

令和 3 年 6 月 11 日現在

機関番号：10101

研究種目：挑戦的研究（萌芽）

研究期間：2017～2020

課題番号：17K19953

研究課題名（和文）材料科学におけるデータ駆動型探索技術の確立

研究課題名（英文）Practical data-intensive approaches to materials sciences

研究代表者

瀧川 一学（Takigawa, Ichigaku）

北海道大学・化学反応創成研究拠点・特任准教授

研究者番号：10374597

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 4,400,000円

研究成果の概要（和文）：本課題では、主として反応物の存在する気体や液体と接して触媒作用を示す固体触媒の探索と設計を対象に、実験やシミュレーションにより生成されるデータに基づく機械学習を活用するための枠組みとベストプラクティスの確立を目的とした。固体触媒の組成データについて実際に予測性能の向上に寄与する入力表現法の開発、アンサンブル学習によるばらつきの大きな訓練データからの予測モデルの確立、文献データなど実験や計算に伴う人間由来の強いバイアスを考慮した上で、探索済み空間の精緻化探索と未探索空間の検査・探索のバランスを両立した逐次実験計画を提案することができた。

研究成果の学術的意義や社会的意義

産業や社会で求められる新物質・新材料の探索プロセスでは、個々の候補材料の物性は実験や電子状態計算によって個別に調べられてきた。こうした探索は候補の選別に経験と勘が必要となる上、時間や手間の面で高コストである。近年求められる候補材料がますます複雑化し材料探索が困難になり、この試行錯誤プロセスを合理化・効率化するため、機械学習などのデータ科学への期待はますます高まっている。本研究で確立した機械学習活用の枠組みやベストプラクティスは工業合成や排ガス浄化など産業上も非常に重要となる不均一触媒の設計や探索のデータに基づく効率化に寄与するものである。

研究成果の概要（英文）：This study focused on developing the framework and best practices of machine learning for materials sciences, in particular, the design and discovery of heterogeneous catalysts for gas-phase reactions such as oxidative coupling of methane. We developed an effective input representation of catalysts composition data that could practically improve the prediction performance of machine learning models, the practices of applying ensemble models to handle inconsistent training datasets from the literature, and the sequential experimental design by model-based optimization to consider the exploration-exploitation tradeoff.

研究分野：機械学習

キーワード：機械学習 不均一系触媒 固体触媒

様式 C - 19、F - 19 - 1、Z - 19 (共通)

1. 研究開始当初の背景

(1) 産業や社会で求められる新物質・新材料の探索プロセスでは、個々の候補材料の物性は実験や電子状態計算によって個別に調べられてきた。こうした探索は候補の選別に経験と勘が必要となる上、時間や手間の面で高コストである。近年求められる候補材料がますます複雑化し材料探索が困難になり、この試行錯誤プロセスを合理化・効率化する新たな方法論が求められている。

(2) 特に、機械学習を基盤とするデータ科学への期待は大きく、今までのように経験と勘と根性で闇雲に調べるのではなく、現在までに得られたデータに基づいて論理的かつ網羅的に候補物質を絞り込み、それについてのみ実験による確認や計算を行えば良いような、効率的な材料開発の決め手として期待されている。

(3) もともと日本の職人的お家芸であったはずの材料開発の分野において、先んじてデータ駆動型アプローチを導入し、効率的に新材料開発を推し進めようとする欧米に圧される形で、リアルタイムインフォマティクスの取組みが国を挙げて様々な形で始まっている。特に米国オバマ政権が 2011 年に打ち立てたマテリアルズ・ゲノム・イニシアティブ(MGI)の取組みの中、2012 年 10 月に発表された MIT とサムソンの共同研究による成果はわが国に驚きと脅威を与えるものであった。それは、リチウムイオン電池に関する短期間の共同研究の成果として、加熱や発火の恐れのある従来の液体の電解質に代わり、安全かつ長寿命の固体電解質を開発したというものであった。しかし、まさにこれはトヨタと東工大のグループが何十年に渡って取り組み 2011 月にようやく特許出願(2012 年 11 月公開)したばかりの物質と同じものであった。欧米中韓はこうした取組みをますます加速化させており、遅れることなくデータ駆動型研究のリソースと技術基盤を確立せねば、日本の材料開発の優位性が脅かされかねないことは共通の認識となっている。

(4) このような喫緊の危機意識と期待にも関わらず、新たな専門分野の知識習得や異分野参入のリスクを伴う参入障壁の高さから、こうした境界領域に参画できる機械学習研究者は非常に限られるのが現状である。

2. 研究の目的

(1) 本課題では、現在までに得られたデータに基づいて合理的、効率的、かつ、網羅的に候補物質を絞り込むデータ駆動型の帰納的な探索技術の確立を目指す。特に、時間のかかる精密な電子状態計算や実験を伴わず、機械学習に基づいて超高速な物性予測を行うための枠組みとベストプラクティスの体系化を目標とする。

(2) 具体的な対象として、連携研究者から得られる実データに基づき、固体触媒の小分子吸着能や触媒活性を予測するモデル構築に取り組み、新触媒の発見を支援するためのデータ科学的技術基盤の構築を行う。

(3) 機械学習技術は現在 ICT 分野を中心に様々な実用投入が急速に進められており、代表的な手法群は様々なオープンソースソフトウェアとして、比較的容易に利用できるようになっている。しかし、現在の機械学習のフォーカスは Google のような特殊業態企業向けの技術や、画像認識・音声認識など人間が無意識に可能なタスクを機械で模倣する技術に集中しており、いずれも科学研究で必要となる技術と力点がかなり異なる。そのため、機械学習研究者の参画が必須であり、専門的知見から効果的・体系的な技術基盤の確立を目指す。

3. 研究の方法

(1) 本課題計画時の研究方法は下記の 3 つであった。

組成データを伴う情報統合モデルの構成

多元系材料における各元素の配合比率など、百分率(%)表記されるデータは組成データ(compositional data)と呼ばれ、通常の数値のような統計処理が施せないことが古くから知られている。こうした定数和制約を持つ組成データを適切に扱うことに加え、組成を構成する各要素(元素)に関する記述子を統合的に利用できる機械学習法を開発する。

アンサンブル・ランダムイズによる機械学習予測の安定化とメタ特徴の構成

材料科学のデータは非常に手間や時間のかかる計算や実験によって得られたものであり、機械学習の観点では小サンプルデータに当たる。こうした条件下では機械学習の予測出力の分散が過剰に大きくなるため、Bagging 法などのアンサンブル学習、高次ランダム射影

型の学習、Stacking などのメタ特徴の付与により安定的予測を得る枠組みを開発する。

ハイパーパラメタ最適化法の実践的活用

高度な機械学習アルゴリズムにはチューニングパラメタが複数存在し、信頼性のある予測を実現するためにはこの最適化が鍵となる。単純な全探索には多大な計算コストが必要となるため、近年提案されているベイズ最適化や木型パルツェン推定などの手法に基づき、このハイパーパラメタ最適化も含めた包括的な技術基盤の実現を目指す。

4. 研究成果

(1) 「組成データを伴う情報統合モデルの構成」の課題については、計画時より北海道大学触媒科学研究所の清水研一教授、高草木 達准教授、鳥屋尾 隆助教らとの共同研究として、反応物の存在する気体や液体と接して触媒作用を示す固体触媒の探索と設計を対象に実験データ・計算データの両面から研究を行った。このように異なる相で触媒作用を示す触媒を不均一系触媒と良い、特にメタンの酸化カップリング反応や水性ガスシフト反応など気相反応に対し優れた性能を示す触媒の探索と設計を具体的な対象とした。

(2) 固体触媒は主に複数の元素からなり、主たる元素に少量の他の元素を混合することで良い触媒性能が探索されている。そのためどの元素が何割混合されているかという組成情報は主となる変数であり、この組成情報に対してどのような入力表現・モデル表現を構築するかが技術上の主関心であった。元素 A が 70%、B が 20%、C が 10% 含まれるとすると、A, B, C の割合を並べた (70, 20, 10) を入力変数としてデータ解析にかけられることが多い。しかし、元素として主にアルカリ金属(周期表 1 族)、アルカリ土類金属(2 族)、遷移金属(3 族~11 族)が使われ、種類が 60 種類以上と多く、このような表現にすると非常に多次元のベクトル変数になってしまうこと、また実際はそのうち高々 4-5 元素までしか使われないため非常にスパースな変数となってしまいう問題が明らかとなった。

(3) 当初計画通り、統計学における組成データ (compositional data) を扱う上で基礎となる Aitchison 幾何を考慮した入力表現を用いて、2010 年までの文献データから収集されたメタン酸化カップリング反応の 1868 件の触媒データ (Baerns et al) に対して機械学習予測の評価を行った。しかし、データが非常に高次元であることにより定数和制約に対する手法である Aitchison 幾何は実際の予測精度の向上にほとんど寄与が見られなかった。また行列分解などによる潜在表現への分解も多角的に検討を行ったが予測精度向上にはつながらなかった。

(4) 様々な検討の後、実際に安定的に予測精度の向上が見込める元素組成の入力表現として Sorted Weighted Elemental Descriptor (SWED) 表現を開発した。主たるアイデアとしては、まず、 $(A, B, C, D, E) = (70, 0, 20, 10, 0)$ のような組成表現では元素ごとの特性が反映されないため、個々の元素自体を電気陰性度、密度、イオン化エネルギーなどの複数の値からなる「元素特徴量」で表現し、その混合組成の表現に使うというものである。検討の結果、組成比の大きい元素から順番にこの元素特徴量にその組成比を掛けた値を並べた表現が予測精度向上に寄与することが分かり、これを用いてメタン酸化カップリング反応データの予測や触媒の傾向分析を行った。一方、分析の結果、文献データは、使われる元素の頻度の大きな偏りがある、同一・類似の触媒に対する報告値に大きなばらつきがある、など、様々な選択バイアスを含むことも顕著になった。これらは化学実験が人間の活動の成果であることに起因したものであり、自然の法則性とは異なる人為的バイアスであるが、本質的に避けがたいものである。そこで、現在のデータには強いバイアスがある仮定のもとで、現在のデータから高い確度で予測される触媒組成だけではなく、まだデータが取られていない未知の触媒組成の探索も考慮し、これらのトレードオフを考えた触媒探索を逐次モデルベース最適化の枠組みで定式化し、現在利用できるデータから次に検証すれば大きい情報が得られる見込みの高い触媒候補を同定した。この問題は、当初計画で検証していたハイパーパラメタの探索手法と同様の問題であり、また、当初計画で検証したアンサンブル学習を用いることで教師値に大きなばらつきがある状況での予測の安定化を実現し、技術検討を行っていた の知見を活かすことができた。これらの結果は当該分野の専門誌 ChemCatChem で論文報告(文献 1)を行い、Front Cover 論文に採択された。

(5) 一連の研究において、機械学習の専門家である研究代表者も触媒科学の専門家である共同研究者たちも曖昧なままであった機械学習活用について様々な点で一定の理解を得ることができた。特に、機械学習を実用する上での多種多様な落とし穴と、データ駆動型予測の実効性を伴う利活用の難しさである。機械学習は基本的に学習データの傾向を代表するよう訓練され、その傾向を用いて予測を行うものである。しかし、材料科学における主目的は今までのデータが正確に予測できることではなく「今までのデータを超越する」対象について何らかの示唆を得ることである。これは機械学習の通常の用途を超越するものであり、適用範囲を逸脱している。材料探索や材料設計に機械学習を用いる際のスタートはこの点を強く認識した上で、どのように機械学習を活用するか、どのようにしてどのようなデータを取るかを計画することである。実際にはデー

夕に反映できない様々な因子が存在し、これらは機械学習に入力される情報に対する交絡因子となるため、意図しない形で私たちの理解をミスリードしうる。したがって、改めてデータ駆動形の成功の鍵は手法の正確・適切な設計・運用とともに、心臓部であるデータそのものを実験や計算から生成する際に「どのような対象を選ぶか」という実験計画にある。確立した逐次モデルベース最適化による逐次実験計画はこれを補助する役割を果たすが同時に見過ごされうるバイアスが存在するため、計算・実験を複数併用した多角的な方法による因果検証が必要である。

(6) 以上のような分析は 2010 年までの文献データから収集されたメタン酸化カップリング反応の 1868 件の触媒データ(Baerns et al)に基づいていたが、その後 10 年の間で不均一系触媒研究のトレンドも大きく変化している。そこで、この 1868 件の既存データに対して 2010-2020 年の文献データを調査・追加し 4759 件にまで拡充した。このようにして得た 4759 件のデータに対して、新規分のデータの傾向の分析や、データ全体を用いたメタン酸化カップリング反応の触媒の再分析および候補探索を行った。データを拡充することで新たなトレンドも反映することができクロスバリデーションによる予測評価上も予測性能を改善することができた。また、SWED 表現で用いる元素記述子を精査し、選択的に限定することで、以前の手法では訓練データからの微改善によるかなり保守的な予測にとどまっていた問題を解消し、一つの選択肢として、より広い候補探索を行う新規手法も確立した。同時に全データで学習したモデルについて SHAP 法や部分依存度プロットによってどのような傾向が学習されたのかに関する情報を定量的に抽出できることを示した。このような一連の解析と併せて、こうした触媒組成データの一つのベストプラクティスを広く示すことができた。結果は論文にまとめ論文誌に投稿を行った。

(7) 計算データについては、本研究課題の計画の契機でもあり、本課題の北海道大学触媒科学研究所との共同研究のスタートでもあった文献 2 で二元金属の d-band center の値が、計算せずに周期表から得られる元素記述子から簡単に機械学習で予測できるという報告をきっかけに、より実際の触媒性能を規定する量である分子の吸着エネルギーの予測の研究を行った(文献 3)。これにより、計算の場合でもどのようにデータを取るかの実験計画や入力データの質やカバー範囲の問題の影響が大きいくことが明らかになり、計算データ・実験データに共通して起こり得る様々な実際上の問題や落とし穴を整理することができた。こうした理解は、本課題実施中にマテリアルズインフォマティクスが大きく広がっていき注目を浴びる中で、触媒研究における広範な事例サーバイと機械学習を用いた実践について総説として発表し、分野の筆頭誌の一つである ACS Catalysis(文献 4)をはじめ、Book Chapter(文献 5,6)や和誌総説(文献 7-9)として報告することができた。

<引用文献>

- 1 Suzuki K, Toyao T, Maeno Z, Takakusagi S, Shimizu K, Takigawa I, Statistical analysis and discovery of heterogeneous catalysts based on machine learning from diverse published data. *ChemCatChem*. 2019; 11(18): 4537-4547.
- 2 Takigawa I, Shimizu K, Tsuda K, Takakusagi S, Machine-learning prediction of d-band center for metals and bimetals. *RSC Advances*. 2016; 6: 52587-52595. highlighted in the article "Machine-learning accelerates catalytic trend spotting" (*Chemistry World*)
- 3 Toyao T, Suzuki K, Kikuchi S, Takakusagi S, Shimizu K, Takigawa I, Toward effective utilization of methane: machine learning prediction of adsorption energies on metal alloys. *The Journal of Physical Chemistry C*. 2018; 122(15): 8315-8326.
- 4 Toyao T, Maeno Z, Takakusagi S, Kamachi T, Takigawa I*, Shimizu K*, Machine learning for catalysis informatics: Recent applications and prospects. *ACS Catalysis*. 2020; 10: 2260-2297.
- 5 Toyao T, Takigawa I, Shimizu K, Machine learning predictions of adsorption energies of CH₄-related species. *Direct Hydroxylation of Methane*. 2020;135-149
- 6 Takigawa I, Shimizu K, Tsuda K, Takakusagi S, Machine learning predictions of factors affecting the activity of heterogeneous metal catalysts. *Nanoinformatics*. 2018;45-64
- 7 鳥屋尾 隆・清水研一・瀧川一学, 機械学習・計算化学を併用した固体触媒研究, 分離技術, Vol 50, No 1, 2020; 31-36.
- 8 鳥屋尾 隆・清水研一・瀧川一学, 触媒インフォマティクスの動向, 科学と工業, Vol 94, No 7, 2020; 182-187.
9. 瀧川一学, 触媒研究における機械学習と最適実験計画, 電気化学, Vol 88, No 1, 2020.

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計14件（うち査読付論文 10件 / うち国際共著 0件 / うちオープンアクセス 1件）

1. 著者名 Liu C, Li Y, Takao M, Toyao T, Kamachi T, Hinuma Y, Takigawa I, Shimizu K.	4. 巻 124(28)
2. 論文標題 Frontier molecular orbital based analysis of solid-adsorbate interactions over group 13 metal oxide surfaces	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry C	6. 最初と最後の頁 15355-15365
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcc.0c04480	査読の有無 有
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 鳥屋尾 隆・清水研一・瀧川一学	4. 巻 94(7)
2. 論文標題 触媒インフォマティクスの動向	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 科学と工業	6. 最初と最後の頁 182-187
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) なし	査読の有無 有
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 Toyao T, Takigawa I, Shimizu K	4. 巻 in book
2. 論文標題 Machine learning predictions of adsorption energies of CH ₄ -related species.	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Direct Hydroxylation of Methane. Springer, Singapore	6. 最初と最後の頁 135-149
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1007/978-981-15-6986-9_7	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 Toyao Takashi, Maeno Zen, Takakusagi Satoru, Kamachi Takashi, Takigawa Ichigaku, Shimizu Ken-ichi	4. 巻 10
2. 論文標題 Machine Learning for Catalysis Informatics: Recent Applications and Prospects	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 ACS Catalysis	6. 最初と最後の頁 2260 ~ 2297
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acscatal.9b04186	査読の有無 有
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 Suzuki Keisuke, Toyao Takashi, Maeno Zen, Takakusagi Satoru, Shimizu Ken ichi, Takigawa Ichigaku	4. 巻 11
2. 論文標題 Statistical Analysis and Discovery of Heterogeneous Catalysts Based on Machine Learning from Diverse Published Data	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 ChemCatChem	6. 最初と最後の頁 4537 ~ 4547
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/cctc.201900971	査読の有無 有
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 Kamachi Takashi, Tatsumi Toshinobu, Toyao Takashi, Hinuma Yoyo, Maeno Zen, Takakusagi Satoru, Furukawa Shinya, Takigawa Ichigaku, Shimizu Ken-ichi	4. 巻 123
2. 論文標題 Linear Correlations between Adsorption Energies and HOMO Levels for the Adsorption of Small Molecules on TiO ₂ Surfaces	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry C	6. 最初と最後の頁 20988 ~ 20997
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcc.9b05707	査読の有無 有
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 瀧川一学	4. 巻 88
2. 論文標題 触媒研究における機械学習と最適実験計画	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 電気化学	6. 最初と最後の頁 14 ~ 20
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.5796/denkikagaku.20-FE0004	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 Hinuma Yoyo, Toyao Takashi, Kamachi Takashi, Maeno Zen, Takakusagi Satoru, Furukawa Shinya, Takigawa Ichigaku, Shimizu Ken-ichi	4. 巻 122
2. 論文標題 Density Functional Theory Calculations of Oxygen Vacancy Formation and Subsequent Molecular Adsorption on Oxide Surfaces	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry C	6. 最初と最後の頁 29435 ~ 29444
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcc.8b11279	査読の有無 有
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 Toyao T, Suzuki K, Kikuchi S, Takakusagi S, Shimizu K, Takigawa I	4. 巻 122 (15)
2. 論文標題 Toward effective utilization of methane: machine learning prediction of adsorption energies on metal alloys	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry C	6. 最初と最後の頁 8315-8326
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcc.7b12670	査読の有無 有
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 Takigawa I, Shimizu K, Tsuda K, Takakusagi S	4. 巻 1
2. 論文標題 Machine Learning Predictions of Factors Affecting the Activity of Heterogeneous Metal Catalysts	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Nanoinformatics	6. 最初と最後の頁 45-64
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1007/978-981-10-7617-6_3	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 Pham T L, Kino H, Terakura K, Miyake T, Tsuda K, Takigawa I, Dam H C	4. 巻 18(1)
2. 論文標題 Machine learning reveals orbital interaction in materials	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Science and Technology of Advanced Materials	6. 最初と最後の頁 756-765
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1080/14686996.2017.1378060	査読の有無 有
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48件 (うち招待講演 21件 / うち国際学会 9件)

1. 発表者名 Kikuchi S, Takigawa I, Oyama S, Kurihara M
2. 発表標題 Learning relevant molecular representations via self-attentive graph neural networks
3. 学会等名 Workshop on Deep Graph Learning: Methodologies and Applications (DGLMA'19), IEEE BigData'19 Workshop (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Harada S, Akita H, Tsubaki M, Baba Y, Takigawa I, Yamanishi Y, Kashima H
2. 発表標題 Dual graph convolutional neural network for predicting chemical networks
3. 学会等名 Joint 30th International Conference on Genome Informatics (GIW) and Australian Bioinformatics and Computational Biology Society (ABACBS) Annual Conference (GIW/ABACBS 2019) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Takigawa I
2. 発表標題 The interplay between data-driven and theory-driven methods for chemical sciences
3. 学会等名 The 1st International Symposium on Human InformatiX (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Takigawa I
2. 発表標題 Machine Learning and Model-based Optimization for Heterogeneous Catalyst Design and Discovery,
3. 学会等名 The 2nd ICRReDD International Symposium - Toward Interdisciplinary Research Guided by Theory and Calculation (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 松田 祐汰・瀧川一学・有村博紀
2. 発表標題 ランダム分割木に基づく勾配ブースティングの検証
3. 学会等名 第22回情報論的学習理論ワークショップ (IBIS 2019)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 高尾基史・鳥屋尾 隆・前野禅・高草木 達・瀧川一学・清水研一
2. 発表標題 機械学習によるメタン酸化カップリング反応に有効な触媒探索
3. 学会等名 第42回ケモインフォマティクス討論会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 菊地翔馬・栗原正仁・小山聡・瀧川一学
2. 発表標題 化学情報の適応的選択によるグラフ畳み込み学習の解釈性の向上
3. 学会等名 情報処理学会北海道シンポジウム2019
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 守屋勇樹・田畑剛・岩崎未央・河野信・五斗進・石濱 泰・瀧川一学・吉沢明康
2. 発表標題 深層学習に基づくペプチド由来イオンピークの新規検出手法
3. 学会等名 第67回質量分析総合討論会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 瀧川一学
2. 発表標題 不均一系触媒研究のための機械学習と最適実験計画
3. 学会等名 第80回応用物理学会秋季学術講演会 シンポジウム(招待講演)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 瀧川一学
2. 発表標題 化学研究のための機械学習と最適実験計画
3. 学会等名 物性研究所スパコン共同利用・CCMS合同研究会「計算物質科学の新展開」(招待講演)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 瀧川一学
2. 発表標題 分子のグラフ表現と機械学習
3. 学会等名 有機合成化学協会, 「AIと有機合成化学」第三回勉強会(招待講演)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 瀧川一学
2. 発表標題 機械学習は真の理解や発見に寄与できるか
3. 学会等名 第35回関東CAE懇話会, AI・IoT時代のデータ利活用による理解と発見(招待講演)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 瀧川一学
2. 発表標題 機械学習による化学反応の予測と設計
3. 学会等名 情報系 Winter Festa Episode 5
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 瀧川一学
2. 発表標題 機械学習による化学反応の予測と設計
3. 学会等名 近畿化学協会コンピュータ化学部会 公開講演会（第107回例会）（招待講演）
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 瀧川一学
2. 発表標題 機械学習は真の発見に寄与できるのか？
3. 学会等名 MI21・JAIST合同シンポジウム（（情報統合型物質・材料開発イニシアティブ・北陸先端科学技術大学院大学）データ科学における予測と理解の両立を目指して - 分かるとは何か？ - （招待講演）
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 瀧川一学
2. 発表標題 分子のグラフ表現と機械学習
3. 学会等名 第79回応用物理学会特別シンポジウム：インフォマティクスへの招待～機械学習・インフォマティクスは応用物理をどう変えるか？～（招待講演）
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 瀧川一学
2. 発表標題 データ駆動科学と機械学習
3. 学会等名 第2回データサイエンス研究会，岐阜大学（招待講演）
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Takigawa I.
2. 発表標題 Machine learning for chemical sciences.
3. 学会等名 2018 International Workshop on New Frontiers in Convergence Science and Technology, HU-SNU Joint Symposium, (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Takigawa I.
2. 発表標題 Machine learning and surrogate optimization on heterogeneous catalysts.
3. 学会等名 PRESTO International Symposium on Materials Informatics - Learn the Data, to Bridge the Intelligence into the Future - (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 鳥屋尾隆, 高草木達, 瀧川一学, 清水研一
2. 発表標題 メタンの有効利用を目的とした機械学習による吸着エネルギー予測
3. 学会等名 触媒討論会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 菊地翔馬・瀧川一学
2. 発表標題 入力表現の適応的選択を伴うグラフ畳み込みネットワーク学習
3. 学会等名 情報処理学会 第81回全国大会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 中野 裕太・瀧川一学
2. 発表標題 化学反応ネットワークにおける最適反応経路候補の列挙
3. 学会等名 情報処理学会 第122回数理モデル化と問題解決(MPS)研究発表会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 守屋勇樹・田畑 剛・岩崎未央・河野 信・五斗 進・石濱 泰・瀧川一学・吉沢明康
2. 発表標題 機械学習に基づくペプチド由来イオンピークの新規検出手法
3. 学会等名 第21回情報論的学習理論ワークショップ(IBIS 2018)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 小林正人・原淵 祐・堤 拓朗・小野ゆり子・瀧川一学・武次徹也
2. 発表標題 機械学習を利用した第一原理MDトラジェクトリの自動分類
3. 学会等名 日本コンピュータ化学会2018秋季年会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 越野 沙耶佳・岡崎 文哉・瀧川一学
2. 発表標題 定量的構造活性相関予測における化合物特徴表現の実験的検証
3. 学会等名 2017年度人工知能学会全国大会(第31回)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 鈴木 慶介・瀧川一学・清水 研一・高草木 達
2. 発表標題 組成情報と要素特徴量の統合に基づく化学反応量の予測
3. 学会等名 2017年度人工知能学会全国大会 (第31回)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 瀧川一学
2. 発表標題 機械学習は化学研究の"経験と勘"を合理化できるか?
3. 学会等名 電気化学会 第33回ライラックセミナー・第23回若手研究者交流会 (招待講演)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 瀧川一学
2. 発表標題 グラフデータの機械学習における特徴表現の設計と学習
3. 学会等名 日本応用数理学会 2017年度年会 (招待講演)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 Ichigaku Takigawa
2. 発表標題 Frontiers of data-driven property prediction: molecular machine learning
3. 学会等名 Innovation Camp 2018 for Computational Materials Science (ICCMS2018) (招待講演)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 瀧川一学
2. 発表標題 分子のグラフ表現と機械学習
3. 学会等名 異分野融合ワークショップ「データ科学との融合による化学の新展開」(招待講演)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Takigawa I, Shimizu K, Tsuda K, Takakusagi S
2. 発表標題 Machine learning predictions of factors affecting the activity of heterogeneous metal catalysts
3. 学会等名 The 255th ACS (American Chemical Society) National Meeting (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

〔図書〕 計2件

1. 著者名 瀧川一学	4. 発行年 2019年
2. 出版社 技術情報協会	5. 総ページ数 463
3. 書名 第10章第1節 機械学習に基づく分子の物性のデータ駆動予測とその活用 (「マテリアルズ・インフォマティクスによる材料開発と活用集」)	

1. 著者名 Kei-ichiro Takahashi, David A. duVerle, Sohiya Yotsukura, Ichigaku Takigawa, Hiroshi Mamitsuka	4. 発行年 2019年
2. 出版社 Springer	5. 総ページ数 243
3. 書名 SiBIC: A Tool for Generating a Network of Biclusters Captured by Maximal Frequent Itemset Mining (「Data Mining for Systems Biology」)	

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

6. 研究組織

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
--	---------------------------	-----------------------	----

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関
---------	---------