

計測インフォマティクスの発展とJST-CRESTの展開 － 未踏スケールデータアナリティクスへの期待 －

2022年12月26日

大阪大学 産業科学研究所

第1研究部門(情報・量子科学系) 知能推論研究部門 教授

科学技術振興機構

革新的計測解析CREST 研究総括

情報計測CREST 研究代表

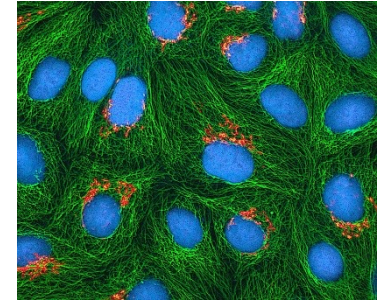
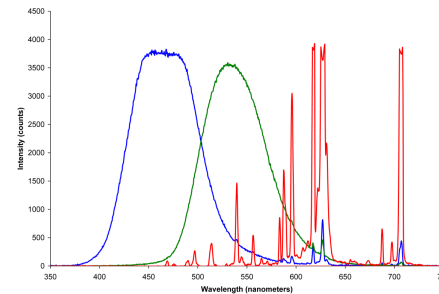
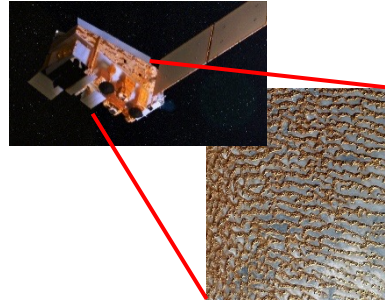
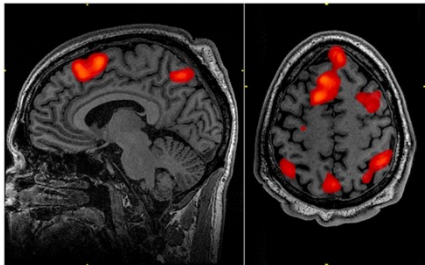
鷺尾 隆

「計測 × AI = 計測インフォマティクス研究」 の背景

1.1 先端計測技術研究の動向

出力情報の多様・複雑・多量化の壁

- 計測・分析技術の進展に伴い、画像やスペクトルなど多様・複雑・多量な出力情報から計測・分析結果を得るニーズが高まっている。

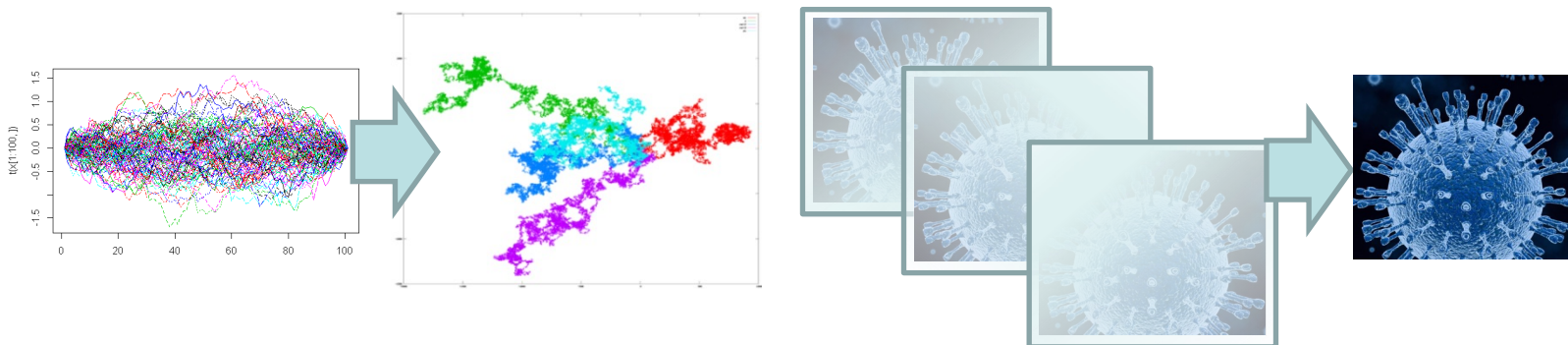


- 多様・複雑・多量な出力故に.....
 - 余計な情報も多く含まれる。
 - 生の出力表現形式が必ずしも目的には適さない。
 - 必要な情報が複数箇所に散らばって出力される。

1.2 情報科学・統計数理の動向

情報特徴抽出,変換,学習,複数情報統合技術の発展

- 実用的に高精度な計測・分析結果を得るには....
 - 適切な時空間や特徴空間を選んで変換・推定
 - 必要な特徴を適切に抽出して目的量を推定
 - 適切な複数出力情報の抽出・統合により推定

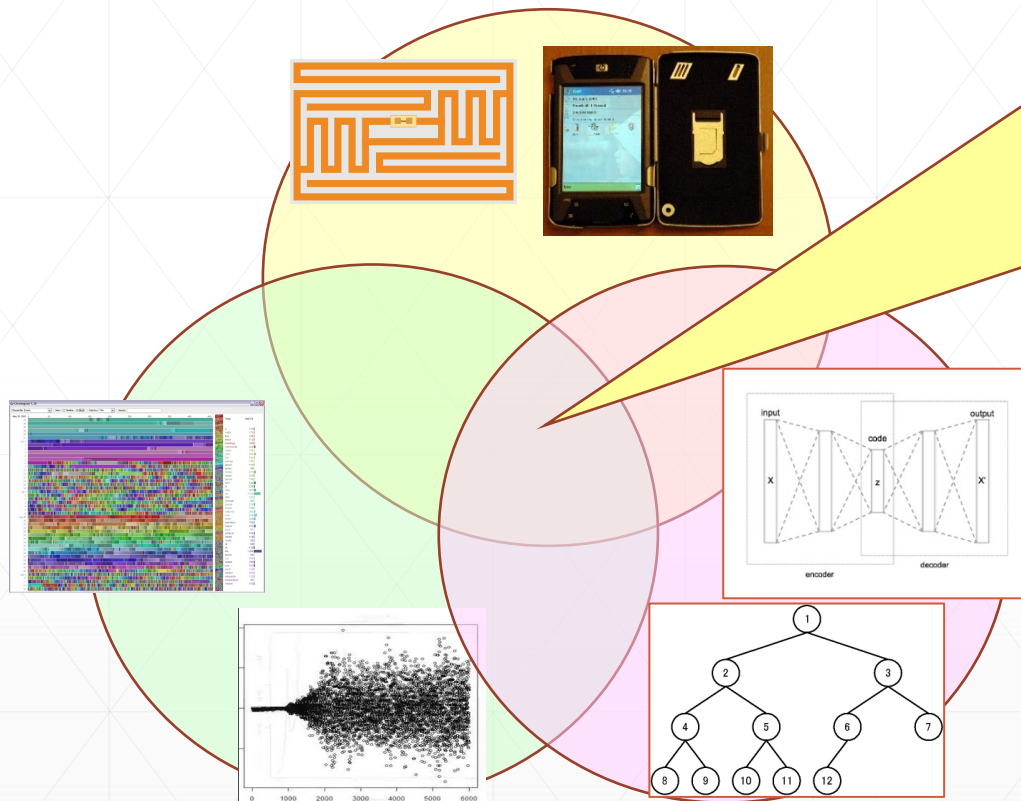


- 統計処理やパターン認識, 機械/深層学習などの技術
 - 特徴変換・抽出や情報統合により高精度・高信頼な結果を得ることに長じている。

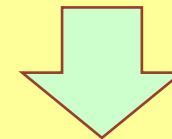
先端計測技術開発において、情報科学・統計数理への期待が高まっている。

1.3 計測インフォマティクス的目標

研究開発が進む最先端デバイス・装置
による先端計測・IoTセンシング技術



先端計測デバイス・
装置技術
+
情報科学・統計数理



新たな先端計測・
IoTセンシング技術
の開発

計測装置・センサーから
得られる膨大なデータ

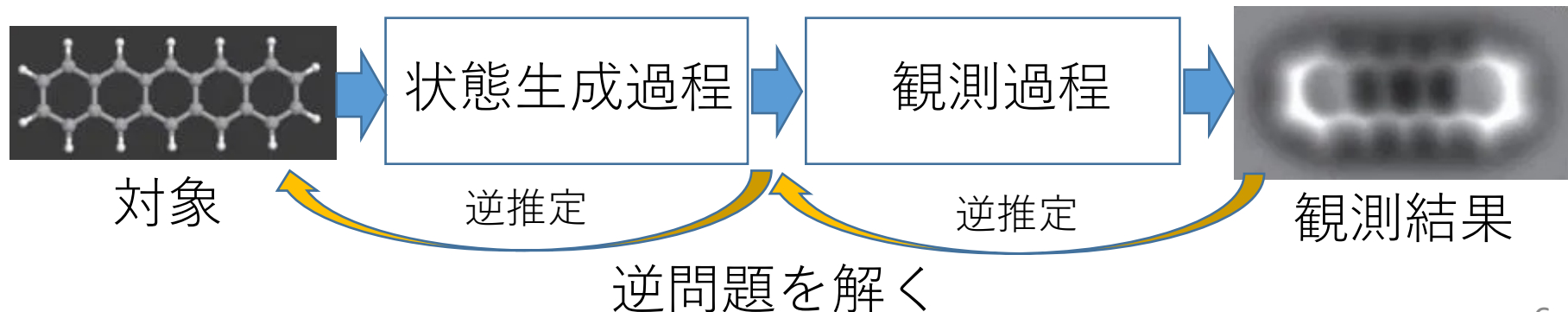
急速に発展する情報科学・
統計数理によるデータ解析

1.4 計測インフォマティクスを巡る経緯と状況

国内外の研究状況

- 各計測分野での個別問題の解決技術研究は多数
- 機械学習研究
 - 計測問題を目的とする基礎研究は皆無
 - 最尤推定やノイズ除去など計測問題で役立つ関連研究が行われているに留まる。
- 統計的推定・信号処理・パターン認識手法研究
 - データ生成過程を
 - ✓ 状態生成過程のモデル
 - ✓ 観測過程のモデル（計測過程のモデル）

に区別して観測結果から対象をモデルベース逆推定する研究は多数



1.4 計測インフォマティクスを巡る経緯と状況

世界的にも情報科学・統計数理を積極的に先端計測科学研究に取り込む努力は不十分

その背景

- 具体的な計測技術開発に比べ、数理・情報科学は抽象的であり、先端計測に適用して得られる成果の見通しを得にくい。
- 計測科学と情報科学・統計数理の両方を深く理解し橋渡し役として異分野融合に挑戦する人材が不足している。

1.5 [情報計測] 計測技術と高度情報処理の融合によるインテリジェント計測・解析手法の開発と応用(2016年～2023年)

CREST

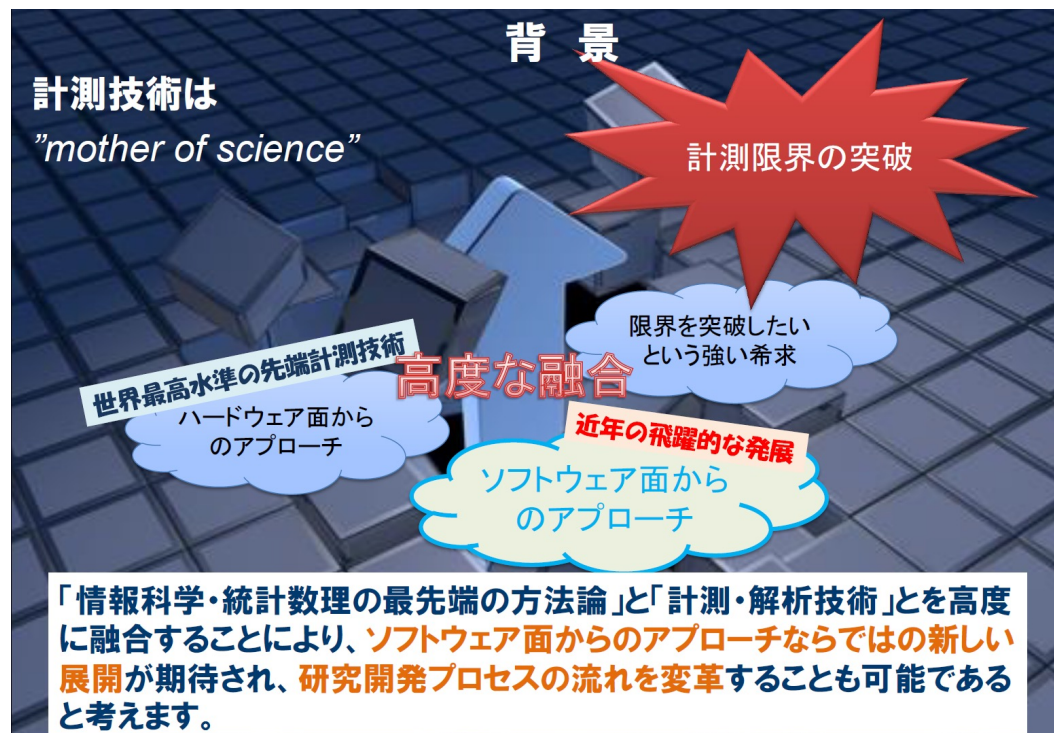
計測
PRESTO

https://www.jst.go.jp/kisoken/crest/research_area/ongoing/bunyah28-3.html

研究総括



雨宮慶幸(東大)



副研究総括



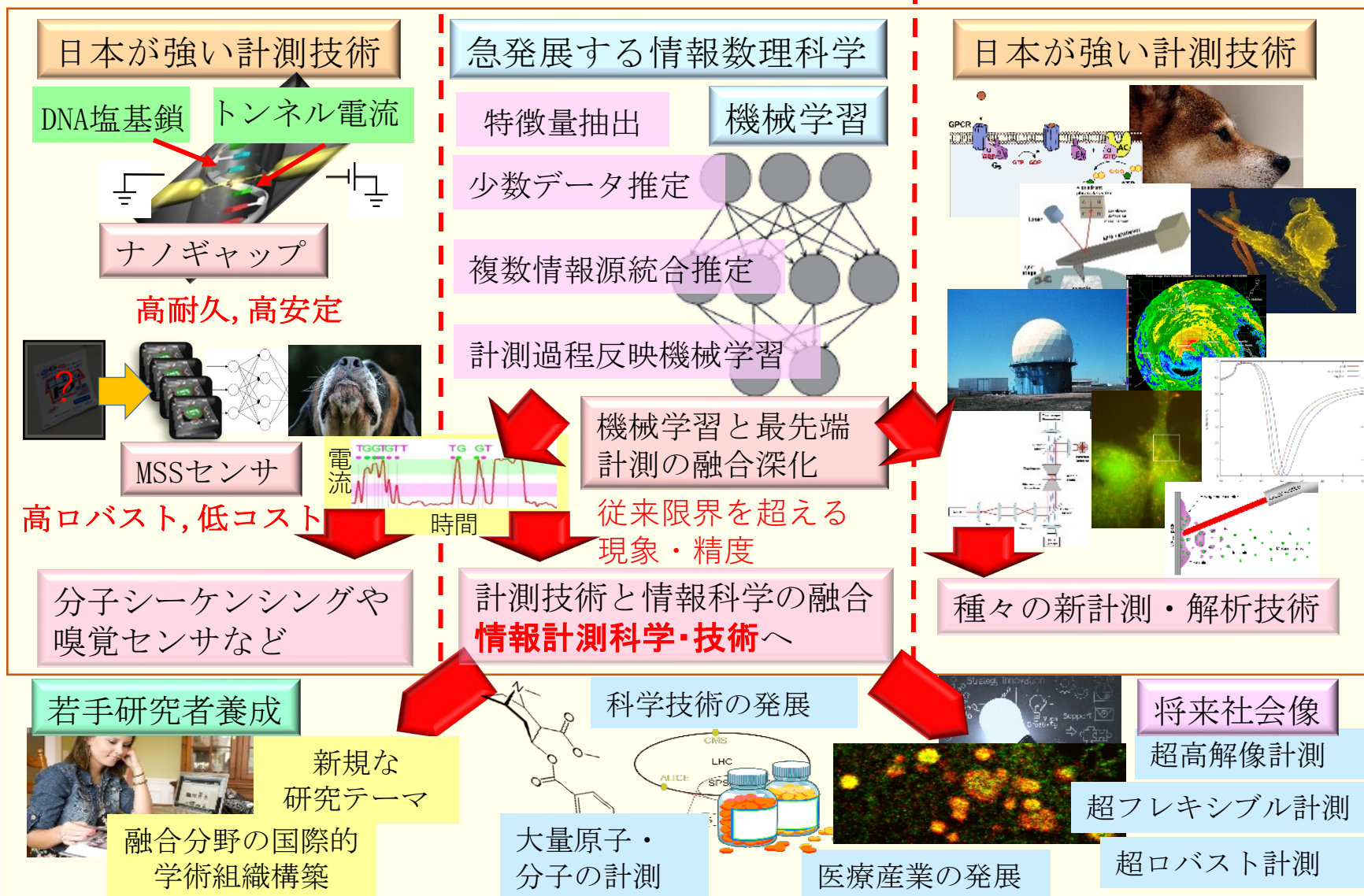
北川源四郎(東大)

鷺尾 隆 (大阪大学 産業科学研究所)

機械学習と最先端計測技術の融合深化による
新たな計測・解析手法の展開



1.5 情報計測CREST, さきがけが目指す成果



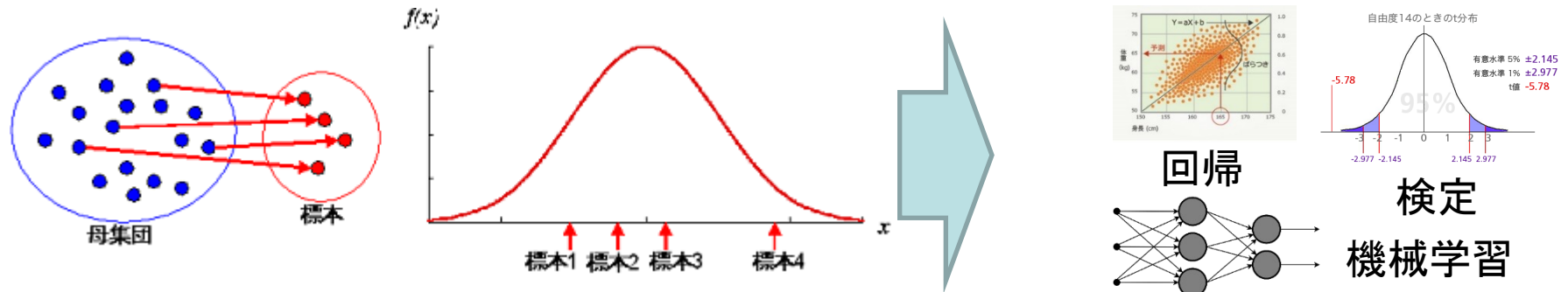
お話の流れ

1. 「計測 × AI = 計測インフォマティクス研究」の背景
2. 計測インフォマティクス研究の論点
3. 計測の逆問題を解く研究開発事例
 - 3.1 細胞蛍光撮影画像からの超高速超解像イメージング
 - 3.2 Noise2Noise深層学習を用いたナノチャンネル計測ノイズ低減
 - 3.3 MSSセンサによる超ロバスト嗅覚計測
4. 分析の逆問題を解く研究開発事例
 - 4.1 AI × ナノ計測デバイスによる1アミノ酸鏡像異性体分子識別
5. 計測インフォマティクスの展望と活動
6. CREST[革新的計測解析] 社会課題解決を志向した革新的計測・解析システムの創出
7. 未踏スケールデータアナリティクスセンターへの期待

2.1 論点1:計測からみた標準的機械学習の問題点

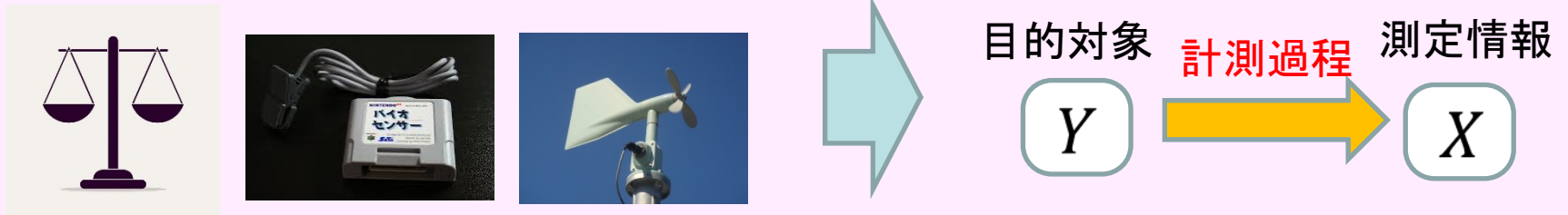
基本発想:「先端計測」+「既存機械学習」でいいのか？

➤ 従来の統計や機械学習: **過去のデータやその分布を学習**



過去と異なる対象の高精度ロバストな計測が困難

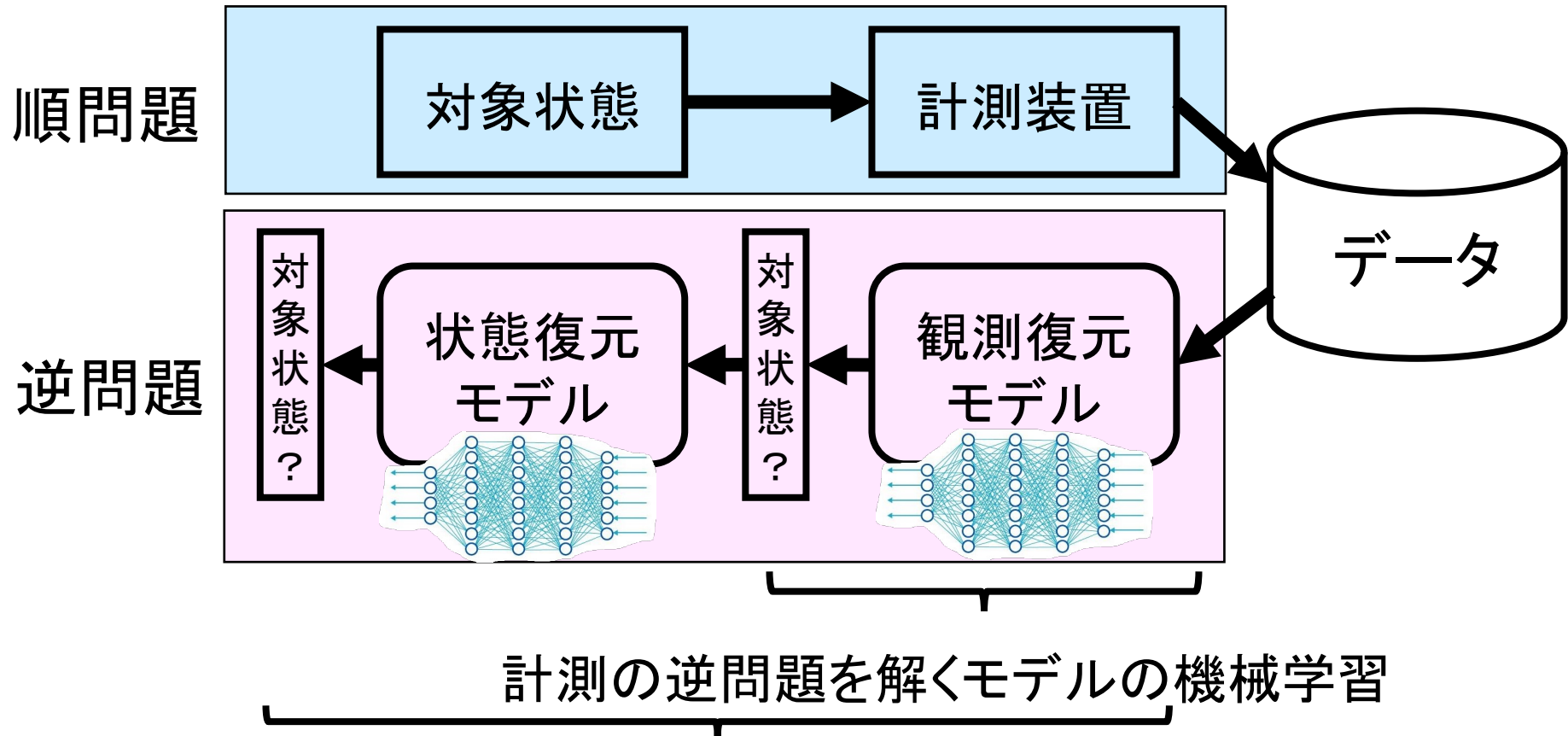
➤ 対象が幅広い計測の問題への新しい取り組み



データではなく、計測過程モデルを学習

対象が変わっても高精度ロバストな計測が可能

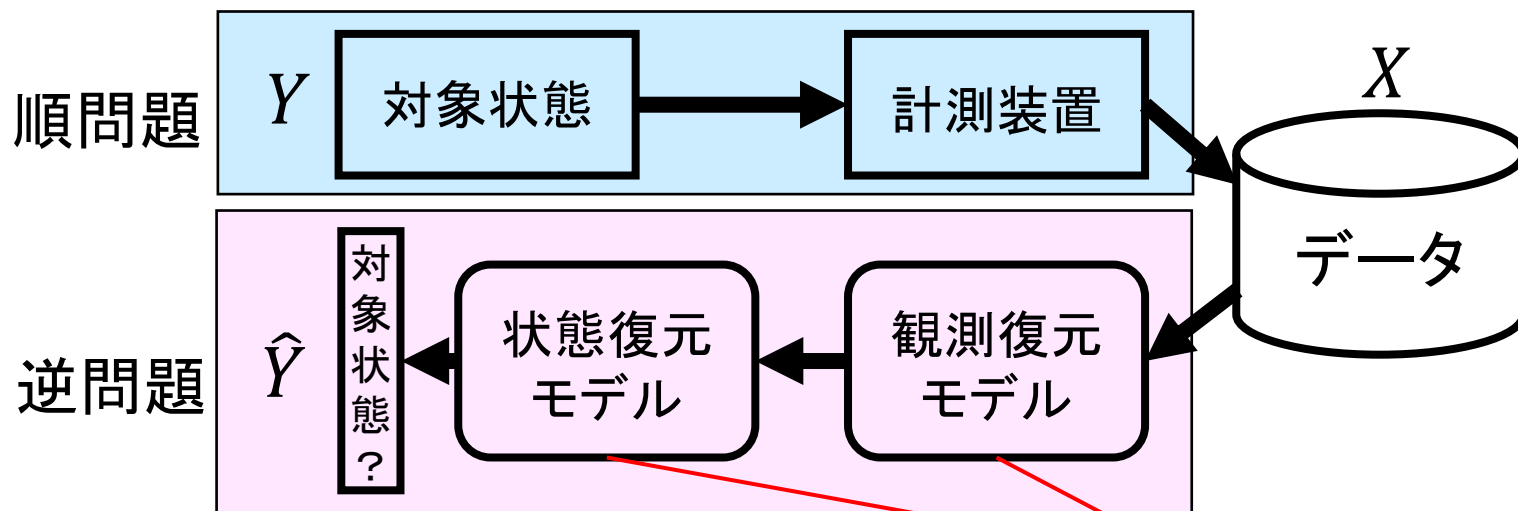
2.1 計測と分析を区別した計測指向機械学習



分析の逆問題を解くモデルの機械学習

現状の機械学習では、同じデータから2つの逆問題を区別して学習する方法の研究が不十分

2.2 論点2:ベイズ推定・スパース推定の高度な適用



ベイズの定理
$$P(Y|X) = \frac{P(X|Y)P(Y)}{\int P(X|Y)P(Y)dY} \propto \underbrace{P(X|Y)}_{\text{尤度}} \underbrace{P(Y)}_{\text{事前分布}}$$

$$\max_Y \log P(Y|X) \equiv \max_Y (\log \underbrace{P(X|Y)} + \log \underbrace{P(Y)})$$

観測復元モデルや状態復元モデルとして
どんなモデルや近似を用いるが課題

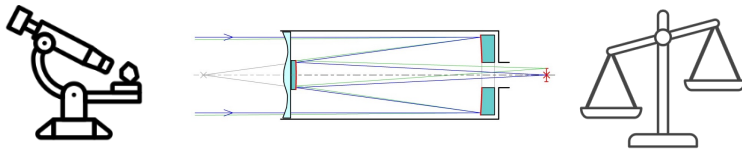
2.2 ベイズ推定・スパース推定の高度な適用

$$\max_Y \log P(Y|X) \equiv \max_Y (\log P(X|Y) + \log P(Y))$$

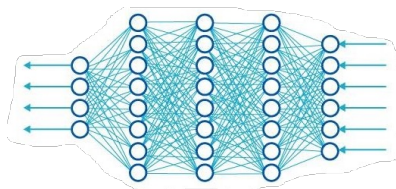
観測復元モデル

状態観測復元モデル

計測系の物理モデル



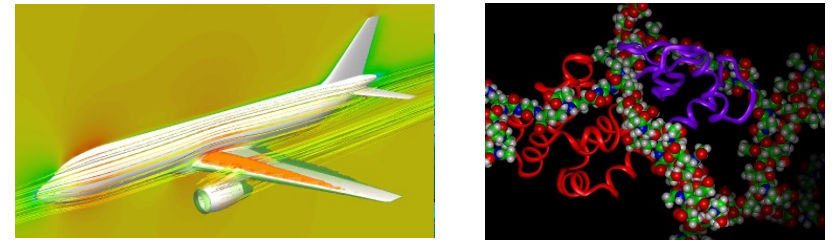
計測系の機械学習モデル



計測系の簡略近似モデル

$$P(X|Y) \propto e^{-\alpha|X-\hat{X}(Y)|^2}$$

対象状態の物理モデル



対象状態の簡略近似モデル

例) L2損失 L1損失(スパース)

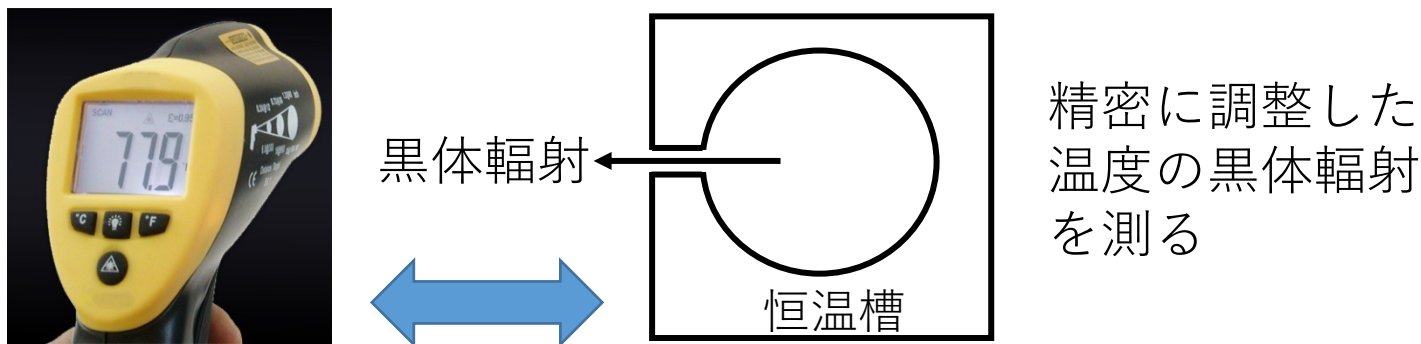
$$P(Y) \propto e^{-\lambda Y^2} \quad P(Y) \propto e^{-\lambda|Y|}$$

それぞれどんなモデルを使うべきか、計測問題によって様々な選んだモデルに適切な推定アルゴリズムが必要

2.3 論点3:計測系の効率的で高精度な校正

- 計量法に規定する「計量器の校正」の定義
計量器の表示する物象の状態の量と（中略）標準となる特定の物象の状態の量との差を測定すること
- 広辞苑第四版の「測定器の校正」の定義
実験に先立って、測定器の狂い・精度を、基準量を用いて正すこと（その差を最小とするための調整を含む）

例）赤外線放射温度計の校正

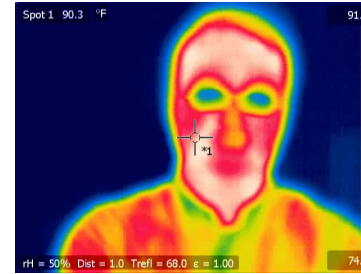
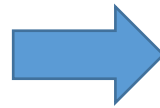


両者の温度の差 $\Delta = |T_{\text{measure}} - T_{\text{reference}}|$ を最小にするように温度計を正す。

2.3 計測系の効率的で高精度な校正

- 複雑化する計測の校正をどう行うか？

例) 赤外線サーモグラフィーの校正



対象各部の
温度測定

- デバイスの物理パラメータ
 - 電子回路パラメータ
 - 画像処理ソフトのパラメータ
- などのパラメータベクトル X

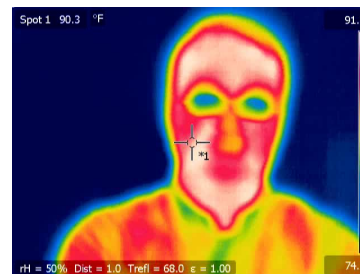
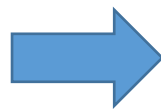
- 各画素の測定温度ずれ
 - 光学レンズの画面各部位のボケ
 - 光学レンズの画面各部位の収差
- などの総合性能指標 Y

$$X \rightarrow Y$$

Y を最小にする X の効率的な校正手順は？

2.3 計測系の効率的で高精度な校正

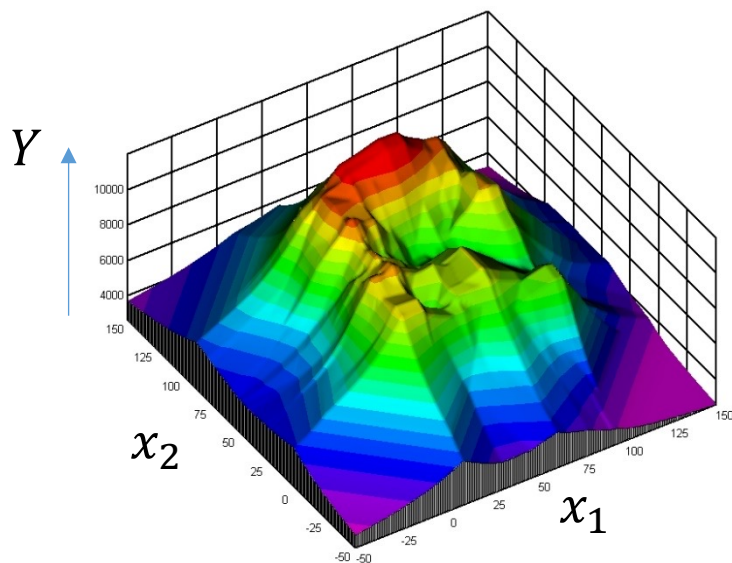
- 複雑化する計測校正のアプローチ



校正パラメータベクトル

$$X = [x_1, x_2, \dots, x_n]$$

総合性能指標 Y

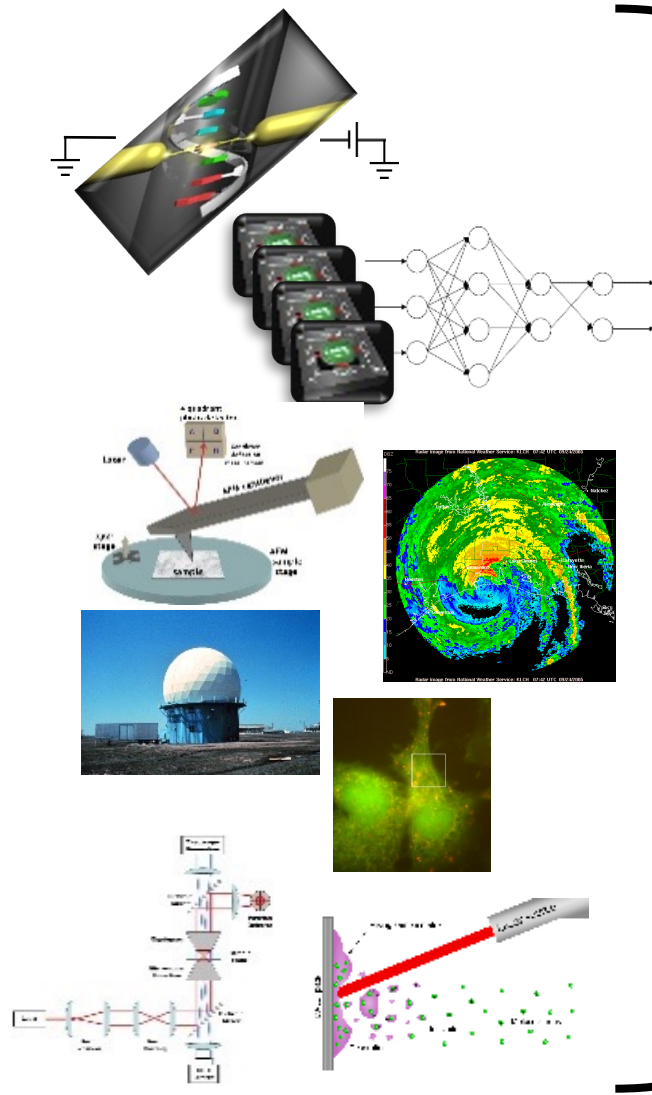


少ない回数の校正手順
での性能指標の最適化



多次元パラメータ空間での
性能指標の効率的逐次最大化問題
情報科学の問題

2.3 計測系の効率的で高精度な校正



計測系の性能 S

精度

ロバスト性

所用時間

コスト

サイズ

計測範囲

.....

$$S = \underset{S}{\operatorname{argmax}} f(S)$$

種々の数理最適化
アルゴリズム

線形計画法

凸最適化

整数最適化

劣モジュール関数最適化

ベイズ最適化

乱択

.....

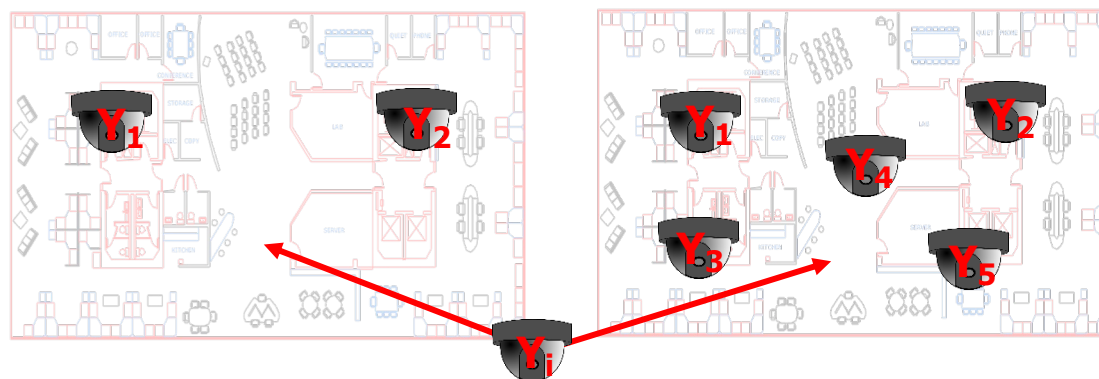
情報科学的に計測系の
各種性能 S を最適化

2.4 論点4: 対象状態逆推定に最適な計測点選択

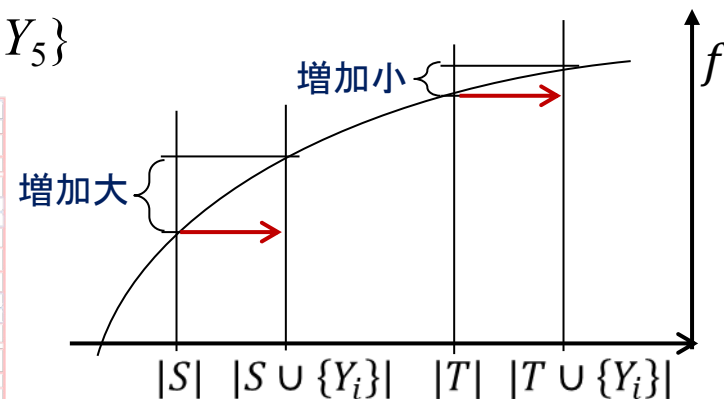
劣モジュラー関数によるセンサ配置最適化のアプローチ

監視カメラなどセンサ最適配置問題

設置位置 $S = \{Y_1, Y_2\}$ 設置位置 $T = \{Y_1, Y_2, Y_3, Y_4, Y_5\}$



$$f(S \cup \{Y_i\}) - f(S) \geq f(T \cup \{Y_i\}) - f(T)$$



監視エリア $f(S)$ は収穫逨減性を有する劣モジュラー関数

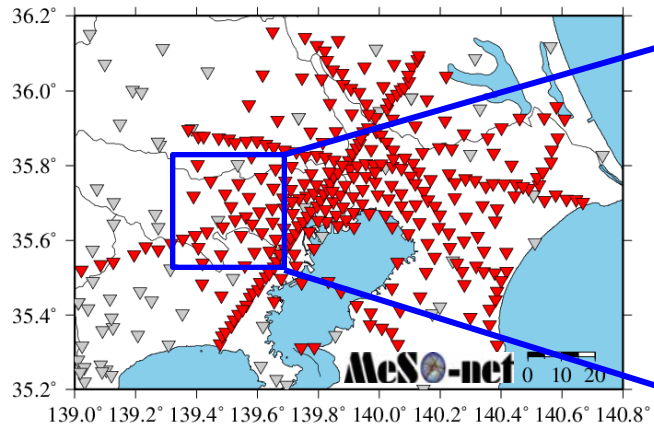
限られた個数のセンサの最適配置(設置個所の集合)を求める問題
劣モジュラー関数最大化問題

$$\rightarrow S = \operatorname{argmax}_S f(S) \quad \text{s.t.} \quad |S| \leq k$$

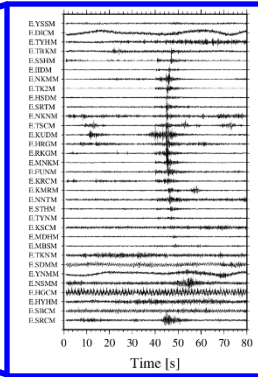
一定の誤差以内で最適解を探すアルゴリズム知られている。

2.4 対象状態逆推定に最適な計測点選択

劣モジュラ関数最大化による首都圏地震観測網における
俊足かつ高精度地震検知のための地震計配置最適化

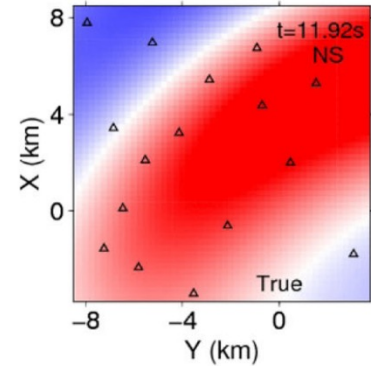


設置箇所296個 ▼ : MeSO-net観測点
▼ : 従来の観測点



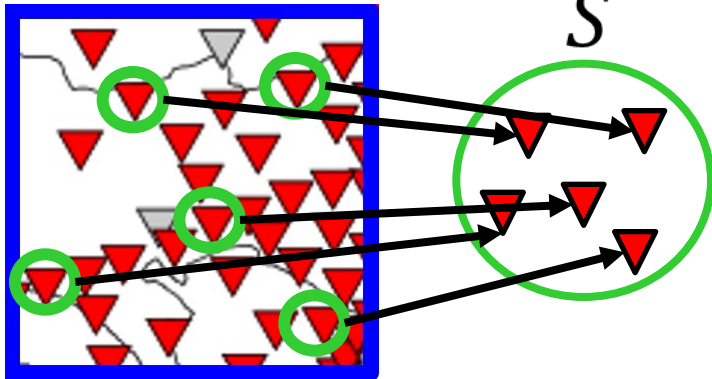
表層～深層
の波伝播に
関する
階層化
地下構造
モデルM

[Kano et al. 2017]

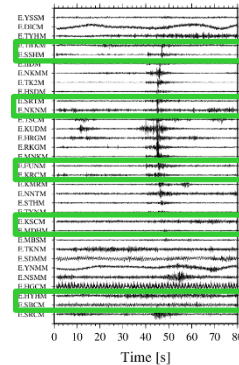


エリア内の地震加速度分布

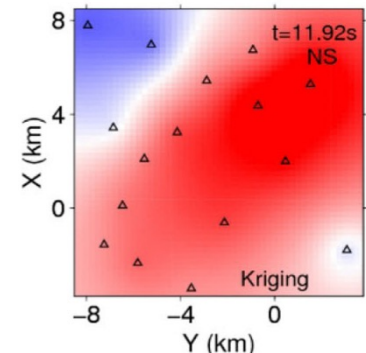
問題設定



監視エリア



表層～深層
の波伝播に
関する
階層化
地下構造
モデルM



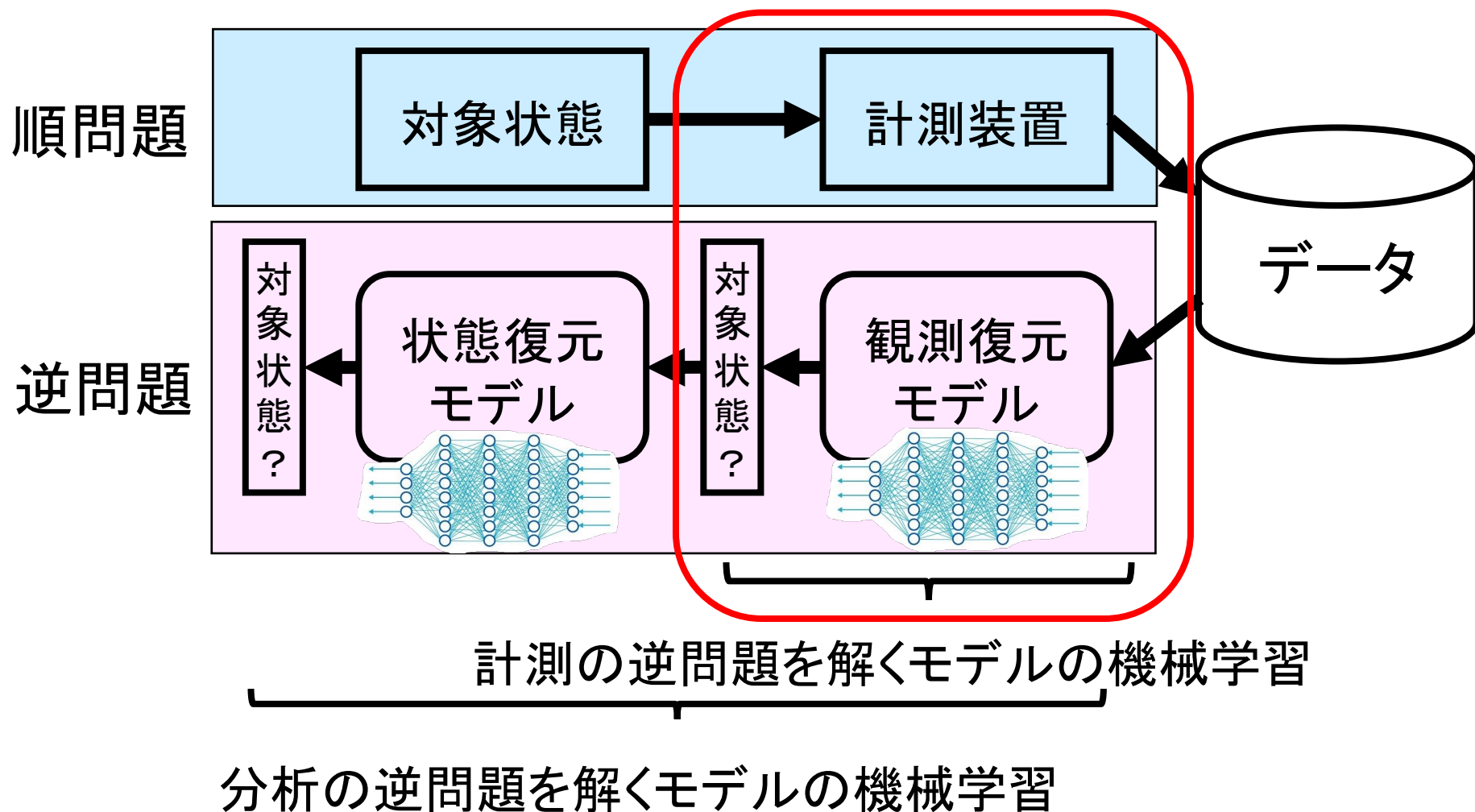
劣モジュラ
関数最大化

緊急時などに少数地震計から俊足に高精度な震度分布を把握

お話の流れ

1. 「計測 × AI = 計測インフォマティクス研究」の背景
2. 計測インフォマティクス研究の論点
3. 計測の逆問題を解く研究開発事例
 - 3.1 細胞蛍光撮影画像からの超高速超解像イメージング
 - 3.2 Noise2Noise深層学習を用いたナノチャンネル計測ノイズ低減
 - 3.3 MSSセンサによる超ロバスト嗅覚計測
4. 分析の逆問題を解く研究開発事例
 - 4.1 AI × ナノ計測デバイスによる1アミノ酸鏡像異性体分子識別
5. 計測インフォマティクスの展望と活動
6. CREST[革新的計測解析] 社会課題解決を志向した革新的計測・解析システムの創出
7. 未踏スケールデータアナリティクスセンターへの期待

3. 計測の逆問題を解く研究開発事例



3.1 細胞蛍光撮影画像からの 超高速超解像イメージング

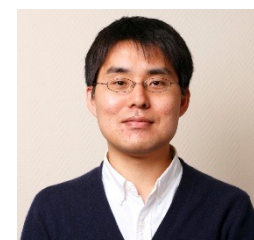
異分野間共同研究（阪大産研）

- 鷺尾研－機械学習

機械学習技術の検討、超解像画像計算の実施



鷺尾 隆



原 聡

- 永井研－生体計測

蛍光物質・計測機器開発及び実験の実施



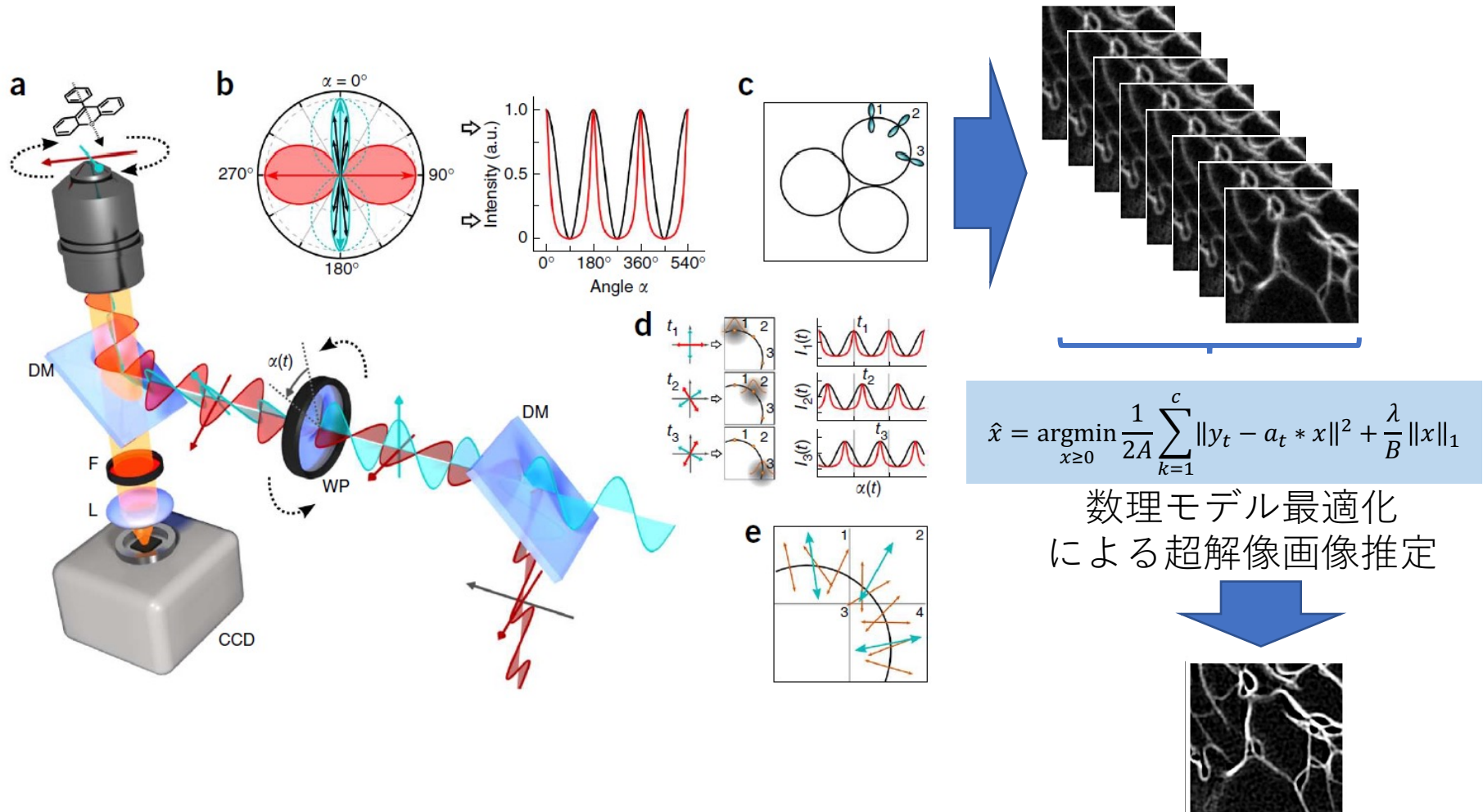
永井 健治



和沢 鉄一

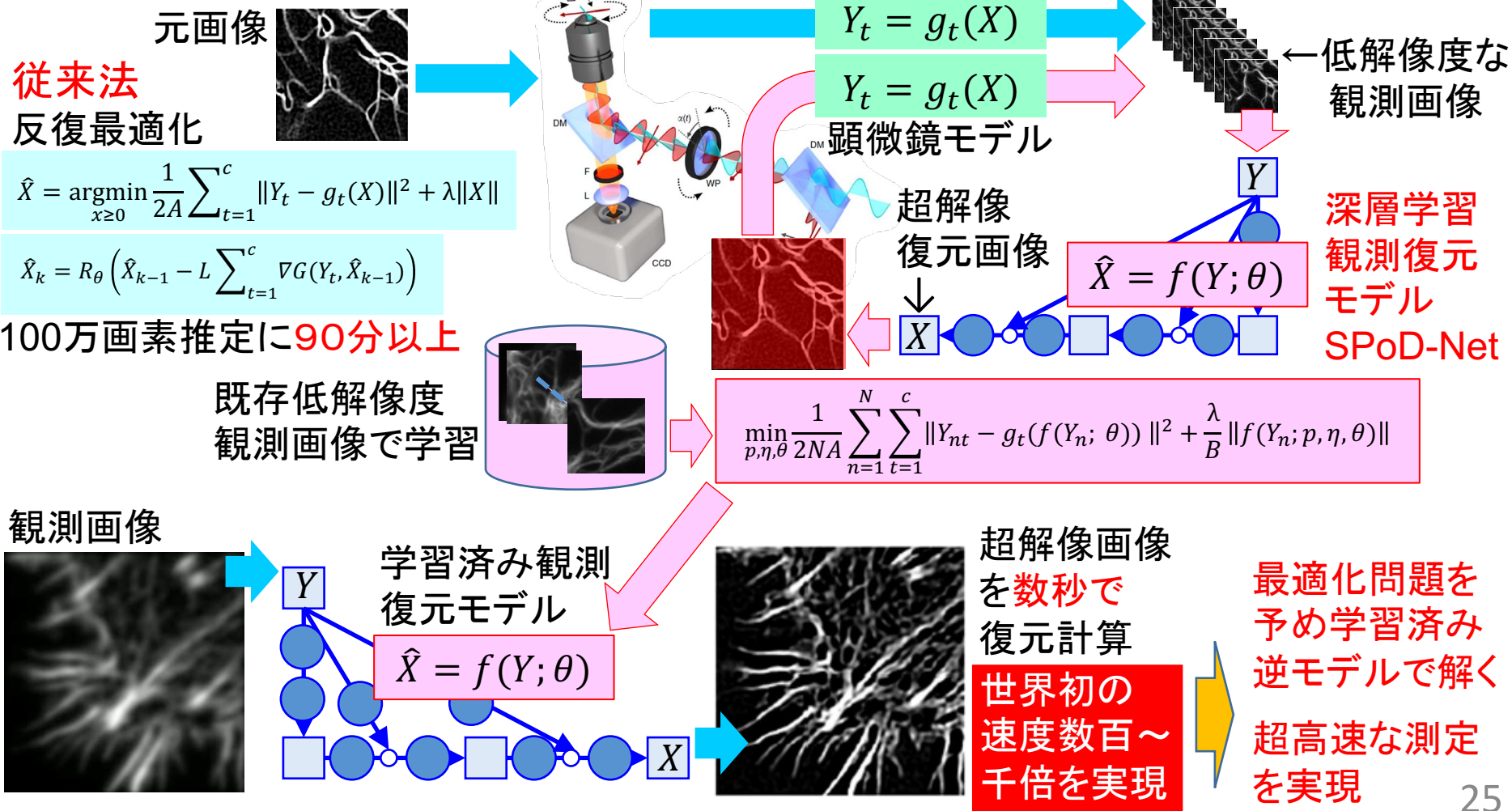
SPoD超解像蛍光顕微鏡 [Nour Hafi et al., Nature Methods, 11(5), 2014]

■ 偏光復調原理を用いた超解像蛍光イメージング (SPoD)



逆問題の深層学習による 超高速超解像生体イメージング技術開発

観測復元モデルを用いた超解像蛍光イメージング(SPoD)を提案



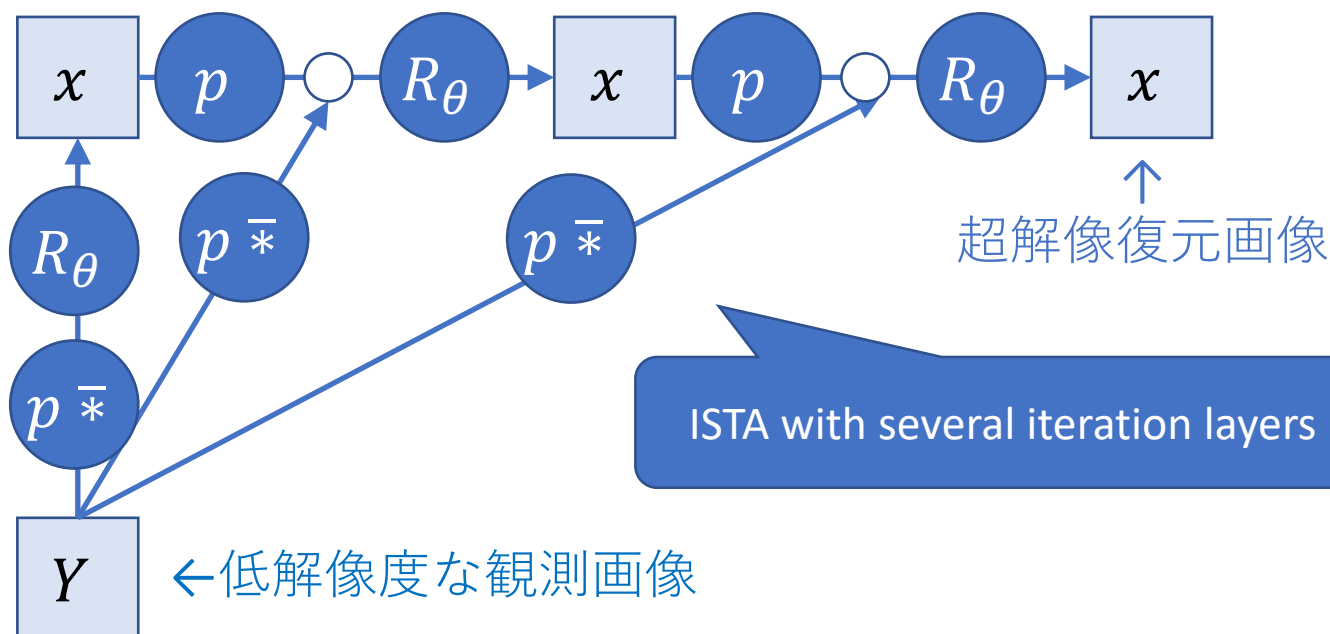
SPoD-NET

■ 最適化計算(ISTA)の反復アルゴリズム

$$\begin{aligned} & \bullet x = R_{\theta}(\eta \sum_{k=1}^c p_t \bar{*} y_t) \\ & \rightarrow x = R_{\theta}(x - \eta \sum_{k=1}^c p_t \bar{*} (p_t * x - y)) \\ & \rightarrow x = R_{\theta}(x - \eta \sum_{k=1}^c p_t \bar{*} (p_t * x - y)) \\ & \rightarrow \dots \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} p_t &\leftarrow a_t \\ \eta &\leftarrow \eta/A \\ \theta &\leftarrow \lambda/B\eta \end{aligned}$$

■ SPoD-NET: 反復過程を少数反復層で模擬する

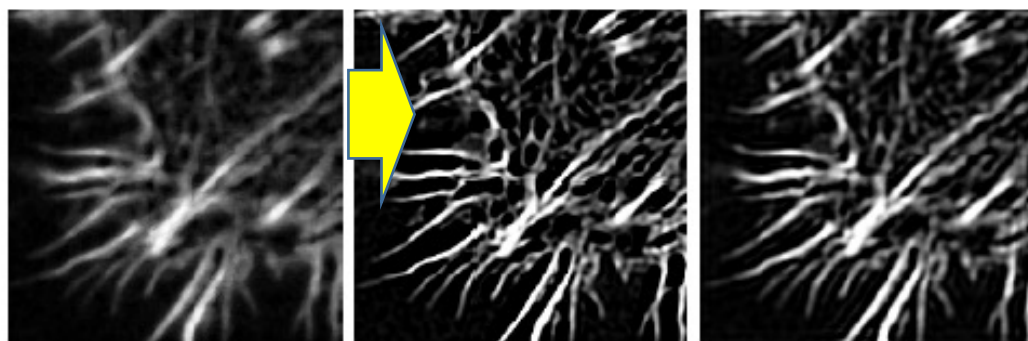


SPoD-NETによる 超高速超解像イメージングの効果

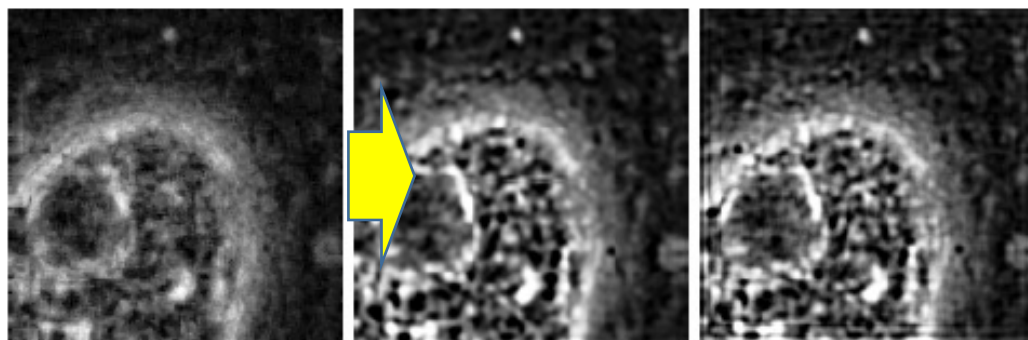
- 本技術: 1秒以下の計算時間
- 従来最速法FISTAの約1000倍の高速化
- オンラインリアルタイムイメージングが可能に

画像データではなく計測過程を学習する。
少数画像から学習可能。
大幅に異なる画像も高精度超高速に復元可能。

超解像画像構成例



(a) 観測画像 (b) FISTA (c) 本技術



(d) 観測画像 (e) FISTA (f) 本技術

3.2 Noise2Noise深層学習を用いた ナノチャンネル計測ノイズ低減

異分野間共同研究（阪大産研）

- 鷺尾研－機械学習

機械学習技術の検討、超解像画像計算の実施



鷺尾 隆



鷹合孝之

- 谷口研－ナノ計測

計測デバイス開発及び実験の実施

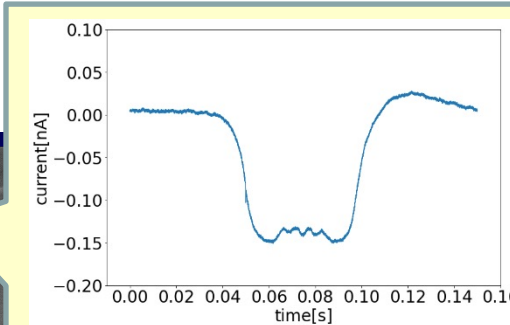
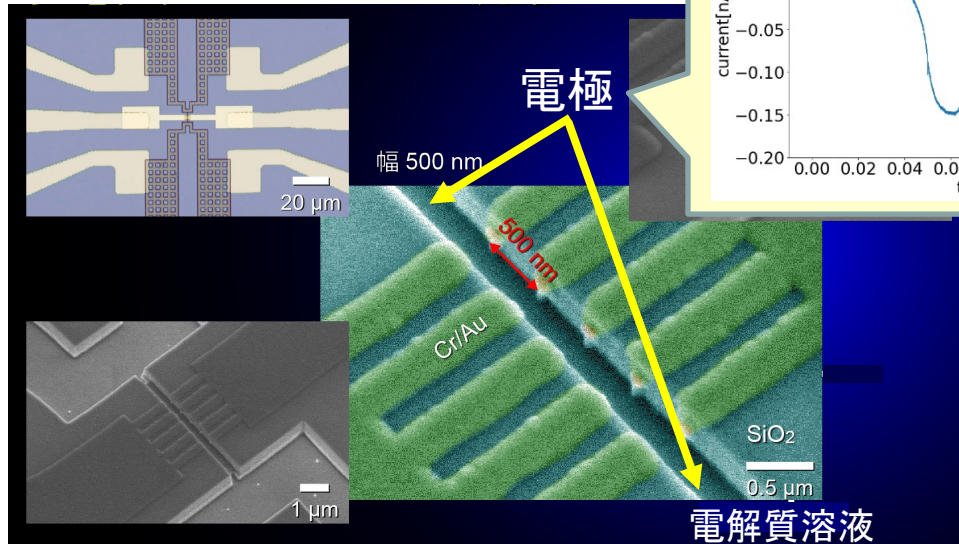


筒井 真楠

深層学習による教師無しノイズ低減モデル学習による高精度計測

取り組む計測問題

多段狭窄ナノチャンネル



5段のナノチャンネルをナノ粒子(細胞)が通過するときに記録される電流波形

→ 粒子の泳動速度変化



運動方程式と理論計算

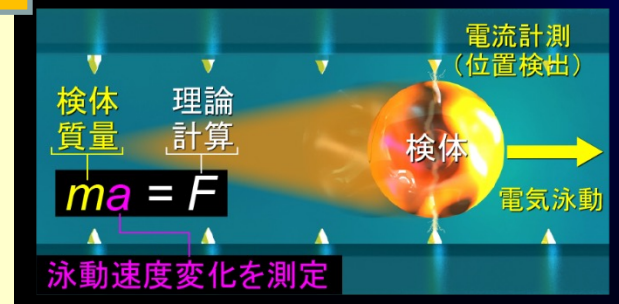
細胞質量測定の可能性

$$F - 6\pi\eta Rv = m \frac{dv}{dt}$$

電気泳動力 動粘性係数 粒子直径

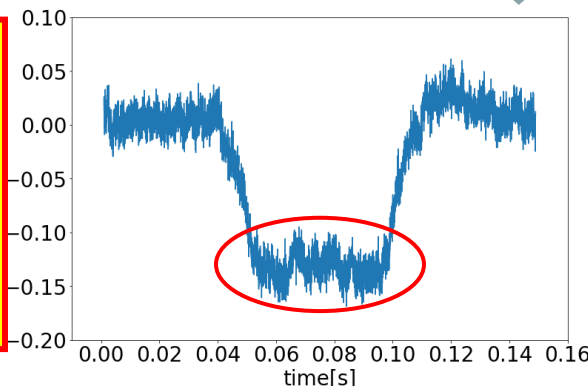
$$v(0) = 0$$
$$v(t) = \frac{F}{6\pi\eta R} (1 - \exp(-\kappa t))$$
$$\kappa = 6\pi\eta R/m$$

加速時間 ~ 0.1 ms (直径 10 μ m) [10 ns (100 nm)]



しかし、実際の波形は。。

情報を損
なわない
ノイズ低
減が必要

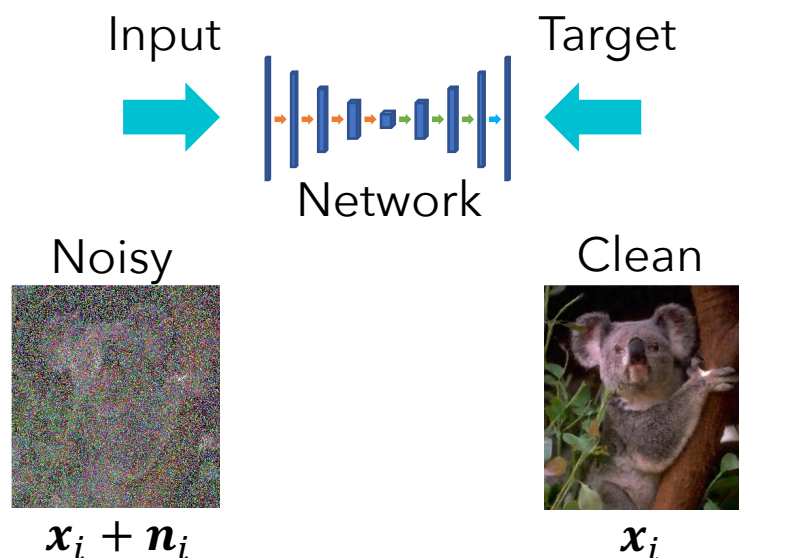


細胞質量
変化検出
細胞増殖
過程制御
究明

機械学習によるノイズ低減法の解説

Noise2Clean

ノイズ入りデータ $\mathbf{x}_i + \mathbf{n}_i$ と
クリーンなデータ $\mathbf{x}_i$ のペアで学習



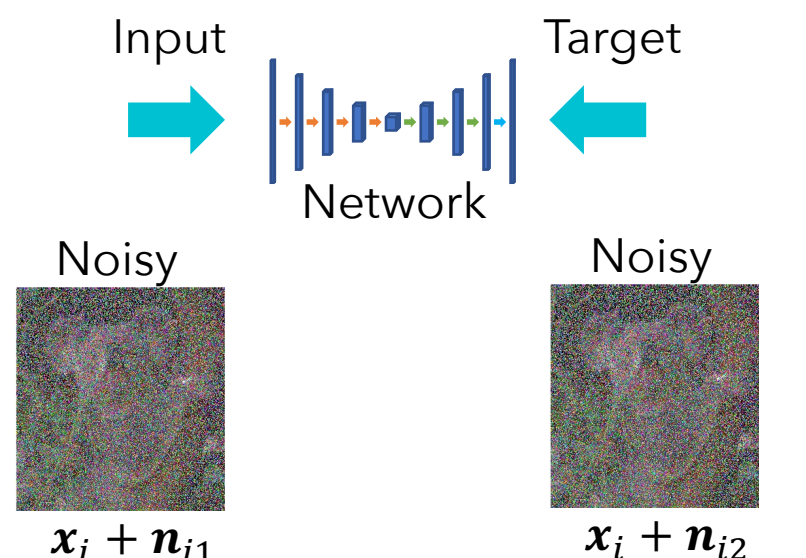
正しい答が必要

ノイズ低減モデル

$$f_n = \operatorname{argmin}_f \mathbb{E}_i [||f(\mathbf{x}_i + \mathbf{n}_i) - \mathbf{x}_i||^2]$$

Noise2Noise [Lehtinen, et al., 2018]

ノイズ入りデータ $\mathbf{x}_i + \mathbf{n}_{i1}$ と
ノイズ入りデータ $\mathbf{x}_i + \mathbf{n}_{i2}$ のペアで学習



正しい答が不要

ノイズ低減モデル

$$\tilde{f}_n = \operatorname{argmin}_f \mathbb{E}_i [||f(\mathbf{x}_i + \mathbf{n}_{i1}) - f(\mathbf{x}_i + \mathbf{n}_{i2})||^2]$$

Noise2Noise法の性質

ノイズを含む事例のペア $(\mathbf{x}_i + \mathbf{n}_{i1}, \mathbf{x}_i + \mathbf{n}_{i2})$ で学習する Noise2Noise と、ノイズを含む事例とクリーンな事例のペア $(\mathbf{x}_i + \mathbf{n}_i, \mathbf{x}_i)$ で学習する Noise2Clean は数学的には等価である。

Noise2Noise $\tilde{f}_n = \operatorname{argmin}_f \mathbb{E}_i [\|f(\mathbf{x}_i + \mathbf{n}_{i1}) - (\mathbf{x}_i + \mathbf{n}_{i2})\|^2]$

ノイズを含む事例 $\mathbf{x}_i + \mathbf{n}_{i1}$ のネットワーク出力 $f(\mathbf{x}_i + \mathbf{n}_{i1})$ とノイズを含む事例 $\mathbf{x}_i + \mathbf{n}_{i2}$ の間MSEを最小にするよう学習

同等

仮定

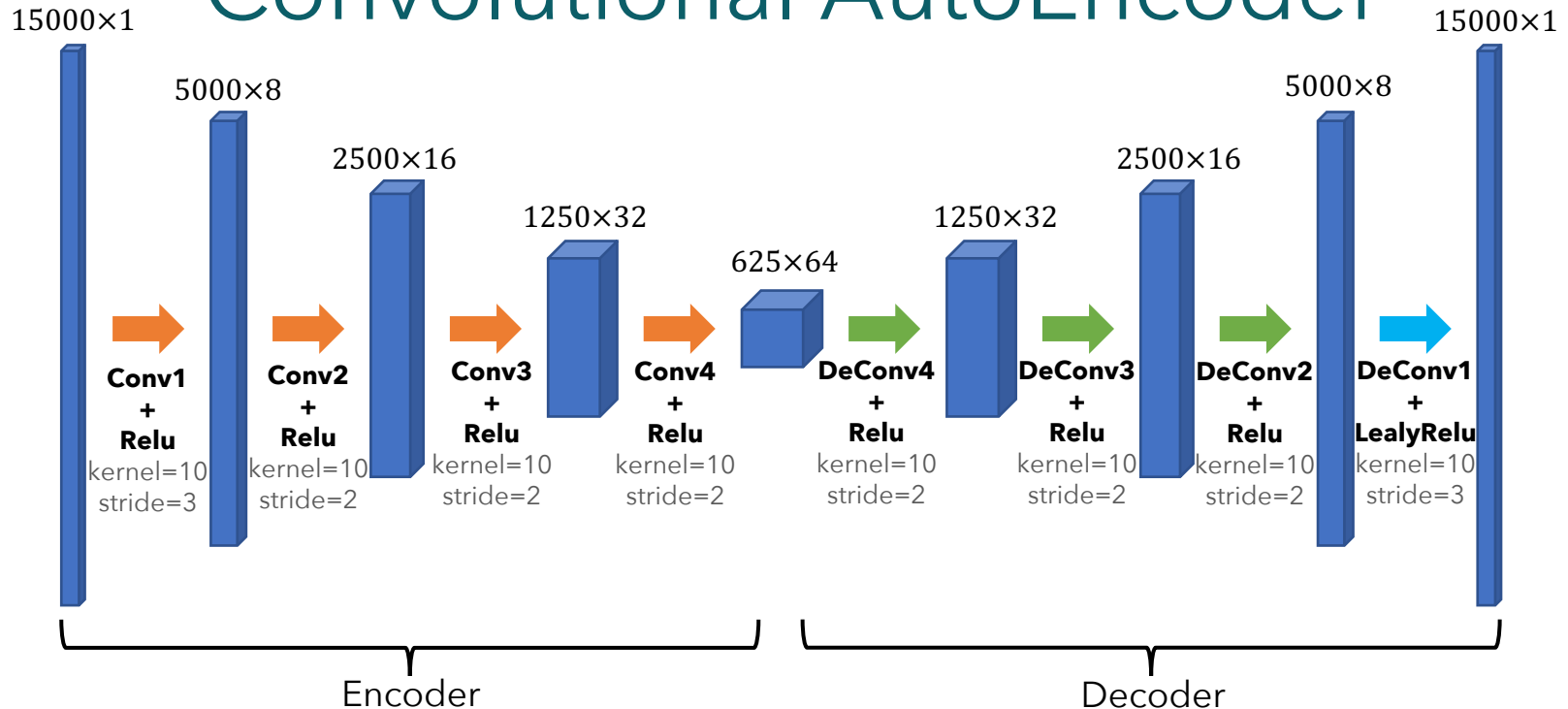
- $\mathbf{n}_{i1}$ と $\mathbf{n}_{i2}$ は独立同分布 (i.i.d.)
- ノイズは平均ゼロ $\mathbb{E}_i[\mathbf{n}_{i1}] = \mathbb{E}_i[\mathbf{n}_{i2}] = \mathbf{0}$

Noise2Clean $f_n = \operatorname{argmin}_f \mathbb{E}_i [\|f(\mathbf{x}_i + \mathbf{n}_i) - \mathbf{x}_i\|^2]$

ノイズを含む事例 $\mathbf{x}_i + \mathbf{n}_{i1}$ のネットワーク出力 $f(\mathbf{x}_i + \mathbf{n}_{i1})$ とクリーンな事例 $\mathbf{x}_i$ の間MSEを最小にするよう学習

複雑な時系列波形に関するNoise2Noise法の実装(1)

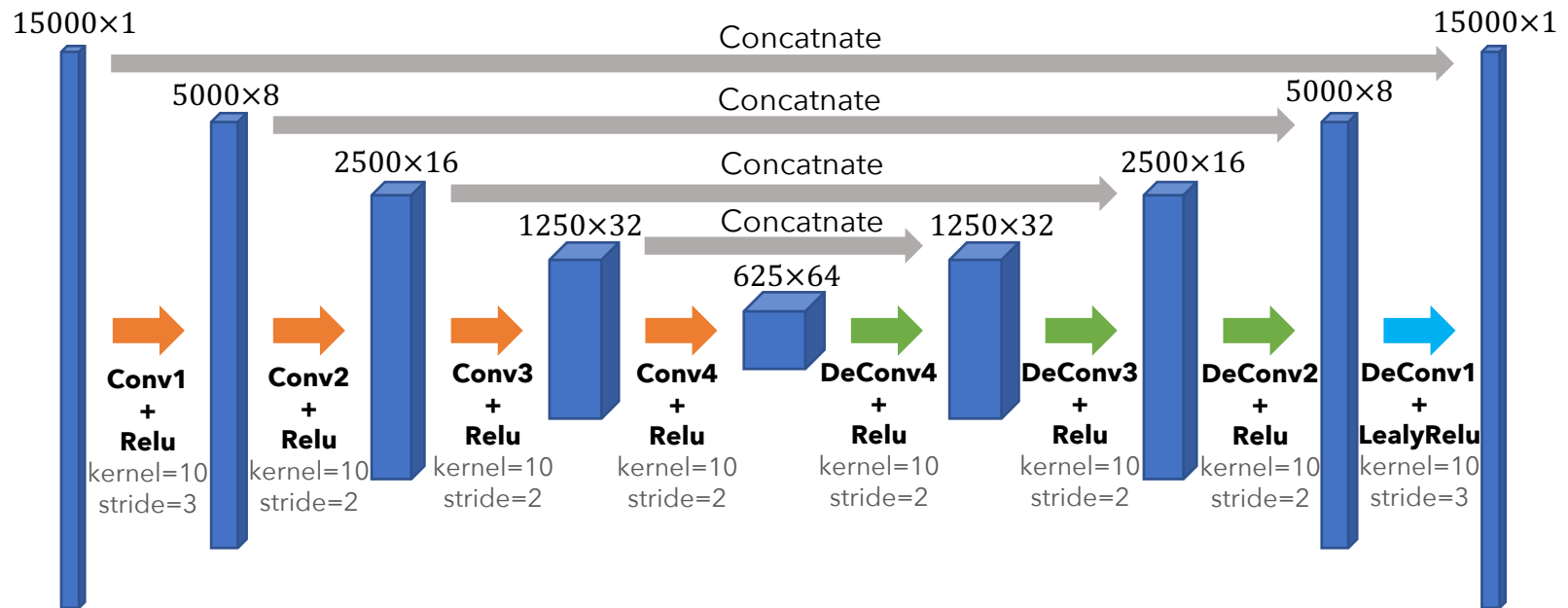
Convolutional AutoEncoder



- 各層はConvolution層からなる.
- 特徴をぼやけさせる効果があるプーリングは用いずストライドの設定によってデータの次元削減を行う.
- 活性化関数は最終層に LeakyReLU, 他は ReLU を採用

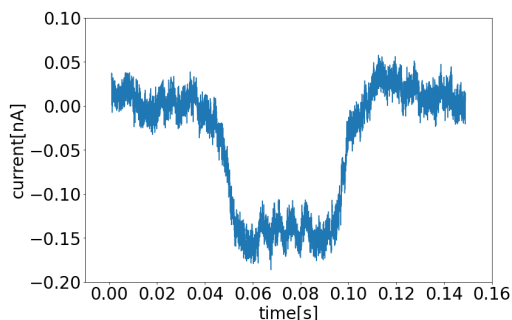
複雑な時系列波形に関するNoise2Noise法の実装(2)

U-net

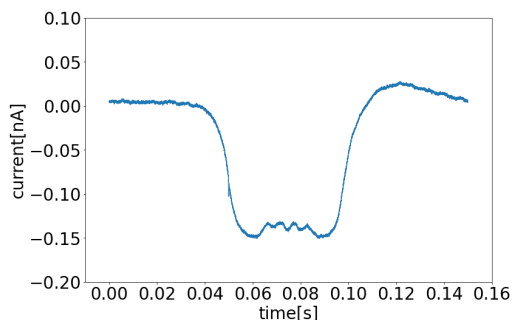


- AutoEncoder のエンコーダ部からデコーダ部にいくつかパスを設けて、位置情報の強調や収束のしやすさを狙ったもの。
- 画像データの処理に用いられる場合は、画像内の対象物体の位置情報をほど良く残す性質をもつことで知られている。

1粒子通過波形実データに関するノイズ低減結果

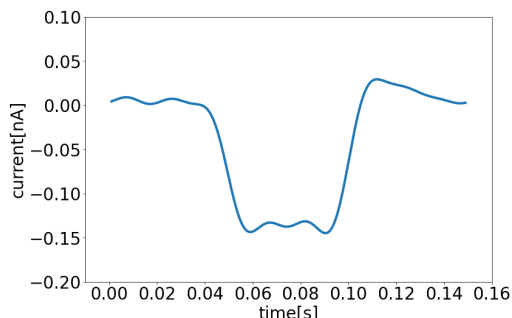


元波形

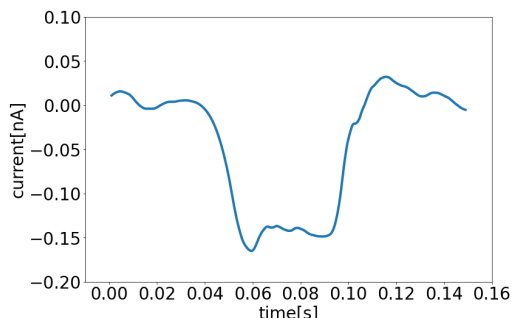


平均波形

元波形の一例と、
全データの平均波形

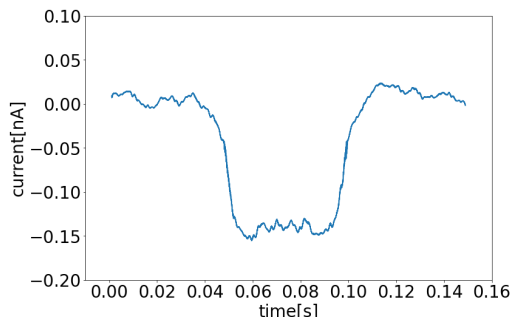


フーリエ変換による
ノイズ低減を行った波形

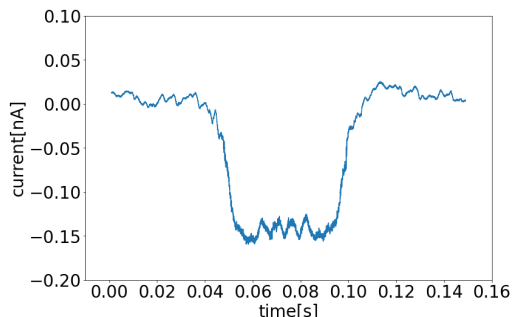


ウェーブレット変換による
ノイズ低減を行った波形

ノイズは低減できているが、
粒子が5段の狭窄部を通り抜
ける様子がほとんど残らない。



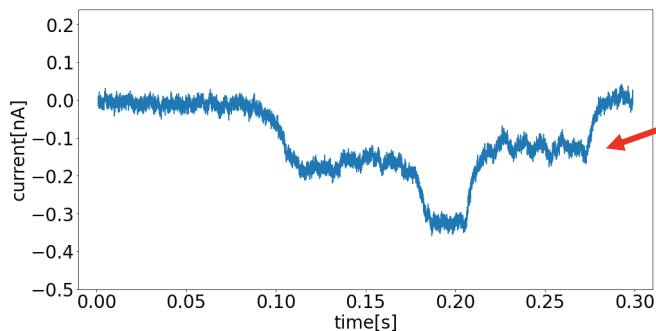
AutoEncoder による
ノイズ低減を行った波形



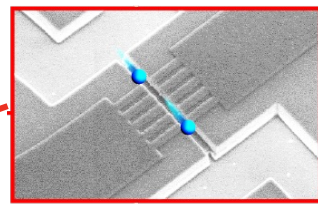
U-netによる
ノイズ低減を行った波形

ノイズが低減できている上、
粒子が5段の狭窄部を通り抜
ける様子が良く残っている。

2粒子通過波形実データに関するノイズ低減結果

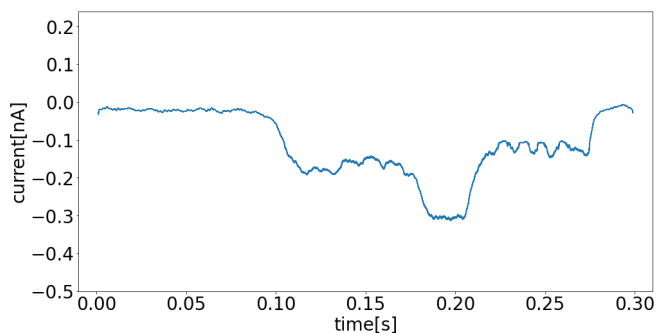


2 粒子通過の計測電流波形

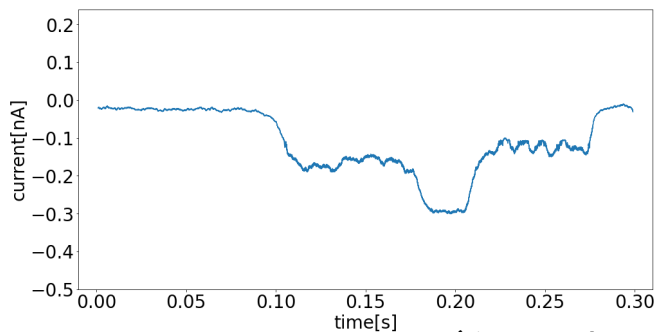


Input

1粒子通過の計測電流波形を用いて学習したノイズ低減モデル



AutoEncoder によるノイズ低減波形



U-net によるノイズ低減波形

Output

両モデルとも効果的にノイズ低減を行い、各粒子が狭窄部を通過する際に生じる電流の一時的減少を明確に導いている。

U-net の結果には僅かながらノイズが残留するが、より詳細な変化を捉えている。

3.3 MSSセンサによる超ロバスト嗅覚計測



異分野間共同研究（阪大産研）

- 鷺尾研（大阪大学 産業科学研究所）
機械学習技術の検討，超ロバスト計測原理の開
発



鷺尾 隆

- 吉川グループ（物質・材料研究機構）
嗅覚センサの開発，計測実験の実施



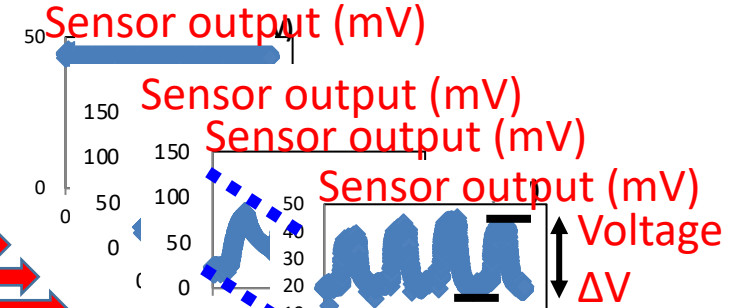
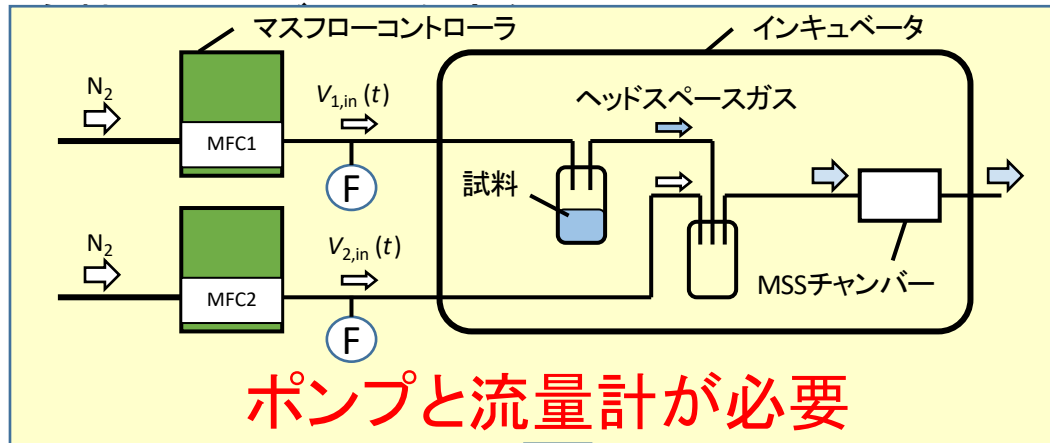
吉川 元起



今村 岳

従来の嗅覚センシングと課題

吉川元 起, 今村 岳 (物質・材料研究機構) のMSS (Membrane-type Surface stress Sensor) を用いたコンパクト嗅覚センシングの実現

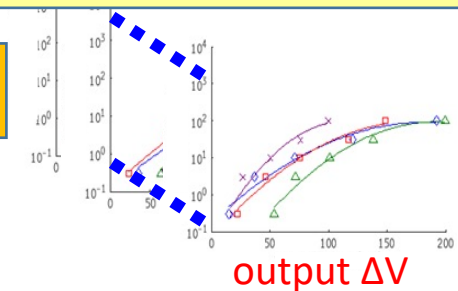


計測過程に基づく
新しい機械学習
による推定を提案



ガスの種類・濃度
の推定結果

特性の異なる複数センサ
情報を統合し高精度推定



出力 ΔV と化合物ガスの
種類・濃度の関係を学習

計測指向の機械学習による推定

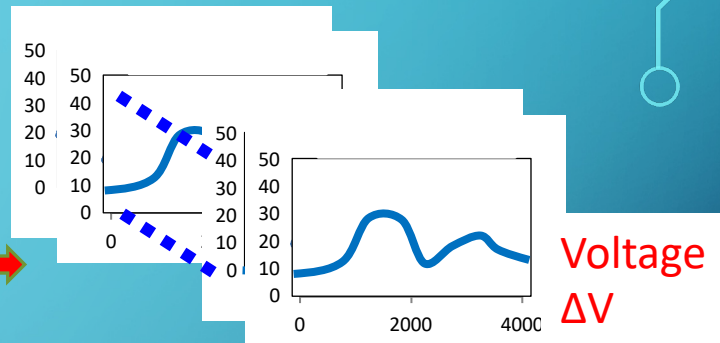


Sensor 1

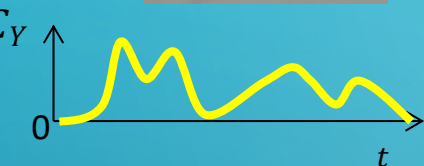


Sensor 4
MSS

Output (mV)



Random
Gas Input



入力: C_Y

未知だが
全センサ共通

伝達関数 $F_{Y1} : X_{Y1} = F_{Y1}C_Y$

伝達関数 $F_{Y2} : X_{Y2} = F_{Y2}C_Y$

伝達関数 $F_{Y3} : X_{Y3} = F_{Y3}C_Y$

伝達関数 $F_{Y4} : X_{Y4} = F_{Y4}C_Y$

出力: X_{Y1}

出力: X_{Y2}

出力: X_{Y3}

出力: X_{Y4}

各MSSの伝達関数は同じガスでも異なる。各出力

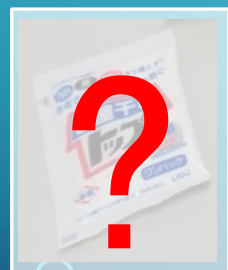
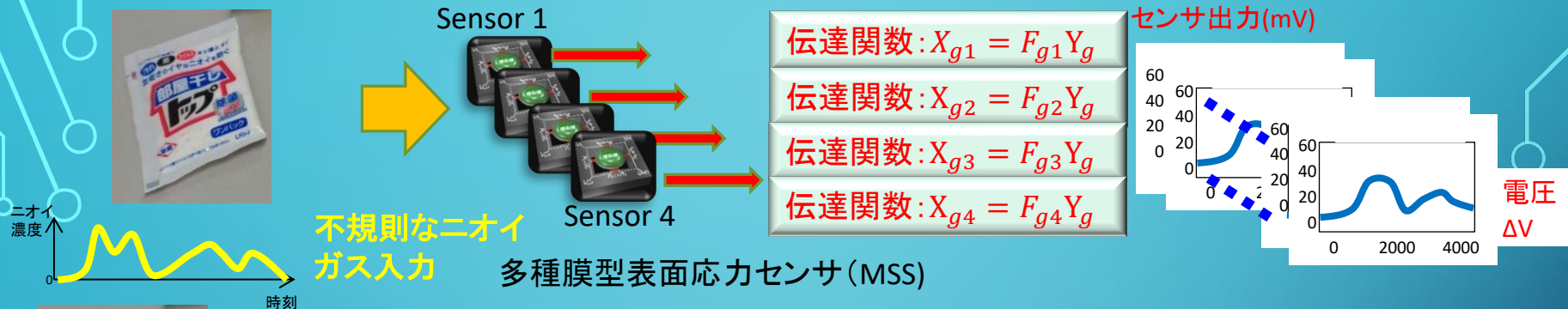
$$\frac{X_{Y1}}{X_{Y2}} = \frac{F_{Y1}}{F_{Y2}}$$

$$\frac{X_{Y1}}{X_{Y3}} = \frac{F_{Y1}}{F_{Y3}}$$

$$\frac{X_{Y3}}{X_{Y4}} = \frac{F_{Y3}}{F_{Y4}}$$

入力波形が異なっても出力の比は**不変**

計測指向の機械学習による推定



$\frac{X_{g1}}{X_{g2}} = \frac{F_{g1}}{F_{g2}}$	$\frac{X_{g1}}{X_{g3}} = \frac{F_{g1}}{F_{g3}}$	$\frac{X_{g3}}{X_{g4}} = \frac{F_{g3}}{F_{g4}}$
$\frac{X_{u1}}{X_{u2}} = \frac{F_{u1}}{F_{u2}}$	$\frac{X_{u1}}{X_{u3}} = \frac{F_{u1}}{F_{ug3}}$	$\frac{X_{u3}}{X_{u4}} = \frac{F_{u3}}{F_{u4}}$
⊥	⊥	⊥
$\frac{X_{g1}}{X_{g2}} = \frac{F_{g1}}{F_{g2}}$	$\frac{X_{g1}}{X_{g3}} = \frac{F_{g1}}{F_{g3}}$	$\frac{X_{g3}}{X_{g4}} = \frac{F_{g3}}{F_{g4}}$

センサ出力各々の比が同じなら
同じガス種

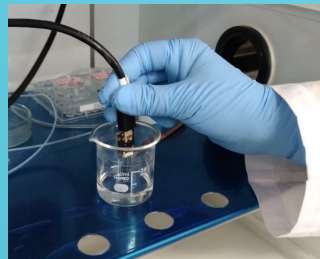
センサ出力の
幾つかの比
が異なるなら
異なるガス種

入力波形やセンサ関数を知ることなくガス種を推定可能

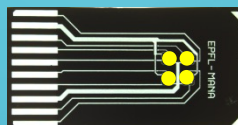
提案した嗅覚センサの実証

世界初!!

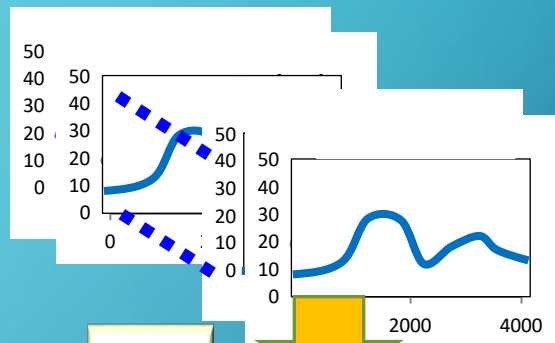
学習データベースの準備



MSS 4CH



センサ出力(mV)



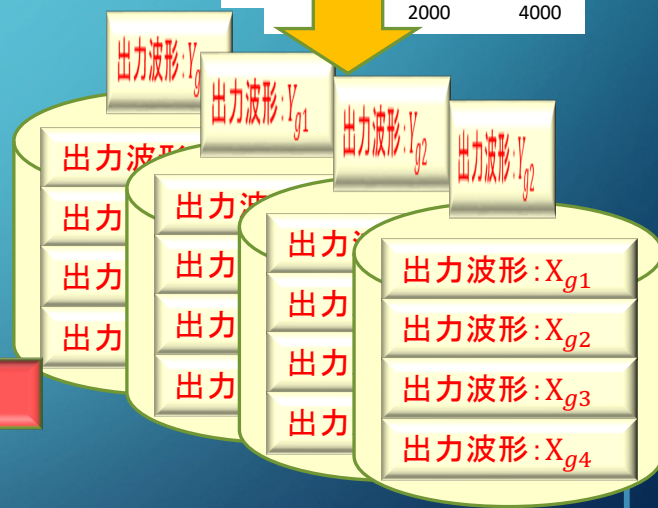
ニオイの実計測



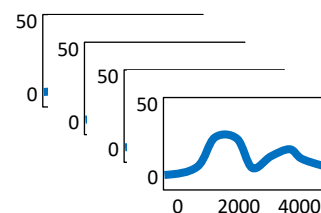
出力波形: Y_{g1}



機械学習
推定アル
ゴリズム



センサ出力(mV)

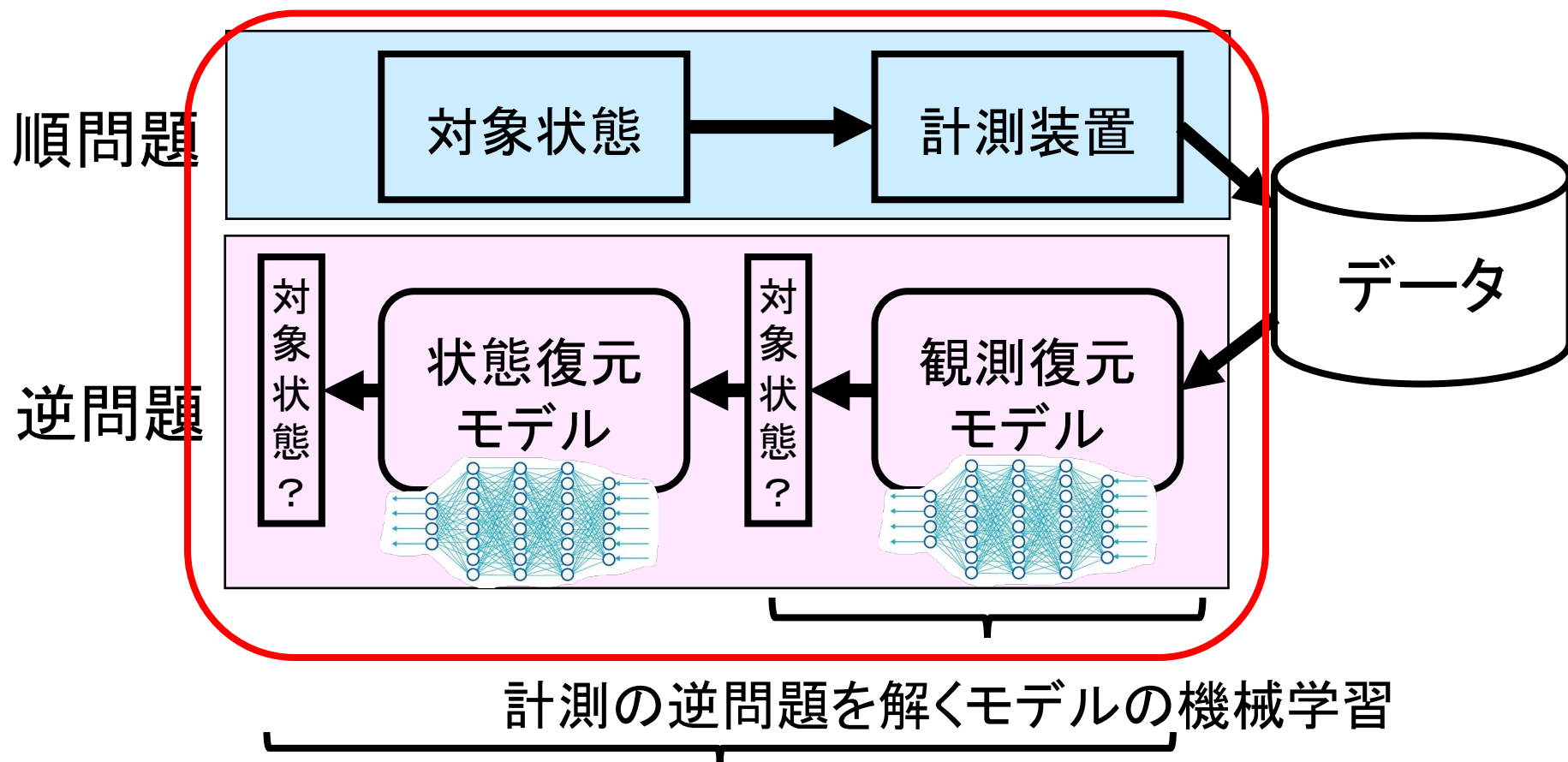


ほぼ100%正
しいニオイを推定

お話の流れ

1. 「計測 × AI = 計測インフォマティクス研究」の背景
2. 計測インフォマティクス研究の論点
3. 計測の逆問題を解く研究開発事例
 - 3.1 細胞蛍光撮影画像からの超高速超解像イメージング
 - 3.2 Noise2Noise深層学習を用いたナノチャンネル計測ノイズ低減
 - 3.3 MSSセンサによる超ロバスト嗅覚計測
4. 分析の逆問題を解く研究開発事例
 - 4.1 AI × ナノ計測デバイスによる1アミノ酸鏡像異性体分子識別
5. 計測インフォマティクスの展望と活動
6. CREST[革新的計測解析] 社会課題解決を志向した革新的計測・解析システムの創出
7. 未踏スケールデータアナリティクスセンターへの期待

4. 分析の逆問題を解く研究開発事例



分析の逆問題を解くモデルの機械学習

4.1 AI×ナノ計測デバイスによる1アミノ酸 鏡像異性体分子識別



異分野間共同研究（阪大産研）

- 鷺尾研 – 機械学習
機械学習技術の検討、数値実験の実施



鷺尾 隆



吉田 剛



鷹合 孝之

- 谷口研 – ナノテクノロジー
計測デバイス開発及び実験の実施



谷口 正輝

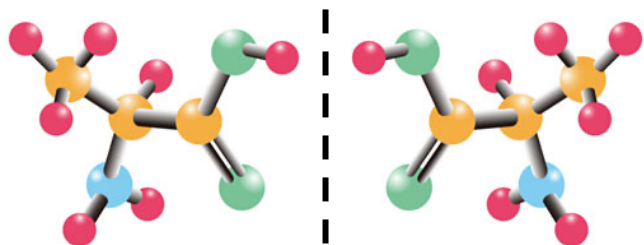


大城 敬人

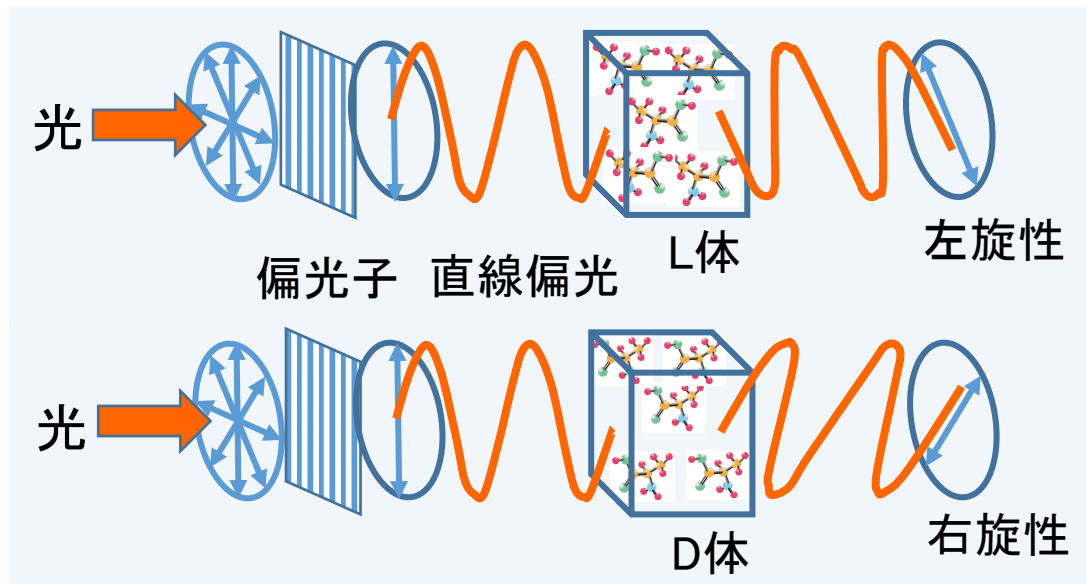


小本 祐貴

鏡像異性体の1分子識別問題

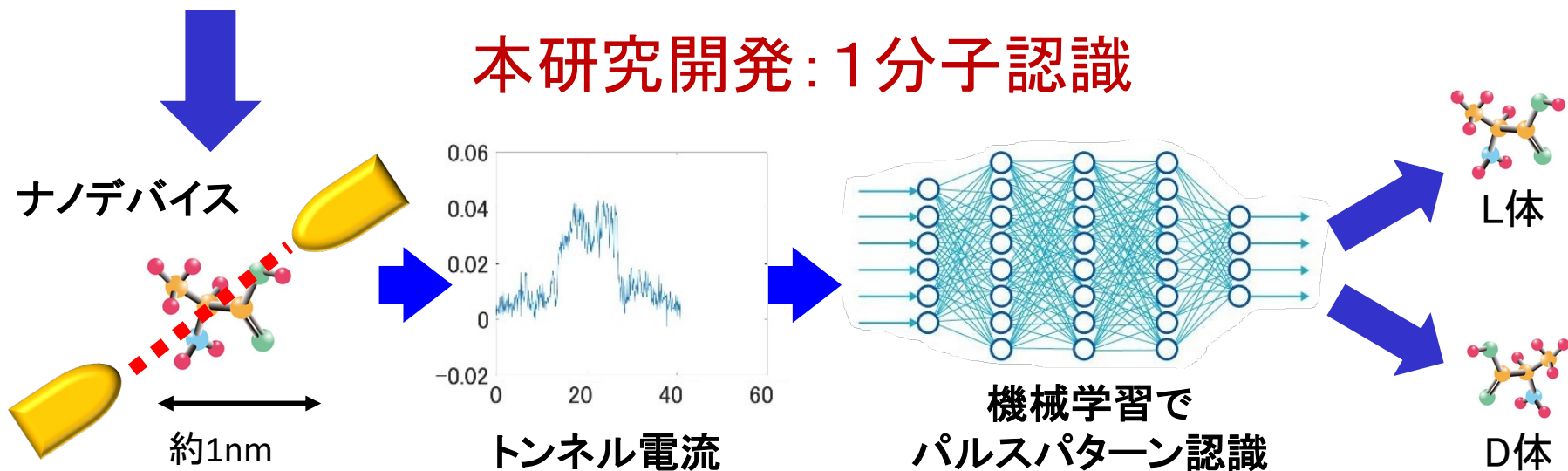


L体:透過光面の左旋性
D体:透過光面の右旋性
鏡に写した関係

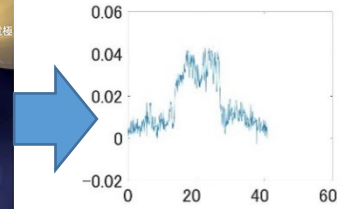
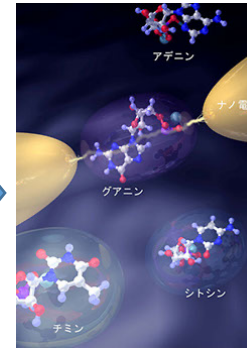
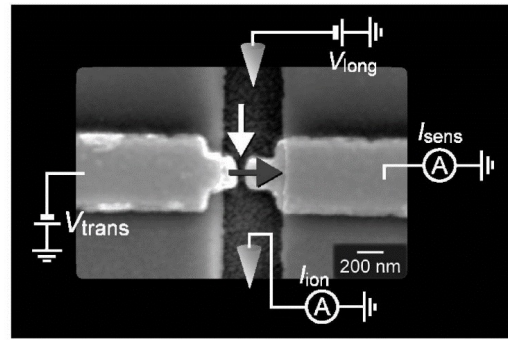
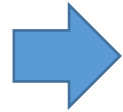
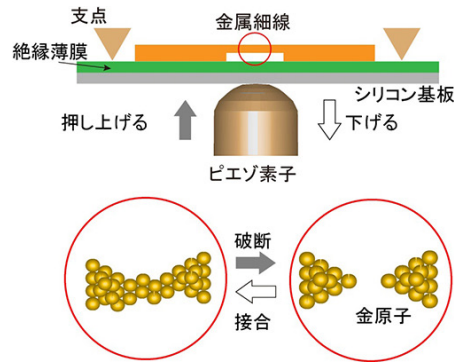


従来、1分子毎にL体,D体に
選り分けることは困難

本研究開発: 1分子認識



ナノギャップによる1分子計測とノイズ除去の必要性



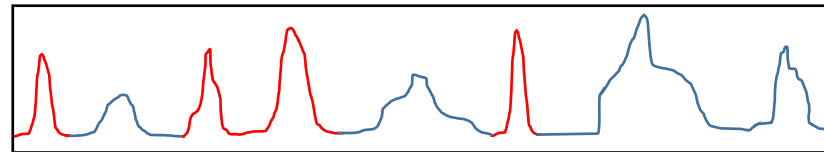
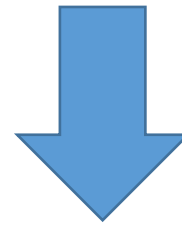
トンネル電流パルス

機械的破断接合(MCBJ)により幅1nm以下のギャップを作成。0.01nm以下の精度で幅を制御。上下電界で分子の泳動を制御。左右電界で分子がギャップ通過時のトンネル電流を計測。

1分子の通過

ナノギャップ電極ではトンネル電流ノイズパルス発生が不可避

- 夾雑物の混在
- トンネル電流の量子雑音
- 電極表面原子の熱運動



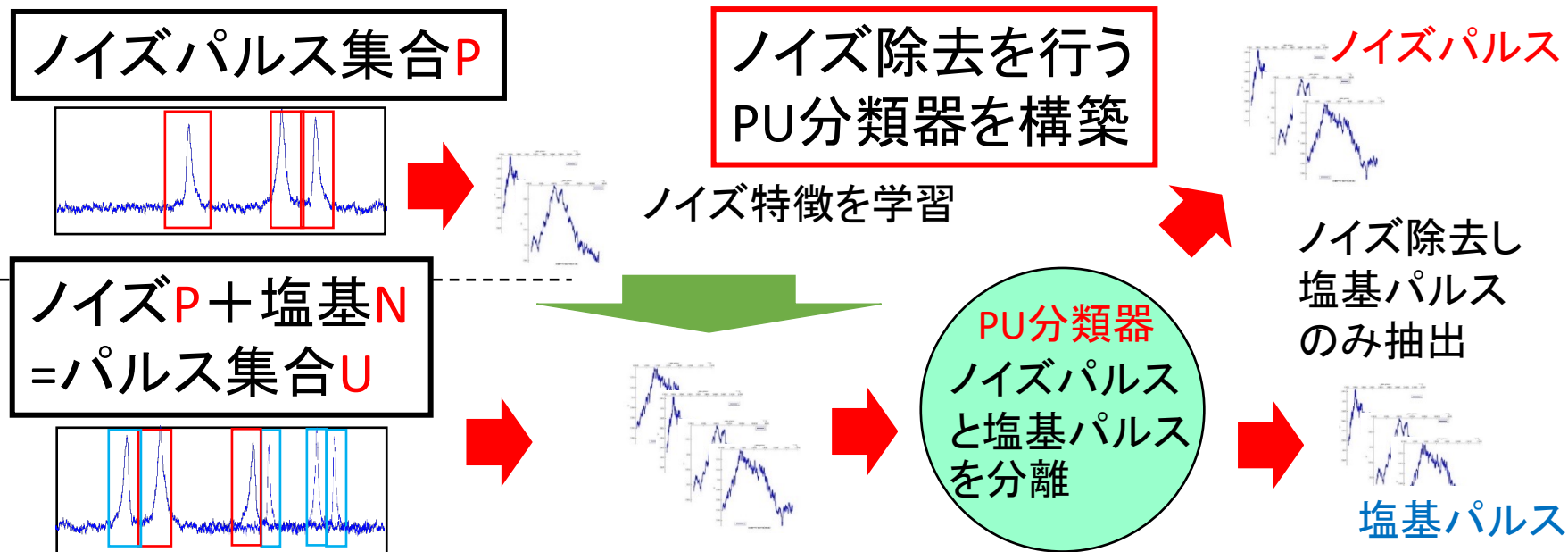
ノイズ
試料

ノイズパルスにより機械学習のパターン認識精度が低下

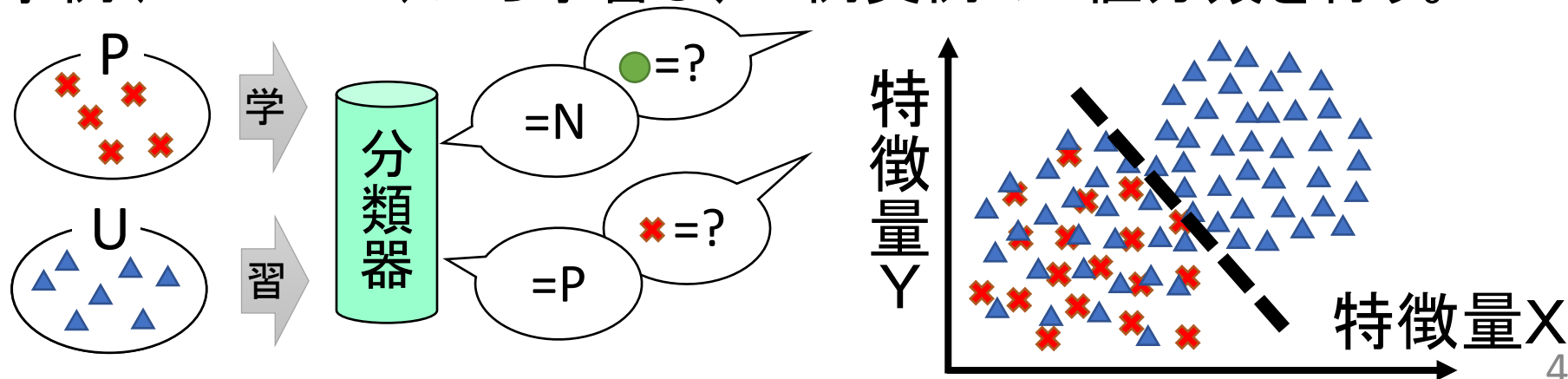
ノイズパルス除去が必要

問題: どれが本物でどれがノイズのパルスか不明

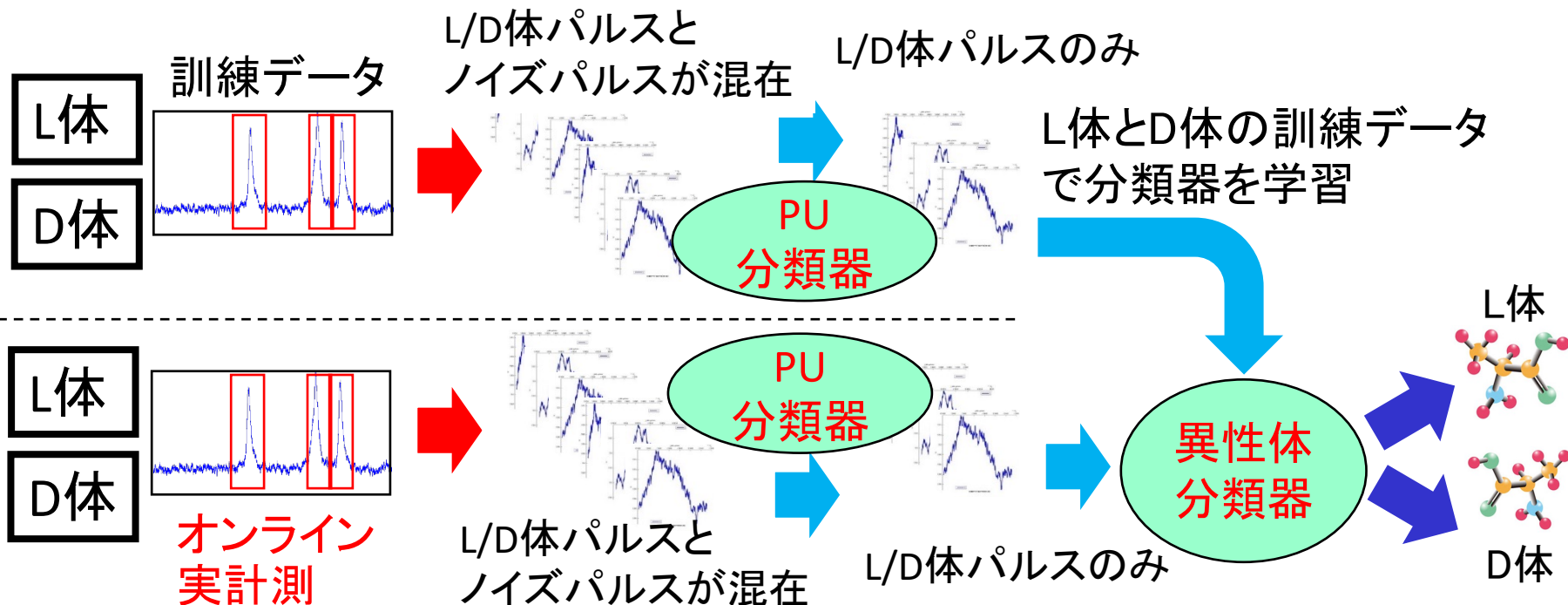
PU弱学習分類器によるノイズ除去



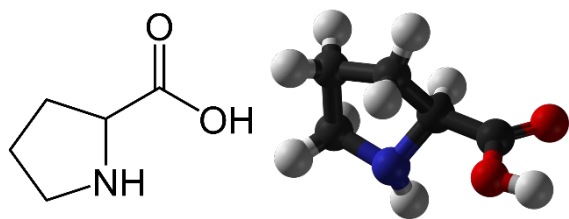
PU分類では、ラベル付き正例 (Positive, Labeled) とラベル無し事例 (Unlabeled) から学習し、正例負例の2値分類を行う。



アミノ酸分子の鏡像異性体(L体とD体)の1分子識別



実適用例



L/D-プロリン(Proline)
 α -アミノ酸

CNN

True label	Predicted label	
	D-Proline	L-Proline
D-Proline	0.89	0.11
L-Proline	0.09	0.91

Randomforest

True label	Predicted label	
	D-Proline	L-Proline
D-Proline	0.89	0.11
L-Proline	0.09	0.91

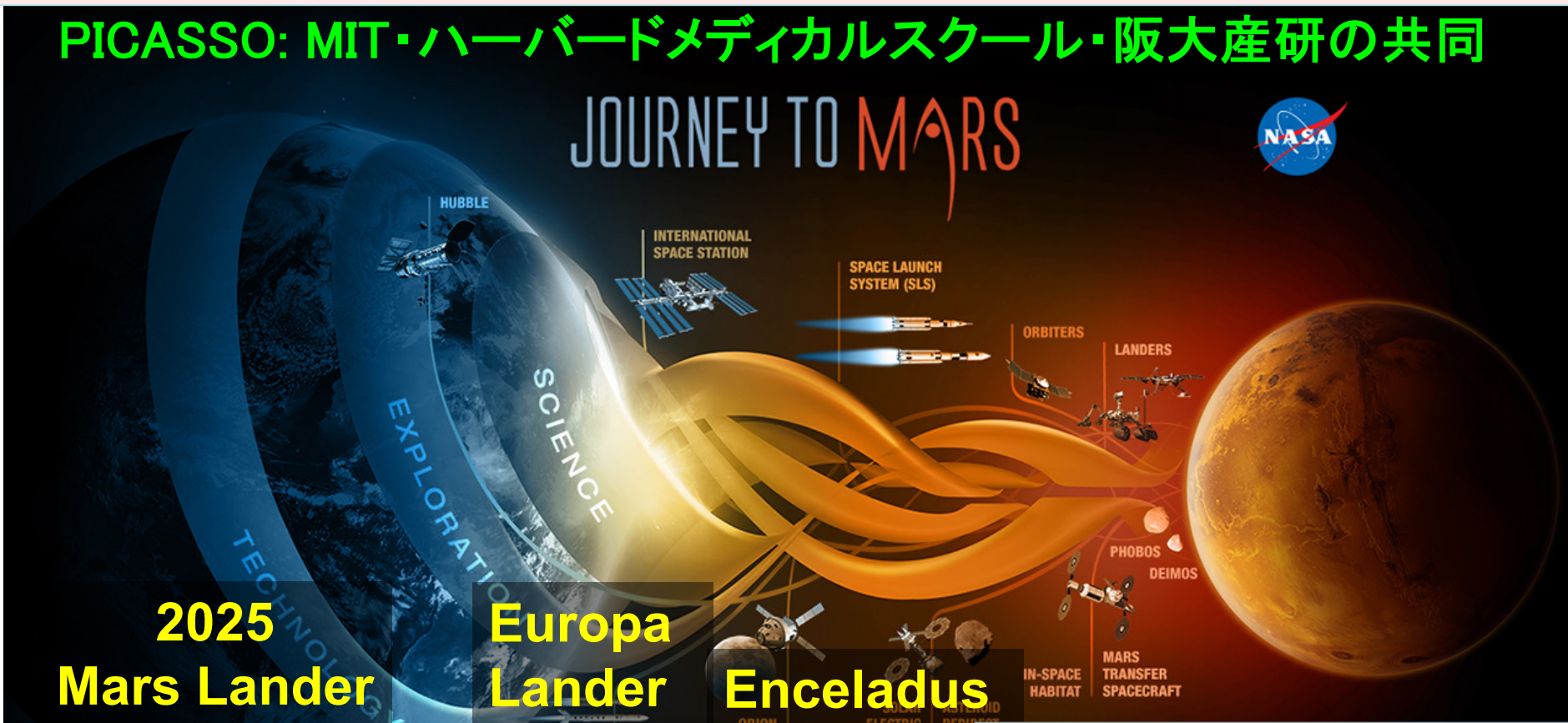
F-measure 0.89

NASA地球外生命体探索プロジェクトに採択・中間評価通過

Single Amino Acid Identification for NASA Extraterrestrial Life Search

PICASSO: MIT・ハーバードメディカルスクール・阪大産研の共同

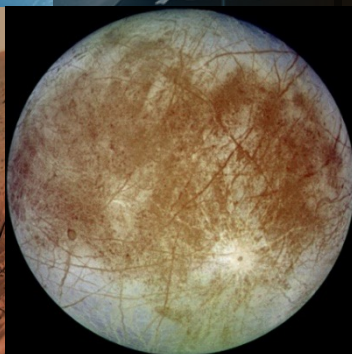
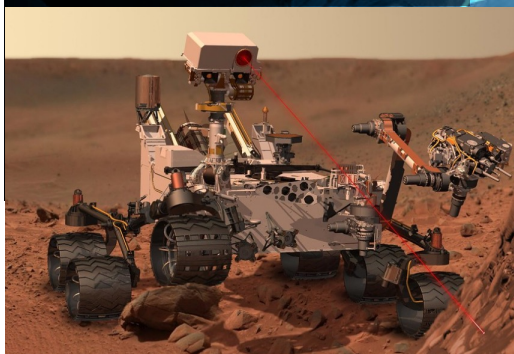
JOURNEY TO MARS



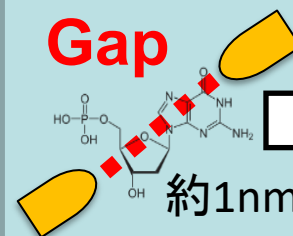
2025
Mars Lander

Europa
Lander

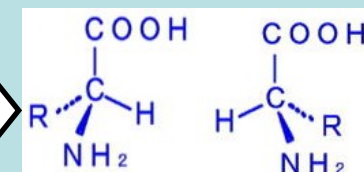
Enceladus



Nano
Gap



Amino Acid



Type L Type D

お話の流れ

1. 「計測 × AI = 計測インフォマティクス研究」の背景
2. 計測インフォマティクス研究の論点
3. 計測の逆問題を解く研究開発事例
 - 3.1 細胞蛍光撮影画像からの超高速超解像イメージング
 - 3.2 Noise2Noise深層学習を用いたナノチャンネル計測ノイズ低減
 - 3.3 MSSセンサによる超ロバスト嗅覚計測
4. 分析の逆問題を解く研究開発事例
 - 4.1 AI × ナノ計測デバイスによる1アミノ酸鏡像異性体分子識別
5. 計測インフォマティクスの展望と活動
6. CREST[革新的計測解析] 社会課題解決を志向した革新的計測・解析システムの創出
7. 未踏スケールデータアナリティクスセンターへの期待

5.1 計測インフォーマティクスの展望

- 計測インフォーマティクスの研究論点
 - (1) 分析のための推定と計測のための推定
 - (2) ベイズ推定・スパース推定
 - (3) 計測系の効率的較正
 - (4) 対象状態逆推定に最適な計測点選択
 - その他.



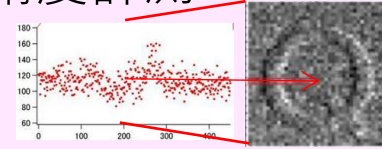
**計測問題の特質を見据えた
さらなる機械学習原理の発展が待たれる**

5.1 計測インフォマティクスの展望

1. 物理的・数理的限界を超える超高精度計測

例：量子精度限界を超える計測

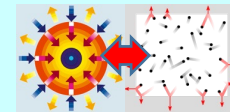
例：ノイズに完全に埋もれた現象の計測



計測物理機構や計測デバイス性能に制約された21世紀初頭までの学術

2. 激変環境下の超ロバスト計測

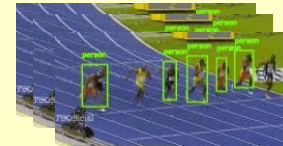
例：極高温高压から極低温低压まで有効な計測



3. ピコ秒スケール現象までの超高速計測

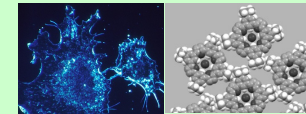
例：1分子高速反応過程の直接計測

例：時系列・動画像の超高密度大量連続計測



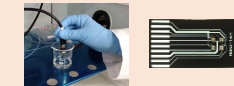
4. 極少光量や極微量物質の超高効率計測

例：複雑な物質構造の超低ダメージ計測



5. 広範普及のための超ローコスト・超コンパクト計測

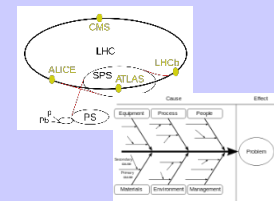
例：スマートフォンに実装可能なニオイ計測



6. 現象解明のための超見える化計測

例：物理・化学機構と観測結果の関係計測

例：物質反応時状態変化の因果関係計測



情報科学により物理的・物質的制約から大幅に解放された計測に基づく21世紀の学術の飛躍的发展

ご紹介

情報計測CREST・さがけ主催セミナー(土曜10:30～)

<https://measurement-informatics-seminars.jp/>



CREST



趣旨 開催方法 参加方法 講演予定 講演記録

エントリー



第1回 2021/06/26 大阪大学産業科学研究所 鷲尾隆「革新的先端計測の方程式：計測+AI＝情報計測」

第19回 07/23 防災科研 久保久彦「日本の地震観測とその観測データへの機械学習の適用事例」

第20回 10/29 阪大 森川耕輔「不完全データに対する統計解析と統計地震学への応用」

第21回 08/20 JAMSTEC 桑谷立「情報計測の実践：地球科学分野を例に」

第22回 09/03 京都産業大 米原厚憲「重力レンズ現象を利用した宇宙の探索」

第23回 09/17 NII 佐藤いまり「光3Dイメージング技術による非破壊・非侵襲計測」

第24回 10/01 阪大 小野寛太「材料の計測の自律化」

第25回 10/15 京大 竹内繁樹「光量子センシングの現状と展望」

第26回 10/22 新潟大 村松正吾「計測信号解析のための局所構造化辞書学習」

第27回 11/05 阪大 西本伸志「脳計測と脳内情報表現」

第28回 11/19 電通大 庄野逸「画像処理に基づいた物性材料解析へのアプローチ」

第29回 12/03 産総研 安藤康伸「データ駆動型材料研究・開発について」

第30回 12/24 埼玉大 松永康佑「微分可能なアプローチによる高速原子間力顕微鏡データの解析」

お話の流れ

1. 「計測 × AI = 計測インフォマティクス研究」の背景
2. 計測インフォマティクス研究の論点
3. 計測の逆問題を解く研究開発事例
 - 3.1 細胞蛍光撮影画像からの超高速超解像イメージング
 - 3.2 Noise2Noise深層学習を用いたナノチャンネル計測ノイズ低減
 - 3.3 MSSセンサによる超ロバスト嗅覚計測
4. 分析の逆問題を解く研究開発事例
 - 4.1 AI × ナノ計測デバイスによる1アミノ酸鏡像異性体分子識別
5. 計測インフォマティクスの展望と活動
6. CREST[革新的計測解析] 社会課題解決を志向した革新的計測・解析システムの創出
7. 未踏スケールデータアナリティクスセンターへの期待

6. CREST[革新的計測解析] 社会課題解決を志向した 革新的計測・解析システムの創出

CREST

(2022年～2029年)

https://www.jst.go.jp/kisoken/crest/research_area/bunya2022-1.html

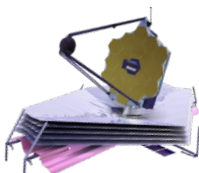
研究総括



鷺尾 隆(阪大)

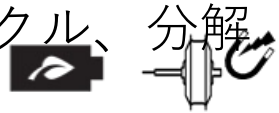
➤ 「計測は科学の母」

科学技術の進歩は「見て・気づく」ことから
科学技術発展の歴史は、計測技術発展の歴史
ノーベル賞（化学・物理）受賞テーマの2～
程度が計測・分析技術関連



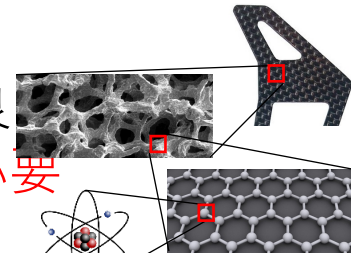
➤ カarbonニュートラル等の様々な社会課題の解決では、 新しい実用材料をはじめとする開発が必要

例：電池、磁石、軽量化、モータ、バイオ材料、食品、リサ
イクル、分解



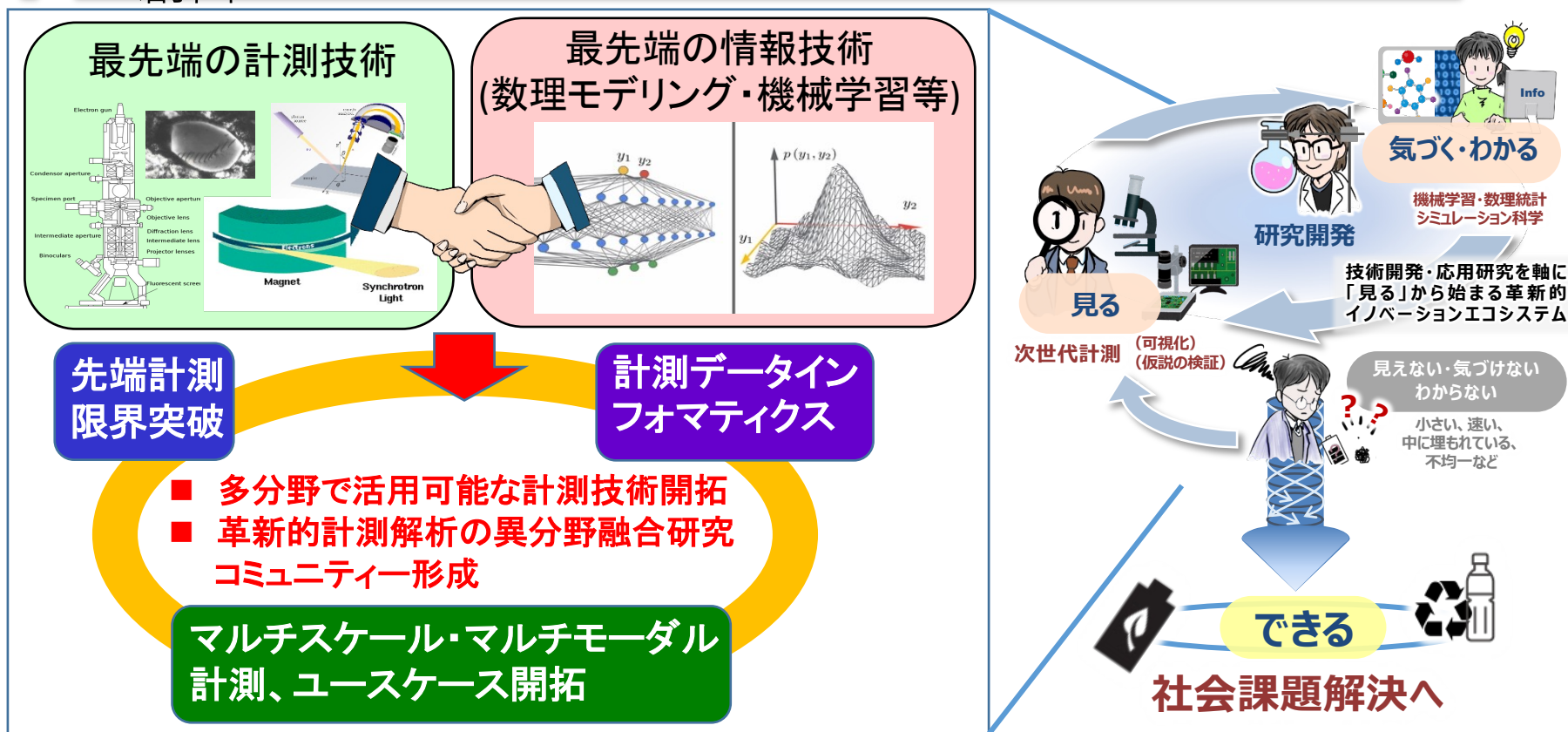
➤ 最先端科学技術研究では、従来計測技術の改良 ではない計測・解析手法のブレークスルーが必要

- 対象の複雑・不均一な階層構造や物質変化
- 人間の理解力をこえる複雑な現象・大量のデータ
- 感染症、再生医療などライフサイエンス系分野でも同様



革新的計測解析CRESTの目指す成果

社会課題解決を志向した革新的計測・解析システムの創出



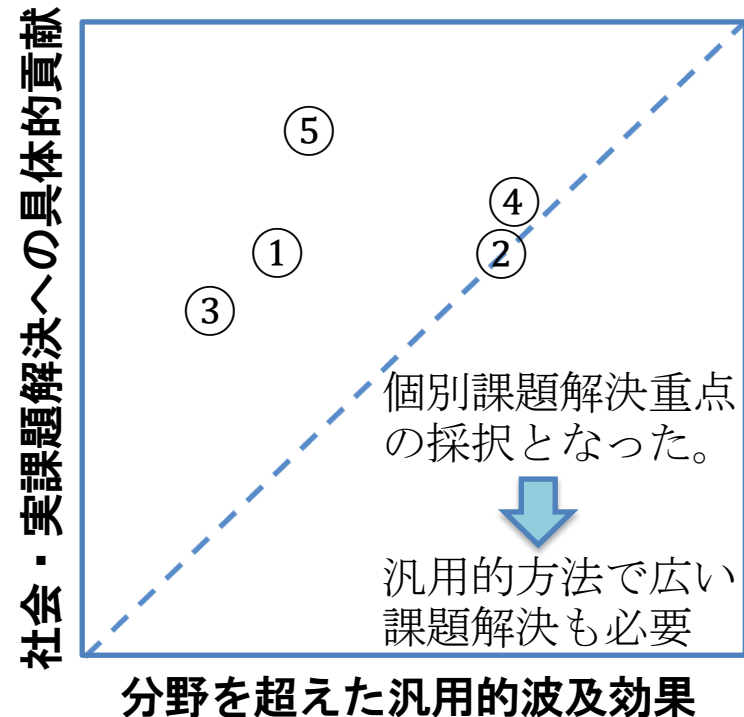
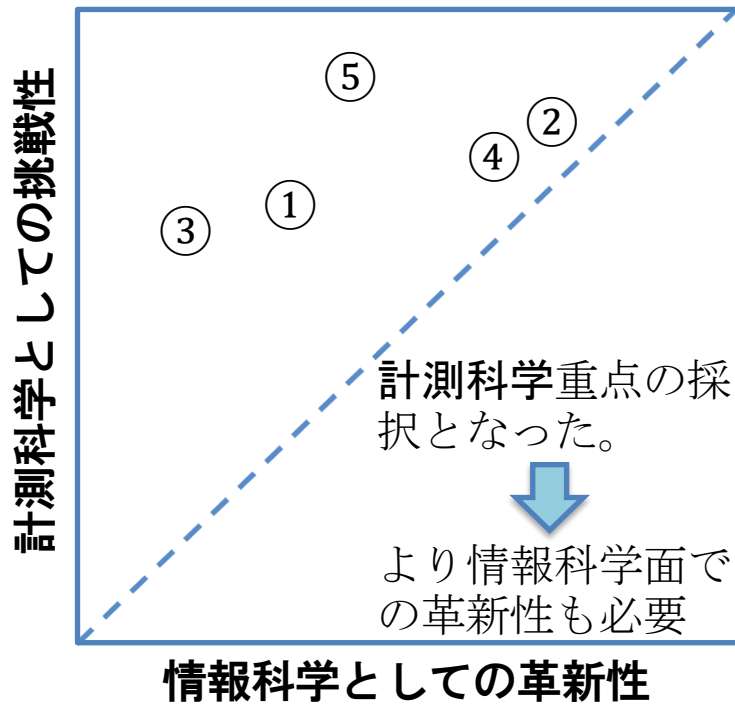
我が国の研究力・産業競争力の向上



社会課題・実課題解決への貢献



CREST 「社会課題解決を志向した革新的計測・解析システムの創出」領域 2022年度採択課題のポートフォリオ



- ①生体環境からの AI駆動型 1 分子ナノポア測法の開発(東大:上村)
- ②計測標準と情報科学を援用した先端精密計測の卓越進化:
10nm超解像光学ルーペの開発(東大:高橋)
- ③次世代放射光 X 線ナノ CT 計測の確立と展開 (東北大:高山)
- ④デバイスインバースデザインのための表界面稼働状態計測解析法の確立 (九大:多田)
- ⑤反応リマスターによるエコ材料開発のフロンティア共創 (名大:唯)

研究の進め方

以下の主要な研究要素等が連携する研究環境を実現することで計測・解析の革新を図る。

(1) 先端計測限界突破（見る）

(2) 計測データインフォマティクス活用（気づく・わかる）

(3) マルチスケール・マルチモーダル計測、ユースケース開拓（できる）

1. 常に**本領域の5つのねらい**：(1)計測・解析手法の革新，(2)現実の課題へのチャレンジ，(3)計測・解析・実応用の一連のプロセスの革新に資する研究開発，(4)分野を超えた計測技術の利用，(5)国際競争に資する研究開発を踏まえた研究開発を進める。
2. 計測科学の研究者のみならず、**情報科学(数理モデリング・機械学習等)の専門家に参加いただくことが有用**と考える。
3. 目標達成には上記3つの研究要素の連携が必要であり、それを実現するために、**積極的に領域内の他研究チームとの共同・連携・協力をいただく**。

以下のような点を重視して選考を行います。

1. 計測・解析プロセスの革新を生み出す斬新かつ独創的な提案であること
2. 現実の計測・解析上の実課題を解決する提案であり、研究期間内に有効性を示せること
3. 我が国の10年後・20年後の研究開発現場・実用技術開発現場で役立つことが期待されること
4. 前記の「5. 想定する研究の進め方」を踏まえた提案であること

お話の流れ

1. 「計測 × AI = 計測インフォマティクス研究」の背景
2. 計測インフォマティクス研究の論点
3. 計測の逆問題を解く研究開発事例
 - 3.1 細胞蛍光撮影画像からの超高速超解像イメージング
 - 3.2 Noise2Noise深層学習を用いたナノチャンネル計測ノイズ低減
 - 3.3 MSSセンサによる超ロバスト嗅覚計測
4. 分析の逆問題を解く研究開発事例
 - 4.1 AI × ナノ計測デバイスによる1アミノ酸鏡像異性体分子識別
5. 計測インフォマティクスの展望と活動
6. CREST[革新的計測解析] 社会課題解決を志向した革新的計測・解析システムの創出
7. 未踏スケールデータアナリティクスセンターへの期待

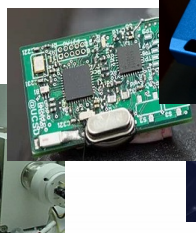
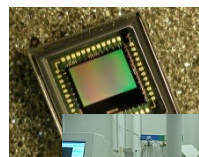
7. 未踏スケールデータアナリティクスへの期待

脱炭素, 資源確保など難課題
解決が21世紀持続に必須

データは石油に代わる最重要資源
データを制する者が21世紀を制する



先端計測/AI・
シミュレー
ションによる
ソリューション
の提供



データを生産し処理するセンサ/AI・ミュー
レーションは21世紀の油田・コンビナート

GAFA

顧客サービスからビッグデータ

デジタルツイン技術

サイバー・フィジカルシステム センサ・生産からビッグデータ



両立できなければ社会の持続困難
2050年からバックキャストすれば
2035年までに社会転換が重要



難社会課題解決立国

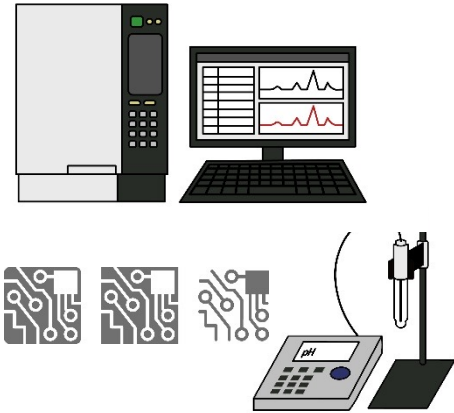


ビッグデータ立国

計測データアナリティクス研究分野・産業の発展(1)

デジタル化・サービス化進展による研究課題・ビジネス形態多様化

計測分析機器開発・製造



開発・販売・保守

計測分析ソリューション開発



システム・プロセス提供

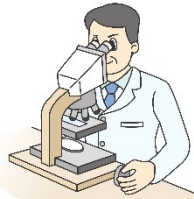
計測分析サービス提供



外注請負サービス



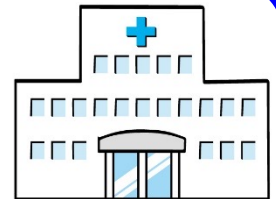
大学・研究機関



検査機関



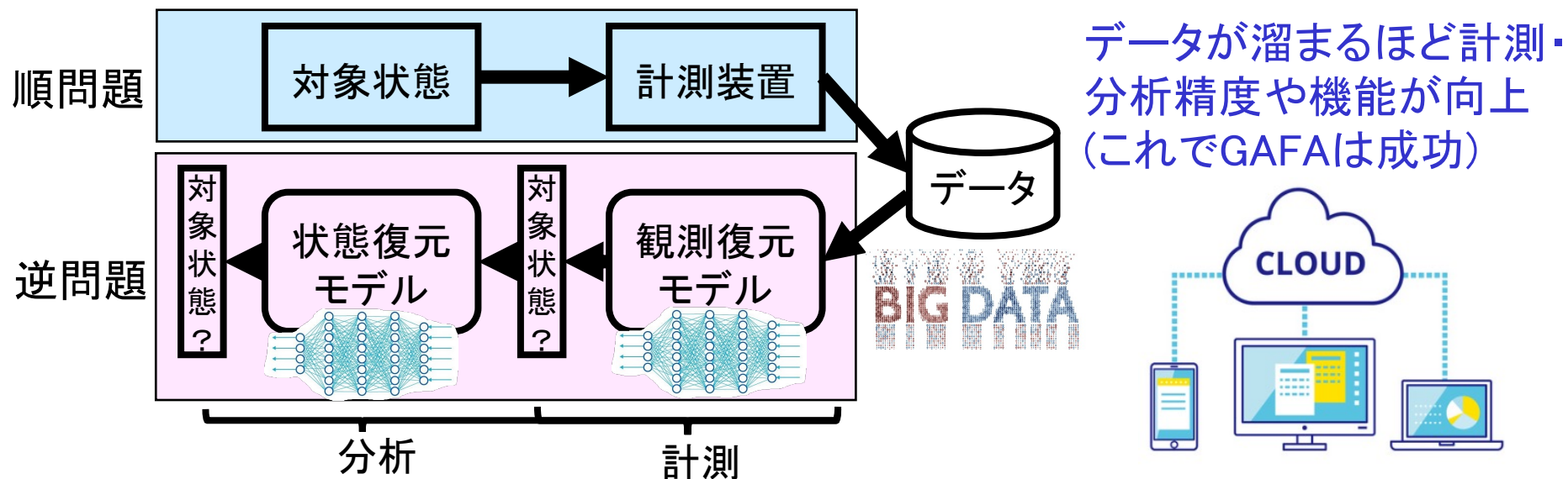
一般企業



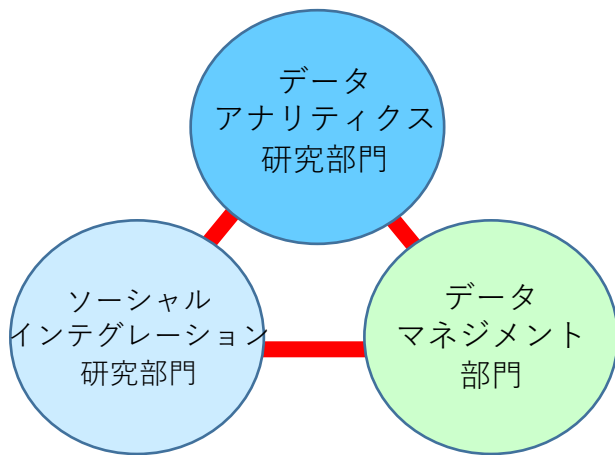
医療機関

複雑・多様な先端計測分析の一般普及に伴い社会ニーズが発展

計測インフォマティクスから見た 先端計測分析ソリューション開発とデータ収集への期待



先端計測分析ハードの開発、提供(販売)、個別データで育てるではなく、ユーザにソリューションを提供し膨大なデータを収集して計測分析システムを育てる。



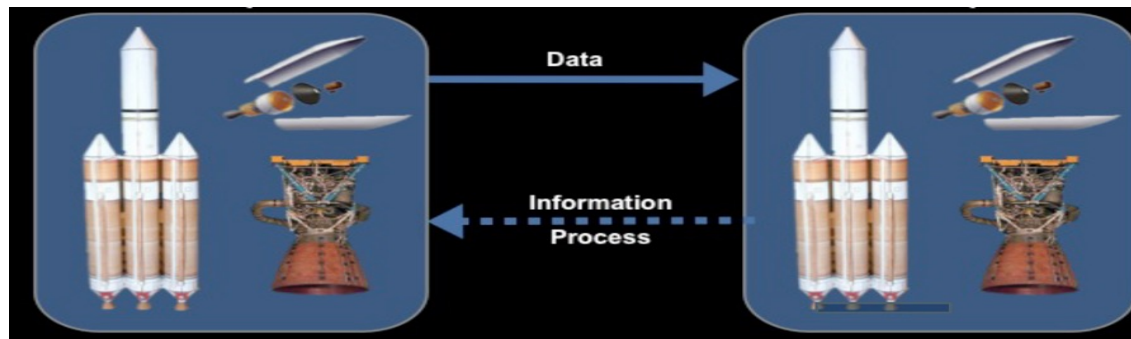
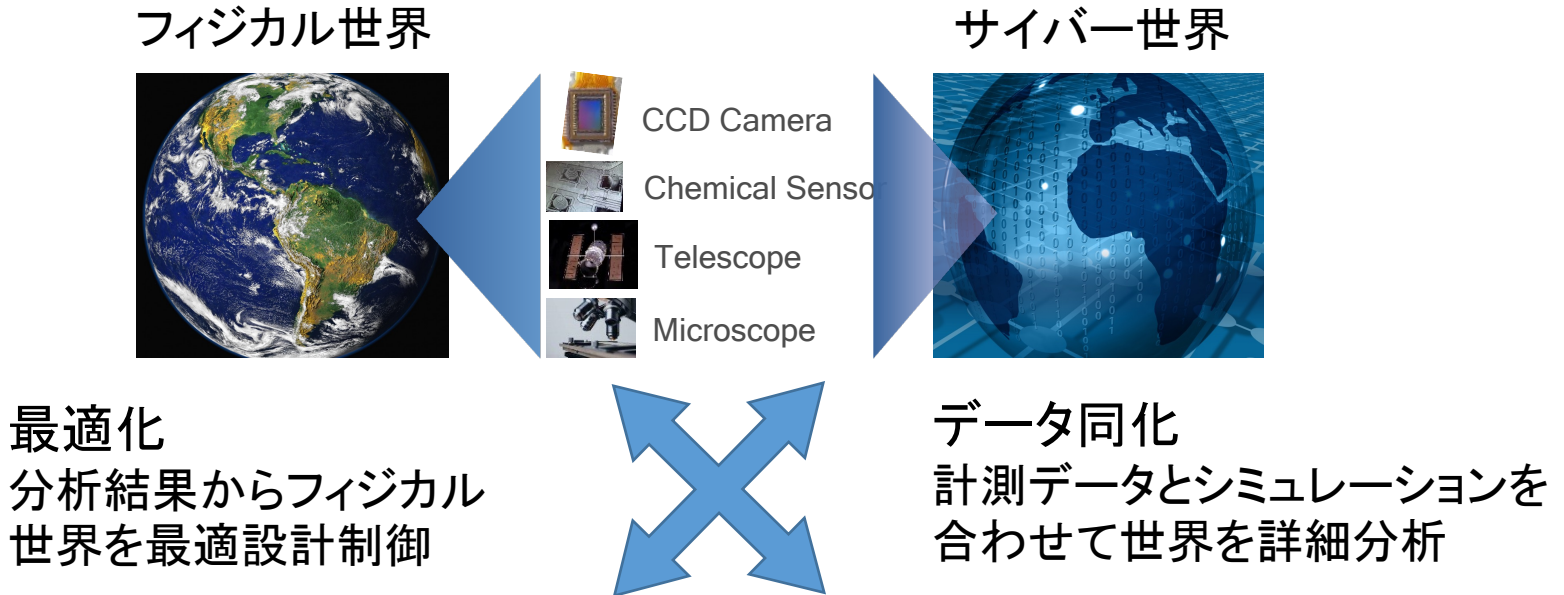
未踏スケールデータアナリティクスセンター

1. 先端的計測科学・情報科学を担う人材
2. 公的機関として可能な幅広いデータ収集
3. 3部門がタッグを組むソリューション開発・提供

大きな期待

計測データアナリティクス研究分野・産業の発展 (2)

サイバー・フィジカル社会におけるデータとシミュレーション融合の重要性
先端計測分析はフィジカル世界とサイバー世界のインターフェイス



フィジカル世界

サイバー世界

デジタルツインシミュレーションはフィジカル世界のサイバー世界への映し絵

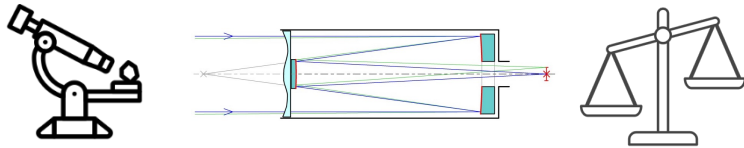
計測インフォマティクスから見た 計測データアナリティクスへのシミュレーション導入の期待

$$\max_Y \log P(Y|X) \equiv \max_Y (\log P(X|Y) + \log P(Y))$$

観測復元モデル

状態観測復元モデル

計測系の物理モデル



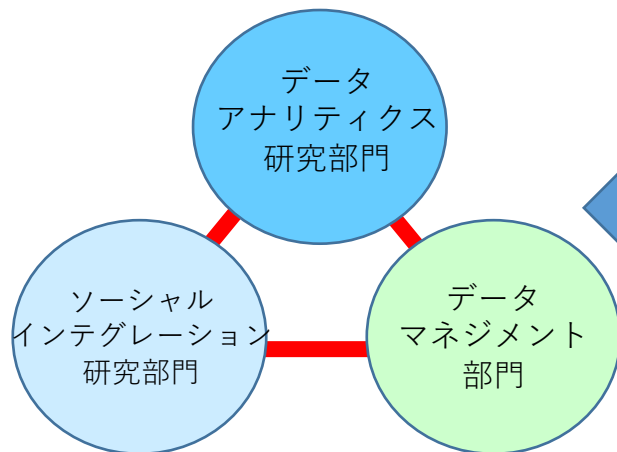
計測系シミュレーションの利用

対象状態の物理モデル



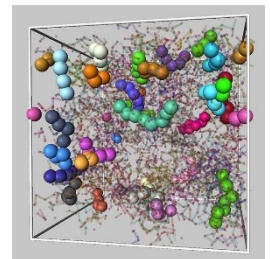
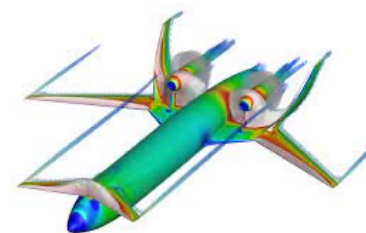
対象系シミュレーションの利用

計測分析という逆問題を解く上でシミュレーションの導入は極めて有効



未踏スケールデータアナリティクスセンター

シミュレーション
研究開発・人材



東北大学 未踏スケールデータ アナリティクスセンター(UDAC)

21世紀の科学と社会の課題解決
に大きな期待を寄せています。