

最新評価分析講座 (第7講)

J. Jpn. Soc. Colour Mater., 93 [11], 353-360 (2020)

深層学習を用いた化学データの解析 質量分析器データの解析による香り印象の予測

中本高道*†

*東京工業大学科学技術創成研究院 神奈川県横浜市緑区長津田町4259 (〒226-8503)

† Corresponding Author, E-mail: nakamoto.t.ab@m.titech.ac.jp

(2020年5月1日受付, 2020年6月9日受理)

要 旨

匂いセンサの分野では、特性の異なる複数センサの出力パターンをパターン認識することで匂い識別、濃度定量等を行われてきたが、扱うデータの規模も小さく限られた情報しか扱われてこなかった。しかし、近年の深層学習により、扱うデータ規模が飛躍的に拡大した。筆者らのグループは数百次元に及ぶ質量分析器データから深層学習により香りの印象を予測する方法を提案し、従来線形手法に比べて高い予測精度を得ることができた。また、より規模の大きな2値表現の香り印象データを扱うために、自然言語処理を用いて香り記述子の自然なグルーピングを行うことができた。さらに、マススペクトルの小さなピークから特徴を抽出するために、板倉斎藤距離を評価関数とするオートエンコーダにより小さなピークの特徴を抽出することが可能になった。このように質量分析器データを深層学習で解析することにより、有用な情報が得られることがわかった。

キーワード：質量分析器, 深層学習, 官能検査, オートエンコーダ, 自然言語処理

1. はじめに

匂いセンサの分野では、特性の異なる複数センサの出力パターンをパターン認識することで匂い識別、濃度定量等を行う¹⁾。筆者らはニューラルネットでパターン認識することにより匂い識別ができることを三十数年前に世界で初めて提案した²⁾。匂いセンサでは多くの場合匂いの分類の問題を扱うが、検出した匂いがどのような印象であるかを推定する研究もいくつか存在する^{3,4)}。しかし、これまでの匂いセンサの研究では数個のセンサを使用して匂いの印象を推定しようとする研究であり、扱うデータの規模も小さく限られた情報しか扱われてこなかった。

しかし、近年の深層学習⁵⁾を扱った研究では、データ規模が飛躍的に拡大して以前よりも一般的な問題を扱うことが可能になってきた。視聴覚の分野では大規模データを扱った数多くの取り組みがあるが⁶⁾、嗅覚の分野ではまだ上記のような小規模問題が多く限られた問題を扱うことが多かった。

しかし、最近になって香りの印象を計算機シミュレーションで予測する研究がいくつか報告されている。これらの研究では

分子構造パラメーターという数千に及ぶパラメーターを化合物の化学式から生成し、香りの印象へ写像を行う⁷⁻⁹⁾。しかし、これらの研究は単一化合物の香りの印象にしか対応できず、複数の成分から構成されている香りの印象を予測することはできない。

それに対して、筆者らのグループは質量分析器データから深層学習により香りの印象を予測する方法を提案した。質量分析器¹⁰⁾では複数成分の香りのマススペクトルは線形重ね合わせが成り立つので、多成分から構成される香りの印象を予測することが容易である。また、十数万に及ぶ化合物のマススペクトルのデータベースが存在し、実際にマススペクトルを測定することもできる。また、マススペクトルの次元数は数百次元に及び、データ数も数百程度は扱うことができる。本稿では、これらのデータに深層学習を適用して香りの印象を予測する方法および計算機実験の結果を紹介する。

2. 匂い印象予測の方法

センシングデータから匂い印象への写像を深層学習により実現するのが基本原理であり、図-1にその様子を示す。匂いの印象は人が匂いを嗅いで行った官能検査におけるさまざまな記述子に関するスコアである。本研究では144の記述子に対してそれぞれ6段階のスコアを用いた。官能検査結果は、Dravnieksによって行われてデータブックにまとめられているものを利用した¹¹⁾。

一方で質量分析器から得られるマススペクトルの例を図-2に示す。横軸がm/z (質量電荷比)、縦軸が検出器出力で最大が1,000になるように規格化されている。ピークの存在する最も大きなピークは分子イオンピークと呼ばれ、その化合物の分



【氏名】 なかもと たかみち
【現職】 東京工業大学科学技術創成研究院未来産業技術研究所 教授
【趣味】 犬と遊ぶこと
【経歴】 1984年東京工業大学電気電子工学専攻修士課程修了。同年日立製作所入社。1987年東京工業大学助手、1993年同大准教授、2013年同大精密工学研究所教授、2016年同大科学技術創成研究院教授、現在に至る。工学博士。1996～1997年、米国パシフィックノースウェスト研究所客員研究員。

【図表について】 電子ジャーナルサイト「J-STAGE」ではカラーでご覧いただけます。https://www.jstage.jst.go.jp/browse/shikizai-char/ja/