

## 中央大学特定課題研究費 ー研究報告書ー

所属	理工学部	身分	教授
氏名	田口善弘		
NAME	Yoshihiro Taguchi		

中央大学特定課題研究費による研究期間終了に伴い、中央大学学内研究費助成規程第15条に基づき、下記の通りご報告致します。

## 1. 研究課題

(和文) テンソル分解を用いた教師なし学習による変数選択のインシリコ創薬への応用

(英文) Unsupervised learning of variable selection using tensor decomposition for in silico drug discovery.

## 2. 研究期間

2023年度 ~ 2024年度

## 3. 研究の概要 (背景・目的・研究計画・内容および成果 和文 600字程度、英文 50word程度)

(和文) 申請者はテンソル分解を用いた教師無し学習による変数選択法 (以下、提案手法) を5年前に、また、その前身となる主成分分析を用いた教師無し学習による変数選択法 (以下、前手法) を10年前にそれぞれ提案し、バイオマーカー探索、疾患原因遺伝子の同定、インシリコ創薬などの分野に応用して、数十本の学術論文の刊行、国際的な学術出版社であるシュプリンガー社よりの英文単著の刊行 (ハードカバー、300ページ) を2019年に、同共編書 (ハードカバー、200ページ) を2022年にそれぞれ刊行するなど、活発な研究を行ってきた。この中で2020年には同法を用いたコロナウィルスのインシリコ創薬の論文を刊行した。この論文は、刊行以来、2年足らずの間に7000回以上アクセスされ、20回以上引用されると共に、内外で大きく取り上げられた。本研究計画ではこの手法を発展させ、一般的なインシリコ創薬パイプラインに発展させることを目的とする。

(英文) The applicant proposed an unsupervised learning-based variable selection method using tensor decomposition (hereinafter referred to as the proposed method) five years ago and its predecessor, an unsupervised learning-based variable selection method using principal component analysis (hereinafter referred to as the predecessor method), ten years ago, and has applied the method to fields such as biomarker search, identification of disease-causing genes and in silico drug discovery. The method has been applied to the fields of biomarker search, identification of disease-causing genes, in silico drug discovery, etc., and active research has been conducted, including the publication of dozens of academic papers and the publication of an English-language single-authored book (hardback, 300 pages) by Springer, an international academic publisher, in 2019 and a co-authored book (hardcover, 200 pages) in 2022, respectively. In this context, a paper on in silico drug discovery for coronaviruses using the same method was published in 2020.