

機械学習を利用した嗅覚センサー研究 ～ニオイのデジタル化～

田村亮

物質・材料研究機構 国際ナノアーキテクトニクス研究拠点/東京大学大学院新領域創成科学研究科

機械学習を利用した材料研究であるマテリアルズ・インフォマティクス (MI) 研究が注目を集めて久しい。機械学習を利用することで、新しい材料の開発、測定・シミュレーション手法の高度化が実現されてきた。本講演では、材料科学分野でどのように機械学習が力を発揮してきたのか、嗅覚センサー研究への機械学習手法適用を軸に、発表者が行ってきた MI 研究を紹介する。

本講演のメインテーマである嗅覚センサー研究では、機械学習を利用し、「ニオイ」をどのようにデジタル化し、ニオイを認識・理解できるかについて研究を行ってきた。ニオイは一般的に数百から数千にもおよぶ化合物からなる複雑な混合気体である。そのため、個々のニオイからその構成成分や濃度など特定の情報を定量的に抽出するには、ガスクロマトグラフィーなどの大型装置によって個々のガス成分を分離して解析する必要がある。一方で、このような大型装置を利用せずに、ニオイを分析するために、嗅覚センサーと称されるツールの研究開発が世界中で進められている。この技術では、多くのニオイサンプルを嗅覚センサーで測定し、それらの応答を総合的に解析することで、個々のニオイサンプルの構成成分や濃度を抽出することなく、ニオイの認識・理解を目指す。つまり、多くのデータがあり、そこから情報を抽出するデータ解析手法が必要であり、まさに機械学習の出番である。目的に応じて適した機械学習手法を利用・開発する必要がある、いくつかの研究を行ってきた。まず、教師あり学習（回帰や分類が代表的な手法）を利用することで、ニオイの定量情報抽出手法を開発した。超高感度小型センサ素子 (MSS)、機能性感応材料を用いることでニオイを電気信号に変換する。そして、電気信号と各サンプルの定量情報（果実の成熟度や健康状態の数値化など）を機械学習で紐付けすることで、未知のニオイから定量情報を予測することができる。その一例として、香りの異なる様々なお酒のニオイから、アルコール度数という特定情報を高い精度で推定することに成功した [Scientific Reports 7, 3661 (2017)]。さらに、機械学習結果を利用して最適な機能性感応材料を選択することで、水、エタノール、メタノールの濃度を正確に推定できることも示した [ACS Sensors 3, 1592–1600 (2018)]。また、教師なし学習（次元圧縮やクラスタリングが代表的な手法）を利用することで、限られたニオイサンプルの中で、基準となるニオイである擬原臭を選定する技術を開発した。機械学習を利用したエンドポイント検出手法により、収集したニオイサンプルの電気信号から「他から外れたニオイ」を選定する。それを基準とみなすことで、様々なニオイを擬原臭の混合比で表すことが可能となる。例えば、12 種類の調味料を対象とした場合、ナンプラー、料理酒、純水が擬原臭として選定され、醤油や焼肉のたれといった他の調味料は、これらの混合比を変えることで表現される [Scientific Reports 11, 12070 (2021)]。このように、機械学習を利用して、ニオイをデジタル化することができれば、ニオイの分解・合成が可能となり、ニオイの記憶、学習、送信、理解、さらには見える化も促進できると考えている。

略歴



2012年東京大学大学院理学系研究科博士課程修了、博士（理学）。物質・材料研究機構 ICYS-SENGEN 研究員、同機構研究員を経て、2018年より同機構、国際ナノアーキテクトニクス研究拠点主任研究員。2017年より東京大学大学院 医療情報生命専攻講師を兼任。2018年より独立行政法人 情報処理推進機構 未踏ターゲット事業 プロジェクトマネージャーを担当。専門は、統計力学、マテリアルズ・インフォマティクス。