

自己組織化マップを用いた匂い情報の直感的視覚表現

森元 章悟* 商 亮** 佐々 文洋* 林 健司***
 (九州大学 *システム生命科学府 **システム情報科学府
 味覚・嗅覚センサ研究開発センター *システム情報科学研究院)

1 はじめに

ガスセンシング技術の進歩により匂い物質の特定は高精度になされてきている。しかし、ガスセンサによって得られるのはどの化学物質がどのくらい存在しているか、という情報であり、どのような匂いが存在しているのかを直感的に理解することは困難である。これは、匂いを直感的に理解するための匂いの視覚的表現法が確立されていないためである。

そこで本研究では、沸点、pHなどに代表される分子固有の化学的性質を示す分子パラメータを用い、解析手法および表現方法を検討することによって、よりよい視覚的表現法を探索した。

本稿では分子パラメータを主成分分析し、レーダーチャートにプロットする視覚的表現方法、分子パラメータを自己組織化マップにすることによる視覚的表現方法の二つを提案する。

2 実験方法

2.1 主成分分析によるレーダーチャート

主成分分析とは多次元データ解析法の一つであり、多次元データのもつ情報をできるだけ損なわずに低次元空間に情報を縮約する方法である。

今回の研究では、25種類のパラメータをもつ313種の分子に対して主成分分析を行った。このとき主成分として得られたもののうち、第9主成分までの累積寄与率により、もとの分子パラメータの94%が表された。本稿では第9主成分までをレーダーチャートにプロットすることで視覚的表現とした。図1は特徴的な匂いを持つ分子としてオクタナール、ヘキサナール、1-ノネナール、2-ノネナールをそれぞれ示す。オクタナールとヘキサナールは同じ鎖状脂肪族アルデヒドであり、1-ノネナールと2-ノネナールは異性体であるため、似た分子パラメータを持っている。

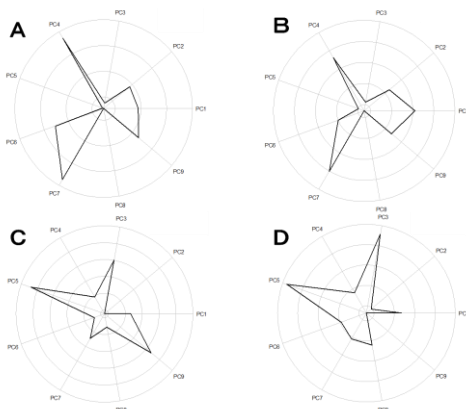


図1 主成分分析によるレーダーチャート A:オクタナール、B:ヘキサナール、C:1-ノネナール、D:2-ノネナール)

2.2 自己組織化マップ(SOM)による分子表現

自己組織化マップとは、コホネンにより提案された教師無しニューラルネットワークアルゴリズムであり、高次元デー

タを2次元平面上へ非線形写像するデータ解析法である。[1]

本研究において作成された自己組織化マップは、レーダーチャートによるものと同様、25個のパラメータを持つ313個の分子をプロットしており、パラメータの近い分子は近くにプロットされるという性質を持っている。各ノードには学習された後の各パラメータの予測値が与えられている。各ノードに対し、対象となる分子のパラメータとの差を求め正規化することにより各ノードのパラメータ的近さを求め、より近いものから順位付けを行い、49個のノードの中から35位までのノードに赤、黄色、白となるようなグラデーションによる色付けを行った。図2はレーダーチャートと同様、オクタナール、ヘキサナール、1-ノネナール、2-ノネナールについての図である。

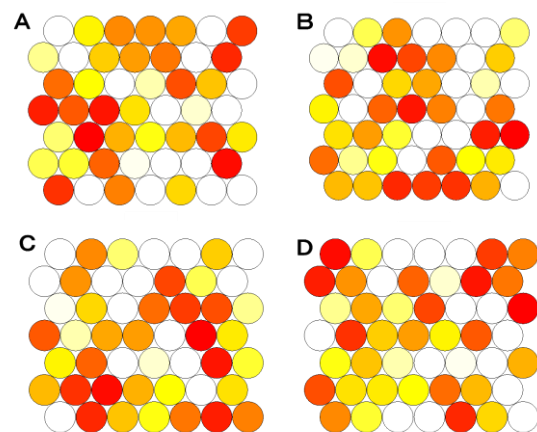


図2 各分子により色づけされた自己組織化マップ(A:オクタナール、B:ヘキサナール、C:1-ノネナール、D:2-ノネナール)

3 結果と考察

レーダーチャートによる表現方法では、似たパラメータをもつAとB、CとDはそれぞれ似た形で表現することができていたことが図1よりわかる。一方、自己組織化マップによる表現方法では、一見して似ているかどうかを判断することは難しいことが図2よりわかる。これは、レーダーチャートによる表現が9つの主成分によって作成されるのに対し、自己組織化マップによる表現は49個のノードの色付けによって図が作製されていることにより、表現の自由度が高くなっているためであると考えられる。今後は自己組織化マップにおけるノードの数を調節するなどの操作を行い、表現としての情報量をレーダーチャートに合わせ、また考察を行っていく必要がある。

参考文献

- [1] Teuvo Kohonen: "Self-Organized Formation of Topologically Correct Feature Maps", BiologicalCybnetics, vol. 43, pp59-69,1982