

令和 4 年 6 月 22 日現在

機関番号：10101

研究種目：基盤研究(B) (一般)

研究期間：2017～2019

課題番号：17H02940

研究課題名(和文)生命動態システムに対する分子データ科学の構築

研究課題名(英文)Development on molecular data science for biomolecule dynamical systems

研究代表者

小松崎 民樹 (Komatsuzaki, Tamiki)

北海道大学・電子科学研究所・教授

研究者番号：30270549

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 14,600,000円

研究成果の概要(和文)：1分子計測、1細胞分光イメージングなどの進展により、細胞などの複雑環境におけるデータが膨大に蓄積されているが、「それらのデータから如何にして背後に存在する分子作用機序を正しく抽出できるか」は喫緊の未解決課題であった。観測される1分子計測データ、イメージングデータから、色素分子の退色や低いシグナルノイズ比を加味しつつ、背後のエネルギー地形を抽出する、細胞状態を分類・推定する、およびラマン計測を飛躍的に迅速化するデータ科学的手法を新規に開発した。この他にも、細胞のトラッキングデータから相互作用域、多体相互作用の様相を同定する解析手法も新規に開発した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

物理学の多くは背後の基本方程式の存在を前提とするところから出発するが、細胞などの複雑系を取り扱う場合にその前提は困難となる。本研究課題では、色素分子の退色や低いシグナルノイズ比など計測原理に基づくデータ駆動科学を新規に展開することに成功した。本研究の社会的意義としては、計測科学と情報科学を融合させることで、これまで細胞・組織形態情報を指標にされてきた細胞診断に対し、分子環境を加味した新たな診断に繋がり、形態異常が顕在化する前の超早期診断の可能性を拓くものである。

研究成果の概要(英文)：With the progress of single-molecule measurement and single-cell spectroscopic imaging, a huge amount of data in complex environments such as cells has been accumulated. "How can we correctly extract the underlying molecular mechanism of action from those data?" was an urgent unsolved issue. From the observed single molecule measurement data and imaging data, by taking into account bleaching effect of dye molecules and low signal to noise ratio, we have developed a series of data scientific framework that extracts the underlying energy landscape, classifies the cell states, and accelerate Raman diagnosis with guaranteeing the accuracy of the diagnosis. In addition, we have newly developed an information science analysis method to identify the interaction region and the aspect of many-body interaction from cell tracking data.

研究分野：生物物理

キーワード：1分子計測 1分子イメージング 機械学習 因果推論 強化学習 ラマン計測 情報計測 自由エネルギー地形

科研費による研究は、研究者の自覚と責任において実施するものです。そのため、研究の実施や研究成果の公表等については、国の要請等に基づくものではなく、その研究成果に関する見解や責任は、研究者個人に帰属します。

## 1. 研究開始当初の背景

2014年のノーベル化学賞に代表されるように、日欧米を中心に1分子計測技術、超解像イメージング技術などの進展により、細胞などの多彩かつ複雑な分子環境における膨大なデータが急速に蓄積されてきている。例えば、ハーバード大化学科 Sunney Xie 教授は酵素反応を一分子レベルで観察し、ある理論モデルを前提として、分子の形に依存して速度定数が異なり得る構造多型性 (Dynamic disorder) の概念を提唱し (English ら *Nature Chem. Bio.* 2006)、世界中の多くの研究者が追随した。しかしながら、その6年後、申請者ら日本、ベルギー、オランダのチームにより、統計科学的な反証が行われ、彼らの帰結は「物理モデルとしては蓋然性が高いものの」(1分子計測には原理的に不可避である) 低いシグナル/ノイズ比に由来する解析上のアーティファクトであることが明らかにされた (Terentyeva ら *ACS Nano* 2012)。すなわち、シグナル/ノイズ比が低く、かつ色素分子の退色の時間スケールも加味し、1分子計測データから背後の分子作用機序を正しく評価する方法論は確立されていなかった。

パーシスタ細胞のように細胞集団のなかには遺伝子上の違いではなく、表現型 (例: 蛋白質の発現量) の違いによって獲得された機能をもつ細胞が存在することが明らかとなった (Balaban ら *Science* 2004、若本ら *Science* 2013)。また、1細胞ラマン分光イメージング (Palonpon ら *Nature Protoc* 2013) によって、細胞分裂や細胞死におけるラマンスペクトル (Okada ら *PNAS* 2012) が計測されるようになった。遺伝工学的に色素分子を導入して特定の (マーカーとなる) タンパク質の含有量を計測する従来観察と比べて、ラマンスペクトルは非破壊かつ非侵襲で、試料内分子を網羅的に分析することを可能とする。しかしながら、「如何に膨大なラマンスペクトルデータなどから表現型の違う細胞群を抽出し、細胞機能を判別し得るか」という問いに応える解析手法は未開拓であった。

## 2. 研究の目的

1分子計測技術、超解像イメージング技術などの進展により、細胞などの複雑な分子環境におけるデータが膨大に蓄積されているが、「それらの計測データから如何にして背後に存在する分子作用機序を正しく抽出できるか」は喫緊の未解決課題である。本研究課題では、モデルや方程式を予め規定するのではなく、観測される1分子計測データ、1分子イメージングデータそのものから、生命動態システムにおける分子の状態、状態間の遷移ネットワーク、多重経路を考慮に入れた自由エネルギー地形および細胞状態 (例: 癌/非癌) を同定し、生命機能との関係をデータ駆動的に明らかにする分子解析技術を構築することを目的とする。

## 3. 研究の方法

I) 1分子蛍光共鳴エネルギー移動 (FRET) 時系列データから多重経路を考慮に入れた自由エネルギー地形を抽出する分子解析理論の開発 1分子 FRET 計測データから背後の反応ネットワークを抽出するうえで一番問題となるのが、Donor と Acceptor 分子で退色の時間スケールが異なり、かつ時系列データが有限長であるため、見掛け上の非平衡性が現れ、誤った解釈を導くことにある。また、従来、自由エネルギー地形は少数の次元に射影して構成されるが、Karplus (ノーベル化学賞 2012) ら (Krivov, Karplus *PNAS* 2004) が指摘するように、従来法では重要な次元を見落としている可能性が高く、構造間を繋ぐ多重経路が正しく反映できないケースが多い (Caflisch, *Curr. Opin. Struct. Biol.* 2006)。そこで、本研究課題では、申請者らが開発してきた1分子時系列データから分子の状態、反応ネットワークを抽出する手法 (*PNAS* 2007, 2008, *PRL* 2013, *Sci. Rep.* 2015) に色素分子の退色の速度論と統計科学における「尤度関数を前提としない」変化点解析法を導入する。見掛け上の非平衡性を示す傾向が強い1分子 FRET 時系列データから実際に1分子が感じる自由エネルギー地形を抽出するデータ駆動型の分子理論を新規に開発する。

II) 1細胞ラマン散乱スペクトルの分子データから細胞状態を判別・同定し、細胞機能との関係を定量する分子解析理論の開発 従来、スペクトルの分類は主成分解析などで極少数の自由度に射影し、その低次元空間でクラスター解析を行う。しかしながら、ここでも重要な次元を見落としている可能性が高い。本研究課題では Kantorovich 測度と呼ばれる分布関数間の距離を導入し、ラマンスペクトルの全情報を反映した (スペクトル間の) 距離空間でのクラスターリングを行い、類似したラマンスペクトル群を同定し、細胞機能との関係性を定量する分子解析理論を開発す

る。また、類似したスペクトルをもつクラスターの抽出には(申請者らが1分子解析において開発した)誤差を考慮するファジークラスタリングの考え (Taylorら *Sci. Rep.* 2015; Liら *Nature Comm.* 2015) を導入し、測定されたスペクトルがどの細胞状態に属するかの確からしさ(確率)を評価する。既知の(細胞死、薬剤耐性などの)細胞機能とラマンスペクトル群から分類されるクラスター間の関係を明らかにする。

#### 4. 研究成果

1. 計測誤差、有限サンプルに由来する誤差に加えて、色素分子の退色キネティクスを考慮に入れて、1分子蛍光共鳴エネルギー移動(FRET)時系列データから反応ネットワークおよびエネルギー地形を再構成する新しい解析手法を開発した。具体的には、情報理論における速度歪み理論に依拠する時系列解析手法を改良し、尤度関数を予め仮定しない累積和に基づく変化点解析、およびドナー・アクセプター色素分子の退色を表すノードを新たに導入し、色素分子の退色に依拠する見かけ上の構造遷移とそれ以外の実際の構造遷移を分類した。色素分子の退色の時間スケールが有意に異なる、アデニレートキナーゼの折り畳みの一分子FRET時系列データに適用し、状態数および状態間のネットワーク、エネルギー地形が変性剤および時間スケールとともにどう変化するかを明らかにすることに成功した。また、タンパク質の構造に依存して退色の時間スケールが異なることによる非平衡性を論じ、詳細釣合いの破れを定量する解析手法も併せて構築した(J.Chem.Phys.2018 特集号(single molecule biophysics)へ招待されて寄稿しEditor's Pickに選出されて高評価を得た)。

2. ラマン分光イメージングは非侵襲、非標識でサンプルに含有される(小分子も含めた)分子全体を網羅的に反映し、細胞や組織中の細胞、細胞核の形態だけでは検出・分類できない分子情報を包含している。微弱なラマン信号から空間情報をできるだけ保持したままS/N比を向上させるsuperpixel分割法を導入し、光子統計によるポアソンノイズを考慮にいたラマン組織学の情報解析技術を開発した(FEBS Lett. 2019 表紙カバーに選出)。速度歪み理論に立脚したクラスター分類、状態識別に重要な波数(ラマンシフト)をアンサンブル学習(ランダムフォレスト)に基づいて同定する手法、ならびに各クラスターの密度分布関数を細胞、組織状態を識別する記述子として考案した。具体的に、細胞、細胞核の形態情報では診断が困難な甲状腺濾胞がんのがん診断、非アルコール性脂肪肝疾患(NAFL)の線維症へ応用した。前者においては、一細胞に跨って平均化されたラマンスペクトルを用いたクラスター分類予測(精度78%)に比べて、その記述子を用いた予測(精度90%)のほうが顕著に優位であること、すなわち、識別にはsubcellularスケールの空間解像度が最低限必要であること、後者においては組織学的には非アルコール性脂肪性肝炎(NASH)同定に必要な繊維化などの形態異常は見られないものの、NAFL群のなかでは、ラマン分光的には正常肝細胞、NASHにそれぞれほぼ等しいクラスに大別されること、すなわち、まだ病理が組織学的には観察されていない極めて初期段階でも組織状態を見分けられる可能性が高いことを新規に見いだした(FEBS Lett.2019, J. Phys. Chem. B 2019)。

3. ラマンスペクトルは化学的な微環境情報を反映する。相補的な関係にある細胞トラッキングデータに基づいて細胞状態を判別・同定し、細胞の離合集散のダイナミクスに隠れている因果関係(主従関係)を見積もる方法論を情報理論における移動エントロピー二に基づいて開発した(Phys. Rev. E 2020, J. Chem. Phys. 2021, BPPB 2021(招待))。ある細胞と別の細胞の主従関係を推定する場合、それら2つの細胞の軌跡データなどを用いて評価されているが、2つの細胞の振る舞いを決める因子が、その2つの細胞以外にも、第3の細胞が介在する状況なども考えられる。主従関係や因果関係における“原因”と“結果”を解析するためには、単純な対の組み合わせで表現できない多体の相互作用から成り立っている。そのため、多体のあいだの因果関係を推定することは要素間の組み合わせの数が膨大になり、データ科学における困難な問いの一つであった。2対の軌跡データを変数とする移動エントロピーを細分化した新しい相乗情報量に着目しこの問題を考察し、移動エントロピーに含まれる相乗情報量の振る舞いを解析することで、要素間の多体の相互作用が推定できることを見いだした(Sci. Adv. 2022 online feature article に選出)。

4. 細胞のラマン顕微鏡を使ったがん診断などの病理診断などでは、どこか一箇所に異常があるか、それともどこにも異常かないかどうかのみが知りたい場合がある。このような場合、最初に異常が見つかった時点で計測を打ち切って異常ありと診断すればよい。各箇所の計測において一度の計測では十分な信頼度で結果が得られない場合、異常のある可能性が高い箇所を集中的に計測することができれば診断の高速化が期待できる。このような異常のあるなしをできるだけ少ない計測で診断する問題は、損失版多腕バンディットモデルにより「悪腕存在チェック問題」

として定式化することに成功 (Machine Learn. 2020, PAKDD2021) した。

5. その他、1分子時系列データから多重経路を考慮に入れた自由エネルギー地形を抽出する分子解析理論の開発に関連して、F1-ATPaseの非アレニウスキネティックスの数理モデリング研究 (Phys. Chem. Chem. Phys. 2017)、非リボゾーム合成酵素の1分子FRET観察に関する国際共同研究(Nature Chem. Bio. 2017)等を展開した。

## 5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計18件（うち査読付論文 16件 / うち国際共著 11件 / うちオープンアクセス 1件）

1. 著者名 Taylor J. Nicholas, Mochizuki Kentaro, Hashimoto Kosuke, Kumamoto Yasuaki, Harada Yoshinori, Fujita Katsumasa, Komatsuzaki Tamiki	4. 巻 123
2. 論文標題 High-Resolution Raman Microscopic Detection of Follicular Thyroid Cancer Cells with Unsupervised Machine Learning	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry B	6. 最初と最後の頁 4358 ~ 4372
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcc.9b01159	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Komatsuzaki Tamiki, Press Steve, Senet Patrick	4. 巻 123
2. 論文標題 Deciphering Molecular Complexity in Dynamics and Kinetics-From the Single Molecule to the Single Cell Level	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry B	6. 最初と最後の頁 6387 ~ 6388
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcc.9b05382	査読の有無 無
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する
1. 著者名 Helal Khalifa Mohammad, Taylor James Nicholas, Cahyadi Harsono, Okajima Akira, Tabata Koji, Itoh Yoshito, Tanaka Hideo, Fujita Katsumasa, Harada Yoshinori, Komatsuzaki Tamiki	4. 巻 593
2. 論文標題 Raman spectroscopic histology using machine learning for nonalcoholic fatty liver disease	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 FEBS Letters	6. 最初と最後の頁 2535 ~ 2544
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/1873-3468.13520	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する
1. 著者名 Tabata Koji, Nakamura Atsuyoshi, Honda Junya, Komatsuzaki Tamiki	4. 巻 109
2. 論文標題 A bad arm existence checking problem: How to utilize asymmetric problem structure?	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Machine Learning	6. 最初と最後の頁 327 ~ 372
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1007/s10994-019-05854-7	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Basak Udoy S., Sattari Sulimon, Horikawa Kazuki, Komatsuzaki Tamiki	4. 巻 102
2. 論文標題 Inferring domain of interactions among particles from ensemble of trajectories	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Physical Review E	6. 最初と最後の頁 012404-1-9
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevE.102.012404	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Shimamoto Nobuo, Toda Mikito, Nara Shigetoshi, Komatsuzaki Tamiki, Kamagata Kiyoto, Kinebuchi Takashi, Tomizawa Jun-ichi	4. 巻 10
2. 論文標題 Dependence of DNA length on binding affinity between TrpR and trpO of DNA	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Scientific Reports	6. 最初と最後の頁 -
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1038/s41598-020-71598-3	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Hiroshi Uchigaito, Tomoki Shirai, Yoichi Iwata, Normann Mertig, Yuya Sugie, Tsubasa Oizumi, Hiroshi Teramoto, Atsuyoshi Nakamura, Shin-ichi Minato, Tamiki Komatsuzaki, Takashi Takemoto	4. 巻 -
2. 論文標題 Minimizing customer waiting time with a new delivery-tour planning algorithm based on tour division and dynamic route optimization	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 International Symposium on Nonlinear Theory and Its Applications (NOLTA2020)	6. 最初と最後の頁 413 ~ 416
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) なし	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Basak Udoy S., Sattari Sulimon, Horikawa Kazuki, Komatsuzaki Tamiki	4. 巻 102
2. 論文標題 Erratum: Inferring domain of interactions among particles from ensemble of trajectories [Phys. Rev. E 102, 012404 (2020)]	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Physical Review E	6. 最初と最後の頁 069902-1-3
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevE.102.069902	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Basak Uday S., Sattari Sulimon, Hossain Md. Motaleb, Horikawa Kazuki, Komatsuzaki Tamiki	4. 巻 154
2. 論文標題 An information-theoretic approach to infer the underlying interaction domain among elements from finite length trajectories in a noisy environment	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 The Journal of Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 034901 ~ 034901
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/5.0034467	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Basak Uday S., Sattari Sulimon, Hossain Motaleb, Horikawa Kazuki, Komatsuzaki Tamiki	4. 巻 18
2. 論文標題 Transfer entropy dependent on distance among agents in quantifying leader-follower relationships	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Biophysics and Physicobiology	6. 最初と最後の頁 131 ~ 144
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.2142/biophysico.bppb-v18.015	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Mizuno Yuta, Takigawa Mikoto, Miyashita Saki, Nagahata Yutaka, Teramoto Hiroshi, Komatsuzaki Tamiki	4. 巻 428
2. 論文標題 An algorithm for computing phase space structures in chemical reaction dynamics using Voronoi tessellation	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Physica D: Nonlinear Phenomena	6. 最初と最後の頁 133047 ~ 133047
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.physd.2021.133047	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Tabata Koji, Nakamura Atsuyoshi, Komatsuzaki Tamiki	4. 巻 -
2. 論文標題 Classification Bandits: Classification Using Expected Rewards as Imperfect Discriminators	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Pacific-Asia Conference on Knowledge Discovery and Data Mining (PAKDD), Workshop on Machine Learning for MEasurement INformatics	6. 最初と最後の頁 57 ~ 69
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1007/978-3-030-75015-2_6	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Nagahata Yutaka, Hernandez Rigoberto, Komatsuzaki Tamiki	4. 巻 155
2. 論文標題 Phase space geometry of isolated to condensed chemical reactions	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 The Journal of Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 210901 ~ 210901
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/5.0059618	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Sulimon Sattari, Udoy S. Basak, Ryan G. James, Louis W. Perrin, James P. Crutchfield, Tamiki Komatsuzaki	4. 巻 8
2. 論文標題 Modes of information flow in collective cohesion	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Science Advances	6. 最初と最後の頁 -
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1126/sciadv.abj1720	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 該当する

1. 著者名 Taylor J. Nicholas, Pirchi Menahem, Haran Gilad, Komatsuzaki Tamiki	4. 巻 148
2. 論文標題 Deciphering hierarchical features in the energy landscape of adenylate kinase folding/unfolding	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 The Journal of Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 123325 ~ 123325
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/1.5016487	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Yuji Tamiya, Rikiya Watanabe, Hiroyuki Noji, Chun-Biu Li, Tamiki Komatsuzaki	4. 巻 3(20)
2. 論文標題 Effects of non-equilibrium angle fluctuation on F1-ATPase kinetics induced by temperature increase	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Physical Chemistry Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 1872-1880
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/C7CP06256G	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 富樫祐一, 新海創也, 小松崎民樹	4. 巻 35(19)
2. 論文標題 特集: 少数性生物学ってなんだ?: 「少数と個性 分子の数と生命らしさ」	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 実験医学	6. 最初と最後の頁 1-1
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) なし	査読の有無 無
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Alfermann Jonas, Sun Xun, Mayerthaler Florian, Morrell Thomas E, Dehling Eva, Volkmann Gerrit, Komatsuzaki Tamiki, Yang Haw, Mootz Henning D	4. 巻 13
2. 論文標題 FRET monitoring of a nonribosomal peptide synthetase	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Nature Chemical Biology	6. 最初と最後の頁 1009 ~ 1015
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1038/nchembio.2435	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

〔学会発表〕 計96件 (うち招待講演 27件 / うち国際学会 23件)

1. 発表者名 Aurelien Pelissier, Atsuyoshi Nakamura, Koji Tabata
2. 発表標題 Feature Selection As Monte-Carlo Search in Growing Single Rooted Directed Acyclic Graph by Best Leaf Identification
3. 学会等名 2019 SIAM International Conference on Data Mining (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Tamiki Komatsuzaki
2. 発表標題 Deciphering hierarchical features in reaction network and energy landscape
3. 学会等名 CECAM Workshop on Network analysis to elucidate natural system dynamics, diversity and performance (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Tamiki Komatsuzaki
2. 発表標題 Raman pathology and its phenotypic landscape for Non-alcoholic fatty liver diseases
3. 学会等名 Telluride Workshop on The Complexity of Dynamics and Kinetics from Single Molecules to Cells (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Tamiki Komatsuzaki
2. 発表標題 Causal inference in Leader-follower relationship
3. 学会等名 ICSB 2019: Singularity Biology: small elements change the function of the whole systems (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Khalifa Mohammad Helal, Harsono Cahyadi, J. Nicholas Taylor, Akira Okajima, Yasuaki Kumamoto, Hideo Tanaka, Yoshinori Harada, Tamiki Komatsuzaki
2. 発表標題 Raman Hyperspectral Image Analysis Using Ensemble Learning for Non-alcoholic Fatty Liver Disease
3. 学会等名 Biomedical Raman Imaging 2019 (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Jean-Emmanuel Clement, Shunsuke Ono, Kentaro Mochizuki, Katsumasa Fujita, Tamiki Komatsuzaki
2. 発表標題 Accelerated Raman hyperspectral imaging for cancer diagnosis
3. 学会等名 Biomedical Raman Imaging 2019 (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Tamiki Komatsuzaki
2. 発表標題 On-the-fly Raman image microscopy by reinforcement machine learning
3. 学会等名 Biomedical Raman Imaging 2019 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Jean-Emmanuel Clement, Shunsuke Ono, Kentaro Mochizuki, Katsumasa Fujita, Tamiki Komatsuzaki
2. 発表標題 Raman Imaging for Exploring Cancer Metabolism
3. 学会等名 The 20th RIES-HOKUDAI International Symposium
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 J. Nicholas Taylor, Kentaro Mochizuki, Kosuke Hashimoto, Yasuaki Kumamoto, Yoshinori Harada, Katsumasa Fujita, Tamiki Komatsuzaki
2. 発表標題 High Resolution Raman Microscopic Detection of Follicular Thyroid Cancer Cells with Unsupervised Machine Learning
3. 学会等名 The 20th RIES-HOKUDAI International Symposium
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Khalifa Mohammad Helal, Harsono Cahyadi, J. Nicholas Taylor, Akira Okajima, Yasuaki Kumamoto, Hideo Tanaka, Yoshinori Harada, Tamiki Komatsuzaki
2. 発表標題 Raman Microscopic Histology using Ensemble Learning for Non-alcoholic Fatty Liver Disease
3. 学会等名 The 20th RIES-HOKUDAI International Symposium
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Koji Tabata, Atsuyoshi Nakamura, Tamiki Komatsuzaki
2. 発表標題 Bad Arm Existence Checking Algorithm with Bandit Feedback
3. 学会等名 The 20th RIES-HOKUDAI International Symposium
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Sulimon Sattari, Udoy Basak, Sky Nicholson, Jason Green, Mikito Toda, Tamiki Komatsuzaki
2. 発表標題 A sandbox model system for analyzing leadership in collective motion
3. 学会等名 The 20th RIES-HOKUDAI International Symposium
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Udoy. S Basak, Sulimon Sattari, Tamiki Komatsuzaki
2. 発表標題 An Information-theoretic approach to identify the interaction radius of a group of collectively moving animals
3. 学会等名 The 20th RIES-HOKUDAI International Symposium
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Tamiki Komatsuzaki
2. 発表標題 Geometrical aspect of chemical reaction dynamics in thermally fluctuating environments and Future Directions
3. 学会等名 Chaos Indicators, Phase Space and Chemical Reaction Dynamics, University of Bristol, (招待講演)(国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Ryoya Kondo, James N Taylor, Jean-emmanuel Clement, Yuta Mizuno, Katsumasa Fujita, Yoshinori Harada, Tamiki Komatsuzaki
2. 発表標題 Classification of Spectra in Raman Microscopic Image by Chemical Heterogeneity
3. 学会等名 The 21st RIES-HOKUDAI International Symposium
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Abdul Halim Bhuiyan, Jean-emmanuel Clement, Kentaro Mochizuki, James Nick Taylor, Koji Tabata, Yuta Mizuno, Atsuyoshi Nakamura, Yoshinori Harada, Katsumasa Fujita, Tamiki Komatsuzaki
2. 発表標題 To classify Raman spectra using Deep Learning Approach
3. 学会等名 The 21st RIES-HOKUDAI International Symposium
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Md. Menhazul Abedin, Koji Tabata, Jean-Emmanuel Clement, Masumi Tsuda, Shinya Tanaka, Tamiki Komatsuzaki
2. 発表標題 Application of Linear Bandit in Drug Screening Example
3. 学会等名 The 21st RIES-HOKUDAI International Symposium
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Uday S. Basak, Sulimon Sattari, Motaleb M. Hossain, Kazuki Horikawa, Tamiki Komatsuzaki
2. 発表標題 Inferring domain of Interaction among Dictyostelium discoideum colony from the ensemble of Trajectories of cells
3. 学会等名 The 21st RIES-HOKUDAI International Symposium
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Zannatul Ferdous, Masumi Tsuda, Jean-Emmanuel Clement, Koji Tabata, Yusuke Ishida, Jun Suzuka, Jian Ping Gong, Shinya Tanaka, Tamiki Komatsuzaki
2. 発表標題 Analysis of Cancer Stem Cells in Sarcoma Model Cells by Deep Neural Network
3. 学会等名 The 21st RIES-HOKUDAI International Symposium
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Jean-Emmanuel Clement, Mochizuki Kentaro, Katsumasa Fujita, Tamiki Komatsuzaki
2. 発表標題 Raman Imaging for Exploring Cancer Metabolism
3. 学会等名 The 21st RIES-HOKUDAI International Symposium
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Md. Motaleb Hossain, Sulimon Sattari, Udoy Sankar Basak, Kazuki Horikawa, Tamiki Komatsuzaki
2. 発表標題 Vector analysis of amoeba motion response to a cyclic-AMP wave
3. 学会等名 The 21st RIES-HOKUDAI International Symposium
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Sulimon Sattari, Udoy Basak, Motaleb Md. Hossain, Kazuki Horikawa, Tamiki Komatsuzaki
2. 発表標題 Vector analysis of amoeba motion with respect to the propagation of chemoattractant cyclic-AMP
3. 学会等名 The 21st RIES-HOKUDAI International Symposium
4. 発表年 2020年

1 . 発表者名 Zannatul Ferdous, Masumi Tsuda, Jean-Emmanuel Clement, Koji Tabata, Jian Ping Gong, Shinya Tanaka, Tamiki Komatsuzaki
2 . 発表標題 Detection of Cancer Stem Cells in Sarcoma Model Cells Using Morphological Features for Developing New Diagnostics Tools
3 . 学会等名 ICReDD 3rd International Symposium (国際学会)
4 . 発表年 2020年

1 . 発表者名 NAGAHATA Yutaka, TAKETSUGU Tetsuya, MAEDA Satoshi,, KOMATSUZAKI Tamiki
2 . 発表標題 The hierarchy of observable reaction networks associated with observation time-intervals
3 . 学会等名 ICReDD 3rd International Symposium (国際学会)
4 . 発表年 2020年

1 . 発表者名 Koji Tabata, Atsuyoshi Nakamura, Tamiki Komatsuzaki
2 . 発表標題 Classification Bandits: Classification Using Expected Rewards as Imperfect Discriminators
3 . 学会等名 PAKDD2021 Workshop on Machine Learning for Measurement Informatics (国際学会)
4 . 発表年 2020年

1 . 発表者名 Tamiki Komatsuzaki , Koji Tabata, Hiroyuki Kawagoe, James Nicholas Taylor , Kentaro Mochizuki , Jean-Emmanuel Clement , Yasuaki Kumamoto , Atsuyoshi Nakamura , Yoshinori Harada , Katsumasa Fujita
2 . 発表標題 On-the-fly Raman image microscopy by reinforcement machine learning
3 . 学会等名 FACSS SciX 2021 (招待講演) (国際学会)
4 . 発表年 2021年

1. 発表者名 小松崎 民樹
2. 発表標題 Mathematical information measurement science: acceleration of Raman spectroscopy by bridging information science
3. 学会等名 バイオ情報計測技術研究会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Helal Khalifa Mohammad, Cahyadi Harsono, Taylor J. Nicholas, Okajima Akira, Kumamoto Yasuaki, Tanaka Hideo, Harada Yoshinori, Komatsuzaki Tamiki
2. 発表標題 Analysis of Raman Microscopic Images of Liver Tissue to Predict Non-alcoholic Fatty Liver Disease
3. 学会等名 生物物理・回折構造生物学 合同研究会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Sulimon Sattari, Udoy Basak, Schuyler Nicholson, Jason Green, Mikito Toda, Tamiki Komatsuzaki
2. 発表標題 A sandbox model system for understanding leadership in collective motion
3. 学会等名 生物物理・回折構造生物学 合同研究会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Udoy Sankar Basak, Sulimon Sattari, Sosuke Ito, Kazuki Horikawa, Tamiki Komatsuzaki
2. 発表標題 Identification of Leader(s) in a Dictyostelium Discoideum colony: An Information-theoretic Approach
3. 学会等名 生物物理・回折構造生物学 合同研究会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 James Nicholas Taylor, Menahem Pirchi, Gilad Haran, 小松崎 民樹
2. 発表標題 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
3. 学会等名 第22回理論化学討論会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Basak Uday Sankar, Sattari Sulimon, Horikawa Kazuki, Komatsuzaki Tamiki
2. 発表標題 An Information-theoretic approach toward identifying the leader(s) and aggregation place in Dictyostelium Discoideum colony
3. 学会等名 第57回日本生物物理学会年会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Sulimon Sattari, Tamiki Komatusaki, Mikito Toda, Sky Nicholson, Jason Green, Uday Basak
2. 発表標題 A leadership-based phase transition in a flocking model with activated and un-activated agents
3. 学会等名 第57回日本生物物理学会年会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 宮下彩季, 滝川皇, 水野雄太, 寺本央, 小松崎民樹
2. 発表標題 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
3. 学会等名 化学系学協会北海道支部2020年冬季研究発表会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Sulimon Sattari, Basak Udoy, Motaleb Md. Hossain, 堀川 一樹, 小松崎 民樹
2. 発表標題 Quantifying the length- and time-scales of influence of cells in collective motion
3. 学会等名 第58回日本生物物理学会年会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Basak Udoy S, Sattari Sulimon, Hossain Md. Motaleb, Horikawa Kazuki, Komatsuzaki Tamiki
2. 発表標題 Inferring domain of Interactions among Dictyostelium discoideum colony from the Ensemble of Trajectories of cells
3. 学会等名 第58回日本生物物理学会年会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Hossain Md. Motaleb, Sattari Sulimon, Basak Udoy S, Horikawa Kazuki, Komatsuzaki Tamiki
2. 発表標題 Vector analysis of amoeba motion with respect to the propagation of chemoattractant cyclic-AMP
3. 学会等名 第58回日本生物物理学会年会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Jean-Emmanuel Clement, Kenntaro Mochizuki, Katsumasa Fujita, Tamiki Komatsuzaki
2. 発表標題 Raman imaging for cancer diagnosis
3. 学会等名 第58回日本生物物理学会年会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 小松崎民樹
2. 発表標題 強化学習を用いたラマン計測迅速化：On-the-fly Raman image microscopy
3. 学会等名 (一社)大阪大学ナノ理工学人材育成産学コンソーシアム 令和2年度第3回ナノ理工学情報交流会(招待講演)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 近藤僚哉, James N. Taylor, Jean-Emmanuel Clement, 水野雄太, 藤田克昌, 原田義規, 小松崎民樹
2. 発表標題 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
3. 学会等名 化学系学協会北海道支部2021年冬季研究発表会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 田中綾一, 水野雄太, 堤拓朗, ミカイルチツベロ, 武次徹也, 小松崎民樹
2. 発表標題 AFIR法を用いた化学反応における動的効果の研究：1, 3-シグマトロピー転移の類似反応を例に
3. 学会等名 化学系学協会北海道支部2021年冬季研究発表会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 近藤僚哉, James N. Taylor, Jean-Emmanuel Clement, 水野雄太, 藤田克昌, 原田義規, 小松崎民樹
2. 発表標題 化学的不均一性も考慮したラマン顕微鏡画像解析
3. 学会等名 生物物理学会学会 北海道支部 - 東北支部合同例会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Md. Motaleb Hossain, Sulimon Sattari, Udoy S. Basak, Kazuki Horikawa, Tamiki Komatsuzaki
2. 発表標題 Analysis Dictyostelium Discoideum cells motion response to a chemoattractant cyclic-AMP wave
3. 学会等名 生物物理学会学会 北海道支部 - 東北支部合同例会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Udoy S. Basak, Sulimon Sattari, Md. Motaleb Hossain, Kazuki Horikawa, Tamiki Komatsuzaki
2. 発表標題 Study on Identification of Leader and Follower agents and its Interaction domain from Trajectories in a Collectively Moving Colony
3. 学会等名 生物物理学会学会 北海道支部 - 東北支部合同例会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Sulimon Sattari, Udoy Basak, James P. Crutchfield, Tamiki Komatsuzaki
2. 発表標題 Modes of Information Flow in Collective Cohesion
3. 学会等名 生物物理学会学会 北海道支部 - 東北支部合同例会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 水野 雄太, 小松崎 民樹
2. 発表標題 イジング計算機を用いた化学反応ネットワーク上の反応経路解析
3. 学会等名 第23回理論化学討論会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 田中 綾一, 水野 雄太, 堤 拓朗, ミカイル チツベロ, 武次 徹也, 小松崎 民樹
2. 発表標題 主成分分析による自由度の削減手法の開発 : [1,3]シグマトロピー転移の類似反応を例に
3. 学会等名 第23回理論化学討論会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 近藤 僚哉, James N. Taylor, Jean-Emmanuel Clement, 水野 雄太, 藤田 克昌, 原田 義規, 小松崎 民樹
2. 発表標題 ラマン分光イメージングにおける化学的空間不均一性の情報理論解析
3. 学会等名 第23回理論化学討論会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 小松崎 民樹
2. 発表標題 計測介入型AIによる迅速ラマン計測
3. 学会等名 JST情報計測オンラインセミナーシリーズ (招待講演)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 小松崎 民樹
2. 発表標題 化学反応ネットワークにおける時間階層性 (Timescale hierarchies in chemical reaction networks)
3. 学会等名 シンポジウム「化学反応経路探索のニューフロンティア2021」 (招待講演)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 田中綾一, 水野雄太, 堤拓朗, ミカイルチツベロ, 武次徹也, 小松崎民樹
2. 発表標題 主成分分析により抽出した少数自由度におけるハミルトン系の構成
3. 学会等名 第15回分子科学討論会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 近藤 僚哉, James N.Taylor, Jean-Emmanuel Clement, 水野 雄太, 藤田 克昌, 原田 義規, 小松崎 民樹
2. 発表標題 ラマン分光イメージングにおける化学的空間不均一性 に基づいたファジークラスタリング手法の開発
3. 学会等名 第15回分子科学討論会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 小松崎 民樹
2. 発表標題 一分子計測からたんぱく質のエネルギー地形の階層性を抽出する Capturing hierarchical features in protein energy landscape from single molecule time series
3. 学会等名 第59回日本生物物理学会年会 (招待講演)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 近藤僚哉, TAYLOR J. Nicholas, CLEMENT Jean-Emmanuel, 水野雄太, 藤田克昌, 原田義規, 小松崎民樹
2. 発表標題 情報理論を取り入れた手法によるラマン分光イメージ中 での化学的空間不均一性の解析
3. 学会等名 第59回日本生物物理学会年会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 田中綾一, 水野雄太, 堤拓朗, チツペロミカイル, 戸田幹人, 武次徹也, 小松崎民樹
2. 発表標題 化学反応の特徴を保ちながら効果的に自由度を縮約する手法の研究
3. 学会等名 化学系学協会北海道支部2022年冬季研究発表会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 近藤僚哉, TAYLOR J. Nicholas, CLEMENT Jean-Emmanuel, 水野雄太, 藤田克昌, 原田義規, 小松崎民樹
2. 発表標題 情報理論による化学的空間不均一性に基づくラマン分光イメージングの解析
3. 学会等名 化学系学協会北海道支部2022年冬季研究発表会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 近藤僚哉, James N. Taylor, 水野雄太, Jean-Emmanuel Clement, 藤田克昌, 原田義規, 小松崎民樹
2. 発表標題 情報理論とラマン分光イメージングを用いた化学的不均一性の解析
3. 学会等名 2021年度生物物理学会北海道支部-東北支部合同例会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 小松崎 民樹
2. 発表標題 How can one bridge information science and measurement sciencThe 22nd SANKEN International Symposium The 17th SANKEN Nanotechnology International Symposium "Next Generation Science and Technology for Super Smart Society"e to accelerate the measurements?
3. 学会等名 The 22nd SANKEN International Symposium The 17th SANKEN Nanotechnology International Symposium "Next Generation Science and Technology for Super Smart Society" (招待講演)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 小松崎 民樹
2. 発表標題 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？
3. 学会等名 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（招待講演）
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Udoy Sankar Basak, Sulimon Sattari, Sosuke Ito, Kazuki Horikawa, Tamiki Komatsuzaki
2. 発表標題 Identification of Leader(s) in a Dictyostelium Discoideum colony: An Information-theoretic Approach
3. 学会等名 生物物理・回折構造生物学 合同研究会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Sulimon Sattari, Udoy Basak, Schuyler Nicholson, Jason Green, Mikito Toda, Tamiki Komatsuzaki
2. 発表標題 A sandbox model system for understanding leadership in collective motion
3. 学会等名 生物物理・回折構造生物学 合同研究会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Helal Khalifa Mohammad, Cahyadi Harsono, Taylor J. Nicholas, Okajima Akira, Kumamoto Yasuaki, Tanaka Hideo, Harada Yoshinori, Komatsuzaki Tamiki
2. 発表標題 Analysis of Raman Microscopic Images of Liver Tissue to Predict Non-alcoholic Fatty Liver Disease
3. 学会等名 生物物理・回折構造生物学 合同研究会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 小松崎 民樹
2. 発表標題 Mathematical information measurement science: acceleration of Raman spectroscopy by bridging information science
3. 学会等名 バイオ情報計測技術研究会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 小松崎 民樹
2. 発表標題 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？
3. 学会等名 「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 (招待講演)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 小松崎 民樹
2. 発表標題 How can one bridge information science and measurement science to accelerate the measurements?
3. 学会等名 The 22nd SANKEN International Symposium The 17th SANKEN Nanotechnology International Symposium "Next Generation Science and Technology for Super Smart Society" (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Tamiki Komatsuzaki
2. 発表標題 Phase Space geometry and Chemical Reaction Dynamics in Driven Systems
3. 学会等名 Geometry of Chemical Reaction Dynamics in Gas and Condensed Phases (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 田畑 公次, 中村 篤祥, 小松崎 民樹
2. 発表標題 非対称性を利用した悪腕存在チェックアルゴリズム
3. 学会等名 第21回情報論的学習理論ワークショップ
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 小松崎 民樹
2. 発表標題 Revisit transition state theory: Past, Present, Future
3. 学会等名 Workshop "Trends in Computational Molecular Biophysics" (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Sulimon Sattari, Uday Basak, Schuyler Nicholson, Jason Green, Mikito Toda, Tamiki Komatsuzaki
2. 発表標題 A sandbox model system for studying leadership in collective motion
3. 学会等名 研究会「理論と実験」2018
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 J. Nicholas Taylor, Kentaro Mochizuki, Katsumasa Fujita, Tamiki Komatsuzaki
2. 発表標題 Classification of Raman Spectra of Healthy and Cancerous Human Follicular Thyroid Cells
3. 学会等名 研究会「理論と実験」2018
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 小松崎 民樹
2. 発表標題 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
3. 学会等名 第1回計測インフォマティクス研究会（招待講演）
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 小松崎 民樹
2. 発表標題 Information theoretic approach to reveal singularity in biology
3. 学会等名 第56回日本生物物理学会年会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Helal Khalifa Mohammad, Cahyadi Harsono, Taylor J. Nicholas, Okajima Akira, Kumamoto Yasuaki, Tanaka Hideo, Harada Yoshinori, Komatsuzaki Tamiki
2. 発表標題 Machine Learning Approaches to Raman Micro-spectroscopic Images
3. 学会等名 第56回日本生物物理学会年会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 小松崎 民樹
2. 発表標題 1細胞ラマン分光イメージングと情報科学の高度融合を目指して
3. 学会等名 ImPACT合田プログラム Serendipityセミナー（招待講演）
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Sulimon Sattari, Tamiki Komatsuzaki, Schuyler B. Nicholson, Jason R. Green
2. 発表標題 Understanding cell colony dynamics from images using velocity extraction and analysis
3. 学会等名 理研シンポジウム「細胞システムの動態と論理X」
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 小松崎 民樹
2. 発表標題 一細胞ラマン計測と情報科学の高度融合による情報計測技術
3. 学会等名 2017年度第2回バイオ単分子研究会（招待講演）
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Sulimon Sattari, Tamiki Komatsuzaki
2. 発表標題 Understanding cell colony dynamics from images using velocity extraction and analysis
3. 学会等名 2017年度日本生物物理学会北海道支部例会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Khalifa Mohammad Helal, Harsono Cahyadi, J. Nicholas Taylor, Akira Okajima, Yasuaki Kumamoto, Hideo Tanaka, Yoshinori Harada, Tamiki Komatsuzaki
2. 発表標題 Multivariate Data-driven approach to Raman Hyper-spectral Images to Diagnose Non-alcoholic Fatty Liver Disease (NAFLD)
3. 学会等名 2017年度日本生物物理学会北海道支部例会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 小松崎 民樹
2. 発表標題 1細胞ラマン分光イメージングと情報科学のinterdependentな融合を目指して
3. 学会等名 第65回応用物理学会春季学術講演会（招待講演）
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 田畑 公次, 中村 篤祥, 本多 淳也, 小松崎 民樹
2. 発表標題 試行回数の少ない悪腕存在チェックアルゴリズム
3. 学会等名 人工知能学会第106回人工知能基本問題研究会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 小松崎 民樹
2. 発表標題 一細胞ラマン計測と情報科学の融合による少数性の生命科学
3. 学会等名 2017年度生命科学系学会合同年次大会（招待講演）
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 Sulimon Sattari, Tamiki Komatsuzaki
2. 発表標題 Predicting Biological Cell Aggregation Using Scalable Random Forest Decision Trees
3. 学会等名 The 18th RIES-Hokudai International Symposium (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 J. Nicholas Taylor, Tamiki Komatsuzaki
2. 発表標題 Apparent Nonequilibrium Behavior in Single-Molecule FRET Time-Series Induced by Photophysics
3. 学会等名 The 18th RIES-Hokudai International Symposium (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 Koji Tabata, Atsuyoshi Nakamura, Tamiki Komatsuzaki
2. 発表標題 Bad Arm Existence Checking Algorithm
3. 学会等名 The 18th RIES-Hokudai International Symposium (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 Khalifa Mohammad Helal, Harsono Cahyadi, J. Nicholas Taylor, Akira Okajima, Yauaki Kumamoto, Hideo Tanaka, Yoshinori Harada, Tamiki Komatsuzaki
2. 発表標題 Raman Microscopic Image Analysis based on Information-theoretic Approach
3. 学会等名 The 18th RIES-Hokudai International Symposium (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 小松崎民樹, 中村篤祥, 藤田克昌, 原田義規
2. 発表標題 ラマン分光イメージング計測と情報科学との高度融合
3. 学会等名 2017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G3分科会－異分野融合とイノベーション創出を目指して－
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 小松崎 民樹
2. 発表標題 ラマン分光イメージングにおける情報計測技術の展開
3. 学会等名 基盤(S) 離散構造処理系プロジェクト「2017年度 秋のワークショップ」
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 田畑 公次, 中村 篤祥, 本多 淳也, 小松崎 民樹
2. 発表標題 グレイゾーン幅を利用した悪腕存在チェックアルゴリズム
3. 学会等名 第20回情報論的学習理論ワークショップ
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 Tamiki Komatsuzaki
2. 発表標題 How one can extract energy landscape from single molecule time series under the existence of noise?
3. 学会等名 The 2nd Korea-Japan Joint Symposium on Single-Molecule Biophysics (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 山田 寛子, 田畑 公次, Khalifa Mohammad Helal, Harsono Cahyadi, J. Nicholas Taylor, 伊藤 創祐, 熊本 康昭, 田中 秀央, 原田 義規, 小松崎 民樹
2. 発表標題 ラマンスペクトルで細胞の病態を分ける - PCAとランダムフォレストを用いて -
3. 学会等名 研究会「理論と実験」2017
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 小松崎 民樹
2. 発表標題 How can one quantify singularity in cells from Single Cell Raman Imaging?
3. 学会等名 第55回日本生物物理学会年会 (招待講演)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 Helal Khalifa mohammad, Cahyadi Harsono, Taylor J. nicholas, Okajima Akira, Kumamoto Yasuaki, Tanaka Hideo, Harada Yoshinori, Komatsuzaki Tamiki
2. 発表標題 Information-theoretical data analysis approaches to Raman micro-spectroscopic images
3. 学会等名 第11回分子科学討論会
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 Tamiki Komatsuzaki
2. 発表標題 Energy landscapes learned from single molecule FRET time series: 'Role of Photobleaching
3. 学会等名 Deciphering complex energy landscape and kinetic network from single molecules to cells: a new challenge to make theories meet experiments (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 Tamiki Komatsuzaki
2. 発表標題 Data-driven mathematics in single cell Raman imaging
3. 学会等名 Telluride Workshop on The Complexity of Dynamics and Kinetics from Single Molecules to Cells (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 Tamiki Komatsuzaki
2. 発表標題 Global Transition States in Reaction Network
3. 学会等名 Telluride Workshop on Chemistry & Dynamics in Complex Environments (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 小松崎 民樹
2. 発表標題 一細胞ラマン計測と情報科学の融合による細胞診断
3. 学会等名 2017年度人工知能学会全国大会 (招待講演)
4. 発表年 2017年

〔図書〕 計3件

1. 著者名 Tamiki Komatsuzaki	4. 発行年 2018年
2. 出版社 Springer	5. 総ページ数 7
3. 書名 Minorities and Small Numbers from Molecules to Organisms in Biology-Toward a New Understanding of Biological Phenomena: Chapter 5 "The Personality of Small Numbers: Do Molecules Have Personality?"	

1. 著者名 小松崎 民樹	4. 発行年 2018年
2. 出版社 量子化学探索研究所	5. 総ページ数 1
3. 書名 IQCE NEWS 「化学反応理論の普遍性：GRRMに期するもの」	

1. 著者名 Meysam Tavakoli, J. Nicholas Taylor, Chun-Biu Li, Tamiki Komatsuzaki, Steve Presse;	4. 発行年 2017年
2. 出版社 Wiley	5. 総ページ数 101
3. 書名 Advances in Chemical Physics: "Single Molecule Data Analysis: An Introduction"	

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

6. 研究組織

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
研究協力者	藤田 克昌 (Fujita Katsumasa) (80362664)	大阪大学・工学研究科・教授  (14401)	
研究協力者	テイラー ジェームス ニコラス (Taylor James Nicholas) (50750824)	北海道大学・電子科学研究所・特任助教  (10101)	
研究協力者	瀧川 一学 (Takigawa Ichigaku) (10374597)	国立研究開発法人理化学研究所・革新知能統合研究センター・研究員  (82401)	
研究協力者	中村 篤祥 (Nakamura Atsuyoshi) (50344487)	北海道大学・情報科学研究院・教授  (10101)	

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計1件

国際研究集会 情報計測科学ウィンターミーティング2017	開催年 2017年～2017年
---------------------------------	--------------------

8 . 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関			
米国	Johns Hopkins University	University of California, Davis	Arizona State University	
イスラエル	ワインズマン研究所			
ドイツ	ミュンスター大学			
米国	Princeton University			