

論文 / 著書情報  
Article / Book Information

題目(和文)	質量分析に基づく匂い再現を行う要素臭の探索
Title(English)	Exploration of Odor Components for Odor Reproduction Based on Mass Spectrometry
著者(和文)	DANIPRASETYAWAN
Author(English)	Prasetyawan Dani
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12156号, 授与年月日:2021年12月31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12156号, Conferred date:2021/12/31, 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	Dani Prasetyawan		
論文審査 審査員		氏名	職名		氏名	職名
	主査	中本 高道	教授	審査員	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「Exploration of Odor Components for Odor Reproduction Based on Mass Spectrometry」と題し、英文7章からなっている。

第1章「Introduction」では、匂い再現、匂い情報空間、データ特徴抽出手法の研究の現状を述べている。これまでに、原臭説が提案され、匂い印象の官能評価結果から匂い情報空間の次元を調べる研究も行われてきたが、匂い再現の一般的手法はまだ確立されていない。嗅覚ディスプレイ等を用いて匂い再現を行うには、匂い近似精度を保った上でできる限り少数の要素臭で行う必要があると説明している。そのためには匂い近似精度の評価関数が重要であり、実際に近似臭を作成して評価関数の評価を行うこと、さらにしばしば香水で用いられる無臭の保留材の影響を取り除き抜える匂いの範囲を拡張する必要があると述べている。

第2章「Methods」では、匂い再現を行うための具体的な手法を説明している。質量分析器を用いて多次元センシングデータを取得し、非負値行列因子分解法で基底ベクトルを抽出し、取得した匂いデータから基底ベクトルを近似的に求め、基底ベクトルに対応する匂いを要素臭としている。基底ベクトルによる近似精度の評価関数としては、KL (Kullback-Leibler) divergence及びIS (Itakura-Saitoh) divergenceを用い、基底ベクトルの近似及び要素臭による対象臭の近似には、非負拘束最小二乗法及び非線形最適化手法を用いると説明している。さらに保留材の影響を除く手法としては独立成分分析を用いると述べている。それに加えて、匂い再現を評価する官能検査手法として、1:2点比較法を用いると述べている。

第3章「Odor analysis without fixative」では、保留材を含まない185種類の精油について匂い再現を行った結果を説明している。要素臭の数を10として、KL及びIS divergenceを評価関数としてマススペクトルの再現を行った結果、IS divergenceの方が良好な結果が得られたと述べている。濃度が低くても強い香気を有する低揮発性香気成分はマススペクトルの高m/z領域に小さなピークを有しIS divergenceはその再現に有効であると説明している。

第4章「Sensory evaluation of approximated odor」では、第3章の結果に基づいて実際に要素臭を作成し、要素臭を調合した近似臭の近似精度を官能検査により評価している。KL及びIS divergenceに基づいて作成した要素臭を調合した近似臭をそれぞれ用意し、対象臭とどちらが類似しているかを1:2点比較法により調べている。代表的な6種類の精油について官能検査を行った結果、6種類中5種類の精油について、IS divergenceの方が同等以上の近似精度が得られたと述べている。

第5章「Suppression of fixatives using ICA with essential oils」では、精油に保留材を加えたサンプルから、保留材を含まない匂い成分のマススペクトルを独立成分分析により抽出する実験を述べている。5種類の保留材と精油がランダムに混ざったサンプルを用意し、独立成分分析により独立成分を抽出し、各保留材のマススペクトルと独立成分との相関係数を調べて各独立成分に対応する保留材を同定している。そして、最後に残った独立成分を保留材無しの匂い成分として抽出している。計算機実験の結果、保留材の影響を受けることなく匂い成分のマススペクトルを抽出できることがわかったと述べている。さらに保留材の有無による匂いの違いがあるかどうかをオレンジとスペアミントについて官能検査で調べて、両者に差がなく保留材を取り除いてもヘッドスペースの匂いは同じであり、独立成分分析により匂いの抽出に成功したと述べている。

第6章「Suppression of fixatives using ICA and odorant analysis with perfumes」では、匂い再現を適用する匂いの範囲を拡大するために、99種類の香水サンプルに独立成分分析を適用した結果を述べている。保留材としては10種類用意している。香水に関しては保留材の比率は不明であるが、保留材のマススペクトルとそれに相当する独立成分の相関係数は十分大きいために、残った独立成分は保留材無しの匂い成分とみなせると述べている。さらに、IS divergenceにもとづいた非負値行列因

子分解法をもとの香水サンプル及び抽出した匂い成分に適用して、要素臭の数とマススペクトルの近似誤差の関係を明らかにし、保留材の影響を除いた方が近似精度が向上すると述べている。

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による匂い再現において近似精度の評価関数を確立し、無臭の保留材の影響を抑える手法を考案して適用できる匂いの範囲を精油だけでなく香水まで拡張したもので、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。

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。