

論文内容の要旨

博士論文題目 Comprehensive evaluation of prediction for residual pesticides in foods
by quantitative structure-property relationship
(定量的構造物性相関による食品中残留農薬の網羅的な予測評価)

氏 名 芹野 武

(論文内容の要旨)

食品中の残留農薬分析は LC-MS や GC-MS などのクロマトグラフィーと質量分析計を組み合わせたシステムで測定されている。最新の日本の厚生労働省のポジティブリストによると、食の安全を担保することを目的として、700 以上の農薬が一斉分析法に掲載されている。多くの種類の農薬が様々な作物で使用されており、多様な化学的特性により GC-MS や LC-MS による一斉分析において技術的な問題が存在する。食品中の残留農薬分析を行う食品分析ラボでは、これらの問題を、コストがかかる実サンプルの測定を何度も行い分析メソッドを修正・開発することで現状対応している。本研究ではこれらの問題解決の手法として、定量的構造物性相関 (QSPR) によって 1. 残留農薬の回収率の回帰予測および 2. 農薬の分類予測を行い、それぞれのパフォーマンスを評価した。2 つの予測では既存の食品分析の検証されたデータを用いた。農薬の化学的な特性を分子レベルで表す分子記述子 (MD) を予測の説明変数として用いた。224 種類の分子記述子が農薬の canonical SMILES によって得られた。R プログラムの caret パッケージにより様々なアルゴリズムで機械学習を適用した。強い相関のある分子記述子について相関分析とクラスタ分析で検討を行った。本研究の QSPR によって開発された予測手法は、実際の測定がなくても未知の残留農薬の回収率の予測や、分析手法を GC-MS から LC-MS に測定を変更する際の予備検討などで活用することが可能で、食品分析ラボのメソッド開発の工数やコストの削減に貢献することが期待される。

氏 名	芹野 武
-----	------

(論文審査結果の要旨)

令和2年6月30日に開催した公聴会の結果を参考に、令和2年8月31日に本博士論文の審査を実施した。以下に述べる通り、本博士論文は、本学位申請者が、独立した研究者としてバイオインフォマティクス・ケモインフォマティクスを中心とした分野で研究開発活動が続けていくために必要な素養を備えていることを示すものである。

芹野武氏は、本博士論文においては、残留農薬を的確に定量するための手法として、定量的構造物性相関 (QSPR) によって 1. 残留農薬の回収率の回帰予測および 2. 農薬の分類予測を行い、それぞれのパフォーマンスを評価した。2つの予測では既存の食品分析の検証されたデータを用いた。農薬の化学的な特性を分子レベルで表す分子記述子 (MD) を予測の説明変数として用いた。224 種類の分子記述子が農薬の canonical SMILES によって得られた。R プログラムの caret パッケージにより様々なアルゴリズムで機械学習を適用した。本研究では、約 90 種における回帰モデルを活用するなど機械学習について悉皆的に理解し適用するに至っており情報科学との学際領域の発展に貢献するものである。

よって、本論文は、博士 (工学) の学位論文としての価値があるものと認める。