

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)            | 審査の要旨                                                                                                                                                                                           |
| Type(English)     | Exam Summary                                                                                                                                                                                    |

(博士課程)

## 論文審査の要旨及び審査員

| 報告番号        | 甲第  |       | 号   | 学位申請者氏名 |       | 原田 祐希               |  |
|-------------|-----|-------|-----|---------|-------|---------------------|--|
| 論文審査<br>審査員 |     | 氏 名   | 職 名 |         | 氏 名   | 職 名                 |  |
|             | 主査  | 中本 高道 | 教授  | 審査員     | 間中 孝彰 | 准教授                 |  |
|             | 審査員 | 岩本 光正 | 教授  |         | 竹井 義法 | 学外審査員<br>(金沢工業大学教授) |  |
|             |     | 中川 茂樹 | 教授  |         |       |                     |  |
|             |     | 佐藤 誠  | 教授  |         |       |                     |  |

### 論文審査の要旨 (2000 字程度)

本論文は、「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」と題し、7章からなっている。

第1章「序論」では、生体嗅覚の仕組み、匂いの分類、匂いセンシング空間の多次元データ解析の研究の現状を述べ、比較的少数の要素臭を用いて多様な香りを再現するためには要素臭探索法が必要であり、さらに生体匂いセンシング空間では十分なデータが取得できないために足りないデータを補間するために嗅覚受容体応答予測法が必要であると述べている。

第2章「非負値行列因子分解法を用いた近似臭作成方法における距離尺度の検討」では、質量分析器データを用いて匂い近似を行う距離尺度について検討している。非負値行列因子分解法で基底ベクトルセットを求めるが、基底ベクトルの算出及び利用できる香りデータを用いた基底ベクトル近似に距離尺度が必要になる。マスペクトルにおいて小さなピークが匂いの質に影響を与えることが多く、IS(Itakura-Saito)距離尺度を用いることにより小さなピークの再現性を高めて匂い近似精度を向上させることができたと述べている。

第3章「嗅覚受容体応答情報に基づいた非負値行列因子分解法による要素臭の探索」では、嗅覚受容体応答データを上記非負値行列因子分解法に基づいて基底ベクトルを算出している。10個の基底ベクトルを含めて全データを階層的クラスタ分析により解析した結果、香氣成分のクラスタに合うように基底ベクトルが配置され、さらに様々な果実臭のデータを基底ベクトルで表現できるので、本手法により要素臭を探索できる可能性が示唆されたと述べている。

第4章「香氣分子構造の数値表現と様々な香氣分子によるパラメータ空間」では、香氣成分の数千に及ぶ分子構造パラメータから嗅覚受容体の応答強度を非線形回帰により予測可能であると述べ、分子構造パラメータの情報を抽出する方法を示し、1500種類の香氣分子の分子構造パラメータを抽出することができたことと述べている。

第5章「香氣分子構造をもとにした自己組織化マップによる嗅覚受容体の応答強度予測法」では、4章で抽出した分子構造パラメータと嗅覚受容体応答データを用いて自己組織化マップを学習させている。条件数を用いて大まかに分子構造パラメータを絞り込み、その後赤池情報基準を交差検定で評価する2段階のパラメータ削減法を提案し、数十のパラメータを選択後に自己組織化マップを学習させている。蛍光プレートリーダーで得た嗅覚受容体応答を予測する計算機実験を行い、比較的良好な予測を行うことができたことと述べている。

第6章「香氣分子構造情報のオートエンコーダによる次元圧縮と多層パーセプトロンによる嗅覚受容体の応答強度予測法」では、深層機械学習の手法の一つであるオートエンコーダで数千次元の分子構造パラメータを数十次元まで非線形次元圧縮して高い精度で復元可能であると述べている。そして、その圧縮データを多層パーセプトロンに入力して機械学習を行い、受容体の応答強度を予測する手法を提案している。交差検定による受容体応答予測を行った結果、予測精度向上の可能性を見出したと述べている。

第7章「結論と今後の課題」では、本研究の成果及び将来展望をまとめている。

以上を要約するに、要素臭を探索する手法として匂いセンシング空間を多次元データ解析し、さらに受容体応答予測によりセンシング空間を補間することを提案しその可能性を確かめたもので、工學上學術上貢献するところが大きい。よって我々は本論文が博士(工学)の学位論文として十分価値あるものと認める。

注意:「論文審査の要旨及び審査員」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。