

嗅覚センサーと機械学習でニオイのデジタル化と見える化に挑む

～「擬原臭：限られたサンプルの中で基準となるニオイ」を選ぶ～

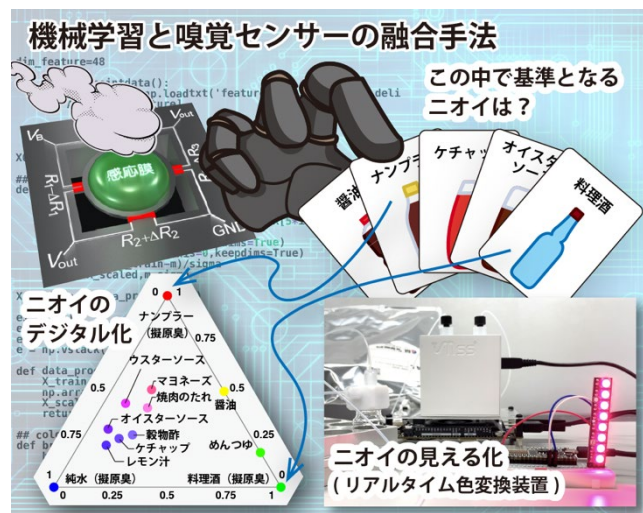
配布日時：2021年6月21日14時

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）は、限られたニオイサンプルの中で基準となるニオイ「擬原臭（ぎげんしゅう）」を選定する技術を嗅覚センサーと機械学習を利用し開発しました。この擬原臭という新概念を導入することで、様々なニオイを擬原臭として選定された数種類のニオイの混合比で表す「デジタル化」が可能となります。これにより、色のように、ニオイも分解・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技術です。
2. 光の3原色や味の5原味に対応する、嗅覚における原臭の定義を試みる研究は古くから行われてきました。しかしながら、現在でも科学的に原臭を決めることはできていません。それは、視覚や味覚に限られた種類の受容体（刺激を情報に変換するもの）で構成されているのとは異なり、人間の嗅覚には約400種類という膨大な受容体があるため、基準が定められないことが主な原因です。
3. 研究チームは、世の中にある全てのニオイの中から原臭を定義するのではなく、限られたニオイサンプルの中から基準となるニオイ（ここではこれを「擬原臭」と呼びます）を選定する技術を考案しました。具体的には、収集したニオイサンプルをNIMSが中心となって開発している超高感度・小型嗅覚センサー：膜型表面応力センサー（MSS）で測定します。その測定結果を機械学習で解析することで、ニオイサンプルの中からいくつかの「他から外れたニオイ」を探し出し、それを基準とみなします。これにより、様々なニオイを擬原臭の混合比で表すことができます。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ます。
4. ニオイのデジタル化によって、嗅覚を他の感覚に変換することも可能です。例えば、擬原臭それぞれに色を与えることで、様々なニオイをそれらの混合色で表現でき、ニオイの「見える化」が実現できます。そのデモンストレーションとして、考案技術を利用し、ニオイをリアルタイムで色に変換する装置を開発しました。

5. 本研究は、NIMS 国際ナノアーキテクトニクス研究拠点（WPI-MANA）の田村亮主任研究員、機能性材料研究拠点（RCFM）の柴弘太主任研究員、若手国際研究センターの南皓輔 ICYS 研究員、RCFM の吉川元起グループリーダー、統合型材料開発・情報基盤部門（MaDIS）の津田宏治 NIMS 招聘研究員、MaDIS の許含笑研修生（研究実施当時）、WPI-MANA の北井孝紀研修生（研究実施当時）、RCFM の中津牧人研究業務員（研究実施当時）によって実施されました。



6. 本研究成果は、Scientific Reports 誌オンライン版に2021年6月9日（日本時間）に掲載されました。

研究の背景

視覚では、「赤色」「緑色」「青色」が3原色であり、これらを異なる比率で混ぜ合わせるだけで、あらゆる色を作成することができます。味覚に関しても、「甘味」「酸味」「塩味」「苦味」「うま味」が5原味と認識されており、これらを混ぜ合わせることで様々な味を表現することができます（視覚と異なり、味覚に対しては、新たな受容体¹⁾が発見されることがあり、原味の種類はこれらより増える可能性があります。）。一方で、視覚や味覚に限られた種類の受容体で構成されているのとは対照的に、人間の嗅覚には約400種類という膨大な受容体が存在すると言われていています。そのため、ニオイの基となる原臭を探し当てることは非常に困難であり、この難解な問題を解決するための研究が世界各所で行われてきました。ギリシャ時代のアリストテレスによる7分類（甘い、酸っぱい、つんとくる、豊かな、脂肪、収斂性、糞様）にはじまり、近世の植物学者リンネによる7分類（芳香性、フラグラント、麝香、にら臭、尿臭、悪臭、腐敗臭）、最近ではドイツの心理学者ヘニングによる6原臭による嗅覚プリズム（薬味臭、花香臭、果実臭、樹脂臭、焦臭、腐敗臭）や、イギリスの生化学者アムーアによる7原臭（樟脳臭、刺激臭、エーテル臭、花香臭、ミント臭、ムスク臭、腐敗臭）などが知られています。日本でも、江戸時代の本草学者・儒学者である貝原益軒による5臭（こうばし、くさし、こがれくさし、つちくさし、くちくさし）や、化学者の加福均三による8臭説（ヘニングの6原臭に、生臭い、酸っぱいを追加）など、多くの説が提唱されてきました。しかしながら、世の中に存在する全てのニオイを、このように少数の原臭では表現できないことが確認されており、現在でも原臭を決めることは嗅覚分野における最も重要な課題の一つとなっています。

研究内容と成果

本研究では、世の中にある全てのニオイの中から原臭を定義するのではなく、限られたニオイサンプルの中から基準となるニオイ（ここではこれを「擬原臭」と呼びます）を選定する技術を考案しました。この技術ではまず、対象とするニオイサンプルを用意します。そして、それぞれのニオイサンプルを NIMS が中心となって開発を進めている膜型表面応力センサー（MSS）²⁾ を利用し電気信号に変換します。ここでは、12個の性質の異なる受容体材料が塗布されたセンサーチャンネルを持つ MSS を使用しました。各電気信号から、物理化学的な知識に基づいて4つの重要な特徴量³⁾を抽出します。例えば、図1の電気信号に示す、A点とB点の間の傾きは、ニオイの受容体への吸着に対する情報を、C点とD点の間の傾きは脱着の情報をそれぞれ持っているため、これらを重要な特徴量として利用します。これにより、それぞれのニオイを48次元（=12チャンネル×4つの特徴量）のベクトルに変換することができます。この高次元空間において、他のニオイとは大きく外れたニオイサンプルを見つけ出すために、機械学習を用いたエンドポイント検出手法⁴⁾を利用します（図1）。このエンドポイント検出手法により、他から外れたニオイサンプルをランキング（擬原臭ランキング）として得ることができます。このランキングの上位いくつかのニオイを、限られたニオイサンプル中の基準となるニオイとして選択し、これを擬原臭に選びます。擬原臭以外のニオイは、電気信号から抽出された高次元ベクトルを解析することで、高い精度で擬原臭の混合臭として表すことができます。これにより、ニオイの分解・合成が可能となります。

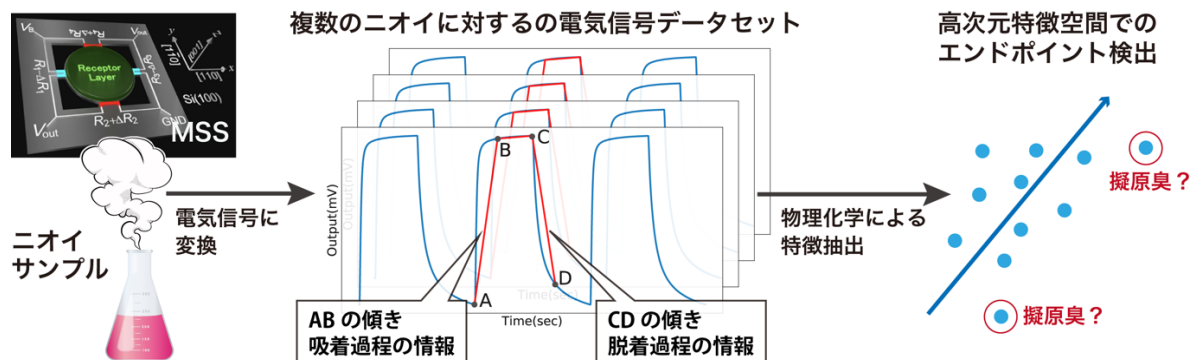


図1 擬原臭を選択するための流れ。ニオイサンプルをMSSで測定し、電気信号に変換します。電気信号からさらに物理化学的な知識を利用し、高次元の特徴量を抽出します。例えば、ABの傾きはニオイの吸着過程を、CDはニオイの脱着過程を表す特徴量になります。機械学習によるエンドポイント検出手法を用いることで、他から外れたニオイサンプルをランキングとして評価します。上位いくつかのニオイサンプルを擬原臭として選択します。

考案技術のデモンストレーションのために、調味料に対する検証実験を行いました。具体的には、ケチャップ、マヨネーズ、レモン汁、オイスターソース、ウスターソース、料理酒、めんつゆ、焼肉のたれ、穀物酢、醤油、ナンプラーの 11 種類の調味料と、純水を含む 12 種類の液体試料を用意しました。これらのニオイを MSS で測定した結果を図 2(a)に示します。このように試料によって異なる形状の電気信号が測定されます。次に、機械学習によるエンドポイント検出を行いました。その結果、擬原臭ランキングが図 2(b)のようになりました。ここでは、このランキングのうち上位 3 つを調味料のニオイの基準である擬原臭として選定し、ナンプラー、料理酒、純水が擬原臭となりました。そして、他の調味料のニオイをこの 3 つ擬原臭の混合臭で表す場合の混合比をプロットしたものが図 2(c)になります。ここで強調しておきたい点として、擬原臭はエンドポイントのランキングから目的に応じて幾つ選択しても良い点です。ここで多くの擬原臭を選択すれば、ニオイの高次元分析を行うことができます。

各ニオイの混合比が評価できれば、ニオイのデジタル化が実現できます。このデジタル化により、嗅覚を他の感覚に変換することもできます。例えば、擬原臭それぞれに色を与えることで、それらの色の混合色として様々なニオイを表現することができ、ニオイの見える化が実現できます。これをデモンストレーションするために、調味料の擬原臭であるナンプラー、料理酒、純水の色としてそれぞれ、赤色、緑色、青色を割り当てました。そして、他の調味料をこの 3 色の混合色として表した色が図 2(b)、(c)に示した色になります。

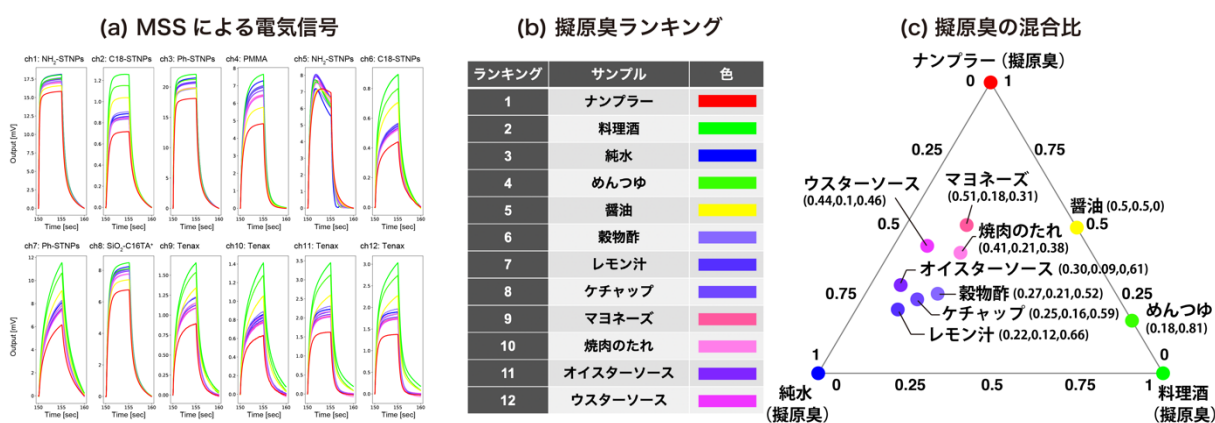


図 2(a) MSS によって測定された 12 種類の調味料の電気信号パターン。(b) 機械学習を用いたエンドポイント検出による擬原臭ランキング。上位 3 つを擬原臭とすると、ナンプラー、料理酒、純水が選択されます。また、ナンプラーを赤色、料理酒を緑色、純水を青色とした際の、他の調味料の色も示しています。(c) 上位 3 つを擬原臭とした際のその他の調味料の混合比。値は、ナンプラー：料理酒：純水の比率をそれぞれ表しています。醤油とめんつゆのニオイはナンプラーと料理酒を混ぜ合わせることで表現できることを示しています。実際にナンプラーと料理酒を混ぜ合わせると、人間の鼻で嗅いだ場合でも、それぞれ醤油やめんつゆに近いニオイになることを確認しています。

あらかじめ擬原臭が決まっている場合、新しいニオイを MSS で電気信号に変換することで、すぐに混合比を評価することができます。つまり、ニオイを測定すると瞬時に色に変換することも可能です。このアイデアを実現するために、小型コンピュータ、MSS モジュール、LED ライトを用いて、図 3 左図に示すようなニオイの色を表示する装置を作製しました。ここでは、調味料を対象とした色変換装置として、擬原臭はナンプラー、料理酒、純水としました。様々な調味料のニオイを測定しリアルタイムで LED に色を出力した結果を図 3 右図に示しました。

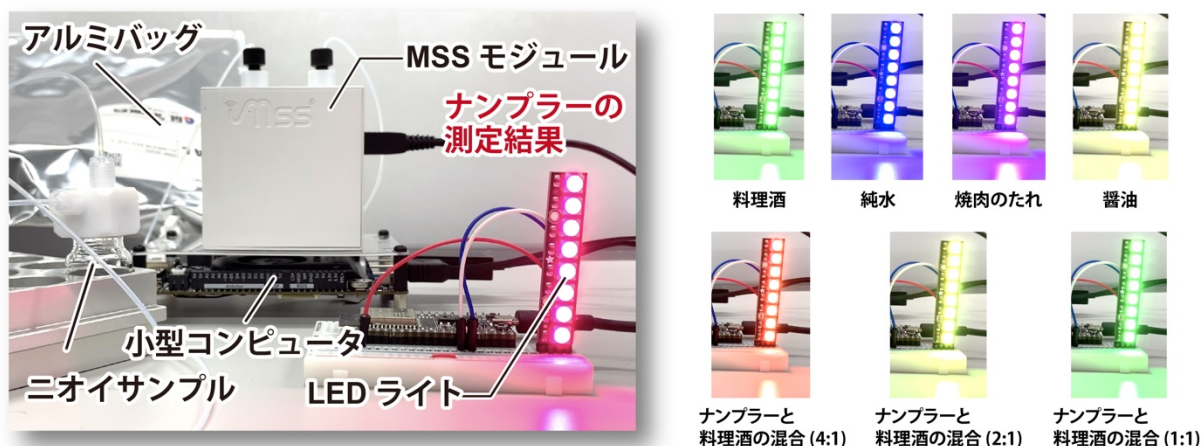


図3 (左図) ニオイの色を表示する装置。ニオイサンプルとしてナンプラーを色変換した結果をLED ライトに出力しています。(右図) 料理酒、純水、焼肉のたれ、醤油、ナンプラーと料理酒の混合サンプル (混合比4 : 1)、ナンプラーと料理酒の混合サンプル (混合比2 : 1) ナンプラーと料理酒の混合サンプル (混合比1 : 1) におけるLED 出力結果。

今後の展開

擬原臭を用いたニオイの分解・合成・見える化は、食品、化粧品、書籍、映画など、様々な分野で応用できる技術であると期待しています。例えば、ニオイと色を対応付けることで、混ざったニオイを直感的に把握しやすくなります。また、ニオイそのものの数値情報を得る技術は確立されていないため、本技術を通してニオイをデジタル化することで、ニオイの記憶、学習、送信、理解なども促進できると考えています。例えば、インターネットでニオイを共有することもできるかもしれません。本研究で提案した擬原臭選定技術は、MSSに限らず、他のセンサーアレイ・嗅覚センサーにも汎用的に使用することができるため、幅広い応用が期待できます。今後は産学官の連携により、様々なニオイサンプルの中から擬原臭を見つけ出し、それを用いたニオイのデジタル化・見える化による応用例を創出していきたくと考えています。

掲載論文

題目：Determination of quasi-primary odors by endpoint detection

著者：Hanxiao Xu, Koki Kitai, Kosuke Minami, Makito Nakatsu, Genki Yoshikawa, Koji Tsuda, Kota Shiba, and Ryo Tamura

雑誌：Scientific Reports **11**, 12070 (2021).

掲載日時：2021年6月9日（日本時間）掲載

用語解説

(1) 受容体

刺激を受け取り、情報として利用できるように変換するもの。視覚、味覚、嗅覚それぞれに対して、受容体が存在している。

(2) 膜型表面応力センサー (MSS)

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

(3) 特徴量

機械学習において、分析する各データの特徴を、定量的に表した数値のこと。

(4) エンドポイント検出手法

空間の外れに位置するデータを見つけ出す手法のこと。エンドポイント(他から大きく外れたデータ)としてのスコアが評価でき、擬原臭を選択する際に、どの程度数のデータ点をエンドポイントとして検出すればいいか決めることができる。

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) ナノセオリー分野 量子物性シミュレーショングループ

主任研究員 田村亮 (たむらりょう)

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

TEL: 029-860-4948

国立研究開発法人物質・材料研究機構 機能性材料研究拠点 電気・電子機能分野 嗅覚センサグループ
主任研究員 柴弘太 (しばこうた)

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

TEL: 029-860-4603

国立研究開発法人物質・材料研究機構 若手国際研究センター
ICYS 研究員 南皓輔 (みなみこうすけ)

E-mail: MINAMI.Kosuke@nims.go.jp

TEL: 029-851-3354

国立研究開発法人物質・材料研究機構 機能性材料研究拠点 電気・電子機能分野 嗅覚センサグループ
グループリーダー 吉川元起 (よしかわげんき)

E-mail: YOSHIKAWA.Genki@nims.go.jp

TEL: 029-860-4749

国立研究開発法人物質・材料研究機構 統合型材料開発・情報基盤部門
NIMS 招聘研究員 津田宏治 (つだこうじ)

(東京大学大学院新領域創成科学研究科 教授)

E-mail: tsuda@k.u-tokyo.ac.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