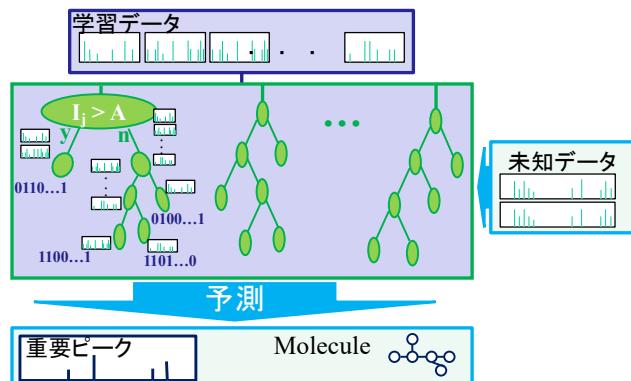


物質計測・イメージング研究室（青柳研究室）

～データ駆動科学と分析～

データから重要な情報を引き出し、物理化学現象を解明

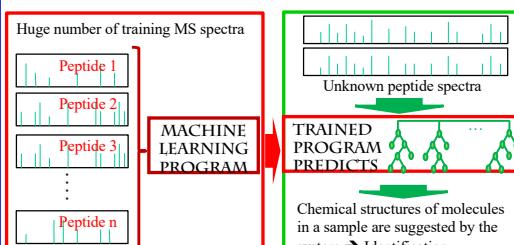


青柳 里果 教授 (2502C)

研究室：1107B (11号館1階北側)

関連科目：統計学入門・機器分析I・生物物理学・熱力学

装置開発とデータ駆動科学は車の両輪！



データ駆動科学

3

データ駆動科学って？

高度な分析・先端計測 → 複雑な計測データ

計測データが潜在的に持つ情報

計測データの全てが解釈できてはいない

実際には、計測データの一部だけが使われて、残りの情報は使えないまま、埋もれてしまう。

データそのものを使って（駆動して）、分析装置に期待されていた以上の情報を引き出し、物理化学現象を明らかにする。

装置開発とデータ駆動科学は車の両輪！

2

授業と研究の関係

熱力学I (2年生前期)

- 科学の重要な基礎分野の一つ
- エントロピーと情報エントロピー

情報エントロピー：情報量の指標以上の概念を含む

統計学入門 (2年生後期)

- 統計学に基づく数値解析・機械学習の基礎
- データ駆動科学の入り口

機器分析I (2年生後期)

- 分析の基本概念・分析装置の物理的原理

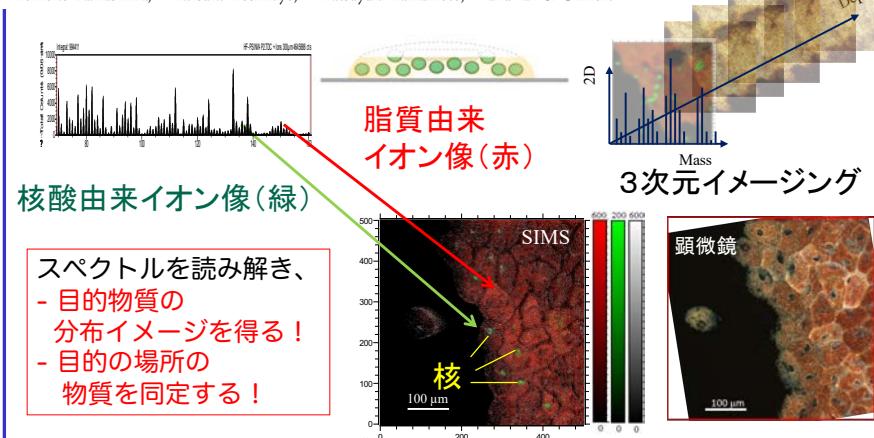
生物物理学 (3年生前期)

- 生命とは何か？
- 人工知能とは？ 情報と物質の間の関係は？

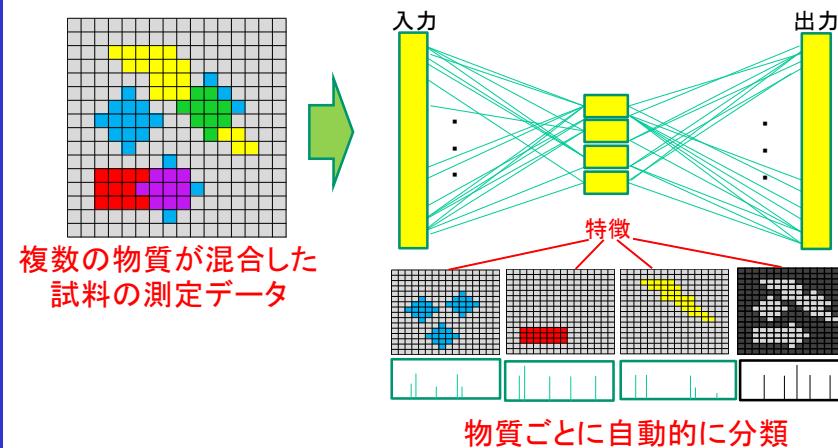
4

OrbiSIMS Imaging Identifies Molecular Constituents of the Perivacuole Membrane of *Paramecium bursaria* with Symbiotic *Chlorella variabilis*

Satoka Aoyagi,*† Yuuki Kodama,|| Melissa K. Passarelli,‡,§ Jean-Luc Vorng,‡,§
Tomoko Kawashima,§ Keisuke Yoshikiyo,|| Tatsuyuki Yamamoto,|| and Ian S. Gilmore*,‡,§



機械学習の例



6

研究室に入ると



- 1) 個別打ち合わせで研究テーマを決めていきます。個人に合った研究テーマを教員から提案します。
- 2) 3年後期から研究を始めます。最初は、教員と一緒に研究します。ある程度慣れてきたら、グループ別に研究を進めます。
- 3) 研究内容を深く理解するために、添削を受けながら研究レポートをたくさん書き、研究論文の書き方を習得します。
- 4) 研究内容をスライドにまとめて発表し、鋭い質問に答えられるように訓練します。他の人の発表にも質問できる能力を養います。
- 5) 良い研究成果が得られて、発表意欲がある場合は、学会などの発表、学術雑誌(英語)への論文投稿をします。

勉強と研究は必ずしも高い相関を持ちません(でもいつかは勉強も必要)
成績にかかわらず、研究意欲の高い人を全力で応援します。

7

データ解析の応用

多変量解析 → 古典的手法だが有用

機械学習・深層学習 → 複雑な現象にも対応可能

スペースモデリング

→ ゼロが多いほど解が求めやすい、という特徴を活かして、活用。

情報エントロピー

→ 曖昧さと確実さを統計力学のエントロピーと同様の方法で計算。熱力学のエントロピーと関連づけられれば物理・化学現象を解く鍵にもなり得る。

測定の物理的原理を理解したうえで、適するデータ解析手法を選ぶ。

8

卒業研究の研究課題の概要

解析対象は、生物試料（細胞・組織）、有機物・高分子材料から、無機物・金属・電池材料まで多岐に渡ります。研究の目的に応じて以下の3グループがあります。

1. イメージンググループ

複数の測定手法のデータを一つのデータとセットとして一括してデータ解析することにより、一つの測定手法からでは得られない物理化学情報の取得を目指します。仮想的な先端分析装置を開発します。画像解析、多変量解析、スパースモデリング、機械学習・深層学習などを用います。生物試料から金属材料までを対象とします。画像解析、多変量解析、スパースモデリング、機械学習・深層学習、情報エントロピーなどを用います。

2. スペクトルグループ

適切なスペクトル情報を得るために、マトリックス効果の補正、多変量解析、スパースモデリング、機械学習・深層学習、情報エントロピーの応用を検討します。

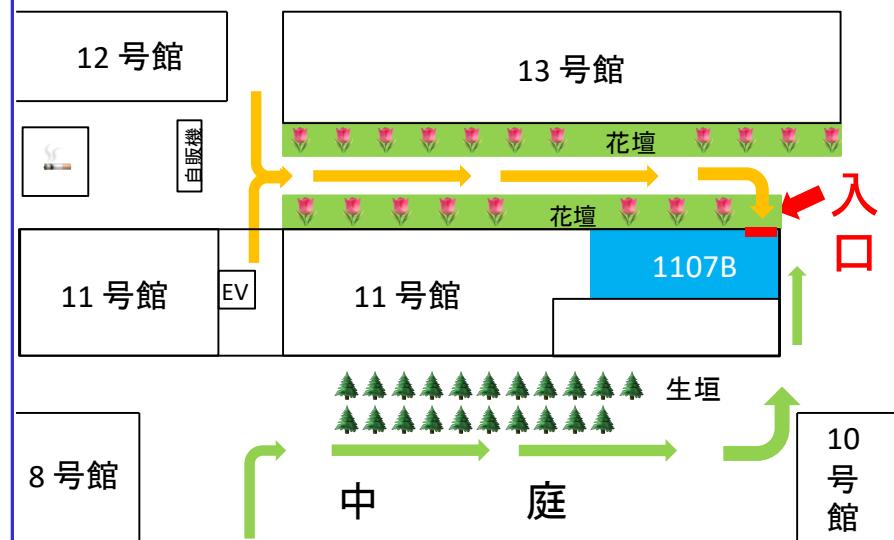
スペクトルの情報エントロピーと試料の熱力学エントロピーの関係を考え、情報と物理化学の新しい関係を構築します。

3. データ予測グループ

TOF-SIMSスペクトルの解釈が難しいため、機械学習を用いて、これまでに公開されたスペクトルデータと国際連携の中で集めたデータを中心として、機械学習によって、未知試料データを解釈できるモデル構築を目指します。

物質計測・イメージング研究室(青柳研究室)

11号館1階 1107B

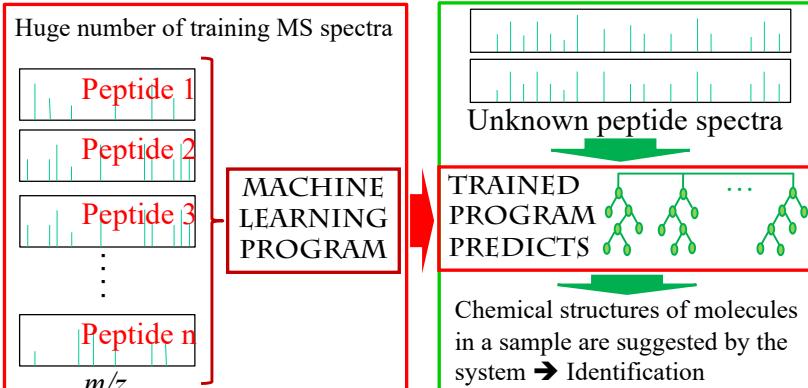


質問などあれば、メールで連絡してください。

aoyagi@st.seikei.ac.jp

研究室のホームページも参考にしてください。

<http://www.ml.seikei.ac.jp/spectra/>



S. Aoyagi et al., *Anal. Chem.* 2021, 93, 9, 4191–4197

<https://doi.org/10.1021/acs.analchem.0c04577>