ガスセンサシステムにおける伝達関数を用いた

ガス識別機械学習モデルの構築

Development of Machine Learning Models for Gas Identification Based on Transfer Functions

今村岳*1 Gaku Imamura 吉川元起^{*1,2} Genki Yoshikawa 鷲尾隆*3 Takashi Washio

*1 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 International Center for Materials Nanoarchitectonics, National Institute for Materials Science

*2 筑波大学大学院 数理物質科学研究科 物質•材料工学専攻 Materials Science and Engineering, Graduate School of Pure and Applied Science, University of Tsukuba

> *3 大阪大学 産業科学研究所 The Institute of Scientific and Industrial Research, Osaka University

Various applications of gas sensors have been envisioned in many fields along with the recent development in information and communication technology (ICT). Gas Identification plays a central role in gas sensor applications including artificial olfaction. In the conventional gas identification protocol, however, a strict gas flow control is required to reproduce comparable sensing signals. To eliminate such a severe constraint and identify gas species with an arbitrary gas injection pattern, here we report an analysis approach based on transfer function, which represents the relationship between inputs and outputs (i.e. a gas input pattern and the resultant sensing signals). In this study, we developed machine learning models which can identify gas species from an arbitrary gas injection pattern. Even though the sample gases were randomly injected, we successfully identified solvent vapors by the transfer functions with the classification accuracy of 0.98±0.03. This study provides a versatile data analysis platform which is independent of gas flow control.

1. 序論

モノのインターネット(IoT)に代表されるネットワークシステム の発達に伴い、次世代デバイスの基礎技術としてガスセンサが 注目されている。特に、複雑なガスの混合物であるニオイを検 知・識別する人工嗅覚の開発はガスセンサの究極の応用であり、 このようなネットワークシステムと組み合わせることで食品、環境、 安全、医療などの様々な分野での応用が期待されている。ガス センサを用いてガス種の識別を行う場合、測定により得られるシ グナルから、ガス種に固有の特徴を抽出する必要がある。このよ うな特徴を抽出するためには、マスフローコントローラやポンプ などによって流量を精密に制御して測定を行う必要があった。 [Imamura 2016] しかし、全ての測定において流量を厳密に制 御することは実用上困難であり、ガスセンサシステムの社会実装 の妨げとなっていた。

そこで本研究では、制御システムの概念である伝達関数をセ ンサシグナルの解析に導入し、これを記述子とした機械学習モ デルを構築することで、任意の流量制御でのガス識別を可能と する新規データ解析手法の開発を行った。これにより、従来必 要であった厳密な流量制御が不要となり、流量がランダムに変 化するような場合でも、ガスの識別を行うことが可能となる。さら に、伝達関数に注目することで、異なる流量制御により得られた 測定データを相互に比較することができることから。人工嗅覚の 実現に必要不可欠な「ニオイのライブラリ」の構築を行うことが可 能となる。

連絡先:IMAMURA.Gaku@nims.go.jp



図 1. (a) ガス測定システム。(b) MSS チップ光学顕微鏡写真。

2. 伝達関数

伝達関数は、ある入出力系における入力と出力の関係を示したものである。センサの応答が、あるガス種 g に対して線形な応

答を示すと仮定すると、入力パターン x(t)に対するセンサ出力 y(t)は、伝達関数 hg(t)を用いて以下の式で記述される。

$$y(t) = \int_0^t h_g(\tau) x(t-\tau) d\tau \tag{1}$$

ここで、hg(t)は入力に依存しないことから、hg(t)に注目することによりガスの識別が可能となる。

フーリエ変換することで、式(1)を周波数空間での表現に直すと、

 $Y(f) = H_g(f)X(f)$ (2) となる。ここで、X(f)、Y(f)、H_g(f)は、それぞれ周波数空間にお ける入力、出力、伝達関数である。

3. ガス測定

図 1a に本研究で用いた実験系を示す。バイアル瓶にいれた 試料の蒸気を、2 つのマスフローコントローラ(MFC)を用いて濃 度を変化させてセンサに導入した。濃度の変化は MFC1、 MFC2 の総流量を 100 sccm に保ちながら流量の比を変化させ ることにより行った。試料としてはエタノール、トルエン、ヘキサン、 水の 4 つの溶媒を用いた。本研究では、ガスセンサとして膜型 表面応力センサ(Membrane-type Surface stress Sensor, MSS)を 用いた。MSS は、感応膜と呼ばれる部位がガスを吸着すること に伴い生じる表面応力を電気的に読み取ることで動作するセン サである。[Yoshikawa 2011] 本研究では、感応膜として poly(vinylidene fluoride)、polysulfone、poly(4-methylstyrene)、 polycaprolactone をチャンネル 1~4 に塗布した MSS センサチ ップを用いた。(図 1b) 測定は、MSS にブリッジ電圧-0.5 V を 印加し、サンプリング周波数 20 Hz で、各溶媒につき 20 秒ずつ 30 回行った。

4. 機械学習モデル

各測定データについて、式(2)にしたがい各チャンネルにお ける伝達関数 Hg(f)を計算した。MFC の切り替え時間がおよそ 0.5 秒程度であることから、ナイキストの定理にしたがい、伝達関 数のうち 1 Hz 以下の周波数成分のみを解析に用いた。(0.05 ~1 Hz の 20 成分) 周波数成分は複素数で与えられるため、 各周波数成分は絶対値と位相の 2 つ変数で表現した。したが て、チャンネル数が 4、解析に用いる周波数成分が 20、周波数



図2.識別モデル構築手順。



図 3. LDA スコアプロット。

成分の表現が2変数であることから、120次元のデータとして解析を行った。

ガス識別モデルの構築手順を図 2 に示す。全データを学習 データとテストデータに分け、学習データで構築したモデルをテ ストデータにて評価した。データはまず標準化され、次元削減さ れた後に分類器により識別される。ハイパーパラメータの最適 化およびモデルの評価は、10×10の交差検証により行った。

5. 結果·考察

識別モデルの構築に先立ち、得られた Hg(f)のデータセットに 対して線形判別分析 (LDA)を行った。図3に結果を示す。この ように、伝達関数の違いを反映して、特徴量空間上でガス種ご とにクラスターが形成され、互いに分離することが確認された。

次に、4 つの溶媒蒸気の識別モデルを構築した。本研究では、 次元削減として主成分分析 (PCA)を用い、分類器としてロジス ティック回帰 (LR)とサポートベクトルマシン (SVM)の2 種類を 用いた。その結果、LR で 0.94±0.04、SVM で 0.98±0.03 の精度 での識別に成功した。

6. まとめ

本研究では、ガスセンサを用いたガス測定において、伝達関 数という入力と出力の関係を記述子としたガス識別を行う機械 学習モデルの構築を行った。これにより、従来は厳密な流量制 御が必要であったガスの識別が、任意の流量制御で簡便に行 えることが示された。本研究では MSS をガスセンサとして用い たが、伝達関数に基づく解析法は MSS に限らず、酸化物半導 体ガスセンサや水晶振動子などあらゆるガスセンサに適用可能 である。伝達関数に注目することで、様々な流量制御に依存しない ことから、伝達関数に注目することで、様々な流量制御にて測 定されたデータが相互に比較可能となる。したがって、人工嗅 覚の実現に必要不可欠な「ニオイのライブラリ」の構築が可能と なり、実用的な人工嗅覚の実現が期待される。

参考文献

- [Imamura 2016] G. Imamura, K. Shiba, G. Yoshikawa: Smell identification of spices using nanomechanical membranetype surface stress sensors, Japanese Journal of Applied Physics, the Japan Society of Applied Physics, 2016.
- [Yoshikawa 2011] G. Yoshikawa, T. Akiyama, S. Gautsch, P. Vettiger, H. Rohrer: Nanomechanical Membrane-type Surface Stress Sensor, Nano Letters, American Chemical Society, 2011.