

Md. Altaf-UI-Amin

2. 発表標題

Development of an Integrated System for Clustering of Simple and Bipartite Graphs and its Application to Different Types of Biological Data

3. 学会等名

University of Manitoba, Canada (招待講演)

4. 発表年

2019年

## 1. 発表者名

Md. Altaf-UI-Amin

## 2. 発表標題

Novel Method and Tool for Clustering of Simple and Bipartite Graphs: Applications in Ecology and Identification of Inflammatory Bowel Disease(IBD) Related Genes and miRNAs

## 3. 学会等名

University of south Australia, Adelaide (招待講演)

## 4. 発表年

2020年

## 〔図書〕 計2件

1. 著者名 Altaf-UI-Amin, M., & Kanaya, S.	4. 発行年 2020年
2. 出版社 Elsevier	5. 総ページ数 33
3. 書名 Applications of Network Clustering in Natural Product Research, In book: Reference Module in Chemistry, Molecular Sciences and Chemical Engineering	

1. 著者名 Kanaya, S., Altaf-UI-Amin, M., Aki, M. H., Huang, M., & Ono, N.	4. 発行年 2020年
2. 出版社 Elsevier	5. 総ページ数 16
3. 書名 Databases for Natural Product Research, In book: Reference Module in Chemistry, Molecular Sciences and Chemical Engineering	

## 8. 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）

## 9. 科研費を使用して開催した国際研究集会

計0件

## 10. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

-

11. 備考

DPClus0 & BiClus0 (DPClusSB01.1)  
[http://www.knapsackfamily.com/GRAFH\\_CLUSTERING/](http://www.knapsackfamily.com/GRAFH_CLUSTERING/)