

論文 / 著書情報
Article / Book Information

題目(和文)	深層学習を用いた香気物質の印象予測モデルの研究
Title(English)	
著者(和文)	野崎裕二
Author(English)	Yuji Nozaki
出典(和文)	学位:博士(工学), 学位授与機関:東京工業大学, 報告番号:甲第10707号, 授与年月日:2017年12月31日, 学位の種別:課程博士, 審査員:中本 高道,渡邊 澄夫,長谷川 修,長谷川 晶一,高村 大也
Citation(English)	Degree:Doctor (Engineering), Conferring organization: Tokyo Institute of Technology, Report number:甲第10707号, Conferred date:2017/12/31, Degree Type:Course doctor, 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

(博士課程)
Doctoral Program

論文要旨

THESIS SUMMARY

専攻:	知能システム科学	専攻	申請学位(専攻分野):	博士	(工学)
Department of			Academic Degree Requested	Doctor of	
学生氏名:	野崎 裕二		指導教員(主):	中本 高道	
Student's Name			Academic Supervisor(main)		
			指導教員(副):		
			Academic Supervisor(sub)		

要旨(和文 2000 字程度)

Thesis Summary (approx.2000 Japanese Characters)

我々の社会における匂いの性質や品質は、食べ物や飲み物、化粧品、工業製品、室内空気の品質管理や空気・水質の汚染の重要な感覚的な特性である。

人が感じる匂いの印象の元は空気中に含まれる化学混合物であるが、人が匂いを認識する生体メカニズムは複雑である。1991年のBuckとAxelによる匂い受容体の発見の報告以降、嗅覚における匂い受容の生物学的な理解は目覚ましい進歩を遂げてきたが、分子の持つ膨大なパラメータ、例えば分子量や官能基などが我々の認識にどのように結びついているかは理解されていない。分子のパラメータと匂いの印象の関係を探る研究は古くから行われてきたが、従来まで用いられてきた主成分分析などの方法では生物の非線形な認識を表現するようなモデルを作ることはできていなかった。

マスペクトルには官能基に由来するフラグメントピークなどの匂いの性質に影響を与える分子の部分的な構造の情報が含まれるため、嗅覚受容体の活性パターンを導く予測因子として有用である。嗅覚受容体のアンタゴニストの存在により、混ぜ合わされた匂い物質が作る印象は単純な足し算とはならず、全く異なるものとなることもある。こうした事実からも、マスペクトルは匂いの元である分子の構成を示す情報ではあるものの、人の感じる匂いの印象との結びつきは線形でなく、非線形な結びつきであると考えることができる。先行研究で提案されている手法は主成分分析を基本とする線形変換を主としたものであり、両者の関係に線形性を仮定している。こうした背景のもと、本研究では分子パラメータの一つであるマスペクトルを入力とし、その分子に対応する匂いの印象を、人工ニューラルネットワークを用いて予測する数理モデルについて提案する。

機械学習はメールの検索エンジンやスパムフィルタ、音声認識や文字認識などのソフトウェアにも用いられており、私たちの日常生活においても大きな役割を果たしている。近年では深層学習と呼ばれる多数のネットワークを組み合わせたモデルが注目されており、本研究で提案する予測モデルは2つの深層オートエンコーダによる非線形な特徴抽出と特徴量を変換するための多層パーセプトロンを組み合わせた深層モデルである。

第一章では人間の有する嗅覚の受容器である嗅覚受容体細胞、匂いを認識するメカニズム並びに本日までに当該分野で行われてきた先行研究について述べる。

第二章では本実験に使用した多層パーセプトロンの計算機上での実装と、使用した官能検査データおよびマススペクトルのデータについて述べる。

第三章では物質の匂い印象を複数の記述子と各記述子への当てはまりの度合いを連続値で表した官能検査のデータを用いて、匂い印象を連続値で予測する回帰モデルを提案した。予測モデルは9層からなる深層ニューラルネットワークである。この提案モデルによる予測性能(モデルの出力と官能検査結果の相関係数)は線形手法である部分回帰最小二乗法モデル及び5層パーセプトロンによるモデルと比較して有意に高いものであることを実験により示した。

第四章では分子の匂い印象を、記述子への当てはまりの有無(離散値)で表した官能検査のデータを用いる。四章で用いた官能検査データでは、よく似た種類の記述子が相互排他的に出現するために相関が低く、三章で用いたモデルは有効ではなかった。この問題への対処のために、言語的な類似性に基づく記述子のクラスタリングを利用したモデルを提案した。実験において、官能検査のデータに用いられた150種類以上の記述子は自然言語処理の技術を用いて6つのグループに分類された。自然言語処理の技術に基づくクラスタリングを用いた匂い印象の分類モデルは、官能検査データの相関係数に基づくクラスタリングを用いた分類モデルよりも有意に性能が改善されることが示された。

第五章ではオートエンコーダに用いる距離関数として板倉斎藤距離を検討した。マススペクトルにおいて分子量の大きなピークは人間の嗅覚閾値が低い分子に由来するもので、たとえ値が小さくとも匂いの認識に与える影響は大きい。一般に用いられる二乗和誤差や交差エントロピーなどの距離関数ではこうした小さな特徴を効率的に評価することが難しいが、板倉斎藤距離を用いたオートエンコーダはマススペクトルの小さなピークをより高い精度で近似できることが示された。

第六章では第三章で提案した9層のニューラルネットワークと第五章で提案した板倉斎藤距離を採用したオートエンコーダを組み合わせ、小さなピークの近似性能の改善が匂い印象の予測精度の改善の可能性を示した。

以上、本研究では深層ニューラルネットワークを用いたマススペクトルから匂い印象を予測するモデルを提案し、提案モデルの予測性能が従来手法よりも優れたものであることを計算機実験により確認した。

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 1 copy 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).

論文要旨

THESIS SUMMARY

専攻： Computational Intelligence and
Department of Systems Science

学生氏名： Yuji Nozaki
Student's Name

申請学位(専攻分野)： 博士 (Engineering)
Academic Degree Requested Doctor of

指導教員(主)： Takamichi Nakamoto
Academic Supervisor(main)

指導教員(副)：
Academic Supervisor(sub)

要旨(英文 300 語程度)

Thesis Summary (approx.300 English Words)

The sense of smell arises from the perception of odors from airborne chemical compounds. The process of perceiving odor is a result of information processing starting at olfactory receptor cells in olfactory epithelium and ending at hippocampus, piriform cortex, amygdala and orbitofrontal cortex through an olfactory bulb. After the finding of olfactory receptors by Buck and Axel in 1991, study of biological mechanism of odor perception has been accelerated. However, the relationship between the impression of odor and the numerous physicochemical parameters has yet to be understood owing to its complexity. As such, there is no established general method for predicting the impression of odor only from its physicochemical properties.

In this study, we designed a novel predictive model based on an artificial neural network with a deep structure for predicting odor character utilizing the mass spectra of chemicals. The proposed deep neural network consists of three neural networks, that is, two autoencoders to reduce the dimensionality of original data into feature vectors of lower dimensionality equipped at both input and output of the deep neural network, and a neural network mapping a feature vector of mass spectrum onto a feature vector of odor character.

Unlike previous studies using linear models, proposed model is capable of approximating complex nonlinear representation as the model uses deep structured neural networks. The result of computer simulation showed that the accuracy of proposed neural networks in predicting odor character was much higher than a conventional method.

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).