

戦略的創造研究推進事業 CREST
研究領域「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」
研究課題「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」

研究終了報告書

研究期間 2016年10月～2020年 3月

研究代表者：吉川元起
(物質・材料研究機構機能性材料研究
拠点センサ・アクチュエータ研究開発セ
ンター グループリーダー)

§ 1 研究実施の概要

(1) 実施概要

本研究では、人間の五感に対応するセンサで最も開発が遅れている「嗅覚センサ」について、最先端のセンサ素子(研究代表者 NIMS 吉川グループが担当)、データ解析技術(主たる共同研究者 NEC 渡辺グループが担当)、および感応材料(主たる共同研究者 NIMS 有賀グループが担当)を融合することによって、社会実装に向けた技術的な課題を洗い出し、それらを克服する指針を与えることを目的とした。

センサ素子としては、研究代表者 NIMS 吉川が中心となって開発に成功した膜型表面応力センサ(Membrane-type Surface stress Sensor, MSS)を軸に研究開発を進めた。MSSは、当該分野での長年の課題となっていた高感度と小型を両立し、嗅覚センサに必要とされる各種特性を網羅したセンサ素子である。特にガスを吸着させる感応膜材料として、ほとんど全ての材料が利用可能である点を最大限に活かし、主たる共同研究者 NIMS 有賀がこれまでに培ってきた多種多様な機能性材料を、MSS の感応膜として適用した。ここで全自動測定システムを独自に開発し、感応膜の材料パラメータや各種測定条件など、センサ信号に影響を与えるパラメータを掃引した網羅的な測定を行い、100 万とおりを遙かに超えるセンサ信号を取得した。こうして得られた膨大な多次元センサ信号を擁する「メガライブラリ」に対して、主たる共同研究者 NEC 渡辺グループを中心に、機械学習を駆使した多角的な解析を進め、嗅覚センサによるニオイの判別精度に対する各パラメータの影響を定量的に調べた。

このような計測技術と情報処理の密接な連携によって、嗅覚センサの社会実装に向けた重要な成果が複数得られた。まず、嗅覚センサ信号と各種パラメータとの定量的な相関の抽出に向けたモデルケースとして、香りの異なる様々なお酒のニオイと、測定対象のパラメータであるアルコール度数との相関を抽出し、その定量推定を試みた。その結果、予測誤差の最小化を指針としてセンサの感応膜を選択することによって、高い精度で特定パラメータを定量推定可能であることが明らかとなった。さらに、より実アプリケーションに近いニオイサンプルに対しても、高精度な定量推定が可能であることを実証することに成功した。これらの結果を受けて、単純な判別だけでなく、このような回帰分析を含む各種の機械学習分析をクラウド上で実行可能な解析プラットフォームを開発し、さまざまなサンプルで高精度定量予測モデルを簡単に作成し、その予測精度を検証することが可能となった。また、各種ニオイサンプルに対して構築したセンサ信号ライブラリを定量的に検証していくことによって、MSS を含むナノメカニカルセンサでは、測定対象ガスの分圧が感度を決定づける因子となることが確認され、また測定対象ガスや測定環境の湿度が、判別精度に大きな影響を与えることが明らかとなった。特に湿度の影響に関しては、多くのアプリケーションで、当初の予想を大きく上回る影響があることが確認された。そのため、この湿度の揺らぎをハードウェア・ソフトウェアの両面において抑制することを試みた。まず感応膜においては、特に疎水性の材料に着目し、高湿度環境下でも高い感度が維持できる感応膜の開発に成功した。またシステムレベルにおいても、湿度揺らぎを抑制するフィルターの開発に成功した。情報処理のアプローチとしては、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「時定数スペクトル法」を開発し、さらにそこから特定成分のスペクトルを除去する手法の開発に成功したことにより、湿度の影響を抑制した解析を行うことが可能となった。これらの手法を適用することによって、多くアプリケーションで要求される高湿度環境下においても、ニオイの高精度識別が実現することが確認された。一方で、嗅覚センサの社会実装を妨げる大きな要因となっているポンプやバルブなどの周辺装置を排した測定方法の実現に向けて、制御工学の概念である伝達関数を導入した解析方法の検証を大阪大学・鷺尾教授と共同で研究を進めた。特に、ガスの入力に本質的に依存しない伝達関数比に着目することによって、センサ素子をニオイ源の近くにかざすだけでニオイの識別を可能にする「フリーハンド測定」を実現した。

以上、最先端の計測技術を駆使して測定された膨大なデータを、最先端の情報処理技術によって解析することにより、嗅覚センサの社会実装に向けた技術的な指針を確立しただけでなく、

浮かび上がってきた課題に対して有効な、新たな計測／情報処理技術を開発することにも成功した。本研究によって、現在の嗅覚センサ技術で、どういったアプリケーションが実現可能であるか、また実現不可能なアプリケーションに対しては、何がネックとなるかについて、概ね予測可能となり、その理由を科学的に説明することが可能となった。

(2) 顕著な成果

<優れた基礎研究としての成果>

1.

概要:

全自動測定装置を独自に開発し、当該分野における世界最大級の規模となる 100 万通りを超える嗅覚センサ信号を集めたメガライブラリを構築した。この膨大なデータを、機械学習などを駆使して多角的に解析することによって、ナノメカニカルセンサに基づく嗅覚センサの感度を決める因子を明らかにした。さらに各種測定条件の影響を網羅的に検証し、なかでも湿度が支配的な影響を与える因子であることを明らかにした。

2.

概要:

ニオイという多成分混合系から特定の情報を抽出し、さらにその高精度定量予測を実現するハード・ソフト双方向開発の指針を確立した。この実証例として、嗅覚センサ素子(MSS)、機能性感応膜材料(独自開発ナノ粒子)、および機械学習を融合して、各種アルコール飲料から、アルコール度数の定量予測を行った。予測誤差の最小化を指針とした感応膜材料の最適化を行うことで、高精度定量予測が実現することを実証しただけでなく、三成分の高精度同時定量予測も可能であることを示した。

3.

概要:

MSS を含むナノメカニカルセンサの動的挙動に対して、粘弾性的性質に基づく解析モデルを構築した。この解析モデルによって、先行研究では必須であった数値計算を用いることなく、感応膜へのガスの拡散の時定数、感応膜の粘弾性緩和の時定数、および粘弾性体の緩和／瞬間弾性率など、シグナルを決定づける主なパラメータを簡単に抽出し、シグナルを再現することが可能となった。また、これらのパラメータは試料ガスと感応膜の組み合わせによって大きく異なる事を確認し、最適な感応膜の組み合わせを科学的に予測可能にした。

<科学技術イノベーションに大きく寄与する成果>

1.

概要:

嗅覚センサ信号の解析に、制御工学の概念である伝達関数を導入し、嗅覚センサの在り方を変える画期的な解析方法を確立した。特に、MSS などの微小なセンサ素子アレイでは、ガスが入力が各チャンネルで同一であると見なせる事に着目し、世界初となるガスの入力に本質的に依存しないニオイ識別が可能となった。これによって、従来の嗅覚センサで必要とされていたポンプやバルブなどを必要とせず、センサ素子をニオイ源の近くにかざすだけでニオイの識別を可能にする「フリーハンド測定」を実現した。

2.

概要:

嗅覚センサに有効な感応膜材料の開発指針を明らかにし、さらに感応膜材料となる固体材料のパターン認識を実現する新たな解析方法を確立した。さまざまなタイプの感応材料を作製し、それらの材料特性とセンサシグナルとの関係を網羅的に調べることで、基本的感度特性を与えるマトリックス材料と、化学的選択性を与える感応材料との組み合わせが有効であることを確認した。さらに、通常ガスセンサに対する逆転の発想から、ガスをプローブとすることにより、固体材料をパターンで識別可能であることを実証した。

3.

概要:

嗅覚センサシグナルに大きな影響を与える因子である湿度に対して、ハードウェア・ソフトウェアの両面からその影響を抑制する方法を開発した。特に、大抵のセンサシグナルは、測定対象ガスの感応膜への吸脱着特性を反映した複数の指数関数の和で表現可能であるという点に着目した「時定数スペクトル法」を新たに開発し、そこから特定成分のスペクトルを除去する方法を確立した。これらの手法を適用する事により、高湿度サンプルにおいても高精度判別が可能となることを実証した。

<代表的な論文>

Gaku Imamura, Kota Shiba, Genki Yoshikawa, Takashi Washio, "Free-hand gas identification based on transfer function ratios without gas flow control," Scientific Reports 9, 9768 (2019).

Kosuke Minami, Gaku Imamura, Takahiro Nemoto, Kota Shiba, Genki Yoshikawa, "Pattern recognition of solid materials by multiple probe gases", Materials Horizons, (2019), 6, 580-586.

Kota Shiba, Ryo Tamura, Gaku Imamura, and Genki Yoshikawa, "Data-driven nanomechanical sensing: specific information extraction from a complex system", Scientific Reports 7, 3661-1-3661-12 (2017).

§ 2 研究実施体制

(1) 研究チームの体制について

① 「吉川」グループ

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 センサ・アクチュエータ研究開発センター グループリーダー)

研究項目

- ・全自動測定システムの構築と網羅的データ収集
- ・感応膜材料の開発と最適化
- ・嗅覚センサの動作原理の解明
- ・実アプリケーションに向けた計測技術の研究開発

② 「渡辺」グループ

主たる共同研究者: 渡辺 純子 (日本電気(株)データサイエンス研究所 主幹)

研究項目

- ・データサーバーとクラウド解析プラットフォームの開発
- ・数理モデルの開発
- ・特徴量設計とニオイ判別精度の予測
- ・実アプリケーションに向けた解析技術の開発

③ 「有賀」グループ

主たる共同研究者: 有賀 克彦 (物質・材料研究機構 WPI-MANA 主任研究者)

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
- ・特定アプリケーションのに向けた特殊材料の開発

(2) 国内外の研究者や産業界等との連携によるネットワーク形成の状況について

- ・伝達関数を中心とした基礎研究に関しては、大阪大学・鷺尾隆教授との密接な連携を継続的に推進しており、複数の共著論文や、共同発明の特許を申請している。
- ・機械学習による解析については、東京大学の津田宏治教授のグループと連携を進めており、共著の論文を発表している。
- ・サンプル数増加に対する予測精度向上の可能性については、同領域・さきがけ研究者の中西義典助教との議論を進めている。
- ・MSS を軸とした一連の嗅覚センサの技術については、「MSS アライアンス」や「MSS フォーラム」などを通じて、産学官連携を進めている。