

# Graph PLSによる薬の候補探索

~マルチラベル学習におけるグラフマイニング~

	Label <sub>1</sub>	Label <sub>2</sub>	Label <sub>3</sub>	Label <sub>4</sub>
Graph <sub>1</sub>	3	0	0	0
Graph <sub>2</sub>	0	4	0	1
Graph <sub>3</sub>	1	0	1	0

- ❖ グラフマイニングで分類や回帰に適した有益なパターンを収集したい。
- ❖ 複数のラベルを持つグラフデータに対して、既存の手法では各ターゲットに対してそれぞれの部分グラフパターンを収集する必要があり、非効率である。
- ❖ 本手法では自動的に少数の固有ベクトルに対応する部分グラフパターンを収集する。
- ❖ 人工データ及び実データに基づいて、大規模な計算機実験でその有効性を検証した。