

## 科学研究費助成事業 研究成果報告書

令和 3 年 6 月 5 日現在

機関番号：82401

研究種目：基盤研究(B) (一般)

研究期間：2017～2020

課題番号：17H01783

研究課題名(和文) グラフデータの機械学習における特徴表現設計の体系化

研究課題名(英文) Feature Representation Design for Graph Machine Learning

研究代表者

瀧川 一学 (Takigawa, Ichigaku)

国立研究開発法人理化学研究所・革新知能統合研究センター・研究員

研究者番号：10374597

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 9,900,000円

研究成果の概要(和文)：本課題では、グラフ表現を持つデータの機械学習の枠組みで、適切な入力特徴表現の設計問題に体系的に取り組んだ。応募者のグラフ線形学習の知見を拡張し、部分グラフ特徴集合上での決定木アンサンブル学習法、部分グラフ探索空間からできるトライ構造による決定木学習、組合せ的な探索空間の確率的探索によるグラフ学習高速化、部分グラフ特徴の共起によるグラフ学習、部分グラフ特徴の探索空間の二分決定ダイアグラムによる圧縮、二重グラフ畳み込みによるグラフを頂点とするグラフ上の機械学習、頂点特徴量を注意機構で適応的に重み付けする学習モデル、ユーザ編集意図を反映する深層グラフ生成による分子グラフ自動補完などの成果が得られた。

研究成果の学術的意義や社会的意義

分子のグラフ表現の主対象である有機低分子は(a)医薬品、細胞内代謝物、有機EL材料、食品、化粧品、など波及範囲が広い、(b)活性の発現機序がモデル化困難な程に複雑、(c)可能な分子の候補数が組合せ的に巨大、という背景から活性の理解にデータ科学の技術が強く望まれており、本課題で得られる知見により広い波及効果が期待できる。また、グラフ表現データという設定は広い汎用性を持ち、公的リポジトリの多様なアッセイデータに基づく具体的な評価系を多数構築しやすく、強い特徴間相関や指数的な高次元性に由来する困難を体系的に評価できる良いモデルケースとなっている。

研究成果の概要(英文)：This project focuses on the feature representation problems for graph machine learning. By extending our previous work on sparse linear learning over the subgraph-feature search space, we developed novel related methods such as decision tree ensemble learning over subgraph search space, decision tree learning based on regarding the subgraph search space as a trie, efficient learning by stochastic search over subgraph space, graph learning by subgraph co-occurrences, compressing the subgraph search space by decision diagrams, dual graph convolutions for a graph of graphs, self-attentive graph learning for molecular property prediction, and user-edit aware generative graph autocompletion.

研究分野：機械学習

キーワード：機械学習 グラフデータ 分子表現

1. 研究開始当初の背景

(1) 機械学習分野のスター研究者 Andrew Ng 教授 (Stanford 大) は “Applied machine learning” is basically feature engineering. ”と表現した。現在、身近な ICT 社会基盤への機械学習技術の浸透が急速なペースで進んでいるが、機械学習にどのような特徴量を入力するのが良いかという根本的な難点は残ったままである。特徴ベクトル表現が決まれば既存の多様な機械学習手法が適用できるが、実際はこの特徴生成・特徴設計のステップが最も困難で、多角的専門知識や手間・時間を要し、かつ、最も予測精度を規定する。画像・音声など定型の生計測が自明に得られる場合には深層学習による特徴表現学習の取り組みが進められているものの、一般には特徴表現設計は feature engineering と呼ばれる人手の職人的な試行錯誤に依ってしまっている。これでは結局対象問題の特性を「機械が学習」しているというより「機械学習ユーザが学習」している状態であり、技術的解決が最も期待されている課題の一つと言える。

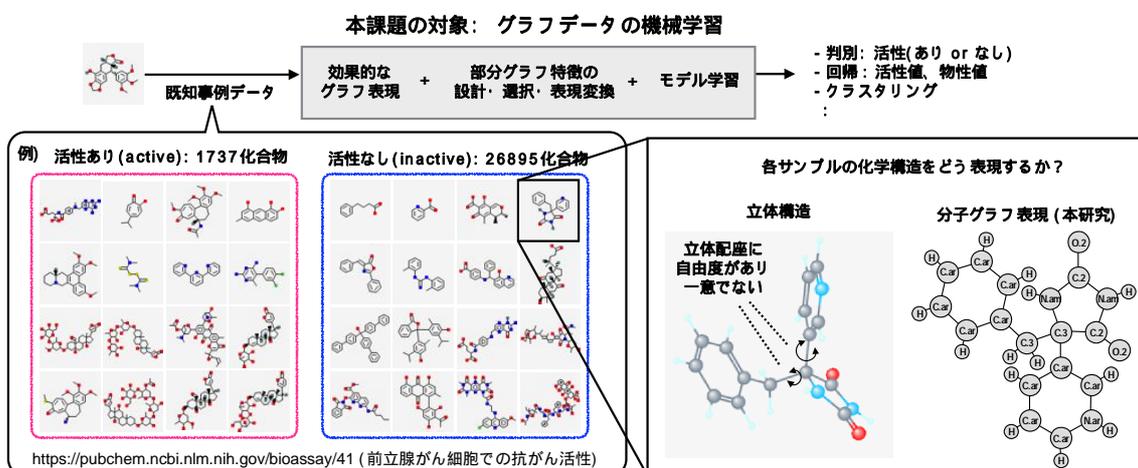
(2) 有機低分子は (a) 医薬品、細胞内代謝物、有機 EL 材料、食品、化粧品、など波及範囲が広い、(b) 活性の発現機序がモデル化困難な程に複雑、(c) 可能な分子の候補数が組合せ的に巨大、という背景から活性の理解にデータ科学の技術が強く望まれており、本課題で得られる知見により広い波及効果が期待できる。また、機械学習での feature engineering の問題の重要性は広く認識されているにもかかわらず、個性が高いため汎用的視点での研究は非常に少ない。本課題ではグラフ表現を持つという適度な一般性を持ち形式的な扱いが可能な対象を用いることで、超高次元空間における特徴表現学習を含んだ汎用機械学習の枠組みを検証できる。

(3) 本計画構想時の 2016 年、研究課題を開始した 2017 年度から終了時点の 2020 年度には、本課題の研究テーマと関連技術研究において予想以上の目まぐるしい技術的变化と研究動向の変化があった。特に、グラフに対する深層学習技術であるグラフニューラルネットワーク (GNN) や自然言語処理・コンピュータビジョンに根本的な変化をもたらした Transformer 構造の出現と急速な研究の進展があった。開始時点では、グラフの機械学習は分野においてそれほどメジャーな研究テーマではなかったが、現在では最も研究の多いテーマの一つとなっており、研究実施期間には応用範囲や新たな問題を非常に多く研究することができた。

2. 研究の目的

(1) 本課題では、下図のような有機低分子の活性・物性予測タスクを念頭に、応募者が近年注力してきたグラフ表現を持つデータの機械学習の枠組みで、この適切な特徴表現の設計問題に体系的に取り組む。特徴設計の問題はドメイン依存性・問題依存性が高く、体系的な研究が非常に少ないのが現状である。しかし、対象がグラフとして与えられる設定では、用いる特徴量は基本的に部分グラフ特徴由来となり、可能な部分グラフ特徴やその合成特徴量が組合せ的に多数定義できるため、特徴の表現や変換、特徴の冗長性、特徴間の相関構造、モデル推定との融合などを体系的に議論できる。また、グラフ表現データという設定は広い汎用性を持ち、公的リポジトリの多様なアッセイデータに基づく具体的な評価系を多数構築しやすく、強い特徴間相関や指数的な高次元性に由来する困難を体系的に評価できる良いモデルケースとなっている。

(4) 各事例がグラフ構造を伴う問題で最も波及効果が多く、分野横断的に研究されているのが分子表現である。特に生命科学や化学では分子の生物活性や物性の予測は非常に重要な情報を与える。本課題では主として分子のグラフ表現を具体的対象として研究を行うが、同時に、グラフの機械学習の他の利活用先の探索も検討する計画である。



### 3. 研究の方法

(1) 本課題計画は「グラフ表現を持つデータの機械学習」における「適切な特徴表現の設計・評価の体系的な方法」の確立を目標に、次の3点の具体課題の理解・解決を目指すものであった。

多くの可能な特徴を生成して機械学習で選別・表現学習を行う方式の確立と分析

分子データから Dragon や RDKit などの既存の記述子生成ソフトウェアを用いて容易に数千～数万次元の特徴量が生成できる。応募者はこうした標準的な高次元特徴ベクトル表現に対してどのようにして安定的な予測精度を持つ機械学習法が構築できるかを PubChem 等の公的リポジトリのアクセシビリティデータを用いて予備的に検証していた。部分グラフ構造特徴の有無や数などの組合せ的特徴量やその共起(交互作用)などは組合せ的に大きな数の変数を生成してしまう上、部分グラフ構造はさらに小さな部分グラフ構造を含むことから非常に特殊で変則的な相関構造を伴い、機械学習モデルの安定的推定や挙動の理解が課題である。

既存のケモインフォマティクス・ケモメトリクスの知見の融合

具体的評価に用いる有機低分子の活性・物性予測タスクは機械学習分野ではグラフカーネル法、スパース学習法、2016年以降の深層学習型の潜在表現学習を用いて研究されてきたが、同時に創薬支援技術としてケモインフォマティクスやケモメトリクスの分野に長い歴史と技術的知見が蓄積されている。対象タスクが同一であるため、この両分野の有効手法の原理には密接な関係があると思われる。例えば、創薬分野の Extended Connectivity と、機械学習分野の Weisfeiler-Lehman Graph Kernel や Graph Convolution は類似の原理で機能していると考えられる。現状では分野の壁と商用ソフトウェアの壁により詳細な整理や検証がほとんど行われていないため、複数の同一データセットでこうした手法の分析・評価を行うとともに、有効なアイデアの整理と機械学習分野の既知見への関連付けを行う。

近接グラフに基づく点群の計算幾何的グラフ表現と解析と活用

本課題では主として分子グラフ表現されたデータの機械学習を評価タスクとして研究するが、「グラフデータからの機械学習」の枠組みの新たなキラーアプリケーションを探索したいと考えていた。そこで、課題1・課題2と平行して、点群の計算幾何的グラフ表現からの機械学習を検討することが当初計画であった。

### 4. 研究成果

(1) 課題 : 分子グラフ表現とグラフ由来で生じる組合せ量を変数とする機械学習

グラフ表現を持つデータの場合、特徴量は基本的に部分グラフの有無由来となる。従って、まず与えられたグラフデータ中で生起している部分グラフ特徴を完全探索し、そこから適切な特徴表現をデータ駆動で獲得する方式が望ましい。計画開始前に、可能な全部分グラフ特徴のもとでスパース学習により必要な特徴を同定し Elastic-net 型正則化つき一般化線形モデルを学習する手法を与えていた(IEEE TPAMI, 2016)。本課題では、この線形学習の知見を拡張し、部分グラフ特徴集合上で決定木アンサンブルを学習する手法(文献 1,10)、部分グラフ探索空間からできるトライ構造による決定木学習(文献 11,15)、組合せ的な探索空間の確率的探索によるグラフ学習高速化(文献 13,16)、部分グラフ特徴の共起によるグラフ学習(文献 12)、部分グラフ特徴の探索空間の二分決定ダイアグラムによる圧縮(文献 9)などの成果を得ることができた。また、これらと並行してこうしたグラフ構造に対するアルゴリズム研究として、決定木アンサンブル学習(文献 18,22)、決定グラフ(文献 2,21,23)、系列の繰り返し構造(文献 6)などの研究を行った。

(2) 課題 : 分子グラフに対する表現学習

実施期間中に著しく発展があったグラフ入力に対する深層学習に基づく表現学習およびその分子グラフへの応用について研究を行った。個々の分子を分子グラフ表現とし、さらに分子間の相互作用ネットワークを考えるとグラフをノードとするグラフとなり、二重でグラフ畳み込みを学習するモデルの開発とバイオインフォマティクス事例への応用を行った(文献 4,14)。また、本研究計画時にはグラフとしては色つき重み付きのグラフを考えていたが、表現学習の進展により、グラフトポロジとその頂点や辺に多次元の特徴ベクトルが付随した広義のグラフ表現が有用であることが認識され、どのような頂点特徴量・辺特徴量を用いるかを適応的にアテンション機構により学習するモデルを提案した(文献 5,19,20)。さらに、分子構造を描画する際にユーザによる編集による意図を反映し、組合せ的に膨大な候補からグラフ深層生成モデルにより分子構造の効率的な自動補完を行う手法の研究を行いデモシステムを確立した(文献 24)。

(3) 課題 : ケモインフォマティクスの知見の融合

定量的構造活性相関予測における化合物特徴表現に対して実験的分析を行い、機械学習によるグラフ学習手法と化学のヒューリスティクスを活用するケモインフォマティクス手法との比較を報告した(文献 8)。特に、ECFP(Extended Connectivity Fingerprint)法は部分グラフ特徴探索の点では、頂点のk近傍グラフのみを効率的に探索し、組合せ的高次元だがスパースである有無の0-1ベクトルを固定長ビットにハッシュすることで決まった次元の特徴を得ており、分子データの場合、汎用的グラフ学習を応用するのとは比べ、このヒューリスティクスが非常に有効に

機能することを示した。また実施期間中に採択された世界トップレベル拠点プログラムに所属し、実際に理論化学者、実験化学者、ケモインフォマティクス研究者と化学のタスクを研究し、様々な実際問題のタスクで機械学習の良さとケモインフォマティクスで培われた良いヒューリスティクスを兼ね備えた解析パイプラインの確立と共同研究の基礎作りを行った。

(4) 課題 : グラフ表現の分子構造のトポロジ以外の利活用の探索

当初計画では「点群の計算幾何的グラフ表現と解析と活用」とあるように3次元中の点の集合に対してグラフ学習を活用する形を模索する計画であった。しかし、この点は実施期間中の研究分野の進展により、グラフニューラルネットワークが直接 Geometric Deep Learning の手法としても位置づけられることが分かり自然に解消された。特にマテリアルズインフォマティクスを契機とした量子化学計算での活用という大きな出口に繋がり、グラフ表現学習が3次元中の点の集合に活用できることが広く認識されるようになった。また、実施期間中に JST さきがけマテリアルズインフォマティクス領域への参画や、世界トップレベル拠点プログラム「化学反応創成研究」の採択・開始により、量子化学者との融合課題の研究を開始し、多様な実問題や技術の検討を行うことができた。化学反応はそれ自体3次元点群の配置のエネルギーに沿った変化であり、幾何表現に関するグラフ表現学習の良いトピックであると同時に、化学反応において素反応が連鎖する化学反応ネットワークもグラフ構造を持ち、組合せアルゴリズムの側面も生じる。実際に列挙の観点からも化学反応経路の探索技術に関して研究報告を行った(文献 17)。

実施期間中に起こった他の特筆すべき研究動向として、グラフは組合せ構造であるが、組合せ問題や組合せ最適化を解くこと自体にもグラフの機械学習が活用できるという知見が挙げられる。グラフニューラルネットワークを用いて様々な組合せ最適化について事例データから良いヒューリスティクスを学習する試みは終了時2021年のホットトピックであり、トップ会議 NeurIPS でコンペティション Machine Learning for Combinatorial Optimization も企画されている。組合せ最適化向けのアニーリングハードウェアについても高次元イジング模型の問題をハードウェア制約(配線グラフ)上に埋め込む問題が発生するため、この研究にも従事した(文献 3,7)。

(5) 分子グラフの機械学習やその化学応用に関する招待講演を広く行った(文献 25-31)。

<引用文献>

- 1 Shirakawa R, Yokoyama Y, Okazaki F, Takigawa I. Jointly learning relevant subgraph patterns and nonlinear models of their indicators. The 14th International Conference on Mining and Learning with Graphs (MLG 2018) (KDD'18 Workshop), London, U.K., August 20, 2018.
- 2 Takahashi S, Minato S, Takigawa I. Enumerating and indexing set partitions using sequence BDDs. 2nd International Workshop on Enumeration Problems & Applications (WEPA 2018), Pisa, Italy, 5-8 November 2018
- 3 Sugie Y, Yoshida Y, Mertig N, Takemoto T, Teramoto H, Nakamura A, Takigawa I, Minato S, Yamaoka M, Komatsuzaki T. Graph minors from simulated annealing for annealing machines with sparse connectivity. The 7th International Conference on the Theory and Practice of Natural Computing (TPNC 2018), Dublin, Ireland December 12-14, 2018
- 4 Harada S, Akita H, Tsubaki M, Baba Y, Takigawa I, Yamanishi Y, Kashima H. Dual graph convolutional neural network for predicting chemical networks. BMC Bioinformatics. 2020; 21(Suppl 3):94. (From GIW2019)
- 5 Kikuchi S, Takigawa I, Oyama S, Kurihara M. Learning relevant molecular representations via self-attentive graph neural networks. Workshop on Deep Graph Learning: Methodologies and Applications (DGLMA'19), IEEE BigData'19 Workshop, Los Angeles, USA, December 9, 2019
- 6 Nakamura A, Takigawa I, Mamitsuka H. Efficiently enumerating substrings with statistically significant frequencies of locally optimal occurrences in gigantic string. 34th AAAI Conference on Artificial Intelligence (AAAI-20), New York, USA, February 7-12, 2020
- 7 Sugie Y, Yoshida Y, Mertig N, Takemoto T, Teramoto H, Nakamura A, Takigawa I, Minato S, Yamaoka M, Komatsuzaki T. Minor-embedding heuristics for large-scale annealing processors with sparse hardware graphs of up to 102,400 nodes. Soft Computing 2021; 25(3):1731-1749.
- 8 越野 沙耶佳・岡崎 文哉・瀧川一学, 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. 2017年度人工知能学会全国大会(第31回), 4J1-4, ウィンクあいち, 平成29年5月23日-5月26日.
- 9 岡崎文哉・奥山葉月・瀧川一学・湊 真一, 系列二分決定グラフを用いた頻出部分グラフの圧縮表現. 2017年度人工知能学会全国大会(第31回), 4A1-1, ウィンクあいち, 平成29年5月23日-5月26日.

- 10 横山侑政・瀧川一学, 全部分グラフ指示子に基づく決定木の勾配ブースティング. 2017年度人工知能学会全国大会(第31回), 1K1-3, ウィンクあいち, 平成29年5月23日-5月26日.
- 11 坂上陽規・栗田和宏・瀧川一学・有村博紀, 決定化されたグラフパターンライの学習アルゴリズム. 人工知能学会 第105回人工知能基本問題研究会(SIG-FPAI), 石垣島大濱信泉記念館, 平成30年1月28日-29日. (人工知能学会研究会資料 B508 63-68, 2018)
- 12 岡崎文哉・瀧川一学, 部分グラフとその共起を用いたグラフ分類. 人工知能学会 第105回人工知能基本問題研究会(SIG-FPAI), 石垣島大濱信泉記念館, 平成30年1月28日-29日. (人工知能学会研究会資料 B508, 18-23, 2018)
- 13 白川 稜・岡崎文哉・瀧川一学, グラフ分類における部分グラフ特徴集合の確率的探索. 人工知能学会 第105回人工知能基本問題研究会(SIG-FPAI), 石垣島大濱信泉記念館, 平成30年1月28日-29日. (人工知能学会研究会資料 B508, 12-17, 2018)
- 14 原田将之介・秋田大空・椿 真史・馬場雪乃・瀧川一学・山西芳裕・鹿島久嗣, Graph of Graphs に対する二重畳み込みニューラルネットワーク. 2018年度人工知能学会全国大会(第32回), 2A1-01, 城山ホテル鹿児島, 平成30年6月5日-6月8日.
- 15 坂上陽規・瀧川一学・有村博紀, グラフ断片決定木を用いたグラフ特徴抽出手法. 2018年度人工知能学会全国大会(第32回), 3Pin1-10, 城山ホテル鹿児島, 平成30年6月5日-6月8日.
- 16 白川 稜・横山侑政・岡崎文哉・瀧川一学, 適応的な部分グラフ指示子の探索・選択に基づく非線形グラフ分類回帰. 第21回情報論的学習理論ワークショップ(IBIS 2018), D1-85, かでる2.7, 平成30年11月4日-11月7日.
- 17 中野裕太・瀧川一学, 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. 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, 湯布院公民館, 大分県由布市, 平成31年2月28日-3月1日.
- 18 菅原 優・瀧川一学, 非定常データストリームにおける適応的決定木を用いたアンサンブル学習. 人工知能学会 第109回人工知能基本問題研究会(SIG-FPAI), グラバー園 旧スタイル記念学校, 長崎県長崎市, 平成31年3月13日-3月14日.
- 19 菊地翔馬・瀧川一学, 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. 情報処理学会 第81回全国大会, 5P-06, 福岡大学, 福岡県福岡市, 平成31年3月14日-3月16日.
- 20 菊地翔馬・栗原正仁・小山聡・瀧川一学, 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. 情報処理学会北海道シンポジウム2019, 北海道大学 情報科学研究院, 令和1年10月5日.
- 21 瀧澤涼介・喜田拓也・有村博紀・瀧川一学, 大きな正規表現に対する系列二分決定グラフを用いた効率よい照手法. 電子情報通信学会 コンピューテーション研究会 (COMP), 北海道大学札幌キャンパス 学術交流会館第3会議室, 令和1年10月25日.
- 22 松田 祐汰・瀧川一学・有村博紀, ランダム分割木に基づく勾配ブースティングの検証. 第22回情報論的学習理論ワークショップ (IBIS 2019), ウィンクあいち, 令和1年11月20日-23日.
- 23 湊真一・番原睦則・堀山貴史・川原純・瀧川一学・山口勇太郎, コスト制約つき組合せ問題に対する ZDD を用いた高速な解列挙手法. 電子情報通信学会 コンピューテーション研究会 (COMP), オンライン開催 (当初予定: 愛媛大学), 令和2年12月4日.
- 24 胡晟・瀧川一学・肖川, 深層生成モデルを用いた分子グラフ自動補完. 第13回データ工学と情報マネジメントに関するフォーラム (DEIM2021), オンライン開催 (当初予定: 磐梯熱海ホテル華の湯), 令和3年3月1日-3日.
- 25 瀧川一学, (招待講演) 分子のグラフ表現と機械学習. 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」, 2018年3月13日-14日, 奈良先端科学技術大学院大学.
- 26 瀧川一学, (招待講演) 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. 日本応用数理学会年会, 武蔵野大学有明キャンパス, 平成29年9月8日.
- 27 瀧川一学, (招待講演) 決定木・回帰木に基づくアンサンブル学習の最近. 電子情報通信学会 スマートインフォメディアシステム研究会 (SIS), 定山溪ビューホテル, 平成30年6月7日-6月8日.
- 28 瀧川一学, (招待講演) 分子のグラフ表現と機械学習. 第79回応用物理学会秋季学術講演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?~, 名古屋国際会議場, 平成30年9月18日.
- 29 瀧川一学, (招待講演) 分子のグラフ表現と機械学習. 有機合成化学協会, 「AI と有機合成化学」第三回勉強会, 2019年6月21日, 中央大学駿河台記念館.
- 30 瀧川一学, (招待講演) 機械学習による化学反応の予測と設計. 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), 2020年1月27日, 大阪科学技術センター.
- 31 瀧川一学, (招待講演) 機械学習による化学反応の予測と設計, セッション「生命科学・材料科学におけるデータサイエンスの最前線」, 2020年度統計関連学会連合大会, 2020年9月8日~12日, 富山国際会議場・富山県民会館.
- 32 瀧川一学, (招待講演) 分子のグラフ表現と機械学習, セッション「データサイエンスの世界をのぞいてみませんか?」第10回 CSJ 化学フェスタ 2020, 2020年10月20日, 日本化学会.

## 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 Sugie Y, Yoshida Y, Mertig N, Takemoto T, Teramoto H, Nakamura A, Takigawa I, Minato S, Yamaoka M, Komatsuzaki T	4. 巻 25(3)
2. 論文標題 Minor-embedding heuristics for large-scale annealing processors with sparse hardware graphs of up to 102,400 nodes	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Soft Computing	6. 最初と最後の頁 1731-1749
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1007/s00500-020-05502-6	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 Harada S, Akita H, Tsubaki M, Baba Y, Takigawa I, Yamanishi Y, Kashima H	4. 巻 21(Suppl 3)
2. 論文標題 Dual graph convolutional neural network for predicting chemical networks	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 BMC Bioinformatics	6. 最初と最後の頁 94
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1186/s12859-020-3378-0	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 34
2. 論文標題 人工知能学会基本問題研究会	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 人工知能	6. 最初と最後の頁 603 ~ 611
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 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 Lam Pham Tien, Kino Hiori, Terakura Kiyoyuki, Miyake Takashi, Tsuda Koji, Takigawa Ichigaku, Chi Dam Hieu	4. 巻 18
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 -

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 -

[学会発表] 計49件 (うち招待講演 21件 / うち国際学会 13件)

1. 発表者名 Nakamura A, Takigawa I, Mamitsuka H
2. 発表標題 Efficiently enumerating substrings with statistically significant frequencies of locally optimal occurrences in gigantic string
3. 学会等名 34th AAAI Conference on Artificial Intelligence (AAAI-20) (国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Sugie Y, Mertig N, Iwata Y, Teramoto H, Nakamura A, Takigawa I, Minato S, Komatsuzaki T, Takemoto T
2. 発表標題 Compiling higher order binary optimization problems into annealing processors
3. 学会等名 25th International Symposium on Artificial Life and Robotics (AROB 25th 2020), (国際学会)
4. 発表年 2020年

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 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 瀧澤涼介・喜田拓也・有村博紀・瀧川一学
2. 発表標題 大きな正規表現に対する系列二分決定グラフを用いた効率よい照合手法
3. 学会等名 電子情報通信学会 コンピューテーション研究会 (COMP)
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 瀧川一学
2. 発表標題 人工知能の基本問題：これまでとこれから
3. 学会等名 人工知能学会 人工知能基本問題研究会(SIG-FPAI) (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 ユーザのための機械学習・深層学習入門
3. 学会等名 Rinkai Hackathon 2019 with DDBJing (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 Shirakawa R, Yokoyama Y, Okazaki F, Takigawa I.
2 . 発表標題 Jointly Learning Relevant Subgraph Patterns and Nonlinear Models of Their Indicators
3 . 学会等名 The 14th International Conference on Mining and Learning with Graphs (MLG 2018) (KDD'18 Workshop) (国際学会)
4 . 発表年 2018年

1 . 発表者名 Takahashi S, Minato S, Takigawa I.
2 . 発表標題 Enumerating and Indexing Set Partitions Using Sequence BDDs
3 . 学会等名 2nd International Workshop on Enumeration Problems & Applications (WEPA 2018) (国際学会)
4 . 発表年 2018年

1 . 発表者名 Sugie Y, Yoshida Y, Mertig N, Takemoto T, Teramoto H, Nakamura A, Takigawa I, Minato S, Yamaoka M, Komatsuzaki T.
2 . 発表標題 Graph Minors from Simulated Annealing for Annealing Machines with Sparse Connectivity.
3 . 学会等名 The 7th International Conference on the Theory and Practice of Natural Computing (TPNC 2018) (国際学会)
4 . 発表年 2018年

1 . 発表者名 Takemoto T, Mertig N, Hayashi M, Susa-Tanaka S, Teramoto H, Nakamura A, Takigawa I, Minato S, Komatsuzaki T, Yamaoka M
2 . 発表標題 FPGA-Based QBoost with Large-Scale Annealing Processor and Accelerated Hyperparameter Search
3 . 学会等名 2018 International Conference on Reconfigurable Computing and FPGAs (ReConFig 2018) (国際学会)
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 菅原 優・瀧川一学
2. 発表標題 非定常データストリームにおける適応的決定木を用いたアンサンブル学習
3. 学会等名 人工知能学会 第109回人工知能基本問題研究会(SIG-FPAI)
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 白川 稜・横山侑政・岡崎文哉・瀧川一学,
2. 発表標題 適応的な部分グラフ指示子の探索・選択に基づく非線形グラフ分類回帰
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 高橋翔哉・湊 真一・瀧川一学
2. 発表標題 SeqBDDを用いた集合分割の族の表現法と実験的評価
3. 学会等名 情報処理学会 第169回アルゴリズム研究会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 坂上陽規・瀧川一学・有村博紀
2. 発表標題 グラフ断片決定木を用いたグラフ特徴抽出手法
3. 学会等名 2018年度人工知能学会全国大会（第32回）
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 原田将之介・秋田大空・椿 真史・馬場 雪乃・瀧川一学・山西芳裕・鹿島久嗣
2. 発表標題 Graph of Graphsに対する二重畳み込みニューラルネットワーク
3. 学会等名 2018年度人工知能学会全国大会（第32回）
4. 発表年 2018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 決定木・回帰木に基づくアンサンブル学習の最近
3. 学会等名 電子情報通信学会 スマートインフォメディアシステム研究会 (SIS) (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 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 岡崎文哉・奥山葉月・瀧川一学・湊 真一
2. 発表標題 系列二分決定グラフを用いた頻出部分グラフの圧縮表現
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 横山侑政・瀧川一学
2. 発表標題 全部分グラフ指示子に基づく決定木の勾配ブースティング
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 合成変量とアンサンブル：回帰森と加法モデルの要点
3. 学会等名 電子情報通信学会 信号処理研究会（SIP）（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 白川 稜・岡崎文哉・瀧川一学
2. 発表標題 グラフ分類における部分グラフ特徴集合の確率的探索
3. 学会等名 人工知能学会 第105回人工知能基本問題研究会(SIG-FPAI)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 岡崎文哉・瀧川一学
2. 発表標題 部分グラフとその共起を用いたグラフ分類
3. 学会等名 人工知能学会 第105回人工知能基本問題研究会(SIG-FPAI)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 坂上陽規・栗田和宏・瀧川一学・有村博紀
2. 発表標題 決定化されたグラフパターントライの学習アルゴリズム
3. 学会等名 人工知能学会 第105回人工知能基本問題研究会(SIG-FPAI)
4. 発表年 2018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0件

〔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