

# ニューラルネットワークと行列因子分解の組み合わせによる 薬剤-標的相互作用予測

中嶋 悠介<sup>1,3,a)</sup> 安尾 信明<sup>3</sup> 関嶋 政和<sup>2,3</sup>

概要：薬剤-標的相互作用予測を行う手法として、推薦システムなどにも広く用いられている行列因子分解などが提案されている。薬剤とタンパク質の相互作用を予測することは薬剤候補化合物を探索するだけでなく、オフターゲット予測やドラッグリポジショニングを行う上で重要である。これまで、単純な行列因子分解モデルではタンパク質や化合物についての特徴量が全く用いられておらず、この点を改善することによってより高精度に予測がおこなえと考えられる。本研究では推薦システムの分野で提案されたニューラルネットワークと行列因子分解を組み合わせたモデルを導入し、化合物についての特徴量を予測モデルに導入することによって予測精度の改善を図った。

## Drug-target interaction prediction using matrix factorization and neural network

NAKASHIMA YUSUKE<sup>1,3,a)</sup> YASUO NOBUAKI<sup>3</sup> SEKIJIMA MASAKAZU<sup>2,3</sup>

---

<sup>1</sup> 東京工業大学 大学院情報理工学研究科  
Department of Computer Science, Tokyo Institute of Technology

<sup>2</sup> 東京工業大学 科学技術創成研究院  
Advanced Computational Drug Discovery Unit, Tokyo Institute of Technology

<sup>3</sup> 東京工業大学 情報理工学院  
Department of Computer Science, Tokyo Institute of Technology

a) nakashima@bi.c.titech.ac.jp