

「計測技術と高度情報処理の融合によるインテリジェント計測・解析手法の
開発と応用」

平成 28 年度採択研究代表者

H29 年度
実績報告書

吉川元起

国立研究開発法人物質・材料研究機構

グループリーダー

標準ニオイ多次元メガライブラリ構築と高解釈性数理モデル抽出による
判別精度の定量予測

§ 1. 研究実施体制

(1)「吉川」グループ

- ① 研究代表者:吉川 元起 (NIMS WPI-MANA、グループリーダー)
- ② 研究項目
 - ・全自動測定システムの開発・網羅的測定
 - ・感応膜材料の開発・探索・塗布・評価

(2)「渡辺」グループ (NEC データサイエンス研究所、主幹)

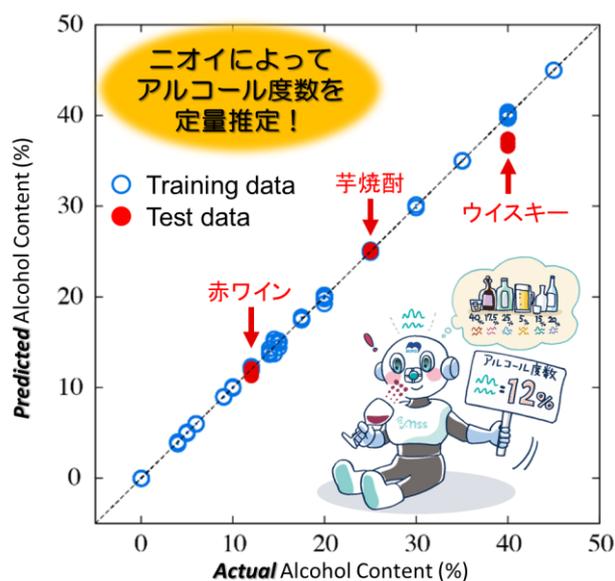
- ① 主たる共同研究者:渡辺 純子 (NEC データサイエンス研究所、主幹)
- ② 研究項目
 - ・クラウド解析プラットフォームの構築
 - ・異種混合学習による判別分析モデルの構築・実装

(3)「有賀」グループ

- ① 主たる共同研究者:有賀 克彦 (NIMS WPI-MANA、主任研究者)
- ② 研究項目
 - ・感応膜材料の網羅的探索・評価
 - ・新規機能性材料の設計・合成・評価

§ 2. 研究実施の概要

本年度は、昨年度までに構築した全自動測定システムのスループットを2倍に拡張し、各種機能性材料について、様々な条件下でのガス応答特性の網羅的測定を進めた。ここで得られる膨大なセンサ信号データと、感応膜材料／測定条件／測定対象ガスの各種パラメータとの定量的な相関を抽出することは、本研究の目的である「判別精度の定量予測」や、その最適化に向けた指針を確立する上で重要な要素となる。そこで本年度は、この定量的な相関抽出に向けたアプローチとして「回帰分析」に着目し、機械学習を用いて解析した場合の有効性について検証を行った。このニオイ測定信号データと客観指標との相関抽出のモデルケースとして、香りの異なる様々なお酒のニオイから、アルコール度数を定量推定することを試みた¹。センサ素子としては、超高感度小型センサ素子(MSS)を利用し、その素子の上に独自に開発したナノ粒子など、ニオイ分子を吸着する機能性材料を塗布して各種お酒のニオイを測定した。それぞれのお酒のニオイ特有のセンサ信号パターンとアルコール度数とを関連付けて得られる大量のデータセットを用いて、機械学習によって、信号パターンからアルコール度数を推定する予測モデルを構築した。こうして得られる予測精度を指標として、高い予測精度を与える感応膜材料の選定や最適な特徴量の組合せを調べた。こうして最適化されたハードウェア(センサ+感応膜材料)とソフトウェア(予測モデル)を用いることによって、学習に使用していないサンプルのアルコール度数を、高い精度で定量推定することに成功した(右図)。本成果によって、最先端計測技術と高度情報処理技術を融合することで、数百から数千種もの分子が複雑に混合された測定対象である「ニオイ」から、特定情報を高精度に定量推定可能であることが実証された。これを受けて、実アプリケーションに向けた実証実験を推進しただけで無く、このような回帰分析を含む各種の機械学習分析を実行可能なクラウド解析プラットフォームを開発した。これによって、感応膜材料特性や測定条件、あるいは測定対象ガスに付随する各種メタデータなど、関連する各種パラメータとの定量的な相関を柔軟に抽出可能となった。こうした一連のシステムを用いて、各種条件下で有効な感応膜材料の開発や、システム条件の最適化を進めた。さらにこれらと並行して、嗅覚センサシステムを大幅に小型化・簡素化可能な解析技術についても最適化を進め、オープンな環境においても、センサチップだけで各種サンプルのニオイを高い精度で識別可能であることを実証した。



図：ニオイセンサ信号の回帰分析による、アルコール度数の高精度定量推定。

ニオイ」から、特定情報を高精度に定量推定可能であることが実証された。これを受けて、実アプリケーションに向けた実証実験を推進しただけで無く、このような回帰分析を含む各種の機械学習分析を実行可能なクラウド解析プラットフォームを開発した。これによって、感応膜材料特性や測定条件、あるいは測定対象ガスに付随する各種メタデータなど、関連する各種パラメータとの定量的な相関を柔軟に抽出可能となった。こうした一連のシステムを用いて、各種条件下で有効な感応膜材料の開発や、システム条件の最適化を進めた。さらにこれらと並行して、嗅覚センサシステムを大幅に小型化・簡素化可能な解析技術についても最適化を進め、オープンな環境においても、センサチップだけで各種サンプルのニオイを高い精度で識別可能であることを実証した。

¹ K. Shiba, R. Tamura, G. Imamura, G. Yoshikawa, "Data-driven nanomechanical sensing: specific information extraction from a complex system", Scientific Reports 7, 3661-1-3661-12 (2017).