

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)	審査の要旨
Type(English)	Exam Summary

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		野崎 裕二	
		氏名	職名		氏名	職名
論文審査 審査員	主査	中本 高道	教授	審査員	長谷川 晶一	准教授
	審査員	渡辺 澄夫	教授			
		高村 大也	教授			
		長谷川 修	准教授			

論文審査の要旨 (2000字程度)

本論文は「深層学習を用いた香気物質の印象予測モデルの研究」と題し、和文7章からなっている。

第1章「序論」では、嗅覚受容の原理、官能検査の手法、匂い印象予測モデルの研究の現状を述べ、深層学習が非線形で複雑な写像を行うのに適しており、マススペクトル（質量分析器データ）から匂い印象を表す官能検査データを予測することができるかと述べている。

第2章「深層学習を用いた匂い印象予測モデル」では、用いた深層ニューラルネットワークモデル、マススペクトル及び官能検査データについて述べている。学習則、慣性項、正則化について説明し、官能検査の記述子間の相関について調べて、匂い印象の予測モデルを作成する準備を行ったと述べている。

第3章「連続値で表現される匂い印象の予測」では、マススペクトルデータ及び匂い印象データの次元圧縮を行うのに2つのオートエンコーダを用い、そのオートエンコーダの特徴量空間の間を多層パーセプトロンで写像するニューラルネットワークの構造を提案している。それぞれ最適な特徴量空間の次元を決定した後に、匂い印象の予測を計算機実験により行い、交差検定を行った結果、線形手法であるPLS(Partial Least Squares)法よりも高い精度で匂い印象の予測が可能であると述べている。さらにオートエンコーダを用いずに多層パーセプトロンだけで匂い印象を予測する方法、オートエンコーダを一つのみ使用する方法とも比較し、提案手法により予測値と真値の最も高い相関係数が得られたと述べている。

第4章「離散値で表現される匂い印象の予測」では、匂いの印象が記述子に該当するかどうかのみを表す2値データを用いて匂い印象の予測を行っている。2値データを用いた方が対象となる匂い物質数が多くなるので使用している。Wikipedia 英語版の全文テキストから計算した単語ベクトルにより記述子間の類似度行列を作成し、クラスタリングにより記述子を6種類に分類した結果、約7割の確率で記述子クラスターを正しく予測できたと述べている。

第5章「ニューラルネットワークの距離関数の検討」では、ニューラルネットワークの誤差評価に使われる距離指標について検討している。マススペクトルでは小さなピークの変化が、匂い印象には大きな影響を与えることが知られており、その小さなピークの変化を反映させるのに適した距離関数を検討している。マススペクトルデータを次元圧縮するオートエンコーダについて、ユークリッド距離、クロスエントロピー、板倉斎藤距離を用いてニューラルネットワークを学習させて評価した結果、板倉斎藤距離を用いた場合が小さなピークに対するオートエンコーダの再現精度が最も高かったと述べている。

第6章「板倉斎藤距離を用いたニューラルネットワークによる匂い印象の予測モデルの検討」では、第5章のオートエンコーダを用いてマススペクトルの次元圧縮を行い、匂い印象予測を行った結果を述べている。マススペクトルの次元圧縮を行うオートエンコーダ以外は第3章と同じニューラルネットワークを用い、官能検査データも第3章と同じデータを用いている。クロスエントロピーと比較した結果、板倉斎藤距離の方が若干予測精度が向上したと述べている。しかし、さらに予測精度を向上させるには、より多くの学習データが必要になると述べている。

第7章「結論」では、本研究の成果及び将来展望をまとめている。

以上を要約すると、深層学習を香気物質の印象予測に導入して従来の手法と比較することによりその有効性を確認したもので、工業上学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。