

## AI 嗅覚センサのニオイ識別過程の可視化に成功

ニオイ分子ごとに最適な感応材料の開発指針を提供

NIMS は、人工嗅覚技術（嗅覚センサ）の実用化に向け、要素技術である化学センサの開発を進めています。今回、説明可能な AI（eXplainable AI: XAI）を用いて、さまざまなニオイ分子をセンサがどのように識別するのかを明らかにすることに成功しました。これにより、ニオイ分子をとらえる感応材料として、どのような材料を使えば高性能な化学センサを作れるかの指針が得られます。この成果は、人工嗅覚の性能向上だけでなく、人間の嗅覚の仕組み理解にも役立つと期待されます。この研究成果は、9月9日に ACS Applied Materials & Interfaces 誌に掲載されました。

### 研究成果の概要

#### ■ 従来の課題

嗅覚は、食の安全、環境モニタリング、医療診断、快適な生活空間の創出など、私たちの暮らしに欠かせない役割を担っています。このように重要な人間の嗅覚を、人工的に再現する人工嗅覚技術（嗅覚センサ）は、複数の化学センサでニオイ分子を検出し、AI（人工知能）がそれを分類・識別する技術です。しかし現在の人工嗅覚は、化学センサの感度や識別精度に限界があり、実用化は十分に進んでいません。この課題を解決するには、人工嗅覚を支える化学センサをさらに高性能化する必要があります。その中心となるのが、ニオイ分子をとらえる「感応材料」の開発です。従来は、どの感応材料がどのニオイ分子に反応しているのか十分に解明されないまま、AI による分類・識別が行われてきました。もし感応材料ごとの反応特性が明らかになれば、識別したいニオイ分子に応じた最適な材料の開発や、より正確なニオイ識別のための「感応材料の選択」が可能となります。

#### ■ 成果のポイント

NIMS は、94 種類のニオイ分子を、14 種類の感応材料を用いた嗅覚センサ「MSS」で測定し、そのデータを説明可能な AI（XAI）で解析しました。XAI は、識別において、AI がデータのどこを見て識別しているかを可視化する手法です。解析の結果、ニオイ分子と感応材料の組み合わせによって、識別に用いられるセンサ応答の重要な部分が異なることがわかりました。たとえば、芳香族分子の識別には、芳香環を有する感応材料が重要であることがわかりました。これにより、識別したいニオイ分子に応じて必要な感応材料を効率的に選別できるようになり、識別が難しいニオイ分子に対応するための感応材料の開発指針も得られます。また、AI が識別だけでなく予測根拠を示すことで、ニオイや嗅覚の仕組みを理解する手がかりも得られます。

#### ■ 将来展望

今回の技術により、感応材料の開発だけでなく、用途に応じて複数ある嗅覚センサの中から最適なものを選ぶことも可能になります。材料開発だけでなく嗅覚センサデバイスの開発にも役立つ

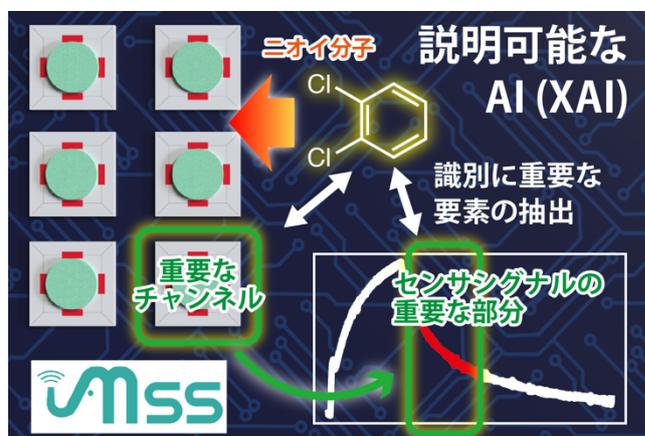


図1：XAIによる嗅覚センサのニオイ識別過程の可視化。ニオイ分子に応じて、どの感応材料が必要で、センサ信号のどこが識別に重要かを抽出できます。

ち、人工嗅覚の実用化が加速するとともに、人間の嗅覚の仕組み理解にもつながります。

## ■その他

- 本研究は、マテリアル基盤研究センターの福井陽大研修生（研究実施当時）、津田宏治 NIMS 招聘研究員、田村亮子 ムリーダー、高分子・バイオ材料研究センターの南皓輔主幹研究員、吉川元起グループリーダーによって実施されました。
- 本研究成果は、2025年9月9日に“ACS Applied Materials & Interfaces”のオンライン版に掲載されました。

## 研究の背景

私たちの身の回りには、食べ物や花の香り、生活空間の空気など、さまざまなニオイがあふれています。ニオイは、食品の安全性や農畜産物の品質、環境の変化、医療や健康状態の把握など、私たちの暮らしや産業に深く関わっています。そのため「ニオイを正しく感じ取り、分析する技術」を人工的に実現しようとする研究が世界中で進められています。人間や動物の鼻は、数十万種類以上もの化合物をニオイとして感じ取ることができるとされています。これは、約 400 種類存在する「嗅覚受容体（感応材料に対応）」を持つ「嗅神経細胞（化学センサに対応）」によってニオイ分子をとらえ、さらに「嗅球（きゅうきゅう）」と呼ばれる脳の一部で、ニオイ分子の特徴をマッピングする高度な仕組みを備えているからです。この仕組みの解明は、私たちがどのようにニオイを感じ取っているのかを理解する手がかりにもなります。この原理を模倣した「人工嗅覚」と呼ばれる技術は、複数の化学センサを使ってニオイ分子を検出し、AI（人工知能）がそれを分類・識別する技術です。しかし現在の人工嗅覚は、化学センサの感度や識別精度に限界があり、実用化は十分に進んでいません。この課題を解決するには、人工嗅覚を支える化学センサをさらに高性能化する必要があります。その中心となるのが、ニオイ分子をとらえる「感応材料」の開発です。しかし、これまでの人工嗅覚研究の多くは、どの感応材料がどのニオイ分子に反応しているのか十分に解明することなく、AI による分類・識別が行われてきました。もし感応材料ごとの反応特性が明らかになれば、識別したいニオイ分子に応じた最適な感応材料の開発や、より正確なニオイ識別のための「感応材料の選択」が可能となります。

## 研究内容と成果

本研究では、ニオイ分子とセンサ応答の関係を明らかにするために、説明可能な AI (XAI) <sup>(1)</sup> を利用しました。XAI は、たとえば画像認識において、AI が画像のどこを視て識別しているかを可視化する手法として広く用いられています。通常の AI は出力の理由を明確に説明できないため、XAI は「AI の予測根拠の理解を促進する技術」として注目されています。

ニオイ分子とセンサ応答の関係を調べる実験として、94 種類の純溶媒から揮発したガスサンプル（ニオイ分子）を、異なる感応材料が使われた 14 チャンネルの膜型表面応力センサ（MSS: Membrane-type Surface stress Sensor）<sup>(2)</sup> で測定しました。MSS は、ナノメカニカルセンサ<sup>(3)</sup> の一種であり、各センサ素子の表面に異なる感応材料が塗布され、その感応材料とニオイ分子の相互作用によって生じる微細な力（表面応力）を電気信号に変換するセンサです。得られたデータを AI の一種である畳み込みニューラルネットワーク（CNN）<sup>(4)</sup> に入力し、94 種類のニオイ分子の官能基による分類や、酸素原子の有無、環構造の有無といったニオイ分子の性質や形の特徴を識別するモデルを作成しました。さらに XAI の一種である Score-CAM<sup>(5)</sup> を用いて、識別における重要度を解析しました。この解析により、各分子の識別において、どのチャンネルが重要であるか、さらに、センサ信号のどの部分が重要かを特定し、センサ応答とニオイ分子の特徴との関係を可視化しました（図 2）。その結果、人工嗅覚における感応材料の各ニオイ分子に対する反応特性が明らかになり、ニオイ分子と感応材料の組み合わせによって、識別に用いるセンサ応答の重要な部分が異なることが分かりました。これにより、識別したいニオイ分子に応じて必要な感応材料を的確に選別できるようになり、識別が難しいニオイ分子に対応するための感応材料の開発指針も得られます。

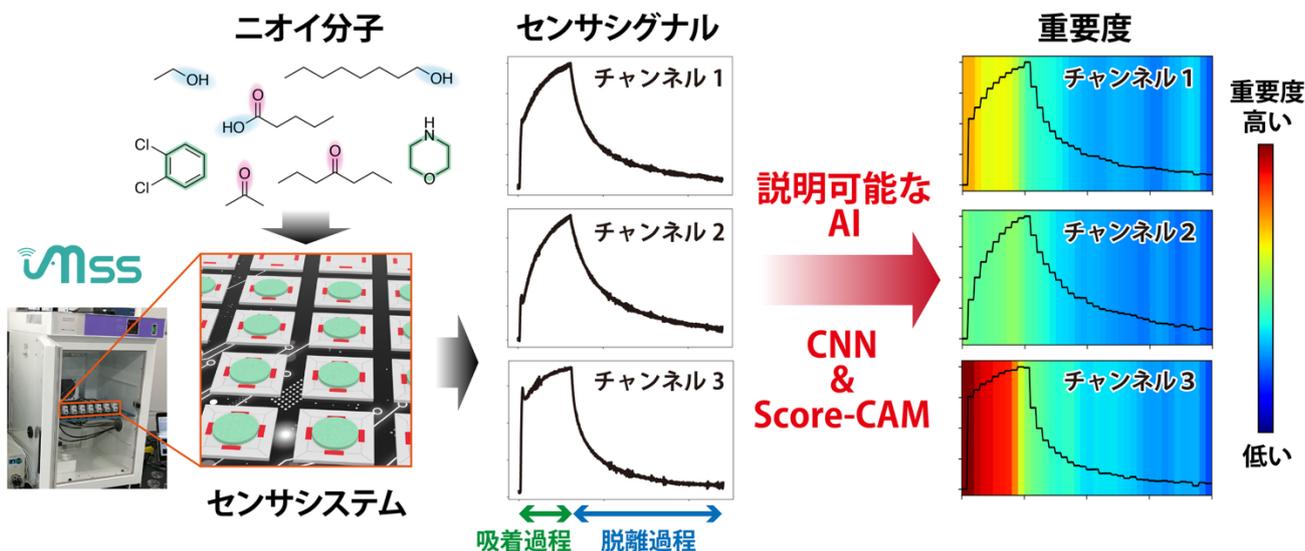


図2：XAIによるニオイ分子データ解析の流れ。ニオイ分子を複数チャンネルのMSSで測定することで、一連のセンサシグナルが得られます。このセンサ応答データセットをCNNおよびScore-CAMで解析することで、識別においてセンサ応答のどの部分が重要であるかが可視化されます。この図では、チャンネル3の吸着過程が識別に重要であることを示しています。

Score-CAMによって抽出されたセンサ応答とニオイ分子との関係を紹介します。まず各種ニオイ分子を、ニオイ分子に含まれる官能基によって分類する場合には、センサ応答で重要となる部分は官能基ごとに異なることがScore-CAMの結果から明らかになりました。たとえば、アルコール官能基が含まれるニオイ分子（アルコール化合物）を識別したい場合、センサシグナルのうち、アルコール化合物がセンサ上の感応材料に吸着する過程が重要であることがわかりました（図3）。これは、アルコール化合物が感応材料へ素早く吸着・拡散するためと考えられます。一方で酢酸などの脂肪酸の識別では、脂肪酸が他の化合物に比べて感応材料内部に残留しやすいため、センサシグナルにおける脱離過程に脂肪酸特有の応答が強く現れることがScore-CAMの結果から確認されました（図3）。さらに、エーテル化合物はCNNによる識別精度が非常に悪く、化合物ごとにセンサ応答で重要となる部分が大きく異なっていることがわかりました。これはエーテル化合物の識別に適した感応材料が今回使用した14チャンネルには含まれておらず、新しい感応材料の開発が必要であることを示しています。次に、各種化合物を酸素原子が含まれているか否かによって分類する場合、吸着過程と脱離過程の開始直後が重要であることが見出され、各分子の、センサ表面（感応材料表面）での吸着や脱離のタイミングが重要であることがわかりました。さらに、脂肪族環や芳香環などの環構造の有無の分類では、特に芳香環を有する芳香族化合物が正しく分類できることがわかり、Score-CAMの結果から、感応材料の一つであるポリ（4-メチルスチレン）が顕著な応答を示すことがわかりました。これは、ポリ（4-メチルスチレン）の芳香環とニオイ分子の芳香環との間で $\pi$ - $\pi$ 相互作用（芳香環が積み重なった配置で安定化する傾向）が生じるためと考えられ、芳香族化合物の分類において重要な感応材料であることが明らかになりました。このように、XAIを利用することで識別だけでなく、その予測根拠が得られ、化学的な知見と対応させて検証できるようになることが示されました。人間の嗅覚を模倣した人工嗅覚システムにおいて、各ニオイ分子とセンサ応答の関係を明らかにすることは、人間の嗅覚の仕組みを解明する研究への貢献にもつながると期待されます。

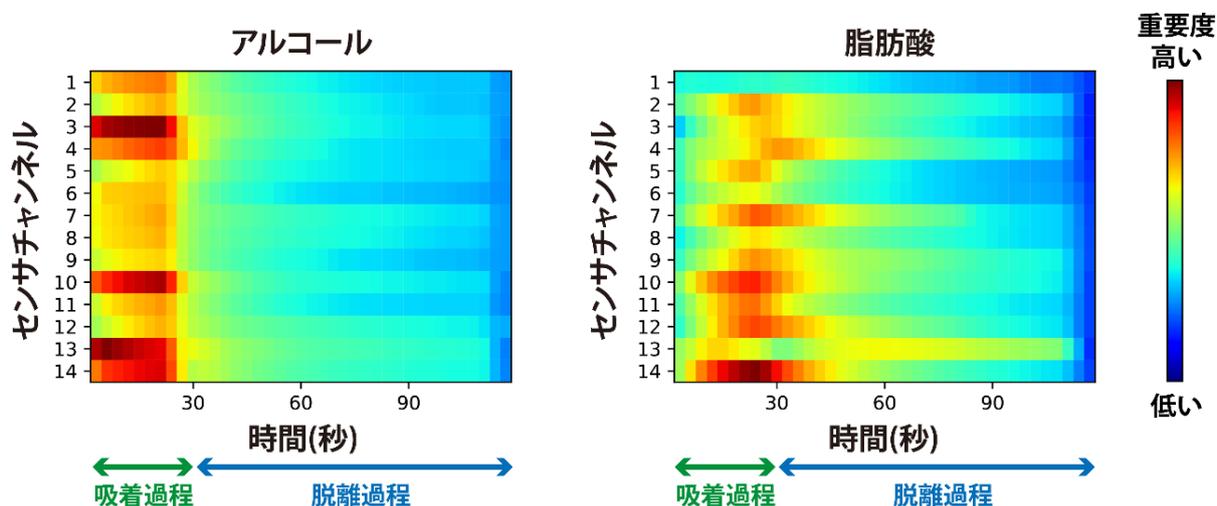


図3：ニオイ分子に含まれる官能基によってニオイ分子を分類する場合の、センサ応答の重要度マップの例。アルコール化合物および脂肪酸の識別において、センサ応答のどの部分が重要であるかを色で表しています。0～30秒の間、ニオイ分子をセンサに曝して吸着させ、30～120秒の間は窒素を流して吸着したニオイ分子を脱離させます。14チャンネル全ての結果を一つのマップとしてまとめて示しています。アルコール化合物では、測定開始後30秒までの吸着過程が重要である一方で、脂肪酸では30秒以降の脱離過程も重要であることを読み取ることができます。

## 今後の展開

説明可能な AI (XAI) による解析手法により、センサがどのようにニオイをとらえているのかを“見える化”できることを示しました。今後は、この技術をさらに発展させ、単一の化合物だけでなく、実際の生活で私たちが感じるような「混ざり合ったニオイ」、例えば果物や香水などに含まれる多成分のニオイに応用していきます。また、複数のセンサから得られるデータを XAI で解析することで、「どのセンサがどのニオイの識別に適しているか」を選び出すことが可能になります。これにより、用途に応じた最適な人工嗅覚システムの設計につながります。こうした展開によって、食品の鮮度管理や環境モニタリング、医療診断など、私たちの生活や産業に直結する幅広い分野で人工嗅覚技術の応用が広がると期待されます。また同時に、人工嗅覚技術の発展を通して、人間の嗅覚の仕組みを解明する学術研究にも貢献したいと考えています。

## ■ 掲載論文

題目	Harnessing Explainable AI to Explore Structure–Activity Relationships in Artificial Olfaction
著者	Yota Fukui, Kosuke Minami, Genki Yoshikawa, Koji Tsuda, and Ryo Tamura
雑誌	ACS Applied Materials & Interfaces
DOI	10.1021/acsami.5c13990
掲載日	2025年9月9日

## ■ 用語解説

### (1) 説明可能な AI (XAI)

AI が出した予測や判断の理由を、人間が理解できる形で説明することを目的とした手法の総称です。代表的な手法として、Grad-CAM や Score-CAM があります。これらの手法を使用すると、AI がどこを視て識別しているかを可視化することができます。

### (2) 膜型表面応力センサ (MSS)

MSS は、Membrane-type Surface stress Sensor の略であり、NIMS が中心となって開発されたセンサ素子です。同

種の従来型センサと比較して、超高感度、小型、低コストなど多くの特徴を有しています。

### (3) ナノメカニカルセンサ

ナノメートルレベルの機械的な変化を検出するセンサのことを指します。特に、分子がセンサ表面に吸着したときに生じる「機械的な応答（たわみや振動の変化）」を利用して、分子を感知できます。MSS はナノメカニカルセンサの一種です。

### (4) 畳み込みニューラルネットワーク (CNN)

CNN は、Convolutional Neural Network の略であり、画像認識やパターン認識に強いニューラルネットワーク（人間の脳の神経細胞を模した数学モデルで、入力されたデータを処理し、複雑なパターンを学習・予測できるモデル）のことを指します。画像の特徴を自動で抽出し、それを使って分類や認識を行う仕組みを持ちます。

### (5) Score-CAM

CAM (Class Activation Mapping) は、深層学習モデルである CNN が画像のどこを視て判断しているかを可視化する手法です。CAM の代表的な手法として、勾配情報を利用して重要度を計算する Grad-CAM があります。しかし、勾配情報を使用することで、結果にノイズがのってしまい解析が不安定になるという問題がありました。そこで勾配情報を利用しない Score-CAM が提案され、より安定した結果が得られるようになりました。

## 本件に関するお問い合わせ先

研究内容について	<b>NIMS マテリアル基盤研究センター チームリーダー</b> <b>田村亮</b> E-mail: TAMURA.Ryo@nims.go.jp TEL: 029-860-4948 URL: <a href="https://samurai.nims.go.jp/profiles/tamura_ryo">https://samurai.nims.go.jp/profiles/tamura_ryo</a>
	<b>NIMS 高分子・バイオ材料研究センター 主幹研究員</b> <b>南皓輔</b> E-mail: MINAMI.Kosuke@nims.go.jp TEL: 029-851-4571 URL: <a href="https://samurai.nims.go.jp/profiles/minami_kosuke">https://samurai.nims.go.jp/profiles/minami_kosuke</a>
	<b>NIMS 高分子・バイオ材料研究センター グループリーダー</b> <b>吉川元起</b> E-mail: YOSHIKAWA.Genki@nims.go.jp TEL: 029- 860-4749 URL: <a href="https://samurai.nims.go.jp/profiles/yoshikawa_genki">https://samurai.nims.go.jp/profiles/yoshikawa_genki</a>
報道・広報について	<b>NIMS 国際・広報部門 広報室</b> 〒305-0047 茨城県つくば市千現 1-2-1 E-mail: <a href="mailto:pressrelease@ml.nims.go.jp">pressrelease@ml.nims.go.jp</a> TEL: 029-859-2026, FAX: 029-859-2017

# NIMS とは？

NIMS（ニムス）は、国内で唯一、物質・材料科学の研究に特化した国立研究開発法人です。世界を構成する様々な「物質」。その中で私たちの生活を支えているのが「材料」です。その材料も、大きくは有機・高分子材料、無機材料に分類でき、無機材料はさらに金属材料とセラミックス材料とに分けられます。石器時代から産業革命を経て現代まで、人類の発展はこの材料の進歩とともにありましたが、近年では、地球規模の環境や資源問題の解決手段のひとつとしても注目が高まっています。NIMS はその物質・材料に関する研究に特化した国立研究開発法人として、「材料で、世界を変える」をテーマに、未来を拓く物質・材料の研究に日々取り組んでいます。

## 【NIMS を掴む参考ページ】

NIMS はこんな研究所！ <https://www.nims.go.jp/nims/introduction.html>

NIMS ビジョン <https://www.nims.go.jp/nims/profile.html#vision>