

データ駆動計測研究室

～計測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

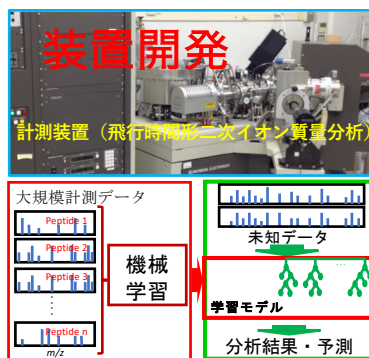
背景

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！



データ駆動計測

科学技術の基盤

物質の性質を明らかにする
→ 物理化学の基礎
→ 高性能材料開発

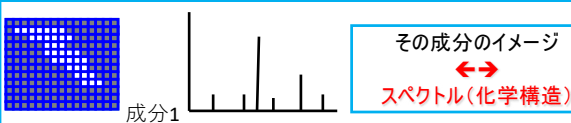
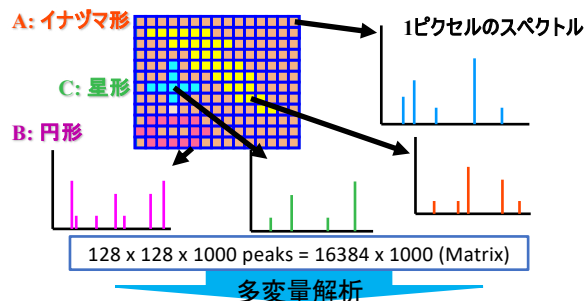
細胞・組織での生化学反応機
構の解明
→ 生命現象の解明
→ 医薬品開発

研究室の成果

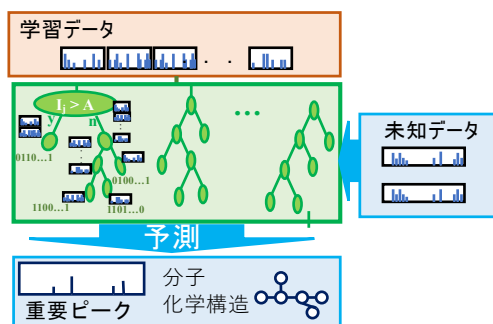
計測データ解析システムの開発

化学イメージデータの解釈

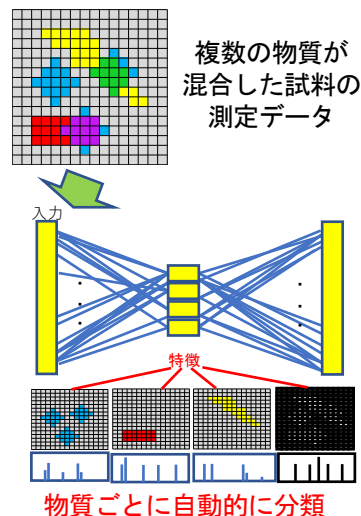
化学イメージデータの数値解析



未知試料スペクトルの予測

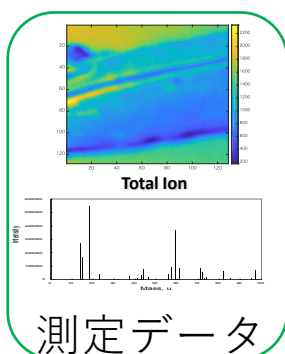


S. Aoyagi et al., *Anal. Chem.* 2021, 93, 9, 4191–4197
<https://doi.org/10.1021/acs.analchem.0c04577>

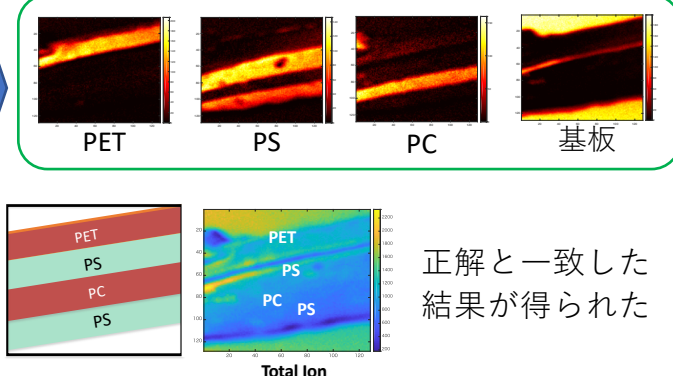


応用例

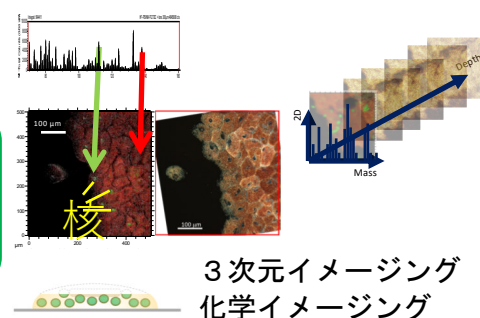
多変量解析・機械学習など
による自動解析結果



測定データ



正解と一致した
結果が得られた



3次元イメージング
化学イメージング

analytical chemistry

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

Satoka Aoyagi,*¹ Yuuki Kodama,¹ Melissa K. Passarelli,² Jean-Luc Vornig,² Tomoko Kawashima,¹ Keisuke Yoshikiyo,¹ Tatsuyuki Yamamoto,¹ and Ian S. Gilmore*^{2,3}