

同時発表：

筑波研究学園都市記者会（資料配布）

文部科学記者会（資料配布）

科学記者会（資料配布）



お酒のニオイからアルコール度数の推定に成功

～超高感度小型センサと機械学習を融合 ニオイから様々な情報の数値化が可能に～

配布日時：平成29年6月20日14時

国立研究開発法人 物質・材料研究機構

概要

1. 国立研究開発法人物質・材料研究機構（NIMS）国際ナノアーキテクトニクス研究拠点（WPI-MANA）ナノメカニカルセンサグループの柴弘太研究員、WPI-MANA 量子物性シミュレーショングループの田村亮研究員、若手国際研究センター（ICYS）の今村岳 ICYS-NAMIKI 研究員、WPI-MANA ナノメカニカルセンサグループの吉川元起グループリーダーは、超高感度小型センサ素子（MSS）⁽¹⁾、機能性感応材料⁽²⁾、および機械学習⁽³⁾を組み合わせることで、ニオイからアルコール度数を推定することに成功しました。本手法は、様々な情報を含む複雑な「ニオイ」から、特定の情報を簡単かつ高精度で定量的に抽出する汎用的な手法として応用が可能であり、果実の成熟度や健康状態の数値化など、様々な分野での利用が期待されます。

2. 「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ことが知られています。そのため、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比較的大きな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りました。

3. 今回、研究チームは、超高感度小型センサ素子（MSS）、機能性感応材料、および機械学習という3つの要素技術を融合して、ニオイから特定の情報を数値化する新たな手法を開発しました。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ました。具体的には、まずニオイ分子を吸着する様々な材料をMSSの表面に塗布し、ビールやウォッカなど各種のお酒のニオイを吹きかけて、それぞれのお酒に特有の電気信号のパターンを記録します。この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使い、機械学習によって、ニオイの電気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ました。さらに、予測精度が改善されるように、機械学習で得られる情報から逆算して、よりお酒のニオイに適した感応材料の選定や、電気信号パターンのどこに注目するか、抽出する特徴量の最適化を行いました。このように双方向的に最適化されたハード（センサ+感応材料）とソフト（予測モデル）を利用することで、学習に使用していないお酒（赤ワイン、芋焼酎、ウイスキー）のアルコール度数を高い精度で推定することに成功しました。



4. 本手法は、アルコール度数だけでなく、様々な分野でニオイから簡単かつ高精度に特定情報を抽出できる可能性があります。例えば、果実の成熟度や健康状態などを数値化してニオイと関連付けることで、それらを定量的に推定できる可能性があります。この成果に基づいて、今後は食品や農産物の品質管理、健康チェック、環境モニタリングなど一般社会や産業界への展開も推進していきます。

5. 本研究は、国立研究開発法人科学技術振興機構（JST）CREST（JPMJCR1665）、科学研究費補助金基盤研究（B）（課題番号: 15H03588）、科学研究費補助金若手研究（B）（課題番号: 16K21602）、JSTのイノベーションハブ構築支援事業「情報統合型物質・材料開発イニシアティブ」の研究の一環として行われました。

6. 本研究成果は、Scientific Reports 誌オンライン版に2017年6月16日（現地時間）に掲載されます。

研究の背景

「ニオイ」は我々の日常生活においてもありふれたものですが、その実態は、一般に数百から数千種類もの化合物から構成される、複雑な混合気体であることが知られています。ニオイを構成する「ニオイ分子」とも呼ばれる化合物群は数十万種にもものぼるため、これらが様々な濃度で混ざり合って形成されるニオイの種類は、ほぼ無限にあると言えます。このように多種多様なニオイには、その発生源に関する実に多くの情報が含まれていますが、その複雑さ故にニオイの中から特定の情報を狙って抽出することは容易ではありません。事実、ニオイの分析に用いられる代表的な従来手法は、質量分析計を備えたクロマトグラフィーのような比較的大きな特殊分析装置を使ったものであり、詳細な情報が得られる反面、その取扱いや結果の解釈には専門的な知識や経験が欠かせませんでした。一方で、嗅覚センサと称されるニオイ分析のためのツールの研究開発も、これまで世界中で進められてきました。一般的な嗅覚センサは、様々な感応材料等を用いることで、各種のニオイ分子に対して異なる応答特性を示す複数個のセンサを準備し、調べたいニオイに対する各センサの応答を総合的に解析することで、ニオイを定性・定量しようというものです。これらの多くは、感度や多様性、動作条件、デバイスサイズ、解析手法などの観点で研究レベルを脱しておらず、いくつかの市販品に関しても、非常に高価であるだけでなく、総合的なシステムとして誰もが手軽に使えるレベルには未だ達していません。我々が毎日必ず接する「ニオイ」を、一般消費者レベルでも簡単に分析することができれば、諸産業のみならず、我々の日常生活までもが大きく変革されることになると考えられます。

研究内容と成果

本研究では、センサ素子、感応材料、解析手法という、嗅覚センサに必須のハードとソフトの両面を最適化することで、ニオイから手軽に特定の情報を抽出することに成功しました。ここではデモンストレーションとして様々なお酒を用意し、そのニオイから「アルコール度数」という特定情報の抽出に挑戦しました(図1)。センサ素子は、構造最適化により同種のものと比較して100倍以上の超高感度を示し、かつモバイル実装可能な、膜型表面応力センサ(Membrane-type Surface stress Sensor; MSS)を4つ並列化して使用しました。また、MSS上に塗布してニオイ分子を吸着させる感応材料としては、独自に開発した、表面特性を制御可能な無機酸化物系ナノ粒子を4種用いました。実際の実験では、アルコール度数の異なる32種類の液体試料を準備し、それらのニオイを、並列化したMSSにより順次測定し、それぞれの応答パターンを得ました。ここで、応答パターンを特徴付ける4つの特徴(傾きやピーク値)を定義し、これらとアルコール度数を対応付けたデータセットを用意しました。このデータセットをトレーニングデータとし、カーネルリッジ回帰⁴⁾という機械学習の手法により、応答パターンからアルコール度数を推定するための予測モデルを構築しました。さらに、予測性能が向上するように、応答パターンの特徴を最適化しました。

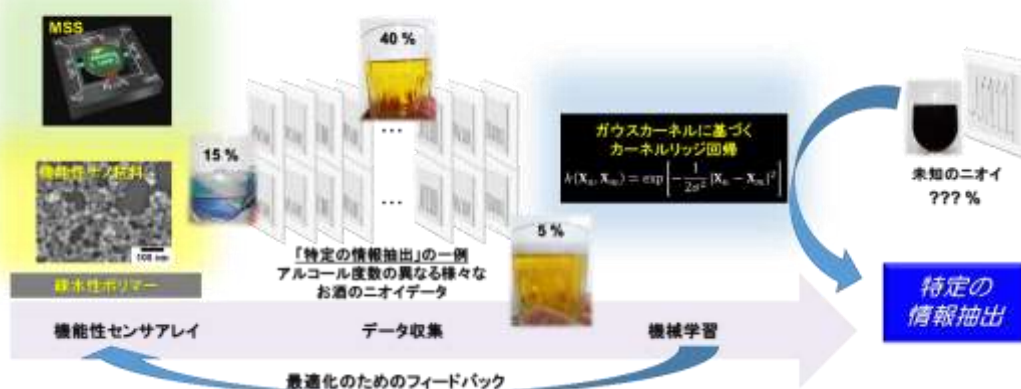


図1 お酒のニオイからアルコール度数を推定するための流れ。様々な材料を塗布したセンサによるニオイ計測と機械学習を繰り返すことで、材料の最適化と、それに伴う高精度推定が可能となります。

それぞれの感応材料に対して予測モデルを構築したところ、アルコール度数の推定には、水に応答しにくい2種のナノ粒子材料を用いることが重要であるという知見を得ることができました。そこで、水に対して大きな応答を示す親水性のナノ粒子2種の代わりに、疎水性ポリマーを2種類選び、新たに感応材料として採用しました。こうして4種類の疎水性感応材料が塗布されたMSSを用いて測定を行い、機械学習によって予測モデルを構築しました。この予測モデルを用いてアルコール度数の推定を試みたところ、きわめて高い精度でアルコール度数が決定できることが確認されました(図2)。このようにデータ科学的手法を用いることによって、複雑な応答パターンから特定の情報を抽出できるだけでなく、より高精度な情報抽出を可能にする感応材料に関する情報も得られることが確認されました。これまでも、複数のセンサとデータ科学的手法とを組み合わせることによって定量的な情報を抽出するという研究はありましたが、本研究では、センサ素子と感応材料というハードウェアにおいて、モバイル化やIoTへの展開につながる最新の独自技術を利用し、さらにこういったハードとソフトの双方向的な最適化を実証したことが、多様な用途展開を考える上で重要であると捉えています。

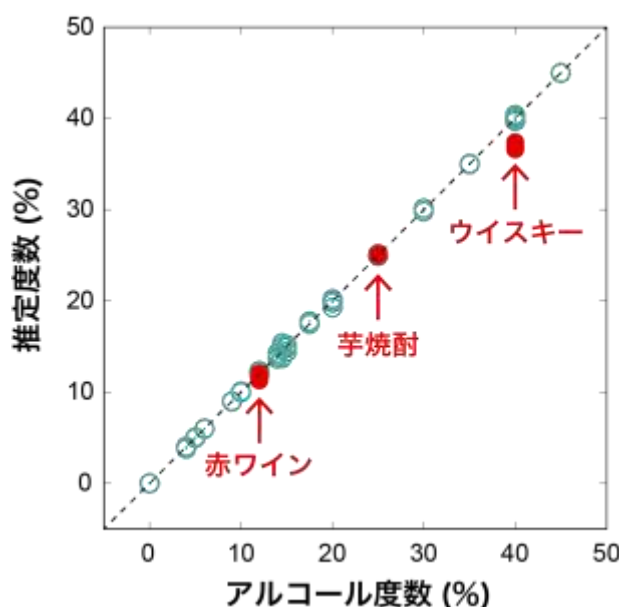


図2 実際アルコール度数と予測モデルによって推定された推定度数の比較。緑の点は32種類の学習に使用した液体試料であり、赤点は学習に使用していないお酒(赤ワイン、芋焼酎、ウイスキー)の推定結果をそれぞれ表します。

アルコール度数はエタノール濃度により定義されています。そこで、アルコール度数と応答パターンの間に単純な比例関係が存在するか確認してみました。その結果、同じアルコール度数であっても、エタノール以外の様々なニオイ分子の影響によって応答パターンはかなり異なっており、アルコール度数と応答パターンの間に単純な相関がある訳ではないことが分かりました(図3)。そのため、このようなアルコール度数と応答パターンの背後にある非線形な相関関係に着目して、多数の応答パターンデータを機械学習によって的確に解析したことが本手法の成功の鍵であったと言えます。今回予測モデルを構築する際に使用した機械学習手法は比較的シンプルな回帰手法であり、データ科学分野が日進月歩であることを踏まえれば、他の手法を採用することでさらなる精度の向上も期待できます。

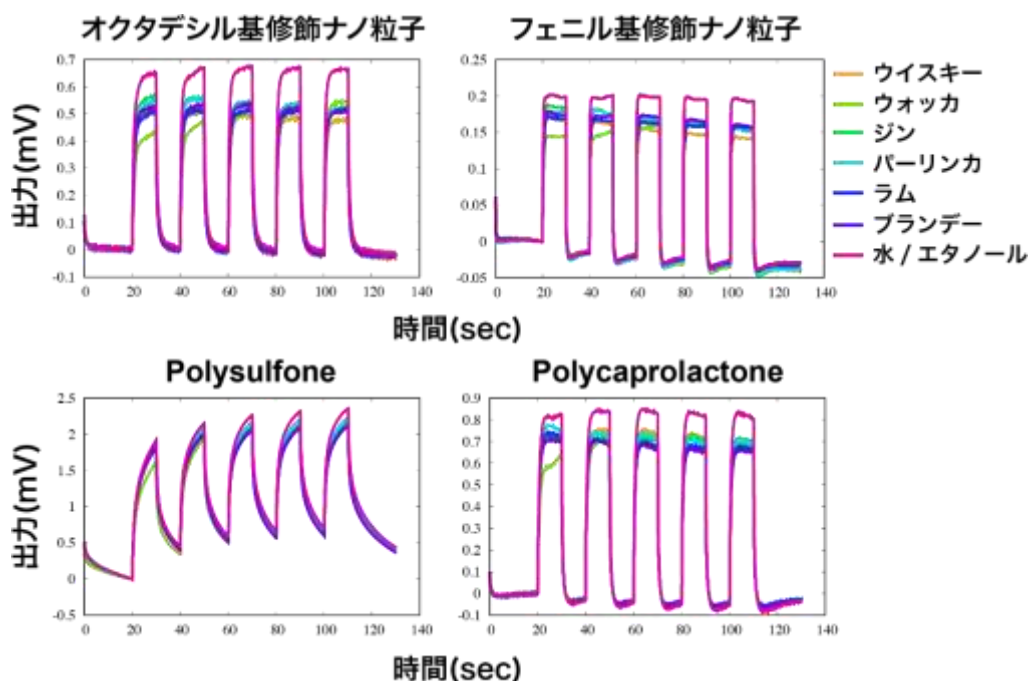


図3 アルコール度数が全て同じ40%である7種類のサンプル（ウイスキー、ウォッカ、ジン、パーリンカ、ラム、ブランデー、水/エタノールの混合溶液）の応答パターン。オクタデシル基修飾ナノ粒子及びフェニル基修飾ナノ粒子は疎水性ナノ粒子であり、ポリスルホン (Polysulfone) 及びポリカプロラクトン (Polycaprolactone) は疎水性ポリマーです。同じアルコール度数であっても、応答パターンが異なることが確認できます。

今後の展開

今回は、ニオイから特定情報を抽出するというコンセプトを実証するために、モデルサンプルとしてお酒を用いてアルコール度数の推定を行いました。本手法は基本的にどのようなニオイに対しても適用することができる汎用的な手法です。例えば食品の成熟度や鮮度とニオイを関連付けることで、品質管理などを行ったり、あるいは、将来的には、ガンの進行度合いを示す「ステージ」に代表されるような疾病の程度とニオイとを関連付けることで、呼気から病気の程度を診断したりといった応用が期待されます。その他、環境モニタリングや防災など、多用途への応用可能性についても検証予定です。

さらに、機械学習の結果として選定される最適材料は、材料を専門に扱う研究機関であるNIMSが既に保有している材料群から選定して供給できる可能性があります。あるいは、新規に材料設計して対応することも可能です。今後は、このようにデータ科学に基づいた材料の設計や探索を行う“マテリアルズインフォマティクス”を最大限利用して本研究を加速させていきます。並行して、産学官が連携して嗅覚センサの業界標準化を目指している「MSS アライアンス⁽⁶⁾」と協働することで、様々な産業への応用可能性についても速やかに検討を進め、近い将来の社会実装を目指します。

掲載論文

題目：Data-driven nanomechanical sensing: Specific information extraction from a complex system

著者：Kota Shiba, Ryo Tamura, Gaku Imamura and Genki Yoshikawa

雑誌：Scientific Reports

掲載日時：2017年6月16日（現地時間）

用語解説

(1) 超高感度小型センサ素子 (MSS)

MSS は Membrane-type Surface stress Sensor (膜型表面応力センサ) の略称であり、2011 年に論文発表されたセンサ素子を指します。従来型のセンサと比較して超高感度、小型、低コストなど多くの特長を有しており、モバイル嗅覚センサを実現する上で重要な要素技術です。

(2) 機能性感応材料

ニオイを構成する多様な成分をカバーするためには、センサと様々な材料とを組み合わせる必要があります。ここでは、無機、有機、複合、生体材料など、特性の異なる多種類の材料群を総称して、機能性感応材料と表現しています。

(3) 機械学習

多数のデータ集合を入力してコンピュータによる解析を行い、そこに潜むパターンや傾向を見つけ出すことを指します。ここで見つけたパターンや傾向を未知データに当てはめることで、判断や予測を行うことができます。

(4) カーネルリッジ回帰

カーネル関数を利用した回帰分析のことです。与えられたデータ集合に対して、説明変数（本研究では、応答パターンを特徴付ける特徴）と目的変数（アルコール度数）の関係式を導出することを回帰分析と呼びます。本研究では、カーネル関数として正規分布を使用しました。

(5) MSS アライアンス

世界初となる IoT 嗅覚センサの業界標準確立に向け、共同で技術開発を進める活動体の名称です。

<http://www.nims.go.jp/news/press/2015/09/hdfqf1000006v15h-att/p201509290.pdf>

本件に関するお問い合わせ先

(研究内容に関すること)

国立研究開発法人 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 (WPI-MANA)

ナノシステム分野 ナノメカニカルセンサグループ

研究員 柴 弘太 (しば こうた)

TEL: 029-860-4603

E-mail: SHIBA.Kota@nims.go.jp

国立研究開発法人 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 (WPI-MANA)

ナノセオリー分野 量子物性シミュレーショングループ

研究員 田村 亮 (たむら りょう)

TEL: 029-860-4948

E-mail: TAMURA.Ryo@nims.go.jp

(報道・広報に関すること)

国立研究開発法人 物質・材料研究機構 経営企画部門 広報室

〒305-0047 茨城県つくば市千現 1-2-1

TEL: 029-859-2026, FAX: 029-859-2017

E-mail: pressrelease@ml.nims.go.jp