11－3　　データ数理研究分野

データ数理研究分野

教　授　小松崎民樹（総研大、理博、2007.10～）
准教授　寺本央（東大院、博(学術)、2017.4～）
助　教　水野雄太（東大院、博(学術)、2019.8～）
助　教　伊藤創祐（東大院、博（理）、2017.4～2018.11）
助　教　西村吾朗（阪大院、理博、2007.10～）
特任助教　James N. Taylor（ライス大、PhD、2014.10～）
田畑公次（北大院、博（情報科学)、2017.7～）
Mikhail Tsitsvero（ローマ・ラ・サピエンツァ大、Phd 2019.10～）
博士研究員　Sulimon Sattari(UC Merced､PhD､2017.7～）
永幡 裕(北大院､博(生命科学)､2019.10～）
学術研究員　土田　旭(北大院､博(理)､2017.12～2019.2）
Aurelien Pelissier(University Grenoble - Alpes、2018.10～2019.3）
Abdul Halim Bhuiyan(University of Dhaka、Master of Science、2019.5～2019.9）
Md. Menhazul Abedin (University of Rajshahi、Master of Science、2020.2～）
学振外国人特別研究員　Jean-Emmanuel Clement (University of Burgundy、PhD、2018.11～2020.12）
外国人協力研究員　Md Motaleb HOSSAIN（北大院、博(理学)、2019.7～）
学　生
博士課程後期
Khalifa Mohammad Helal（生命科学院 生命融合科学コース、2015.10～2019.12）
Udoy Sankar Basak（生命科学院 生命融合科学コース、2017.10～）
Abdul Halim Bhuiyan（総合化学院　物質化学コース、2019.10～）
Zannatul Ferdous（生命科学院 ソフトマター専攻）(2020.4～）
博士課程前期
宮下 彩季（理学部 化学科）(2020.4～）
学部生
宮下 彩季（理学部 化学科、2019.4～2020. 3）
滝川 皇（理学部 化学科、2018.4～2019.3）
近藤 僚哉（理学部　化学科、2020.4～）
田中 綾一（理学部 化学科、2020.4～）
浅野 光平（理学部　数学科、2020.4～）

１．研究目標

生体分子、細胞、組織、そして個体に至る生命システムは常に外界に晒(さら)されながら、ミクロレベルでの“刺激”がマクロレベルまで伝達し頑健な機能を作り出している。生体系の反応現象の多くは、複雑な中に特異性、すなわち、選択性・機能性を保有していて、その特異性が生命現象の豊かさの源泉となっている。生体機能とは「外界からの刺激に対する応答として始まる一連の構造変化とそれに伴う化学反応」であり、階層を越えた「状態変化」のつながりの産物といえる。そのような生命システムを理解するためのアプローチには、大別して、背後に存在する数理構造を提唱するトップダウン的構成論的手法と微視的な立場からマクロな現象の再現を試みるボトムアップ的還元論的手法が存在する。前者は大胆な仮定や粗視化のために自然と乖離したモデルに陥る可能性が存在する一方で、後者は個々の微視的事象を枚挙するだけでシステム全体を捉えることは困難である。

自然科学研究において革命的な発展をもたらすものは、多くの場合、新しい実験技術とその新しい実験事実に基づいた理論・概念の転回である。近年、一分子計測技術等の飛躍的な進展により､「観測」の在り方が大きな変貌を遂げ、サブミリ秒程度の時間分解能で、一分子レベルの大規模構造変形や細胞の分化の経時変化を直接観測することが可能になってきた。

当該研究分野では、化学反応や生体分子の構造転移などの状態変化における「偶然と必然」､「統計性と選択性」､「部分と全体」の基礎原理を解明するとともに､“トップダウン”と“ボトムアップ”の両アプローチを橋渡しする概念や方法論を確立し、できるだけ自然現象に照らし合わせながら生命システムの階層性の論理を構成し、生命の中に積木細工をこえる新しい概念を創出することを目指している。

この他、単一分子分光を用いた生体計測を通して、階層を越えた構造と機能の相関を探っている。具体的には､700～1400 nmの近赤外波長領域の光計測技術を用いた非侵襲計測により、生きたままの生体組織の定量的生体計測技術を確立する。それにより、単一分子レベルから個体レベルまでの階層をまたいだ総合的理解を目指している。

２．研究成果

(1) 対称性下におけるバンド交差の幾何構造の特異点論による分類

バンドエンジニアリングとは固体の複数のバンドを衝突させることにより、そのバンド構造を変化させ、それにより物性の制御を目指すものであり、Dirac-cone engineeringを含むより一般的な枠組みを指す。近年、ナノテクノロジーおよび観測技術の進歩により、バンド構造を物性パラメータを変化させることで制御したり、バンド構造を直接観測したりすることが可能となってきた。そのバンドエンジニアリングを実現するためには、与えられた結晶の対称性および時間反転対称性の下、二つのバンドを衝突させることでバンドにどのような幾何学的変化が生じ、それによりどのように物性が変わるのかを理解することが重要である。結晶の時間反転対称性又は空間反転対称性が破れた状況におけるブリルアンゾーン上の一般の位置にある結晶運動量において生じるバンド交差の幾何構造を特異点論を用いて分類し、そのバンド交差の特異点分類の不変量と分岐を議論し、さらにこの枠組みをより一般の対称性を持つ結

晶運動量におけるバンド交差の幾何構造の分類が可能となるように拡張した。その特異点の分類問題は我々が提案するK[r(G)]同値という同値関係による分類問題として定式化することができる。その定式化の結果は現在論文投稿中である。その一般的な枠組みのもとバンド交差の幾何構造を分類する必要があるのだが、点群の対称群の対称性だけでも122種類の可能な磁気点群があり、さらに着目するバンドがどの既約（複）表現に属しているのかに依存してその幾何構造は変わりうるため、それらを網羅的に手で計算するのはほぼ不可能である。そこで、我々は包括的グレブナー基底系に基づいた特異点の自動分類アルゴリズムを構築した。その自動分類アルゴリズムのおかげで複雑なモジュライパラメータを含み、従来法では分類が難しかったような分類問題も組織的に解くことが可能となった。この成果は現在論文投稿準備中である。

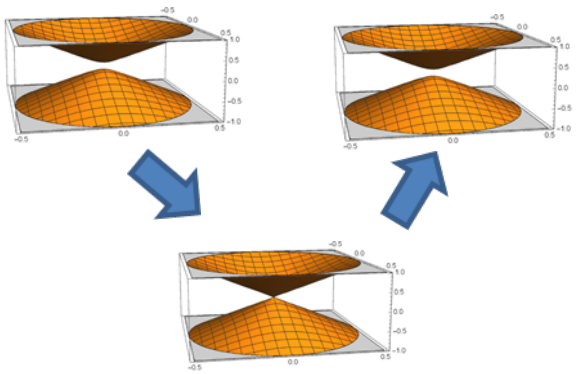


図1：Γ 点と呼ばれる結晶運動量において Bi2Se2 のフェルミ面近傍の二つのバンドが交差し、その点において TKNN 指数が変化する瞬間のバンドの幾何構造の変化

(2) 多目的最適化問題に表れるパレート集合とフロントの微分位相幾何学的分類

多目的最適化問題とは、二つ以上の目的関数を同時に最適化する問題であるが、一般には異なる目的関数は異なる最小点を持っており、一つの目的関数を最小化しようとすれば、他方の目的関数の値は上昇してしまうというように複数の目的関数の最小化は一般にはトレードオフの関係にある。そのような多目的最適化においては単目的関数の最小点を多目的関数へ一般化した概念として、パレート最適解というものが経済学者パレートによって提案されている。ある点がパレート最適解であるとは、その点における目的関数の値の一つを減少させようとすれば、必ずほかの目的関数の値が増大してしまうことを指し、英語ではbest compromise な解と呼ばれている。多目的最適化問題は現在でも様々な応用に使われており、例えば進化計算のトップカンファレンスの一つである GECCO には RWA (Real World Application)というセッションが設けられており、そこには多目的最適化の実問題への応用が毎年多数集められている。多目的最適化問題において一つ解を選ぶとすると、その解はパレート最適解から選びたいと考えられる。実際にパレート最適解のうちどの解を選ぶべきかはユーザーのニーズによって異なるが、パレート最適解全体の構造がわからない状況では、最適な判断を下すことは難しいため、パレート最適解全体の構造がわかっていることが望ましい。パレート最適解全体の構造は古くは Smale らにより特殊な経済学の問題の設定の下で調べられてはいるものの一般的な状況でどのような構造となりうるのかはほとんど知られていなかった。本研究ではまず多目的最適化問題が強凸問題というクラスの問題であるときに、そのパレート最適解全体の集合ととそれを目的関数の空間でみたパレートフロントの構造がどのようなものとなるかを明らかにした。その結果、それらはその境界が目的関数の数を減じた多目的最適化問題の部分問題のそれになっていること等が明らかになった。そのような階層的な構造を利用することで、パレート最適解全体を効率よく見つけることも可能となる。この成果は SIAM Optimization に投稿し、受理された(N. Hamada, K. Hayano, S. Ichiki, Y. Kabata, H. Teramoto, “Topology of Pareto Sets of strongly convex problems”, SIAM Optimization, accepted)。現在は、より一般のクラスの多目的最適化問題のパレート最適解全体の集合およびパレートフロントの構造の微分位相幾何学的構造の網羅的分類を特異点論を用いて行っている。この分類を得るために、広中平祐らによる局所環上の加群に対する標準基底を混合加群に一般化し、その標準基底を計算するためのアルゴリズムを開発した。この成果は数式処理トップカンファレンス ISSAC2020に投稿し受理された(H. Teramoto and K. Nabeshima, “Parametric Standard System for Mixed Module and its Application to Singularity Theory”, Proceedings of the International Symposium on Symbolic and Algebraic Computation, ISSAC2020, accepted)。

(3) 情報幾何を用いた熱力学理論の構築

大腸菌(E.coli)の走化性における適応のダイナミクスに代表されるような生体の情報処理において，機能の正確性やスピードを高めるために十分な熱力学的なコストを支払っていることが知られていた。これは熱力学的なトレードオフ関係(例えばenergy-speed-accuracy trade-off)とよばれ，様々な模型で各論的に調べられてきた流れがある。これに対して我々は情報幾何と確率過程における熱力学の間の関係性を明らかにすることで，普遍的な情報幾何のトレードオフとして熱力学的な不確定性関係の一種を導出することに成功した。

(4)Raman分光画像によって癌／非癌を分類する新しい識別子の開発

我々は高い空間およびスペクトル分解能を持つRaman顕

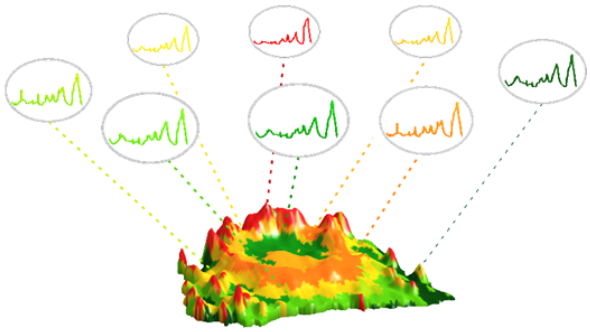


図2：空間的にコヒーレントな細胞域を示す癌性および非癌性のヒト濾胞甲状腺細胞の Raman 顕微鏡画像の分類。通常のヒト濾胞甲状腺細胞からヒト濾胞甲状腺癌細胞を区別する上で有益となる明確な細胞環境を示している。

微鏡画像を用いて、ヒト濾胞甲状腺(Nthy-ori 3-1)細胞と、高分化型甲状腺癌であるヒト濾胞甲状腺癌(FTC-133)細胞の違いを調べている。一細胞Ramanスペクトルの分類と比較することで、Raman画像に含まれる細胞内部の情報の重要さが強調される。高い空間分解能(~ 1.7 μm^2)でスペクトルの粗視化を行うことで細胞内部の情報が抽出され、似通った生化学的組成をもつ位置を表す特性スペクトルグループの組が生成される。我々はそれぞれの単一細胞内の特性スペクトルの出現頻度に基づく細胞分類器を開発している。この分類器を用いることで、一細胞スペクトルの場合(77.6%)に比べて、FTC-133およびNthy-ori 3-1をより正確に(89.8%)分類することができる。また、細胞の区分においてどの細胞内成分が重要であるかを考察し、癌性のFTC-133細胞はNthy-ori 3-1と比べて、脂肪を含有する成分が増加、シトクロームを含有する成分が減少し、寄与した部分の多くは細胞核の外側にあることを発見した。この手法は、分類の正確性を高めることに加え、通常および癌性の濾胞性甲状腺細胞の区別に関連する生化学的差異や細胞内分布に関する豊富な細胞内部の情報をもたらす。

(5)非アルコール性脂肪肝疾患を予測するためのRaman顕微鏡画像の情報理論的ソフトクラスタリング

適切なデータ分析技術と組み合わせたRaman顕微鏡法は、複雑なラマンスペクトルを詳細に分析するための強力な診断ツールとなり得る。我々は、類似の特性を持つグループにデータをクラスタリングすることで、マウスの肝組織のRamanハイパースペクトル画像が、非アルコール性脂肪肝疾患(NAFLD)のステージをどのように分類できるかを分析した。Raman画像データ対するいくつかの前処理の後、情報理論的アプローチであるレート歪み理論(RDT)によるソフトクラスタリング法を行った。これは、類似の統計的性質を持つスペクトルを同じグループに割り当てる。RDTは、条件付き確率p(C_k |S_i)について汎関数F=I(C;S)+β⟨d⟩を最小化することで、スペクトルの集合をより少ない数のグループにクラスタリングする。ここで、Cは得られたクラスタの集合、Sは所与のスペクトルの集合、I(C;S)はCとSの間の相互情報量、⟨d⟩はそれぞれのクラスタ内での全スペクトルの歪みを全てのクラスタについて平均したもの、βはラグランジュ乗数を表している。我々は、データを説明する最適なモデルを得た。このモデルは７つのクラスタからなり、そのそれぞれが類似の分子情報をもつ画像領域を表現する。図3aに、それぞれの画像内の7つのクラスタの空間分布を示す（それぞれの色が個々のクラスタに相当)。これにより、全ての画像で生化学的類似度の分布が明らかになる。この図では、各画像に対する規定食や組織性状が上部にラベルされている。各組織性状におけるそれぞれのクラスタの平均ポピュレーション分布を図3bに示す（クラスタは脂質の割合に対して降順に配列)。個々のマウスのクラスタ数と平均ポピュレーション分布の類似度を計測し、それを各マウスの診断に用いた。脂肪含量という観点では、NAFLとNASHの差別化は困難である一方で、(脂質含量が低い）正常群はほぼ問題なく識別できていた。NAFLは多様であり、いくつかの画像では（高い脂質含量の）NASHに類似している一方で、NASHからほど遠い画像もあった。これらの分類は類似性スコアによって確認が可能で、我々のRaman分析では正常(HFD 8w-3)なマウス1匹とNASH (HFHC 4w-4)マウス1匹がNAFLと分類され、奇妙な組織像(HFD 4w -1, mild fibrosis)のマウス1匹とNAFL (HFD 4w-4, 16w-2)マウス2匹が正常と分類され、NAFL (HFHC 4w (1-3), 8w (2,3,4))マウス6匹がNASHと分類された。我々の結果は、このクラスタリング手法を用いたRaman画像によって、組織診断と比べて

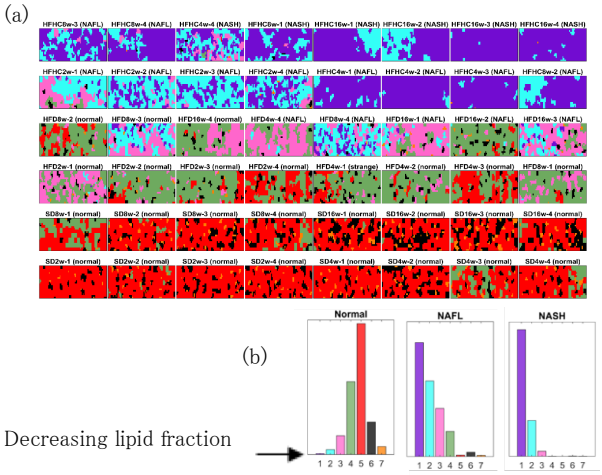


図３:(a) クラスタの空間分布 (b) クラスタの平均ポピュレーション

NAFLDをよりロバストに診断することが可能で、異なるNAFLDの状態の生化学的変動の解明に繋がることを示唆している。

(6)病理診断を応用とした多腕バンディットアルゴリズムの開発

細胞の Raman 顕微鏡を使った癌診断などの病理診断や機械の故障の診断などでは、異常のある個所がある一定個数以上かそれ未満なのかのみが知りたい場合がある。Raman顕微鏡など分光顕微鏡では、一度に明視野の計測を行うのではなく逐次的な計測が行われるため、このような診断を行う場合には、一定個数λ個以上異常がある、または、λ個未満なことが確定した時点で計測を打ち切って異常ありと診断することで高速化が期待できる。

$\lambda = 1$のときは、このような計測の高速化は「悪腕存在チェック問題」として定式化できる。　悪腕存在チェック問題では、確率的多腕バンディット設定において、閾値$\theta \in (0,\ 1)$に対し、報酬平均 μ が θ より大きければ正の腕、θ より小さな場合は負の腕と定義し、与えられた許容誤り確率 $\delta \in (0, 0.5)$に対し、正の腕が存在する場合には$1-\delta$ 以上の確率で「正」、負の腕しか存在しない場合は$1-\delta$ 以上の確率で「負」と出力するできるだけ試行回数が少ないアルゴリズムを開発することを目標とする。

新たに腕判定規則を提案し、従来手法と比較して、難しい問題のインスタンスに対しては必要なサンプル数が約半分になることを理論的に示し、また実験的にも性能が良い

ことを確認した。この成果はMachine Learning に投稿し、受理された。

また、一般のλに対する識別バンディットと呼ばれる問題にも有用なアルゴリズムを提案している。

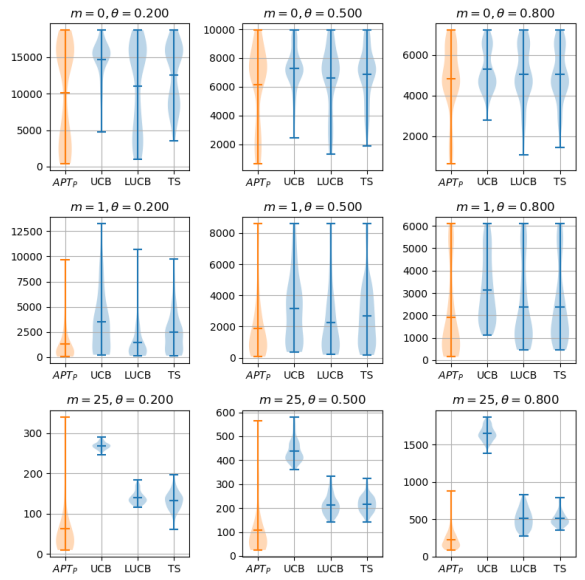


図 4：人工データによるシミュレーション実験の結果（Δ=0.1, δ=0.01）。損失がベルヌーイ分布に従う 100 腕のうち m 腕を平均損失が閾値よりも大きな腕とし、100−m 腕を閾値 θ よりも小さな腕とし、APTp、LUCB、UCB、TS の 100 回実行した停止時刻のバイオリン図と平均を示した。

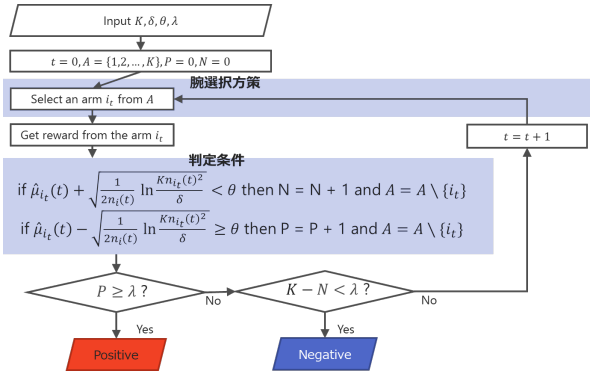


図5 識別バンディット問題に対するアルゴリズムのフローチャート。

(7) 圧縮センシングによるラマン顕微鏡開発

癌を早期に発見することは、死亡率の減少に大きな影響を与える。しかしながら、早期発見を可能にするためには、良性と悪性の間の過渡的な状態を識別できなければならない。したがって、癌を早期にスクリーニングするためには、例えば細胞や組織のような生物学的システムの構造的変化および微小環境変化を高感度で検知できる新たな技術の開発が必要である。光−物質相互作用の非弾性散乱を利用する、無標識の非侵略的な技術である共焦点Raman顕微鏡は、生物学的サンプルの豊富な化学的指紋を与える診断ツールとして大きな可能性を有すると示されている。特に、生物医学の研究における新しいツールであり、実空間の化学情報を取得できるRamanハイパースペクトルイメージングは、異なる癌のスペクトルマーカーのレベルを評価することにより、細胞内構造レベルで癌疾患の定量化を可能にする。しかし、（例えば生細胞の空間−化学情報のような）高次元データを取得するには時間がかかりすぎ、これは臨床応用の際にこの技術の効果を限定的にする。この難点を乗り越えるために、我々は、圧縮センシング理論の考えを利用した新たなRaman顕微鏡を開発した。圧縮センシング理論は、古典的なデータ収集システムに共通する方法論に対し、情報のアンダーサンプリングにより対抗するセンシングパラダイムである。実際、この枠組みを用いることで、非適応的線形測定をごく少数回行うだけでRamanハイパースペクトル画像の識別と圧縮を同時に行うことができる。このアンダーサンプリングのシナリオ（測定回数 m は信号次元 n よりもはるかに小さい）で、圧縮センシング理論は、都合のいい基底におけるスパース構造を用いることで、オリジナルのハイパースペクトル画像を復元することが可能である。ハイパースペクトル画像の復元のための戦略は、空間方向とスペクトル方向両方の平滑度といったハイパースペクトル画像のスパース性およびモデル特性を増進させるような制約つきの最適化問題を解くことである。この方向性に従い、我々は、変換領域ハイパースペクトル全変動と呼ばれる混合L_1,2ノルムの最小化を提案した。

(8) 時間分解法を用いた、高感度蛍光ターゲット検出法の開発：シミュレーションによる検討

蛍光を用いた組織病変部などの高感度検出法は、従来からの放射性プローブを用いた手法を置き換える手法として重要である。しかし、生体組織による強い散乱により表面にある蛍光プローブの観測に限られ、深部にある蛍光プローブの検出は極めて難しい。ピコ秒時間分解手法により背景光に隠れた蛍光プローブ信号を時間領域で分離することにより、従来より高感度に蛍光プローブ信号を取り出すことが可能であることを確かめた。さらに、その方法をシミュレーションにより考察した。

散乱体の中の蛍光は、モンテカルロ法によりシミュレーションした。このシミュレーションは励起光子をある位置から入射しその軌跡を追跡する。散乱が起きる場所、散乱により変わる方向、さらに吸収され光子が消滅するそれぞれの現象を乱数により決め、それを繰り返すことにより蛍光プローブに吸収されるまでの軌跡を、さらに蛍光を発した後も同様にすることにより、検出器に入るまでの軌跡を追う。検出された光子の辿った軌跡の長さが、光子が入射してから検出されるまでの時間に対応し、実際の実験に合わせ検出時刻に対する検出された光子のヒストグラムで時間応答特性を表す。シミュレーションには実際の生体組織の代表的な吸収、散乱係数を用い、背景光に埋もれることを模擬するために試料全体にも僅かに蛍光体を含むように設定した。

シミュレーションから得られた時間応答関数を用い、蛍光プローブからの蛍光像のコントラストを評価した(図6)。

蛍光像の取得は、1点で励起し別の1点で検出しそれを表面で走査することにより得る「表面走査」と通常の蛍光カメラで測定するような励起光の平面照射、平面検出との２つの方法を用いた(図右)。得られた時間応答関数のうちプローブの蛍光体からの信号が強くなる1ns 付近の値を取り出しその強度を用いて求めたものを時間ゲート、時間応答関数を時間に対し積分したものを定常光と図では示している。

蛍光プローブ画像のコントラストは、蛍光プローブの含まれる深さが深くなるにつれ、どの条件の結果も指数関数的に小さくなる。時間ゲートを用いるとすべての場合について定常光のコントラストを大きく改善する。最も一般的な蛍光イメージング手法（平面照射面検出）に比べると1桁程度の改善が得られることがわかる。さらに時間ゲートの場合点照射点検出の2点間の距離が短いほどコントラストが改善すると言う新しい結果が得られた。

以上のことより、時間ゲートを用いることにより蛍光プローブをより高感度に検出でき、また励起検出点間の距離を小さくしたほうがその効果が大きいことがわかった。今後は､例えば今回のシミュレーションでは蛍光寿命は0としているため、それを考慮することなどを行い、結果として最も高感度に蛍光プローブ検出が可能な条件を探る予定である。

(9) 時間分解法を用いた、蛍光ターゲットの位置形状推定

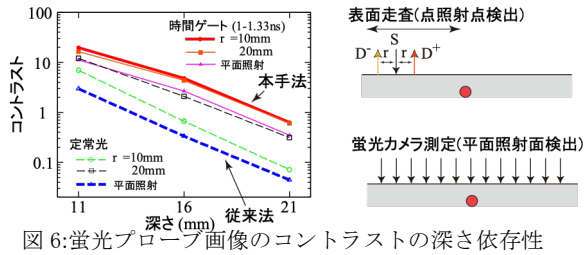


図 6:蛍光プローブ画像のコントラストの深さ依存性

に関する検討

生体組織の内部の病変部の高感度検出法では、放射性プローブを用いた手法が一般的であるが被曝の問題などから蛍光などを用いた別の方法に置き換えることが望ましい。しかし、光学的手法は、生体組織の強い散乱により、深部にある蛍光プローブの検出や位置形状の特定は極めて難しい。このような強い散乱の中で拡散する蛍光からその蛍光体の位置や形状を特定する手法は拡散蛍光トモグラフィ(FDOT)と呼び、多くの研究が行われているが、外乱に弱く確立した手法はない。本研究では、ピコ秒時間分解手法を用いて失われた空間情報を時間領域から補完する時間領域手法を用いた FDOT についてより安定的に正しく位置を推定する手法を研究する。特に、蛍光体の形状を直方体で近似することにより、確定するべきパラメータ数を減らし安定的に推定する手法を研究した。

生体組織での光伝搬は､拡散方程式が良い近似となるが、空間を半空間とし蛍光体を直方体と仮定しその解を解析的に求めた。その結果、未知のパラメータ数は7個を、半空間の界面での計測データから推定する逆問題となる。この問題について、シミュレーションで得たデータと食肉を生体組織模擬サンプルとした実験データの両方を用いて検証したところ、比較的少数のデータから位置と直方体としての形状を再現することができた。またこの手法は計算量も少なく高速に結果を得られることを示した（C.Sun et al, JOSAA2020)。

形状を直方体とした近似と任意の形状との対応関係や複数の蛍光体を含むような条件などの問題を今後検討し、これまでより医療現場で実際に用いることが可能な手法として確立を目指す。

(10)運動解析によるリーダーフォロワー同定

目標：我々の目標は、集団運動しているエージェントグループから、その運動軌跡のアンサンブルだけを使用して、リーダーとフォロワーを特定する情報理論的な枠組みを提案することである。

成果：エージェント間の相互作用領域を運動軌跡から推定する情報理論的枠組みの提案論文を Physical Review E 誌において発表した。我々は、同定された最適な相互作用領域を用いることで、リーダーとフォロワーの分類が大幅に改善する事を示した。

概要：鳥、魚と細胞のような、局所的に相互作用する粒子やエージェントからなるシステムは、全体として自然発生的・時空間的な集団挙動を示す。エージェント間の相互作用は、エージェントの時空間的協調の重要な特徴である。ほとんどの場合、２つのエージェントは無限の距離を隔てて交信する事は出来ないため、相互作用は本質的に局所的であると仮定する事は自然だ。相互作用半径は、エージェント間の相互作用ネットワークを定義するので、集団挙動分析の分野において重要な量である。

集団挙動を研究するために、Reynolds’フロッキングモデル、 Vicsek モデル（VM)、Couzin モデルなど、様々なシミュレーション・モデルが提案されてきた。これらのモデルはコンピュータ上でのシミュレーションが容易であり、これは集団運動の解析を容易にする。VM はミニマルなモデルであるため、集団運動する自己駆動粒子（SPP）の様々なダイナミクス（対称性の破れや相転移など）を研究するのに広く使われているモデルの一つである。このモデルもリーダーとフォロワーの分類に使われてきた。VM では、動いている粒子は距離 R の範囲内にある粒子とのみ相互作用し、相互作用領域は円状であると考える。

我々は、多粒子系において、背後にある粒子間の相互作用領域もしくは相互作用距離を、軌跡アンサンブルから推定する情報理論的枠組みを提案した。集団挙動分析において、捕食者-被食者相互作用とリーダーとフォロワー識別を研究するために、シミュレーションデータと実験データの双方に対し、移動エントロピー（TE）が用いられている。我々は、修正 VM において、同定された最適相互作用領域を用いることで、リーダーとフォロワーの分類が、移動エントロピーが距離にかかわりなくすべてのペアーにおいて計算されるケースと比較して、大幅に改善することを示した。現実には、人は動物、細胞、または鳥のグループの相互作用領域を推察できない。軌跡アンサンブルからそれを推測するために、カットオフ距離λを導入する。我々は、カットオフ距離に対する平均 TE の関数の微分が、実際の相互作用半径の近傍で最小となり、この枠組みは集団運動するエージェントの相互作用領域を捉えられることを示した。我々は非線形尺度としての TE が、相互作用領域の同定において、相互相関（CC）より優れていることも示した。

(11) 細胞性粘菌の細胞場解析と因果解析

細胞性粘菌は最も一般的に研究されている種の一つであ

る。細胞性粘菌は、ある条件下では、個体で独立した細胞として働くが、飢餓状態などの過酷な状態におかれると、結合して多画構造を形成する。私たちの目標は、細胞運動とcAMPシグナルから細胞間関係を定量化する事と、周囲を指揮するシンギュラリティ細胞を探求する事である。また、凝集場所に関する事前予測も行いたいと考えている。

私たちは、細胞間の情報と方向性を定量化するという方法で、リーダーとフォロワーの識別可能性の研究を行っている。相互情報量や移動エントロピー、因果エントロピーのようなさまざまなツールが、2つの過程間の情報フローを

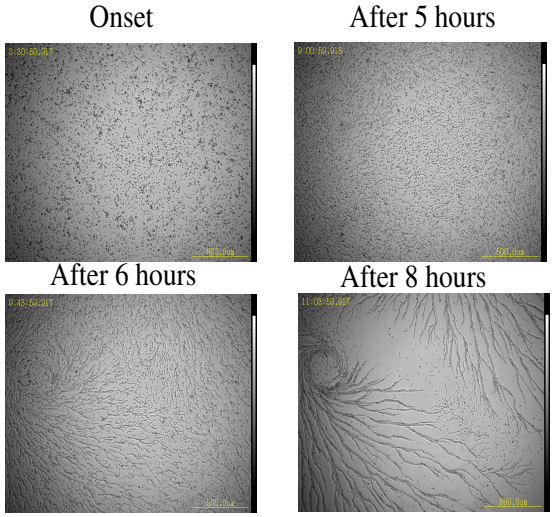


図 7： 典型的な Dicty 細胞の凝集過程

計測するために開発されてきた。二つの確率変数XとYに対し、条件Xの下でのYの条件付きエントロピーは、$H(Y|X) = -\sum_{X,Y} P(X,Y)\ \log\ P(X,Y)/P(Y)$ と定義される。ここで、$P(X,Y)$はその同時確率分布であり、$P(X)$はXの周辺確率分布である。移動エントロピー（TE）はこれら2つの過程の情報フローを測るのに用いられる。YからXへのTEは$TE(Y \to X) = H(X_{n+1}|X_n) - H(X_{n+1}|X_n, Y_n)$と定義される。リーダーとフォロワーの関係の場合、リーダー細胞からフォロワー細胞に伝わる情報は、フォロワー細胞からリーダー細胞に伝わるものよりも大きくなるべきである。しかしながら、TEは、より深い解釈をもたらす他の情報量の組に更に分解可能である。私たちはコロニーにおけるリーダーとフォロワーの関係を解明する事でTEの利点と欠点の問題について取り組んでいる。その一方で、凝集場所を明らかにする為に、我々は、位相差画像のシークエンスに対して粒子画像流速測定（PIV）を適用し、画像上の異なる箇所（グリッド）の間でどのように速度が変わるのかを調べている。我々はこれらのグリッドの方位も測定している。速度分布もしくはグリッドの方位がどの位変わるかを判定するために、カントロヴィッチ距離を用いる。この測度は、誘因（になりうる）運動がいつどのように起こるかを知る為の測度の候補であり、細胞場中の情報伝達の解明につながることが分かった。

(12) ３次元分子構造がもつ構造モチーフの解析法開発

化学反応を理解する上で分子構造３次元から得られる情報は、立体異性体や創薬におけるドッキング法など、分子の機能を知り、利用する上で欠かすことができない。他方、データベースから得られた情報を使って反応性や機能の予測をする化学情報学は分子構造式もしくは分子グラフに代表される２次元の情報を使っている。これは、一般の部分グラフ同型判定問題が NP 完全だが、平面グラフにおいては多項式時間となるためである。

他方、量子化学計算を使って得られるトラジェクトリーや反応経路のデータでは、１．立体構造は変わるが分子構造式はあまり変わらないことが多い、２．立体構造間の原子の移動が特定できている、３．扱う立体構造の原子数に対して量子化学計算による制約がある　といった特徴がある。我々は、複数の分子構造群から、適当な閾値以下の変化（図8）を許容した場合に、変化しない３次元部分構造を特定するアルゴリズムを開発した。

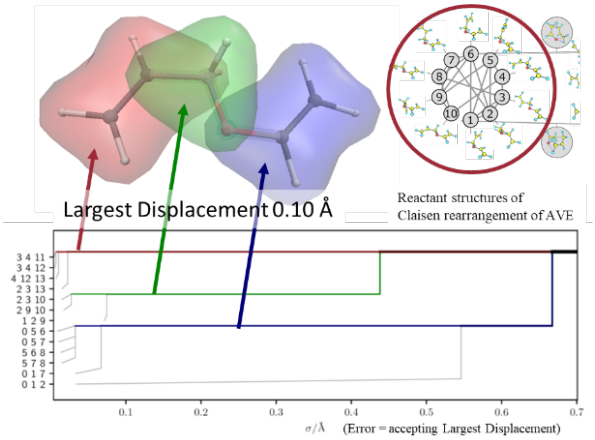


図 8　解析によって得られたアリルビニルエーテルのクライゼン転位反応における反応系分子構造群がもつ構造モチーフ

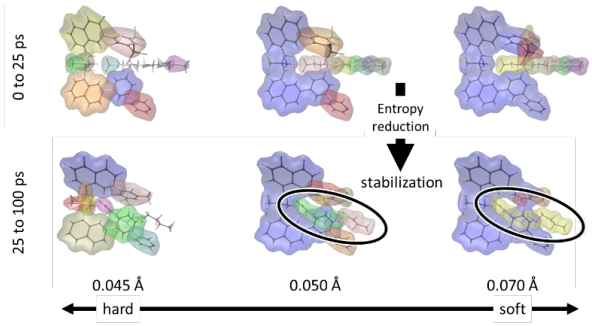


図 9　トラジェクトリーデータから得られた構造モチーフが示す部分構造がある時刻以降安定化

(13) Voronoi 分割による化学反応動力学の相空間構造の計算

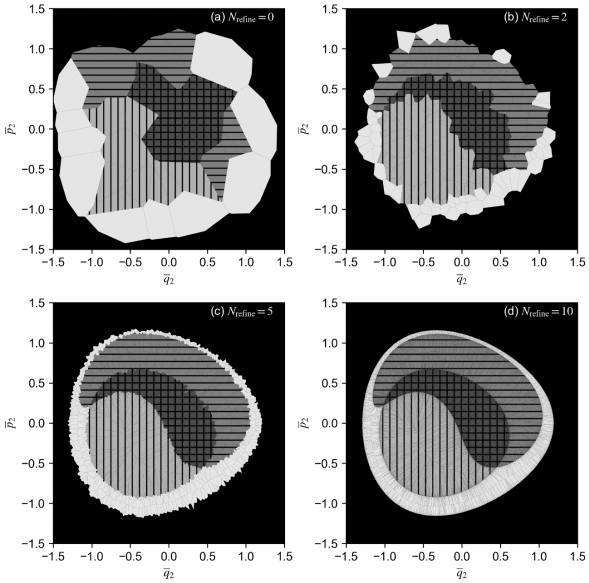
ポテンシャルエネルギー面上の最小エネルギー経路に基づく反応経路図は，化学反応機構の系統的解明と反応速度・選択性の予測に不可欠な学術的基盤となっている．しかし，最小エネルギー経路は動力学効果（分子の運動の効果）を無視しているため，この伝統的な反応経路図の枠組みによって扱えない化学反応の例が，近年多数報告されている．そこで本研究では，動力学効果を取り込める相空間幾何学の理論的枠組みと，量子化学計算の技術とを融合させ，動

力学的反応経路図の自動作成プログラムを開発する．これまで我々は，Voronoi 分割と動力学計算を用いた相空間構造の数値計算法の研究開発を行った.このアルゴリズムは，ランダムに動力学計算の初期条件を選ぶより効率的に化学反応動力学の相空間構造を計算できる.
図10 Voronoi 分割による相空間構造の計算例.

(14) 化学探索における不確実性の評価手法の開拓

実験設定下での反応物の物理的コストのため､もしくは、計算化学であれば多大な計算時間/リソースを必要とするために、化学では実験データであっても、計算データであっても、データを得るために非常にコストが掛かる。最も重要なこととして、計算ができることとその計算の精密さとはトレードオフの関係にあるため、得られる計算または実験データの確信度にはばらつきが生じる。

そのため、まず化学データに現れる不確実性の問題に取り組む必要がある。不確実性を定量化する方法として、ガウス過程には望ましい特性が多くある。第一に、ガウス過程はベイズ推論に依拠しており、そのことは事前分布という形で我々が持っている事前信念をモデルに組み込むことを可能とする。第二に、ガウス過程で用いられている様々なカーネル関数は、化学の特定の問題に対処するためにデザインすることができるであろうからである。



さらに次に問題になってくるのが、正確な分子記述子のデザインである。完璧な記述子であるためには、原子座標の変化に関する連続性と微分可能性、回転と置換不変性、完全性といった、いくつかの条件を満たさなければならない。例えば、SOAP のような関数ベースのアプローチは、こういった条件をほぼ満たしている。しかしながら、可能な限り非冗長でありながらも表現の完全性の問題にも対処できるように､更なる改善がこのアプローチには必要である。さらに我々は、分子のトポロジー的特徴を捉える別の記述子の一群についても研究を行った。

(15) 新概念コンピューティングによる化学反応ネットワークの解析と設計

化学反応ネットワークの解析と設計問題（e.g. 合成経路最適化、反応経路列挙）の多くは，従来型計算機では計算困難である，NP 完全な組合せ最適化問題として定式化される．本研究では，組合せ最適化問題に特化したイジング計算機などの新概念コンピューティング技術を用いて，大規模化学反応ネットワークの解析と設計問題を解くことができる実用的計算技術を開発する．これまでで，問題の定式化とイジング計算機を用いるために必要なイジングハミルトニアンの理論設計を行い，シミュレーティッドアニーリングにより中規模の問題を解けることを確認している．今後は，量子アニーラーや CMOS アニーラ―などのイジング計算機の実機を利用した計算を行い，さらに大規模問題を部分問題に分割する方法論を開発する予定である．

３．今後の研究の展望

生体機能を司る分子は、多くの場合、アボガドロ数個ではなく、少数個が参画し、有限時間内に生体機能は生起する。そこでは平衡統計の枠組みが必ずしも成立している保証はなく、一分子観察を通して、長時間の分子記憶などの動態現象として具現化されているものと思われる。しかしながら、シグナル伝達、エネルギー伝達、DNA複製などの細胞機能において重要な役割を果たす分子機械は、熱揺らぎに晒されながら、入力刺激に対する応答として始まる一連の構造変化とそれに伴う化学反応から成り、平均熱エネルギー（～kBT）よりもさほど大きくない入力に対し、その機能を効率的かつ選択的に発現する。しかしながら、その指導原理は未だに解明されていない。それゆえ、統計性を予め仮定しない基礎理論から化学反応や構造転移の根本原理を追求するとともに、あらかじめ系についての性質（統計性、次元性など）を前提としないで、(実際に観測される）一分子時系列情報から背後に存在する動態構造について読み解く方法論を確立することは熱揺らぎ存在下における生体機能の指導原理を考察するうえで本質的に重要である。今後、引き続き、一分子生物学における自由エネルギー地形概念そのものの再考、生体分子系ダイナミックスと熱揺らぎの拮抗関係、時空間スケールの異なる階層間の情報伝達、環境に適応しながら時々刻々変化する階層ネットワーク構造の遍歴現象などを考察していき、一分子基礎学の創出を目指していく予定である。

一方、近赤外波長域を用いた生体組織レベルでの定量的計測法の確立を目指し、それを用いた生物システムの階層をまたいだ計測とその医学生物学応用を進めていく予定である。またそれにとどまらず幅広い応用も進めて行く。

４．資料

4.1 学術論文（査読あり）

1) Y. Sugie, Y. Yoshida, N. Mertig, T. Takemoto, H. Teramoto, A. Nakamura, I. Takigawa, S. Minato, M. Yamaoka and T. Komatsuzaki: “Minor-embedding heuristics for large-scale annealing processors with sparse hardware graphs of up to 102,400 nodes”, Soft Computing (2021)

2) U. S. Basak, S. Sattari, K. Horikawa and T. Komatsuzaki: “An information-theoretic approach to infer the underlying interaction domain among elements from finite length trajectories in a noisy environment”, J. Chem. Phys. , 154: 034901-1-034901-12 (2021)

3) Jijun Liu, Manabu Machida, Gen Nakamura, Goro Nishimura and Chunlong Sun, On fluorescence imaging: diffusion equation model and recovery of absorption coefficient of fluorophores, Science China Mathematics, doi:10.1007/s11425-020-1731-y.(2020) in press

4) U. Basak, S. Sattari, H. Motaleb, K. Horikawa and T. Komatsuzaki: "An information-theoretic approach to infer the underlying interaction domain among elements from finite length trajectories in a noisy environment" J. Chem. Phys. Accepted for publication

5) U. Basak, S. Sattari, K. Horikawa and T. Komatsuzaki: "Erratum: Inferring domain of interactions among particles from ensemble of trajectories", Physical Review E, 102(124040): 069902-1-069902-3 (2020)

6) N. Shimamoto, M. Toda, S. Nara, T. Komatsuzaki, K. Kamagata, T. Kinebuchi and J. Tomizawa: "Dependence of DNA length on binding affinity between TrpR and trpO of DNA", Scientific Reports, 10: 15624-1-15624-9 (2020)

7) U. Basak, S. Sattari, K. Horikawa and T. Komatsuzaki: "Inferring domain of interactions among particles from ensemble of trajectories", Phys. Rev. E, 102(1): 012404-1-012404-9 (2020)

8) T. Aizawa, M. Demura, K. Gohara, H. Haga, K. Ishimori, M. Kinjo, T. Komatsuzaki, K. Maenaka and M. Yao: "Biophysical Research in Hokkaido University, Japan", Biophysical Reviews, 12(2): 233-236 (2020)

9) T. Komatsuzaki, H. Nakamura, J. Tame, S. Yanaka, T. Nagai and K. Nagayama: "Editorial for the Special Issue of Biophysical Reviews focused on the Biophysical Society of Japan with select scientific content from the 57th BSJ annual meeting, Miyazaki, Japan", Biophysical Reviews, 12: 183-185 (2020)

10) K. Yamamoto, K. Ando, N. Mertig, T. Takemoto, M. Yamaoka, H. Teramoto, A. Sakai, S. Takamaeda-Yamazaki, and M. Motomura, STATICA: A A 512-Spin 0.25M-Weight Full-Digital Annealing Processor with a Near-Memory All-Spin-Updates-at-Once Architecture for Combinatorial Optimization with Complete Spin-Spin Interactions, 2020 IEEE International Solid- State Circuits Conference - (ISSCC), San Francisco, CA, USA, 138, (2020)

11) Y. Sugie, N. Mertig, Y. Iwata, H. Teramoto, A. Nakamura, I. Takigawa, S. Minato, T. Komatsuzaki, and T. Takemoto, "Compiling higher order binary optimization problems into annealing processors", 25th International Symposium on Artificial Life and Robotics (AROB 25th 2020), Beppu, Japan, January 22-24, (2020)

12) H. Teramoto, A. Tsuchida, K. Kondo, S. Izumiya, M. Toda and T. Komatsuzaki, "Application of singularity theory ot bifurcation of band structures in crystals", Journal of Singularities, 21, 289-302 (2020).

13) K. Tabata, A. Nakamura, J. Honda and T. Komatsuzaki: "A bad arm existence checking problem: How to utilize asymmetric problem structure?", Machine Learning, 109: 327-372 (2020)

14) T. Komatsuzaki, S. Pressé and P. Senet: "Deciphering Molecular Complexity in Dynamics and Kinetics - From the Single Molecule to the Single Cell Level", The Journal of Physical Chemistry B, 123(30): 6387-6388 (2019)

15) K. M. Helal, J. N. Taylor, H. Cahyadi, A. Okajima, K. Tabata, Y. Itoh, H. Tanaka, K. Fujita, Y. Harada and T. Komatsuzaki: "Raman spectroscopic histology using machine learning for nonalcoholic fatty liver disease", FEBS Letters, 593: 2535-2544 (2019)

16) J. N. Taylor, K. Mochizuki, K. Hashimoto, Y. Kumamoto, Y. Harada, K. Fujita and T. Komatsuzaki: "High-Resolution Raman Microscopic Detection of Follicular Thyroid Cancer Cells with Unsupervised Machine Learning", The Journal of Physical Chemistry B, 123(20): 4358-4372 (2019)

17) H.Toba, S.Odate, K.Otaki, and G.Nishimura, "The stability condition for FDTD of the optical diffusion equations", Optical Review, 27: 81-89 (2020).

18) C.Sun, G.Nakamura, G.Nishimura, Y.Jang, J.Liu and M.Machida, "Fast and robust reconstuction algorithm for fluorescence diffuse optical tomography assuming a cuboid target", Journal of the Optical Soceity of America A, 37: 213-239 (2020).

19) T. Takemoto, N. Mertig, M. Hayashi, S. Susa-Tanaka, H. Teramoto, A. Nakamura, I. Takigawa, S. Minato, T. Komatsuzaki and M. Yamaoka: "FPGA-Based QBoost with Large-Scale Annealing Processor and Accelerated Hyperparameter Search", In Proc. of IEEE CAS 2018 International Conference on Reconfigurable Computing and FPGAs (ReConFig 2018), Dec. 2018 (2019)

20) G.Nishimura: "Contrast improvement in indocyanine green fluorescence sensing in thick tissue using a time-gating method", Biomed.Opt.Exp., 10, pp.1234-1249, (2019)

21) Y. Sugie, Y. Yoshida, N. Mertig, T. Takemoto, H. Teramoto, A. Nakamura, I. Takigawa, S. Minato, M. Yamaoka and T. Komatsuzaki: "Graph Minors from Simulated Annealing for Annealing Machines with Sparse Connectivity", Theory and Practice of Natural Computing - 7th International Conference, TPNC 2018, Dublin, Ireland, December 12-14, 2018, Proceedings, 11324: 111-123 (2018)

22) S. Ito: "Stochastic thermodynamic interpretation of information geometry", Physical Review Letters 121(3), pp.030605-1-030605-7 (2018)

4.2 学術論文（査読なし）

1) T. Komatsuzaki, H. Nakamura, J. Tame, S. Yanaka,

T. Nagai and K. Nagayama: “Editorial for the Special Issue of Biophysical Reviews focused on the Biophysical Society of Japan with select scientific content from the 57th BSJ annual meeting, Miyazaki, Japan”, Biophysical Reviews, 12: 183-185 (2020)

4.3 総説・解説・評論等

1) 小松崎 民樹:「化学反応理論の普遍性:GRRMに期するもの」、IQCE NEWS、57: 1 (2018)

4.4著書

1) 寺本　央、″計算機で挑戦する特異点を持つ写像の分類とその応用(1) 様々な応用に現れる特異点″、68, 数学セミナー（日本評論社）2020年3月号
2) 寺本　央、″計算機で挑戦する特異点を持つ写像の分類とその応用(2) 特異点分類アルゴリズム″、68, 数学セミナー（日本評論社）2020年3月号
3) T. Komatsuzaki : “Minorities and Small Numbers from Molecules to Organisms in Biology-Toward a New Understanding of Biological Phenomena”, Springer (2018)

4.5 講演

ａ．招待講演（国際学会）

1) T. Komatsuzaki* : “On-the-fly Raman image microscopy by reinforcement machine learning: How to accelerate the measurement?”, SCIX2020, Nevada(オンライン), United States of America (the) (2020-10)
2) T. Komatsuzaki* : “Raman pathology and its phenotypic landscape for Non-alcoholic fatty liver diseases”, The Complexity of Dynamics and Kinetics from Single Molecules to Cells, Telluride, CO., United States of America (the) (2020-06)
3) T. Komatsuzaki* : “Geometrical aspect of chemical reaction dynamics in thermally fluctuating environments and Future Directions”, Chaos Indicators, Phase Space and Chemical Reaction Dynamics, University of Bristol（オンライン）, United Kingdom of Great Britain and Northern Ireland (the) (2020-05)
4) T. Komatsuzaki* : “On-the-fly Raman image microscopy by reinforcement machine learning”, Biomedical Raman Imaging 2019, Icho Kaikan, Suita Campus, Osaka University, Japan (2019-11)
5) T. Komatsuzaki* : “Causal inference in Leader-follower relationship”, ICSB 2019: Singularity Biology: small elements change the function of the whole systems, Okinawa Institute of Science and Technology Graduate University, Japan (2019-10)
6) Y. Mizuno* : “A diagrammatic approach to understanding complicated nonadiabatic chemical reaction dynamics”, XV INTERNATIONAL WORKSHOP ON QUANTUM REACTIVE SCATTERING (QRS2019 workshop), Saitama University, Japan (2019-07)
7) T. Komatsuzaki* : “Raman pathology and its phenotypic landscape for Non-alcoholic fatty liver diseases”, The Complexity of Dynamics and Kinetics from Single Molecules to Cells, Telluride, CO., USA (2019-06)
8) T. Komatsuzaki* : “Deciphering hierarchical features in reaction network and energy landscape”, Network analysis to elucidate natural system dynamics, diversity and performance, CECAM-FR-RA, France (2019-05)
9) H. Teramoto* : “A Fully Automated Algorithm for Classification in Singularity Theory”, AMS Spring Central and Western Joint Sectional Meeting, University of Hawaii at Manoa, United States of America (2019-03)
10) T. Komatsuzaki* : “How can one bridge information science and measurement science to accelerate the measurements?”, The 22nd SANKEN International Symposium The 17th SANKEN Nanotechnology International Symposium ″Next Generation Science and Technology for Super Smart Society″, 大阪大学, Japan (2019-01)
11) G.Nishimura*:”Sensitivity of Florescence Signal in Strong Scattering Medium”, A3 Workshop in Applied Inverse Problems, Okinawaken Seinenkaikan, Naha, Japan (2019.1).
12) T. Komatsuzaki* : “Revisit transition state theory: Past, Present, Future”, Workshop “Trends in Computational Molecular Biophysics”, The Fourth High School Memorial Museum of Cultural Exchange, Kanazawa, Japan (2018-11)
13) H. Teramoto* : “Normal Forms in Singularity Theory for Geometric Classifications of Band Structures”, Dynamics Days Europe 2018, Loughborough University, Japan (2018-09)
14) G.Nishimura*:”Time-domain Optical Tomography for Fluorescence Objects”, Tianyuan Workshop on Mathe-matical and Computational Challenges of Medical Imaging and Iverse Problems, Shanghai University of Finance and Economics, Shanghai, China (2018-8).
15) S. Sattari* and T. Komatsuzaki : “A turnstile-based view of multi-exponential decay”, Geometry of Chemical Reaction Dynamics in Gas and Condensed Phases, Telluride, CO., United States of America (2018-07)
16) H. Teramoto*, A. Tsuchida, Y. Kabata, K. Kondo, K. Nabeshima, S. Izumiya, M. Toda and T. Komatsuzaki : “Normal forms in singularity theory for geometric classifications of local band

structures”, Geometry of Chemical Reaction Dynamics in Gas and Condensed Phases, Telluride, CO., United States of America (2018-07)

17) T. Komatsuzaki* : “Open questions in Higher rank saddles and related”, Geometry of Chemical Reaction Dynamics in Gas and Condensed Phases, Telluride, CO., United States of America (2018-07)

18) S. Sattari* and T. Komatsuzaki : “Computing Chaotic Transport and Phase Space Structure with Symbolic Dynamics”, Geometry of Chemical Reaction Dynamics in Gas and Condensed Phases, Telluride, CO., United States of America (2018-07)

19) T. Komatsuzaki* : “Phase Space geometry and Chemical Reaction Dynamics in Driven Systems”, Geometry of Chemical Reaction Dynamics in Gas and Condensed Phases, Telluride, CO., United States of America (2018-07)

20) T. Komatsuzaki* : “How One can Extract Energy Landscape from Single -Molecule Time Series under the Existence of Noise?”, Biophysical Dynamics, Telluride, CO., United States of America (2018-07)

21) H. Teramoto*, A. Tsuchida, Y. Kabata, K. Kondo, K. Nabeshima, S. Izumiya, M. Toda and T. Komatsuzaki : “Normal forms in singularity theory for geometric classifications of local band structures”, Geometry of Chemical Reaction Dynamics in Gas and Condensed Phases, Telluride, CO., United States of America (2018-07)

22) H. Teramoto* : “Normal forms in singularity for geometric classifications of band structures”, TraX International Conference 2018, Campus de Cantoblanco of the Universidad Autónoma de Madrid, Spain (2018-05)

ｂ．招待講演（国内学会）

1） 西村吾朗、生体組織内に内在する蛍光体の高感度検出、レーザー学会第３期第５回「レーザーバイオ医療」技術専門委員会、北海道大学、札幌市 (2019-7)

2） 寺本 央* : 「イジング型計算機、日立製作所と北海道大学の取り組み」、数学パワーが世界を変える 2019、東京ガーデンパレス、Japan (2019-03)

3） 寺本 央* : 「包括的グレブナー基底系等を用いた特異点分類のアルゴリズムの紹介」、応用特異点論研究会、神戸大学、Japan (2018-12)

4） 小松崎 民樹* : 「ラマン計測と情報科学：情報科学は計測を迅速化できるか」、第１回計測インフォマティクス研究会、大阪大学産業科学研究所、Afghanistan (2018-09)

5） T. Komatsuzaki* : “Information theoretic approach to reveal singularity in biology”, 第 56 回日本生物物理学会年会, 岡山大学 津島キャンパス, Japan (2018-09)

6） 寺本 央* : 「結晶点群、時間反転対称性の下でのバンド構造の幾何学的分類」、第 65 回トポロジーシンポジウム、信州大学全学教育機構、Japan (2018-08)

7） 西村　吾朗、「組織深部拡散蛍光トモグラフィー：時間領域からのアプローチ」、第 37 回日本医用画像工学会大会、筑波大学天王台キャンパス大学会館、つくば市、(2018-7).

8） 寺本 央* : 「対称性下でのバンド交差近傍でのハミルトニアンの分類」、微分幾何学・微分式系・特異点論の応用、広島工業大学、Japan (2018-05 〜 2018-06)

ｃ．一般講演（国際学会）

1) C.Sun, G.Nishimura* , G.Nakamura, M.Machida, Y.Jiang and J.Liu, Time-domain Fluorescence Diffuse Optical Tomography using a Cuboid, Biophotonics Congress: Biomedical Optics 2020 (Translational, Microscopy, OCT, OTS, BRAIN), OSA Technical Digest, JTu3A.20.(2020-4)

2) H.Fujii*, G.Nishimura, S.Endo, N.Nomura, K.Kobayashi, and M.Watanabe: “Numerical study on light propagation in a white bread loaf”, The 7th Asian NIR Symposium, Avani Hotel, Khonkaen, Thailand (2020-2).

3) N.Nomura*,H.Fujii,K.Kobayashi,M.Watanabe and G.Nishimura: “Analysis of interference effects on light scattering in colloidal suspensions”, The 7th Asian NIR Symposium, Avani Hotel, Khonkaen, Thailand (2020-2).

4) A. Pelissier*, A. Nakamura, and K. Tabata : “Feature Selection As Monte-Carlo Search in Growing Single Rooted Directed Acyclic Graph by Best Leaf Identification”, 2019 SIAM International Conference on Data Mining, Hyatt Regency Calgary, Canada (2019-05)

5) G.Nishimura*: “Fluorescence Image Contrast Improve-ment by a Time-domain Method”, 2018 OSA Biophonics Congress: Biomedical Optics, The Diplomat Beach Resort, Hollywood, FL, USA (2018-4).

ｄ．一般講演（国内学会）

1) Chunlong Sun, *西村　吾朗, 中村　玄, 町田　学, Jijun Liu, Yu Jang, 「直方体形状を仮定した拡散蛍光トモグラフィ」 Optics and Photonics Japan 2020, (2020) 11.14-17 (Virtual Conference)

2) 田代　剛大、山田　幸生、丹羽　治樹、牧　昌次郎、北田　昇雄、斉藤　亮平、小池　卓二、道脇　幸博、西村　吾朗, 「近赤外蛍光を用いた咽頭残留の非侵襲検出法の開発: ファントムを用いた検出能評価」 Optics and Photonics Japan 2020, (2020) 11.14--17 (Virtual Conference)

3) S. Sattari*, U. Basak, M. M. Hossain, K. Horikawa

and T. Komatsuzaki : “Quantifying the length- and time-scales of influence of cells in collective motion”, 第58回日本生物物理学会年会, オンライン, Japan (2020-09)

4) J. Clement*, K. Mochizuki, K. Fujita and T. Komatsuzaki : “Raman imaging for cancer diagnosis”, 第58回日本生物物理学会年会, オンライン, Japan (2020-09)

5) U. S. Basak*, S. Sattari, H. M. Motaleb, K. Horikawa and T. Komatsuzaki : “Inferring domain of Interactions among Dictyostelium discoideum colony from the Ensemble of Trajectories of cells”, 第58回日本生物物理学会年会, オンライン, Japan (2020-09)

6) M. M. Hossain*, S. Sattari, U. S. Basak, K. Horikawa and T. Komatsuzaki : “Vector analysis of amoeba motion with respect to the propagation of chemoattractant cyclic-AMP”, 第58回日本生物物理学会年会, オンライン, Japan (2020-09)

7) 西村吾朗* :「生体組織中にある蛍光ターゲットの高感度検出(3)」、Optics and Photonics Japan 2019, 大阪大学 (2019-12).

8) 野村航希*、藤井宏之、西村吾朗、小林一道、渡辺正夫:「干渉性を考慮したコロイド溶液における光伝搬解析」Optics and Photonics Japan 2019, 大阪大学 (2019-12).

9) 田代剛大*、鈴木崇弘、山田幸生、丹羽治樹、牧昌次郎、北田昇雄、斉藤亮平、小池卓二、道脇幸博、西村吾朗,「誤嚥検査のための近赤外蛍光を用いた咽頭残留検出システムの開発」Optics and Photonics Japan 2019, 大阪大学 (2019-12).

10) U. S. Basak*, S. Sattari, K. Horikawa and T. Komatsuzaki : “An Information-theoretic approach toward identifying the leader(s) and aggregation place in Dictyostelium Discoideum colony”, 第57回日本生物物理学会年会, シーガイアコンベンションセンター, Japan (2019-09)

11) S. Sattari*, T. Komatsuzaki, M. Toda, S. Nicholson, J. R. Green and U. Basak : “A leadership-based phase transition in a flocking model with activated and un-activated agents”, 第57回日本生物物理学会年会, シーガイアコンベンションセンター, Japan (2019-09)

12) 田代剛大*、鈴木崇弘、山田幸生、丹羽治樹、牧昌次郎、北田昇雄、斉藤亮平、小池卓二、西村吾朗、道脇幸博:「近赤外蛍光を用いた咽頭残留食物の非侵襲検出法の開発 -ヒトを対象にした計測-」、日本機械学会第３０回バイオフロンティア講演会 (2019)7.19-20 (霧島国際ホテル、霧島市)

13) ジェームス ニコラス テイラー*、Pirchi Menahem、Haran Gilad、小松崎 民樹 :「アデニレートキナーゼの一分子観察データから再構成するエネルギー地形の階層性」、第 22 回理論化学討論会、北海道大学学術交流会館、Japan (2019-05)

14) K. M. Helal*, H. Cahyadi, J. N. Taylor, A. Okajima, Y. Kumamoto, H. Tanaka, Y. Harada and T. Komatsuzaki : “Machine Learning Approaches to Raman Micro-spectroscopic Images”, 第56回日本生物物理学会年会, 岡山大学 津島キャンパス, Japan (2018-09)

15) 伊藤 創祐* :「Information geometry and thermodynamic uncertainty for biochemical process」、第56 回日本生物物理学会年会, 岡山大学 津島キャンパス, Japan (2018-09)

16) 伊藤 創祐* :「情報幾何の確率的熱力学による解釈と熱力学不確定性関係」、日本物理学会 2018 年秋季大会、同志社大学, Japan (2018-09)

ｅ. 研究会・シンポジウム・ワークショップなど

1) 寺本 央* :「実特異点の分類および認識アルゴリズムの進展」、数学と諸分野の連携にむけた若手数学者交流会 2021、オンライン、Japan (2021-03)

2) U. S. Basak*, S. Sattari, M. Hossain, K. Horikawa and T. Komatsuzaki : “Study on Identification of Leader and Follower agents and its Interaction domain from Trajectories in a Collectively Moving Colony”, 生物物理学会学会 北海道支部－東北支部合同例会, オンライン, Japan (2021-03)

3) 近藤 僚哉*、ジェームス ニコラス テイラー、Clement Jean-Emmanuel、水野 雄太、藤田 克昌、原田 義規、小松崎 民樹 : 「化学的不均一性も考慮したラマン顕微鏡画像解析」、生物物理学会学会 北海道支部－東北支部合同例会、オンライン、Japan (2021-03)

4) M. Hossain*, S. Sattari, U. S. Basak, K. Horikawa and T. Komatsuzaki : “Analysis Dictyostelium Discoideum cells motion response to a chemoattractant cyclic-AMP wave”, 生物物理学会学会 北海道支部－東北支部合同例会, オンライン, Japan (2021-03)

5) S. Sattari*, U. S. Basak, J. P. Crutchfield and T. Komatsuzaki : “Modes of Information Flow in Collective Cohesion”, 生物物理学会学会 北海道支部－東北支部合同例会, オンライン, Japan (2021-03)

6) 小松崎 民樹* : 「強化学習を用いたラマン計測迅速化：On-the-fly Raman image microscopy」、大阪大学・ナノ理工学情報交流会、大阪府豊中市、Japan (2021-02)

7) Z. Ferdous*, M. Tsuda, J. Clement, K. Tabata, J. P. Gong, S. Tanaka and T. Komatsuzaki : “Detection of Cancer Stem Cells in Sarcoma Model Cells Using Morphological Features for Developing New Diagnostics Tools”, ICReDD 3rd International Symposium, 札幌（オンライン）, Japan (2021-02)

8) Y. Nagahata*, T. Taketsugu, S. Maeda and T. Komatsuzaki : “The hierarchy of observable reaction networks associated with observation time-intervals”, ICReDD 3rd International Symposium, 札幌（オンライン）, Japan (2021-02)

9) 寺本 央* :「Parametric standard system for generalized mixed module and its application to singularity theory, Hiroshi Teramoto and Katsusuke Nabeshima」、トポロジープロジェクト：幾何や自然科学に現れる特異点、オンライン、Japan (2021-02)

10) 田中 綾一*、水野 雄太、堤 拓朗、チツベロ ミカイル、武次 徹也、小松崎 民樹 : 「AFIR 法を用いた化学反応における動的効果の研究：1, 3-シグマトロピ

一転移の類似反応を例に」、化学系学協会北海道支部 2021 年冬季研究発表会、オンライン、Japan (2021-01)

11) 近藤 僚哉*、ジェームス ニコラス テイラー、Clement Jean-Emmanuel、水野 雄太、藤田 克昌、原田 義規、小松崎 民樹 ： 「機械学習を用いた化学的不均一性の情報を含むラマン顕微鏡画像中のスペクトルの分類 」、化学系学協会北海道支部 2021 年冬季研究発表会、オンライン、Japan (2021-01)

12) R. Kondo*, J. N. Taylor, J. Clement, Y. Mizuno, K. Fujita, Y. Harada and T. Komatsuzaki : "Classification of Spectra in Raman Microscopic Image by Chemical Heterogeneity", The 21st RIES-HOKUDAI International Symposium, 札幌(オンライン), Japan (2020-12)M. M. Abedin*, K. Tabata, J. Clement, M. Tsuda, S. Tanaka and T. Komatsuzaki : "Application of Linear Bandit in Drug Screening Example", The 21st RIES-HOKUDAI International Symposium, 札幌（オンライン）, Japan (2020-12)

13) M. M. Hossain*, S. Sattari, U. S. Basak, K. Horikawa and T. Komatsuzaki : "Vector analysis of amoeba motion response to a cyclic-AMP wave", The 21st RIES-HOKUDAI International Symposium, 札幌（オンライン）, Japan (2020-12)

14) S. Sattari*, U. Basak, M. M. Hossain, K. Horikawa and T. Komatsuzaki : "Vector analysis of amoeba motion with respect to the propagation of chemoattractant cyclic-AMP", The 21st RIES-HOKUDAI International Symposium, 札幌（オンライン）, Japan (2020-12)

15) J. Clement*, K. Mochizuki, K. Fujita and T. Komatsuzaki : "Raman Imaging for Exploring Cancer Metabolism", The 21st RIES-HOKUDAI International Symposium, 札幌（オンライン）, Japan (2020-12)

16) A. B. Halim*, J. Clement, K. Mochizuki, J. N. Taylor, K. Tabata, Y. Mizuno, A. Nakamura, Y. Harada, K. Fujita and T. Komatsuzaki : "To classify Raman spectra using Deep Learning Approach", The 21st RIES-HOKUDAI International Symposium, 札幌（オンライン）, Japan (2020-12)

17) U. S. Basak*, S. Sattari, M. M. Hossain, K. Horikawa and T. Komatsuzaki : "Inferring domain of Interaction among Dictyostelium discoideum colony from the ensemble of Trajectories of cells", The 21st RIES-HOKUDAI International Symposium, 札幌（オンライン）, Japan (2020-12)

18) Z. Ferdous*, M. Tsuda, J. Clement, K. Tabata, Y. Ishida, J. Suzuka, J. P. Gong, S. Tanaka and T. Komatsuzaki : "Analysis of Cancer Stem Cells in Sarcoma Model Cells by Deep Neural Network", The 21st RIES-HOKUDAI International Symposium, 札幌（オンライン）, Japan (2020-12)

19) 小松崎 民樹* ： 「一細胞ラマン計測と情報科学の融合による細胞診断の迅速解析技術の開発」、ＣＲＥＳＴ・さきがけ複合領域「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」第 5 回 CREST 領域会議、オンライン、Japan (2020-10)

20) 寺本 央* ： 「特異点論の諸科学への応用」、数学パワーが世界を変える 2020、秋葉原コンベンションホール、Japan (2020-02)

21) 宮下 彩季*、滝川 皇、水野 雄太、寺本 央、小松崎 民樹 ： 「古典的軌道計算とボロノイ分割を用いた反応チューブの計算方法」、化学系学協会北海道支部 2020 年冬季研究発表会、北海道大学学術交流会館、Japan (2020-01)

22) 小松崎 民樹* ： 「シンギュラリティ生物学における情報×計測」、シンギュラリティ生物学×細胞ダイバース合同ワークショップ、東京大学医科学研究所、Japan (2020-01)

23) 滝川 皇、宮下 彩季、水野 雄太*、寺本 央、小松崎 民樹 ： 「A computational method for reaction tubes based on trajectory calculation and Voronoi tessellation」、北海道大学電子科学研究所 2019 年度 研究交流会、北海道大学、Japan (2020-01)

24) H. Teramoto* : "Standard Basis for Mixed Module, Computational Algorithm and Application to Classification Problems in Singularity Theory", 研究集会「可微分写像の特異点論とその応用」, 京都大学数理解析研究所, Japan (2019-12)

25) 寺本 央* ： 「特異点論によるバンド交差の幾何構造の分類、不変量および分岐の解析」、離散幾何解析とその周辺 2019、CIC 東京、Japan (2019-12)

26) H. Teramoto*, Y. Kabata, K. Hayano and N. Hamada : "Type of singularity that can appear in Pareto set", The 20th RIES-HOKUDAI International Symposium, Hokkaido University Conference Hall, Japan (2019-12)

27) M. Takigawa, S. Miyashita, Y. Mizuno*, H. Teramoto and T. Komatsuzaki : "A computational method for reaction tubes based on trajectory calculation and Voronoi tessellation", 2019 International Symposium of Research Institute for Electronic Science (RIES) Hokkaido University & Center for Emergent Functional Matter Science (CEFMS) National Chiao Tung University, Hokkaido University, Japan (2019-12)

28) J. Clément*, K. Mochizuki, K. Fujita and T. Komatsuzaki : "Raman Imaging for Exploring Cancer Metabolism", The 20th RIES-HOKUDAI International Symposium, Hokkaido University Conference Hall, Japan (2019-12)

29) J. N. Taylor*, K. Mochizuki, K. Hashimoto, Y. Kumamoto, Y. Harada, K. Fujita and T. Komatsuzaki : "High Resolution Raman Microscopic Detection of Follicular Thyroid Cancer Cells with Unsupervised Machine Learning", The 20th RIES-HOKUDAI International Symposium, Hokkaido University Conference Hall, Japan (2019-12)

30) K. M. Helal*, H. Cahyadi, J. N. Taylor, A. Okajima, Y. Kumamoto, H. Tanaka, Y. Harada and T. Komatsuzaki : "Raman Microscopic Histology using Ensemble Learning for Non-alcoholic Fatty Liver Disease", The 20th RIES-HOKUDAI International Symposium, Hokkaido University Conference Hall, Japan (2019-12)

31) K. Tabata*, A. Nakamura and T. Komatsuzaki : "Bad Arm Existence Checking Algorithm with Bandit Feeedback", The 20th RIES-HOKUDAI International Symposium, Hokkaido University Conference Hall, Japan (2019-12)

32) S. Sattari*, U. Basak, S. Nicholson, J. R. Green, M. Toda and T. Komatsuzaki : “A sandbox model system for analyzing leadership in collective motion”, The 20th RIES-HOKUDAI International Symposium, Hokkaido University Conference Hall, Japan (2019-12)

33) U. S. Basak*, S. Sattari and T. Komatsuzaki : “An Information-theoretic approach to identify the interaction radius of a group of collectively moving animals”, The 20th RIES-HOKUDAI International Symposium, Hokkaido University Conference Hall, Japan (2019-12)

34) U. Basak* and T. Komatsuzaki : “Identification of interaction radius of a group of collectively moving animals: an information-theoretic approach”, 2019年度人・環境と物質をつなぐイノベーション創出ダイナミック・アライアンス 生命機能物質・デバイスシステムG3分科会, 大阪大学吹田キャンパス銀杏会館, Japan (2019-11)

35) K. M. Helal*: “Ensemble Learning Framework for Raman Microscopic Analysis of Non-alcoholic Fatty Liver Disease”, 2019年度人・環境と物質をつなぐイノベーション創出ダイナミック・アライアンス 生命機能物質・デバイスシステムG3分科会, 大阪大学吹田キャンパス銀杏会館, Japan (2019-11)

36) 寺本 央* : 「計算機でチャレンジする写像の特異点の分類とその応用」、令和元年度第1回徳島数学談話会 (冬の会)、徳島大学総合科学部、Japan (2019-11)

37) K. M. Helal*, H. Cahyadi, J. N. Taylor, A. Okajima, Y. Kumamoto, H. Tanaka, Y. Harada and T. Komatsuzaki : “Raman Hyperspectral Image Analysis Using Ensemble Learning for Non-alcoholic Fatty Liver Disease”, Biomedical Raman Imaging 2019, Icho Kaikan, Suita Campus, Osaka University, Japan (2019-11)

38) J. Clement*, S. Ono, K. Mochizuki, K. Fujita and T. Komatsuzaki : “Accelerated Raman hyperspectral imaging for cancer diagnosis”, Biomedical Raman Imaging 2019, Icho Kaikan, Suita Campus, Osaka University, Japan (2019-11)

39) H. Teramoto* : “Classification of band crossing geometries, their invariants and bifurcations”, 6th International Workshop on Singularities in Generic Geometry and its Applications, Campus de Burjassot of the Universitat de València, Spain (2019-10)

40) U. Basak* : “Information theory to classify leaders and followers in collective motion”, 研究会「理論と実験」２０１９, 広島大学, Japan (2019-10)

41) J. Clement* : “Raman imaging for cancer diagnosis”, 研究会「理論と実験」２０１９, 広島大学, Japan (2019-10)

42) 寺本 央* : 「特異点論の物質科学への応用」、さきがけ「数学協働」第11回(H31-1st)領域会議、KKRホテル金沢、Japan (2019-09)

43) H. Teramoto* : “Automation algorithms of classification of singularities, current status and future perspectives”, Singularity Theory and its Applications in Differential Equations and Differential Geometry, Lomonosov Moscow State University, Department of Mechanics and Mathematics, Russian Federation (the) (2019-09)

44) 小松崎 民樹* : 「一細胞ラマン計測と情報科学の融合による細胞診断の迅速解析技術の開発」、ＣＲＥＳＴ・さきがけ複合領域「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」第４回 CREST 領域会議、AP 市ヶ谷、Japan (2019-08)

45) H. Teramoto* : “Classification, bifurcation and invariants of band crossings in terms of singularity theory”, Progress in the Mathematics of Topological States of Matter, AIMR, Tohoku University, Japan (2019-07 〜 2019-08)

46) J. Clement* : “Reflection about Surface Enhanced Raman Spectroscopy”, The Complexity of Dynamics and Kinetics from Single Molecules to Cells, Telluride, CO., USA (2019-06)

47) 寺本 央* : 「特異点論によるバンド交差の幾何構造の分類、分岐解析およびその不変量の解析」、研究集会「特異点論による空間研究」、JR博多シティ会議室、Japan (2019-06)

48) 寺本央* : 「開催趣旨説明」、非ノイマン型計算、理論と応用、北海道大学電子科学研究所、Japan (2019-03)

49) K. M. Helal *, H. Cahyadi, J. N. Taylor, A. Okajima, Y. Kumamoto, H. Tanaka, Y. Harada and T. Komatsuzaki : “Analysis of Raman Microscopic Images of Liver Tissu to Predict Non-alcholic Fatty Liver Disease”, 生物物理・回折構造生物学合同研究会, 北海道大学, Japan (2019-03)

50) S. Sattari*, U. Basak, S. Nicholson, J. R. Green, M. Toda and T. Komatsuzaki : “A sandbox model system for understanding leadership in collective motion”, 生物物理・回折構造生物学 合同研究会, 北海道大学, Japan (2019-03)

51) U. S. Basak*, S. Sattari, S. Ito, K. Horikawa and T. Komatsuzaki : “Identification of Leader(s) in a Dictyostelium Discoideum colony: An Information-theoretic Approach”, 生物物理・回折構造生物学 合同研究会, 北海道大学, Japan (2019-03)

52) 田畑 公次*、小松崎 民樹 : 「A bad arm existence checking problem: how to utilize asymmetric problem structure?」、バイオ情報計測技術研究会、グリーンピア大沼、Japan (2019-03)

53) T. Komatsuzaki* : “Mathematical information measurement science: acceleration of Raman spectroscopy by bridging information science”, バイオ情報計測技術研究会, グリーンピア大沼, Japan (2019-03)

54) J. N. Taylor* and T. Komatsuzaki : “High resolution Raman microscopic detection of follicular thyroid cancer cells with unsupervised machine

learning”, バイオ情報計測技術研究会, グリーンピア大沼, Japan (2019-03)

55) A. Pelissier* and T. Komatsuzaki : “In combining single cell hyperspectral Raman images for the diagnosis of follicular thyroid carcinoma measured at different data”, バイオ情報計測技術研究会, グリーンピア大沼, Japan (2019-03)

56) J. Clement* and T. Komatsuzaki : “Cell Raman imaging Compress sensing”, バイオ情報計測技術研究会 チームミーティング, グリーンピア大沼, Japan (2019-03)

57) 寺本 央* : 「特異点論の物質科学への応用」、さきがけ「数学協働」第 10 回 (H30-2nd)領域会議、湘南国際村センター、Japan (2019-02)

58) 小松崎 民樹* : 「1 分子時系列情報からどのように背後の反応ネットワーク を抽出できるのか？」、「生命動態の理解と制御のための基盤技術の創出」研究領域 第 7 回領域会議・第 11 回数理デザイン道場、AP 市ヶ谷 6 階 会議室 C、Japan (2019-01) (招待)

59) 田畑 公次*、中村 篤祥、小松崎 民樹 : 「病理診断迅速化に向けたバンディットアルゴリズムの応用」、北海道大学電子科研究所平成 30 年度 研究交流会、北海道大学電子科学研究所、Japan (2019-01)

60) 寺本 央* : 「特異点論から社会実験へ向けた取り組み、ハードソフト両面から望ましいグラフトポロジーは？」、時空間展開 CREST のキックオフ合宿、定山渓グランドホテル瑞苑、Japan (2018-12)

61) U. S. Basak*, S. Sattari, S. Ito, K. Horikawa and T. Komatsuzaki : “Information theoretic approach to identify the leader(s) in Dictyostelium Discoideum colony”, The 19th RIES-HOKUDAI International Symposium, Jozankei View Hotel, Japan (2018-12)

62) K. M. Helal*, H. Cahyadi, J. N. Taylor, A. Okajima, Y. Kumamoto, H. Tanaka, Y. Harada and T. Komatsuzaki : “Information-theoretical Approaches to Raman Microscopic Images to Predict Non-alcoholic Fatty Liver Disease”, The 19th RIES-HOKUDAI International Symposium, Jozankei View Hotel, Japan (2018-12)

63) S. Sattari*, U. Basak, S. Nicholson, J. R. Green, M. Toda and T. Komatsuzaki : “A sandbox model system for analyzing leadership in collective motion”, The 19th RIES-HOKUDAI International Symposium, Jozankei View Hotel, Japan (2018-12)

64) K. Tabata*, A. Nakamura and T. Komatsuzaki : “Bad Arm Existence Checking Algorithms with Bandit Feedback”, The 19th RIES-HOKUDAI International Symposium, Jozankei View Hotel, Japan (2018-12)

65) M. Takigawa*, S. Sattari, S. Ito, H. Teramoto and T. Komatsuzaki : “The origin of why and how reactions take place: Reaction cylinders by Voronoi tessellation”, The 19th RIES-HOKUDAI International Symposium, Jozankei View Hotel, Japan (2018-12)

66) J. N. Taylor*, K. Mochizuki, K. Fujita and T. Komatsuzaki : “Data-Driven Analysis of Raman Microscopic Images of Human Follicular Thyroid Cells”, The 19th RIES-HOKUDAI International Symposium, Jozankei View Hotel, Japan (2018-12)

67) H. Teramoto*, A. Tsuchida, Y. Kabata, K. Kondo, K. Nabeshima, S. Izumiya, M. Toda and T. Komatsuzaki : “Application of Singularity Theory to Material Science”, The 19th RIES-HOKUDAI International Symposium, Jozankei View Hotel, Japan (2018-12)

68) K. M. Helal* and T. Komatsuzaki : “Ensemble Machine Learning Approach to Raman Hyper-spectral Images to Evaluate Non-alcoholic Fatty Liver Disease in Rats”, ダイナミック・アライアンス平成３０年度 生命機能 物質・デバイス・システム G3 分科会, 東京工業大学すずかけ台キャンパス, Japan (2018-11)

69) 寺本 央* : 「特異点論の物質科学への応用」、ダイナミック・アライアンス平成３０年度 生命機能 物質・デバイス・システム G3 分科会、東京工業大学すずかけ台キャンパス、Japan (2018-11)

70) Sosuke Ito* : “Stochastic thermodynamics and information geometry”, Advances in Physics of Emergent orders in Fluctuations 2018, Ito International Research Center, Japan (2018-11)

71) 田畑 公次*、中村 篤祥、小松崎 民樹 : 「非対称性を利用した悪腕存在チェックアルゴリズム」、第 21 回情報論的学習理論ワークショップ、かでる 2.7、Japan (2018-11)

72) 西村　吾朗* :「医療応用のための近赤外蛍光プローブの高感度検出」、第 34 回近赤外フォーラム,北海道大学学術交流会館、(2018-11)

73) J. N. Taylor*, K. Mochizuki, K. Fujita and T. Komatsuzaki : “Classification of Raman Spectra of Healthy and Cancerous Human Follicular Thyroid Cells”, 研究会「理論と実験」2018, 広島大学理学部, Japan (2018-10)

74) S. Sattari*, U. Basak, S. Nicholson, J. R. Green, M. Toda and T. Komatsuzaki : “A sandbox model system for studying leadership in collective motion”, 研究会「理論と実験」2018, 広島大学理学部, Japan (2018-10)

75) H. Teramoto*：“Application of Singularity Theory to Material Science”, The 6th International Symposium on AMBITIOUS LEADER’S PROGRAM Fostering Future Leaders to Open New Frontiers in Materials Science, Akira Suzuki Hall, Hokkaido University, Japan (2018-10) (招待)

76) 西村　吾朗*：「生体組織中にある蛍光ターゲットの高感度検出(2)」、Optics and Photonics Japan 2018, 筑波大学東京キャンパス文京校舎、(2018-10).

77) 小松崎 民樹*：「一細胞ラマン計測と情報科学の融合による 細胞診断の迅速解析技術の開発」、CREST さきがけ複合領域「情報計測」CREST 第 3 回領域会議、JST 東京別館 1 階ホール、Japan (2018-08 ～ 2018-09)

78) 小松崎 民樹*：「研究内容の概要説明」、新学術領域「シンギュラリティ生物学」キックオフシンポジウム・公募班概要説明、東京大学本郷キャンパス、Japan (2018-09)

79) 寺本 央*：「特異点論の物質科学への応用」、さきがけ「数学協働」第 9 回(H30-1st)領域会議、ホテルメルパルク長野、Japan (2018-09)

80) 小松崎 民樹*：「新概念コンピューティングとは？」、平成 30 年度北海道大学公開講座「去る時代、来る時代を考える」、北海道大学高等教育推進機構、Japan (2018-07) (招待)

81) T. Komatsuzaki*：“How One can Extract Energy Landscape from Single-Molecule Time Series under the Existence of Noise?”, Department Seminar, Johns Hopkins University, Department of Chemistry, Johns Hopkins University, United States of America (2018-07) (招待)

82) 伊藤 創祐*：「生物の情報伝達をどう取り扱うか-生体センサーの熱力学の最近の話題-」、物理学にとっておもしろい生物学、東京大学理学部、Japan (2018-05)

83) 小松崎 民樹*：「１細胞ラマン分光イメージングに基づく細胞場の分子データ科学」、新学術領域研究「分子夾雑化学」 分子夾雑の生命化学 第二回領域会議、ホテルマリノアリゾート福岡、Japan (2018-05)

84) Sosuke Ito, 「Stochastic thermodynamic interpretation of information geometry」, Big data analysis from a dynamical systems point of view, 北海道大学, Japan (2018-05). (招待)

85) J. N. Taylor* and T. Komatsuzaki：“Quantification of Raman Microscopic Images of Human Thyroid Cells with Machine Learning”, 理研シンポジウム「細胞システムの動態と論理 X」, 理化学研究所 生物科学研究棟, Japan (2018-04)

86) S. Sattari*, T. Komatsuzaki, N. B. Schuyler and J. R. Green：“Understanding cell colony dynamics from images using velocity extraction and analysis”, 理研シンポジウム「細胞システムの動態と論理 X」, 理化学研究所 生物科学研究棟, Japan (2018-04)

4.6 シンポジウムの開催

1) 小松崎 民樹、寺本央他：「複雑系数理：物理・化学・生物・情報とカオス」、奈良女子大学記念館（奈良市）(2021年03月27日～2021年03月28日)

2) 小松崎 民樹、諏訪 牧子、原田 慶恵：「次世代統合バイオイメージング数理の協働の展望」、オンライン（オンライン）(2020年10月14日)

3) 小松崎 民樹：「日立北大ラボ×北海道大学「社会創造数学コンテスト2019」表彰式」、オンライン（札幌市）(2020年03月06日)

4) 小松崎 民樹、水野 雄太：「International & Interdisciplinary Workshop on Chemical Reaction Dynamics: Mathematics Informatics, and Physics Meet Chemistry」、19人、北海道大学（北海道札幌市）(2019年10月08日)

5) 小松崎 民樹：「ラマン情報計測会議」、18人、ニセコ町民センター（北海道ニセコ町）(2019年08月03日～2019年08月05日)

6) T. Komatsuzaki, S. Presse and R. S. Berry：“The Complexity of Dynamics and Kinetics from Single Molecules to Cells”, Telluride Intermediate School (Telluride, CO. United States of America (the)) (2019年06月16日～2019年06月20日)

7) 寺本 央:「AIMaPワークショップ「非ノイマン型計算、理論と応用」」、北海道大学電子科学研究所（札幌市）(2019年3月26日)

8) 小松崎 民樹：「北大・日立新概念コンピューティングコンテスト 2018 表彰式」、福岡大学七隈キャンパス（福岡市）(2019年03月15日)

9) 小松崎 民樹、永井 健治、鷲尾 隆：「バイオ情報計測技術研究会」、グリーンピア大沼（北海道茅部郡森町）(2019年03月01日～2019年03月03日)

10) 小松崎 民樹：「シンギュラリティ生物学デザイン思考研究会」、THE HAMANAKO (浜松市) (2019年02月23日～2019年02月25日)

11) J. R. Green, S. Berry, H. Teramoto and H. Waalkens：“Geometry of Chemical Reaction Dynamics in Gas and Condensed Phases”, Telluride Intermediate School (Telluride, CO. United States of America) (2018年07月17日～2018年07月27日)

4.7 共同研究

a．国内大学、研究期間との共同研究

該当なし

b．産業界等との共同研究

1） 株式会社日立製作所「数学モデルとハードウェアアルゴリズムに基づく社会応用」2016-2021 年度

2） 西村　吾朗、株式会社ニコン、光学的手法を用いた生体組織計測技術に関する応用研究、2015～2019 年度

c．国際共同研究

1） J. N. Taylor, 小松崎民樹（北海道大学）、Gilad Haran （ワインズマン研究所、イスラエル）との国際共同研究「AK タンパク質の折りたたみ一分子観察からのエネルギー地形再構成」

2） 小松崎民樹（北海道大学）、Rigoberto Hernandez （ジョンズ・ホプキンス大学）との国際共同研究「化学反応動力学における相空間構造理論」

3） 西村吾朗(北海道大学)、Jijun Liu(東南大学、中国)との国際共同研究「拡散蛍光トモグラフィに関する逆問題とその応用」

4） 小松崎民樹（北海道大学）、Haw Yang （プリンストン大学）、Henning Mootz(ミュンスター大学)との国際共同研究「非リボゾームペプチド還元酵素の 1 分子生物学」

5） 小松崎民樹(北海道大学)、Thomas Bocklitz (Leibniz Institute of Photonic Technology)、Ioan Notingher (University of Nottingham)との国際共同研究「ラマン分光計測における標準化手法の統一とオンライン計測」

d．外国人研究者の招聘

1） David M Leitner、United States of America、(2019 年 10 月 07 日～2019 年 10 月 12 日)

2） James P. Crutchfield、UC Davis, United States of America、(2019 年 01 月 13 日～2019 年 01 月 14 日)

3） Steve Presse、Arizona State Univ., United States of America、(2018 年 10 月 31 日)

4.8 予算獲得状況

a． 科学研究費補助金

1） 水野　雄太、若手研究、相空間幾何学に基づく動力学的反応経路図の自動作成法の開発、2020～2023 年度

2） 西村　吾朗、基盤研究 B、高密度なコロイド溶液におけるふく射の干渉効果とふく射輸送に及ぼす影響の解明, 2020 年度～2022 年度（分担）

3） 西村　吾朗、基盤研究 C、近赤外蛍光検査システムを応用した新しい嚥下機能評価に関する基礎研究, 2020 年度～2022 年度（分担）

4） 小松崎 民樹、新学術領域研究、細胞集団とシンギュラリティ細胞のデータ駆動型数理解析技術の開発、2018～2022 年度

5） 小松崎 民樹、基盤研究 B 、生命動態システムに対する分子データ科学の構築、2017～2019 年度

6） 小松崎 民樹、特別研究員奨励費、1 細胞ラマン分光イメージングのための情報計測技術、2018～2020 年度

7） 寺本　央、基盤研究 C、包括的グレブナー基底系を用いた特異点分類の自動化、2019～2021 年度

8） 田畑　公次、若手　B、確率的多腕バンディット設定における効率的な良腕識別手法の開発とその応用、2018～2021 年度

9） 西村　吾朗、挑戦的研究(萌芽)、蛍光食品を用いた非侵襲誤嚥検査法の研究開発、2018～2020 年度

１０）西村　吾朗、基盤研究 C、生体組織内部にある蛍光体の高感度検出を可能とするタイムドメイン蛍光法、2019～2021 年度

１１）小松崎 民樹、萌芽研究、細胞の集団と少数性のシステム生物学、2016～2018 年度

１２）伊藤　創祐、若手　B、シグナル伝達系の情報熱力学、2018 年度

b．大型プロジェクト・受託研究

1） 水野　雄太、JST さきがけ、離散的化学反応論のための量子計算技術、2020～2023 年度、科学技術振興機構

2） 小松崎 民樹、JST CREST、一細胞ラマン計測と情報科学の融合による細胞診断の迅速解析技術の開発、2016～2021 年度、科学技術振興機構

3） 小松崎 民樹、株式会社日立製作所)、数学モデルとハードウェアアルゴリズムに基づく社会応用、2016～2021 年度

4） 小松崎 民樹、JSPS 二国間交流協定、データサイエンスと非線形科学の融合による新たな非平衡現象の探求、2018～2019 年度

5） 小松崎 民樹、JST CREST、数学に依拠する精度保証等の安全・安心を担保する最適化問題の研究、2018～2023 年度

6） 寺本　央、JST さきがけ、特異点論の物質科学への応用、2016～2019 年度、科学技術振興機構

7） 伊藤　創祐、JST さきがけ、情報幾何と熱力学による生体コンピューティング理論、2018～2021 年度

8） 西村　吾朗、株式会社ニコン、光学的手法を用いた生体組織計測技術に関する応用研究、2015～2019 年度

4.9 受賞

該当なし

4.10 アウトリーチ活動

該当なし