

論文 / 著書情報  
Article / Book Information

題目(和文)	
Title(English)	Machine learning for Scent: Forward and Inverse Perceptual model for Olfactory perception using mass spectrum of Odorant Molecules
著者(和文)	DebnathTanoy
Author(English)	Tanoy Debnath
出典(和文)	学位:博士(学術), 学位授与機関:東京工業大学, 報告番号:甲第12244号, 授与年月日:2022年9月22日, 学位の種別:課程博士, 審査員:中本 高道,奥村 学,山口 雅浩,小尾 高史,長谷川 晶一
Citation(English)	Degree:Doctor (Academic), Conferring organization: Tokyo Institute of Technology, Report number:甲第12244号, Conferred date:2022/9/22, 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	Debnath Tanoy	
論文審査 審査員		氏名		職名	氏名	職名
	主査	中本 高道		教授	長谷川 晶一	准教授
	審査員	奥村 学		教授		
		山口 雅浩		教授		
	小尾 高史		准教授			

## 論文審査の要旨 (2000 字程度)

本論文は「Machine learning for scent: Forward and inverse perceptual model for olfactory perception using mass spectrum of odorant molecules」と題し、英文6章からなっている。

第1章「Introduction」では、匂い空間の次元の推定、匂い印象予測の入力データ、出力データ及び匂い印象予測に関する研究の現状を述べている。そして、記述子のみで匂い印象を表す2値データの場合、記述子が該当する頻度が少ないと精度よく分類するのが困難になる問題を指摘している。また、匂い印象のデータからそのセンシングデータを逆に予測する問題はこれまでに報告されたことがなかったが、匂い印象から香り創作を行うのに重要な課題であると指摘している。

第2章「Method for analyzing Sensing (mass spectrum) Data」では、多層パーセプトロンとその学習方法の説明を行い、次元圧縮の手法、多層パーセプトロンのコスト考慮型学習を説明している。さらに、記述子が該当する頻度が少ない場合の解決方法として、1クラス分類法の適用について検討している。

第3章「Forward method: Mapping of mass spectrum of odorant molecules into the binary odor perceptual space from imbalanced data」では、少数の該当サンプルのみが存在する場合に精度よく匂い印象予測を行う方法と計算機実験結果を述べている。1クラス SVM(Support Vector Machine)を用いて大多数の非該当サンプルのみを学習する方法が、少数の該当サンプルを分類するのに有効であり、GNN(Graph Neural Network)と比較しても高い分類精度が得られることが明らかになったと述べている。さらに、記述子の該当頻度が高い場合、中程度の場合は、コスト考慮型の多層パーセプトロンが適しており、該当頻度により手法を使い分ける必要があると説明している。

第4章「Inverse method: A method to extract the sensing data for a desired scent impression using mass spectrum」では、匂い印象の記述子からセンシングデータとなるマススペクトルを予測する手法及び予測結果を述べている。自己組織化マップを用いて、匂い分子のマススペクトルを2次元マップ上に投影し、指定した記述子に相当する格子のマススペクトルを抽出している。さらに複数の記述子を指定することにより、マススペクトルの範囲を狭めることも可能であると説明している。それから、同一格子内のマススペクトルは類似性が高く、その上匂いも類似していることを官能検査でも確認している。この結果、指定した記述子に対応するセンシングデータの抽出は可能であり、香り創作への道筋を示すことができたことと述べている。

第5章「Odor perception from binary mass spectrum mixture of essential oils」では、2成分混合した香りの印象変化を単独の香りから予測することができるかどうかを検討している。オートエンコーダでマススペクトルのデータを次元圧縮後、多層パーセプトロンで匂い記述子の数値に写像させている。96種類の精油について学習を行い、精油同士を混合した匂いサンプルについて単独の精油に比べて記述子“sweet”が強まるかどうかを予測し官能検査結果と比較した結果、概ね正しく予測することができたことと述べている。

第7章「Conclusion」では、本研究の成果をまとめている。

以上を要約すると、本論文は質量分析器データから匂い印象を予測する問題で低頻度の記述子について分類精度を高め、混合物の匂い印象予測を可能にして、さらに匂い印象からセンシングデータを予測する手法を提案するもので、学術上その貢献するところが大きい。よって、我々は本論文が博士(学術)の学位論文として、十分価値があるものと認める。