T2R2 東京科学大学 リサーチリポジトリ
Science Tokyo Research Repository

# 論文 / 著書情報
# Article / Book Information

| | |
|---|---|
| 題目(和文) | 匂いセンシング空間の多次元データ解析による要素臭の探索法の研究 |
| Title(English) | |
| 著者(和文) | 原田 祐希 |
| Author(English) | Yuki Harada |
| 出典(和文) | 学位:博士(工学),<br>学位授与機関:東京工業大学,<br>報告番号:甲第10146号,<br>授与年月日:2016年3月26日,<br>学位の種別:課程博士,<br>審査員:中本 高道,岩本 光正,中川 茂樹,佐藤 誠,間中 孝彰,竹井 義法 |
| Citation(English) | Degree:Doctor (Engineering),<br>Conferring organization: Tokyo Institute of Technology,<br>Report number:甲第10146号,<br>Conferred date:2016/3/26,<br>Degree Type:Course doctor,<br>Examiner:,,,,, |
| 学位種別(和文) | 博士論文 |
| Category(English) | Doctoral Thesis |
| 種別(和文) | 論文要旨 |
| Type(English) | Summary |

Powered by T2R2 (Science Tokyo Research Repository)

（博士課程）
Doctoral Program

# 論 文 要 旨

THESIS SUMMARY

| | | | |
|---|---|---|---|
| 専攻：<br>Department of | 電気電子工学　　専攻 | 申請学位（専攻分野）：<br>Academic Degree Requested | 博士　（　工学　）<br>Doctor of |
| 学生氏名：<br>Student's Name | 原田　祐希 | 指導教員（主）：<br>Academic Advisor(main) | 中本　高道 |
| | | 指導教員（副）：<br>Academic Advisor(sub) | |

要旨（和文 2000 字程度）
Thesis Summary（approx.2000 Japanese Characters ）


匂いは、人体において揮発性化合物の混合物が鼻の粘膜上の嗅覚神経細胞にて受容され、それによって生じる感覚刺激の対象である。筆者らの研究室では、遠隔地での自由な匂い再現を目指して、匂いの記録再生システム、嗅覚ディスプレイについて研究を行ってきた。嗅覚ディスプレイを使用することで複数の香りを任意の比率で混ぜ合わせて調合し、すぐに香りを発生させることができ、様々な分野で応用が期待されている。しかし、香りの汎用的な要素臭はまだ明らかになっておらず、開発が期待されてきた。

このような背景をもとに本検討では以下の二点を検討した。第一は嗅覚受容体による匂いセンシング空間に基づく、最適な距離尺度の選択と非負値行列因子分解(NMF)法による要素臭の探索である。筆者は香気物質への生体応答を多次元データ解析して、要素臭の計算手法を確立する必要があると考えた。第二は香気分子構造をもとにした嗅覚受容体の応答強度予測である。受容体の機能解明が実験で用いられた香気物質に限定されているために、機械学習を用いて匂いの受容の予測を行った。

中本研究室では、従来より香りに関するセンシング空間・データ空間の解析を報告してきた。質量分析(MS)によるデータ空間上で NMF 法を適用することによって、汎用的な役割を果たす要素臭の作成し、近似臭の作成を検討した。これらの報告により精油に関する匂い近似が出来ることを示したが、質量分析器の広い出力強度範囲をカバーすることが匂いの近似精度向上に必要であることもわかった。そこで、第二章では香気データ間の距離尺度に注目し、広いダイナミックレンジを得るのに最適な距離尺度を検討した。今まで用いられたカルバック・ライブラー距離よりも板倉斉藤(IS)距離に基づく NMF 法の方が高い質量電荷比領域の小さなピークの再現性を高くできることがわかった。

生体の嗅覚に近いセンシング情報を得るためには、より人間の感覚量空間に適したセンシング空間が必要になる点が指摘されてきた。現在、生体の嗅覚情報については幅広い知見が蓄積されつつある。その中でも昆虫については系統的に調べられており、一般的な哺乳類よりも各嗅覚受容体の機能解明が進んでいる。第三章ではショウジョウバエの嗅覚受容体の応答実験のデータに IS 距離を用いた NMF 法を適用することで、要素臭の探索を検討した。計算機実験を行った結果、得られた要素臭で果実香気の近似ができる可能性が示唆された。

生物学的な受容体の機能解明データの蓄積は近年急速に進んでいる反面、匂いを構成するすべての香気物質に対する、すべての嗅覚受容体の応答を取得することは事実上不可能である。昆虫のデータでも限られた化合物に対する応答データしか得られていないことから、受容体の応答予測が必要と考えた。

第四章では構造表記式から市販のソフトウェア(dragon)を使用し、香気化合物の分子構造パラメータを抽出した。そして低次元の空間への非線形写像を得ることができる自己組織化写像(SOM)を用いることで、香料化合物の分子構造パラメータ空間の可視化を示した。

第五章では、香気物質の分子構造パラメータに基づく嗅覚神経細胞の応答予測を行うことを目的とし、SOM による嗅覚受容体の応答強度予測に関して検討をした。また、化合物の分子構造パラメータは幾分冗長なパラメータ空間を形成していると思われる。条件数を用いて冗長性を排除した後、利用するパラメータを漸減しながら、赤池情報量規準(AIC)で交差検定を行うことで、最適予測パラメータ組み合わせを探索するという 2 段階のパラメータ削減手法を提案した。この手法を用いることである程度の精度で予測できることが分かった。

第六章では、化合物の分子構造パラメータ空間へ、非線形性の高い深層機械学習の一手法であるオートエンコーダーを用いた多次元空間の次元圧縮方法を適用し、合成変数化した分子構造パラメータよりニューラルネットワークを用いた応答予測を行う手法に関して検討した。80 次元まで圧縮した香気パラメータをもとにニューラルネットワークを学習し、交差検定より応答強度の予測ができることを確認した。

中本研究室では、自由な遠隔地での匂い再現を目指して、匂いの記録再生システム、嗅覚ディスプレイについて研究を行ってきた。本論文にて述べた検討から、最適な距離尺度が選択された NMF 法などを用いて嗅覚受容体による匂いセンシング空間を解析することで、実用的な要素臭の探索に今後寄与できる。さらに、多種多様に存在する香気物質の分子構造パラメータ空間からその匂いセンシング空間への非線形写像を得ることで、生体の匂いセンシング空間の補間ができ、解析に貢献できるものと考えている。

以上のように多次元データ解析的な手法に基づき、生理学の知見から実用的な要素臭を確立できると思われる。

備考：論文要旨は、和文 2000 字と英文 300 語を 1 部ずつ提出するか、もしくは英文 800 語を 1 部提出してください。
Note：Thesis Summary should be submitted in either a copy of 2000 Japanese Characters and 300 Words (English) or 1copy of 800 Words (English).

注意：論文要旨は、東工大リサーチリポジトリ（T2R2）にてインターネット公表されますので、公表可能な範囲の内容で作成してください。
Attention: Thesis Summary will be published on Tokyo Tech Research Repository Website (T2R2).

（博士課程）
Doctoral Program

# 論 文 要 旨

THESIS SUMMARY

| | | | |
|---|---|---|---|
| 専攻：<br>Department of | 電気電子工学　　専攻 | 申請学位（専攻分野）：<br>Academic Degree Requested | 博士　（　工学　）<br>Doctor of |
| 学生氏名：<br>Student's Name | 原田　祐希 | 指導教員（主）：<br>Academic Advisor(main) | 中本　高道 |
| | | 指導教員（副）：<br>Academic Advisor(sub) | |

要旨（英文 300 語程度）
Thesis Summary（approx.300 English Words ）


An odor approximation is a technique to reproduce odors using a small number of odor components. This technique is essential to realize olfactory sensation in virtual space, i.e, the same or a similar sensation can be obtained by blending a small number of odor constituents.

Our group has for years been studying odor approximation to express a variety of odors using a small number of odor components. Our group has already reported that, by using the NMF (Non-negative Matrix Factorization) method, basis vectors corresponding to odor components can be extracted based on the mass spectra (MS) database.

In this thesis, I firstly studied the method to analyze the ORN(Olfactory Receptor Neuron)' s sensing space to extract odor components. Secondly, I studied the method to expand the ORN`s sensing space by ORN responses prediction based upon machine learning.

In humans, it is known that an olfactory receptor responds to an odorant molecule at the front end stage of olfaction. At the current stage, the insect' s olfaction is more appropriate for systematic survey than mammal' s one since its database is available. NMF method was applied to its database to extract basis vectors.

It was found that the basis vectors were almost evenly located according to the spatial distribution of odors. Thus, it might be possible to express a variety of odors using odor components corresponding to the extracted basis vectors.

Since the number of the data available in the database is still limited, we propose a prediction method of Drosophila' s ORN response from structural parameters of an odorant molecule and SOM (Self-Organizing Map) was proposed. Structural parameters of odorant molecules by using Dragon were obtained. Then, SOM maps structural parameters of an odorant molecule onto an OR response to corresponding odor. For improving accuracy, we selected important parameters based on AIC (Akaike Information Criteria). It was found that the ORN response prediction was roughly achieved.

Moreover, dimensionally reduction of structural parameters by using an autoencoder was performed. Multi-layer perceptron maps the autoencoded structural parameters into a ORN response after training. It was found that ORN responses were roughly estimated.

Response prediction of ORNs can interpolate ORN sensing space to search for odor components for odor approximation since a huge number of data are required for analysis.

The possibility to establish general odor components was demonstrated using multi-dimensional data analysis method and data expanded by ORN response prediction.


備考 ： 論文要旨は、和文 2000 字と英文 300 語を 1 部ずつ提出するか、もしくは英文 800 語を 1 部提出してください。
Note : Thesis Summary should be submitted in either a copy of 2000 Japanese Characters and 300 Words (English) or 1copy of 800 Words (English).


注意：論文要旨は、東工大リサーチリポジトリ（T2R2）にてインターネット公表されますので、公表可能な範囲の内容で作成してください。
Attention: Thesis Summary will be published on Tokyo Tech Research Repository Website (T2R2).