

吉川元起

物質・材料研究機構
機能性材料研究拠点／国際ナノアーキテクトニクス研究拠点
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. 研究成果の概要

本年度は、昨年度までに構築した全自動測定システムを活用することで、当初目標としていたメガ(100万とおり)を遙かに超えるセンサシグナルの取得を達成し、本研究のタイトルにもなっている「メガライブラリ」に関して一定のマイルストーンに到達した。この膨大なセンサシグナルデータを解析することによって、ニオイの情報化における技術的な課題を、より具体的に把握することが可能となり、特に湿度がセンサシグナルに与える影響は、当初予定されていたよりも大きいことが明らかとなった。そのため、今後嗅覚センサを社会実装していくにあたって、汎用的なライブラリを基に、高精度な判別を実現するためには、湿度の影響を抑えることが重要となる。そこで本年度は、以下の3つのアプローチによって、この湿度問題に対応し、その効果の検証を行った: 1) 感応膜材料の分子レベルでの特性改変効果の検証と、新たな感応膜評価方法の確立、2) ハード/ソフト連携による材料の最適化と、高湿度環境下での類似ガス成分の同時定量、3) 伝達関数法の発展と、時定数スペクトル法の開発。1)については、モデルケースとしてポルフィリンのコア構造である Porphine に着目し、中心金属を変えるだけでセンサシグナルが大きく変化することを明らかにした。なかでも、鉄を中心金属にした場合には、高湿度条件下においても高い感度が維持できることを示した。さらに従来のガスセンサに対して逆転の発想を導入することによって、「固体材料のパターン認識」という新たな評価方法を確立した。2)については、類似構造を有するガス分子が高湿度環境下に存在するような場合であっても、水蒸気を含めそれぞれのガス分子の濃度を同時に定量可能であることを示した。このアプローチでは、予測誤差の最小化を指針とした感応膜材料の開発が有効であることが実証された。また3)については、伝達関数法の解析に関して、各種機械学習手法を導入することによって、判別精度の更なる向上を実現した。これとは別のアプローチとして、ガス分子

がセンサに吸脱着する際の動的な挙動を反映したモデルとして、センサシグナルが指数関数の線形和であると仮定し、各指数関数の時定数をノンパラメトリック手法によって連続化された特徴量として与える「時定数スペクトル法」を確立した。これによって、センサシグナルに対して物理的な解釈性を高められただけでなく、個体差へのロバスト性も向上させられることが実証された(図1)。

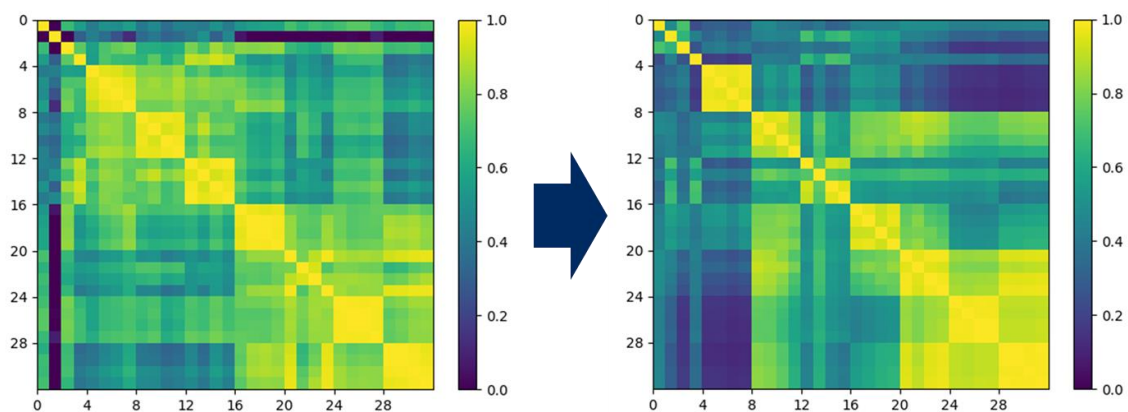


図1:センサシグナル出力(左)と、時定数スペクトル特徴量(右)の相関係数の例。同一／異なるチャンネル間の相関係数はそれぞれ増加／減少し、チャンネル間の差異が浮き彫りになっている。

【代表的な原著論文】

1. H. Ngo, K. Minami, G. Imamura, K. Shiba, and G. Yoshikawa, "Effects of Center Metals in Porphines on Nanomechanical Gas Sensing", *Sensors* 18, 1640, 2018.
2. K. Minami, G. Imamura, T. Nemoto, K. Shiba, and G. Yoshikawa, "Pattern recognition of solid materials by multiple probe gases", *Materials Horizons* 6, 580-586, 2019.
3. K. Shiba, R. Tamura, T. Sugiyama, Y. Kameyama, K. Koda, E. Sakon, K. Minami, H. T. Ngo, G. Imamura, K. Tsuda, and G. Yoshikawa, "Functional nanoparticles-coated nanomechanical sensor arrays for machine learning-based quantitative odor analysis", *ACS Sensors* 3, 1592-1600, 2018.

§ 2. 研究実施体制

(1)「吉川」グループ

- ① 研究代表者: 吉川 元起 (物質・材料研究機構 機能性材料研究拠点／国際ナノアーキテクニクス研究拠点 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
 - ・感応膜の設計指針の確立
 - ・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
 - ・時定数スペクトルに基づいた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 (物質・材料研究機構 国際ナノアーキテクニクス研究拠点 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