

氏名	小林 由幸		
学位の種類	博士（経営学）		
学位記番号	博甲第 10146 号		
学位授与年月日	令和 3 年 11 月 30 日		
学位授与の要件	学位規則第 4 条第 1 項該当		
審査研究科	ビジネス科学研究科		
学位論文題目	Analysis of the environmental parameters for risk assessment of pesticides by machine learning approach		
主査	筑波大学 教授	博士（工学）	吉田 健一
副査	筑波大学 教授	博士（工学）	徐 驊
副査	筑波大学 教授	博士（工学）	津田 和彦
副査	筑波大学 教授	博士（システムズ・マネジメント）	倉橋 節也
副査	秋田県立大学 准教授	博士（システムズ・マネジメント）	鈴木 一哉

論文の内容の要旨

病虫害を防除し農作物を守るため、人工的に合成された化学物質である農薬が使用されている。農薬は一部の医薬品と共通の有効成分が含まれるにもかかわらず、医薬品とは異なり作物管理のために環境中で使用されるため、その安全性の評価は重要である。すなわち、農薬は環境中に残留し環境へ影響を与えることや、農産物に残り無意識のうちに長期間食品を介して摂取される可能性があるため、各国において厳しい規制が敷かれている。規制に伴う安全性の評価、特に農薬登録の際の安全性試験の中には、実験室や実際の農場において数年にわたる長期間、高額な費用を使って行う必要があるものも少なくない。安全性試験の結果はリスク評価のパラメータに使用され、リスク評価の結果によっては農薬が承認されない、また、登録後に抹消されるといった場合もあり、農薬開発における大きな経済的負担となっている。

このような農薬開発における経済的負担を軽減するため、本研究では農薬開発の初期段階で安全性評価のパラメータを効率的かつ簡単に予測する計算モデルの開発を試みている。具体的には分子構造を表す分子記述子や農薬の物理化学的性質などの情報から農薬の土壌への吸着性や生物内での濃縮性を予測するためのモデルを提案している。農薬開発の初期段階で安全性評価のパラメータを予測できれば、スクリーニング結果が望ましくないと予想される候補については、時間と費用のかかる実際の農場における試験をせずに済み、無駄な試験の継続を止める事で開発コストの低減を計れるためである。

本論文は7章で構成される。第1章では、本論文で取り上げる研究の背景と目的を述べ、本研究の位置付けを示している。第2章では、既存研究をサーベイし、それら専攻研究に残された研究課題を整理することで自らの研究の意義を明確にしている。第3章では、農薬の評価報告書から収集した物理化学的性質に関する実験値と化学情報ソフトウェアを使って計算した分子記述子から農薬の残留特性上重要な土壌吸着係数 (K_{oc}) パラメータを予測する計算モデルを提案している。この

結果、従来の研究が扱ってこなかった物理化学的性質の利用により、予測精度が向上できることを示している。第4章では、第3章では実験値を用いていた物理化学的性質についても計算値を使用するモデルを提案し、コストの必要な実験値収集の手間を省いている。また、提案手法の一般性と汎用性を確認するため、先行研究で用いられた中でも大規模なデータセットを使用している。第4章で提案したモデルは計算値を使うため実験値を使った第3章の提案モデルより予測精度の面では劣っているが、物理化学的性質の実験値が得られない場合もあるために、手法の一般化を図った研究と位置づけられる。更に第5章では、前章まで開発してきた計算モデルの枠組みを使って、農薬申請におけるリスク評価およびハザード評価に使用される指標の1つである生物濃縮係数 (BCF) パラメータの予測手法を開発している。その結果、既存の予測モデルよりも精度の高い予測モデルが開発され、第3章および第4章で開発した手法の一般性と汎用性が示されており、提案手法は環境リスク評価のためのさまざまなパラメータの予測モデルに適用可能であることが示唆されている。最後に第6章で、本研究が持つ農薬開発上の意義を整理した後、第7章で結論として本研究の成果をまとめると共に今後の取り組みについて述べている。

審査の結果の要旨

農薬は環境中に残留し環境に影響を与えることや、農産物に残り一般の人が無意識のうちに長期間食品を介して摂取してしまう可能性があるため、その安全性の評価は極めて重要である。特に欧州においては厳しい規制がひかれ、農薬開発コストと開発期間削減の上で、農薬の安全性評価のパラメータの予測は実務的に大きな経済価値を持つ。このような背景の中、本研究は農薬開発の初期段階で K_{oc} や BCF を予測する汎用的な計算モデルを提案しており社会ニーズに合致した研究と言える。

研究の過程で提案された計算モデルは機械学習分野と物性シミュレーション分野の最新技術を組合せたもので、妥当な最新技術を適切に組合せて効率良く実務上重要な課題を解いたことは、著者が薬学、環境科学、物性シミュレーション、機械学習と言った複数の関連分野について豊富な専門知識を有している事を示している。社会的にも重要なテーマについて、複数の領域にまたがる最新の研究成果を利用した解決方法を示した事は、著者の研究者としての卓越した能力を示している。また、農薬開発のコスト削減の上で本研究のもたらす実務的な価値は学会でも高く評価されており、その事は農薬開発や環境科学・情報学に係る国際会議や論文誌に採択されたことなどからも確認できる。

以上、本学位論文は著者の実務家としての問題意識に裏付けされたものであり、研究の内容は博士（経営学）を授与するに十分なものと判断する。

【最終試験】

論文審査委員会による最終試験を令和3年9月22日に実施し、全員一致で合格と判定した。

【結論】

よって、著者は、博士（経営学）の学位を受けるのに十分な資格を有するものと認める。