

# プロフィールシート

## プロフィール



- ・所属  
岐阜大学 工学部 電気電子・情報工学科 准教授
- ・名前 志賀 元紀 (しが もとぎ)
- ・略歴 岐阜大学で博士(工学)を取得後、京都大学化学研究所にて博士研究員・助教などを経て、岐阜大学准教授に着任。現在、科学技術振興機構さきがけ研究者、理化学研究所革新知能統合研究センター客員研究員を兼任。

## 研究・技術シーズ名：

- ・多様な形式のデータを統合する機械学習・データマイニング手法
- ・顕微鏡などの微細構造計測データの網羅的かつ定量的な解析法
- ・効率的な新規材料探索のための機械学習法

## 主要キーワード

**データマイニング**：大規模なデータから重要なルールを発見し、要約する自動解析技術

**機械学習**：人工知能などのシステムをデータから学習させるための技術

**計測インフォマティクス**：顕微分光スペクトルなどのビックデータを解析するための情報技術

**マテリアルズインフォマティクス**：物質・材料科学におけるデータを取り扱うための情報科学技術

## 研究・技術シーズ概要：

### 1. 網羅的な波形（スペクトル）データのクラスタ解析・予測法

様々な実験条件・位置で計測された多数のスペクトルの波形形状を用いて、実験条件や位置をグループ分けする手法です。これによって、各計測点に含まれる化学成分などを同定でき、材料の構造を自動的に抽出できます。新たに作成した試料を客観的に（実験者の主観を除いて）評価したい場合、また、膨大な数のデータを自動処理するのに向いています。

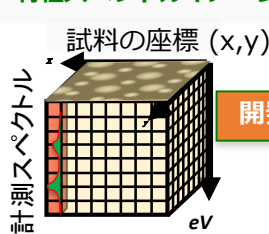
### 2. 新規材料探索のための効率的な実験計画

所望の物性・材料特性を持つように化学組成を最適化するための手法です。一度の実験で最適なものを発見することは難しいので、実験を反復する回数を減らすことを目指しています。最適なものを得られる確率を少しでも増やすことを目指しており、ベイズ最適化などの機械学習技術を用います。

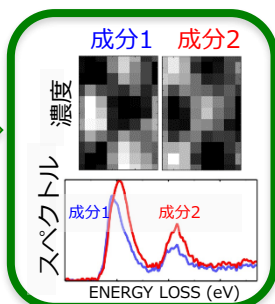
#### 1の適用例

#### 顕微分光データから自動的な物質構造の同定

#### 特性スペクトルイメージ



#### 本手法の出力（原子配置）

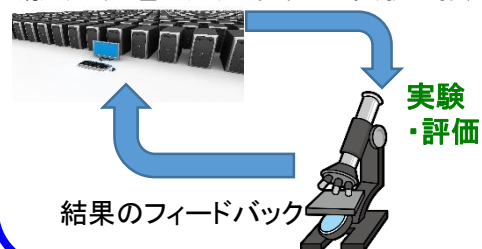


#### 2の概要

#### 新規材料探索のための効率的な実験計画

#### 予測モデル

既知データに基づくモデル行うべき実験の指定



## 産業ニーズ・応用シーン：

材料分野において、前ページ項目 1 は以下のシチュエーションに応用できます。

- 新規に合成した試料に含まれる成分（元素・化学状態）や構造（空間分布）の同定  
電子顕微鏡などのスキャンモードを用いるなどによって、多数のスペクトルデータを入力することによって、スペクトル波形と成分の対応情報がなくても、グループ分けできることがメリットです。これによって、想定していなかった成分を発見できる可能性があります。
- 合成するプロセスにおいて、想定していない異物の含有判定  
計測データとターゲット成分が事前に対応付いていれば、ターゲット成分と異なるものを検出できます。これによって、工場などの合成プロセスによって予期せぬ異物の混入や欠陥を検出できると考えられています。ただし、効率よく作業を行うために、計測の自動化が必須になると考えています。

上記では、材料分野での応用シーンを想定して記載しておりますが、機械学習は汎用技術であるため、応用範囲・可能性は非常に広いものと思われます。計測対象を特徴付ける信号が多数得られていれば、その信号パタンの分類や事象との対応付けが原理的に可能と思われます。データ提供側が考えていただきたいのは、網羅的かつ自動的にデータを取得するシステムです。そのシステムがあれば、マッチできると思われます。

## 展開が期待される分野・領域：

農業 林業 水産 畜産 鉱業 建設 食料品 繊維製品 木製品 パルプ・紙 化学品 医薬品  
化粧品 石油製品 プラスチック ゴム製品 革製品 鉄鋼 非鉄金属 金属製品 セラミック 炭素系新素材  
新素材（その他） 機械 工作機械 自動車 二輪車 航空宇宙 電気機器 精密機器 光学機器  
産業用機器 ロボット ファクトリーオートメーション 音響機器 半導体 電子部品 電池 コンピュータ モバイル  
AR/VR エネルギー 資源 情報通信 衣料 装飾 インターネット 情報処理 電力 ガス レーザー  
光 セキュリティ 住宅 材料分析 画像処理 音声認識 バイオ 省エネ 水 放送 広告 運輸  
倉庫 郵便 卸売 小売 交通 e-コマース 金融 保険 不動産 物品賃貸 宿泊 飲食店  
生活関連サービス 観光 コンテンツ（映像等） 娯楽 教育学習支援 医療 ヘルスケア 福祉 介護 衛生  
リサイクル MaaS SaaS 都市開発 インフラ 環境 印刷、出版 伝統工芸 アート 音楽 デザイン  
その他（機械学習、マテリアルズインフォマティクス）

## その他PR事項：（産学共同実績 等）

紹介した技術のコードの一部をGithubに公開しています。企業の方々が実際に新規に合成した材料計測データに対して、その手法コードを用いることで、材料の成分や構造を同定する等の共同研究に取り組んでいます。現在の共同研究は材料分野がメインとなっておりますが、手法自体は非常に汎用的なので、類似データ形式であれば、様々に応用可能と考えています。