

におい情報処理の産業応用に関する研究

— におい識別に関する試み —

におい計測プロジェクトスタッフ 油上 保* 田中 進** 竹居 翼***

Study about Industrial Application of Odor Information Processing

- Experiment of Odor Identification -

Tamotsu Yugami, Susumu Tanaka and Tasuku Takei

We worked on the research and development from 2006 to 2008 about the odor measurement technique that is high speed / high precision. We developed the odor measurement system which we used a QCM (Quartz Crystal Microbalance) sensor.

One purpose of this research is achievement of the odor recognition system. We tried the odor identification by using the neural network for the response of the QCM sensor of a multi channel.

We report on the case using LVQ as one technique of the neural network in this report.

1. はじめに

工場や商業施設の臭気対策、食品・化粧品の商品開発や品質管理等をはじめとして、様々な分野でにおいの計測や評価・分析などのニーズが拡大している。従来からにおいの評価や分析は、人の鼻による官能試験やガスクロマトグラフや質量分析(GC/MS)等の機器分析により行われている。しかし、官能試験では体調や疲労の影響、機器分析では、測定に要する時間が長い、前処理が必要、連続的な測定ができないといった問題もある。

我々は、平成18年度から平成20年度の静岡県プロジェクト研究において、水晶振動子に感応膜を形成したQCM(Quartz Crystal Microbalance)においセンサを利用した高速・高精度なにおい計測手法について研究開発を行った。QCMにおい計測システムのセンサ応答は、においサンプルごとに特有な異なる応答パターンを示すため、センサ応答を各においサンプルごとに分類できれば、QCMにおいセンサを用いたにおい識別装置の実現が期待できる。

におい評価への応用を目的として、においの識別について、①温度可変型におい計測装置の開発、②同装置を用いた計測、③計測データのニューラルネットワークを利用した解析、といった内容により取り組んだ。

2. 方法

2.1 温度可変型におい計測装置の開発

におい物質は温度により揮発量が増えるため、指定した温度条件下でのサンプルが発生するにおいを計測できることが望まれる。そこで測定対象サンプルを、温度コントロールしながらにおいの計測が行える温度可変型におい計測装置¹⁾を開発した。

2.2 においサンプルの計測

においサンプルとして4種類の発泡素材(ウレタン発泡体2種類、ポリエチレン発泡体、ゴム発泡体)を前項で示した温度可変型におい計測装置を用いて、80℃に加熱し、加熱開始から1時間経過した時点から計測を行った。図1に測定系の概要を示す。ひと

*) 現 機械電子科 **) 現 ユニバーサルデザイン工芸科長 ***) 現 沼津工業技術支援センター

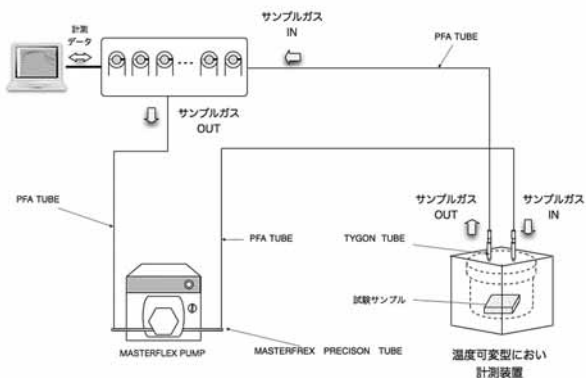


図1 測定系の概要

つの試料に対して、計測とドライエアーによるセンサのパーツをそれぞれ20分間ずつ3回繰り返して1計測とした。計測には、温度センサと6chのQCMにおいてセンサを用いた。

2.3 データ前処理と主成分分析 (PCA)

計測におけるQCMにおいてセンサの応答の最大値を特徴ベクトルとして採用し、データの前処理として正規化を式(1)により行った。

$$Xn_i(t) = \frac{x_i(t)}{\sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N x_i(t)^2}} \quad (1)$$

N: センサ数
x(t): センサ応答の最大値

においサンプルごとの分離の度合いを確認するため、特徴ベクトルの主成分分析 (PCA) を行った。主成分分析は、試料A~Dの各試料No.1~8の計測データからそれぞれ22個の特徴ベクトルを用いて行った。また、主成分分析は、特徴ベクトルの正規化を行った場合と行わなかった場合の両方について行い、前処理の効果を確認した。

2.4 学習ベクトル量子化法 (LVQ)

学習ベクトル量子化法 (LVQ: Learning Vector Quantization)²⁾ は、Kohonenによって提案された競合型ニューラルネットワークの一種であり、入力データのパターン分類を行う教師あり学習である。図2にLVQのネットワーク構造を示す。

競合層の各ニューロンはそれぞれコードブックベクトルを持っており、式(2)を満たすような、入力ベクトルに対して最もユークリッド距離が近いコード

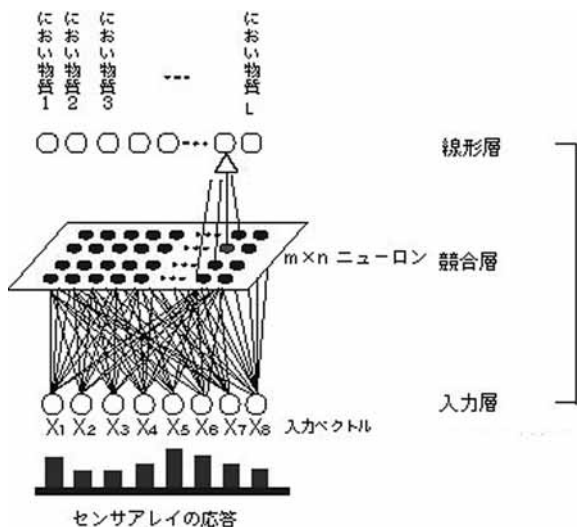


図2 LVQのネットワーク構造

ブックベクトルを持つニューロンcに対して、cが属するクラスと入力ベクトルのクラスが同じ場合は、 m_c を式(3)に従い入力ベクトルに近づけ、クラスが異なる場合は m_c を式(4)に従い入力ベクトルから遠ざける。この過程を繰り返して学習を行っていく。(図3)

$$c = \arg \min \{ \|x - m_i\| \} \quad (2)$$

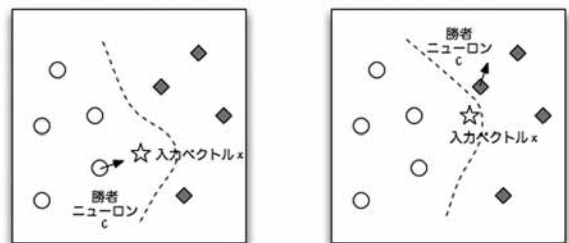
$$m_c(t+1) = m_c(t) + \alpha(t) [x(t) - m_c(t)] \quad (3)$$

if x and m_c belong to the same class

$$m_c(t+1) = m_c(t) - \alpha(t) [x(t) - m_c(t)] \quad (4)$$

if x and m_c belong to the different classes

x: 入力ベクトル
 m_i : 競合層のコードブックベクトル
 m_c : 入力ベクトルに最も近い競合層のコードブックベクトル
 α : 学習係数 (初期値 0.1以下)
t: 学習回数



(a) 入力ベクトルxと勝者ニューロンcのコードブックベクトルが同じクラスの場合 (b) 入力ベクトルxと勝者ニューロンcのコードブックベクトルが異なるクラスの場合

図3 LVQの学習原理

各試料とも2.3項にて採用した22個の特徴ベクトルデータの中から、LVQの参照ベクトルの初期値として、3、5、7個を選び、学習用ベクトルとして8、9、10個を、残りを識別評価用として、9

通りに対して、組み合わせをランダムに変えて学習と識別テストをそれぞれ20回繰り返した。この時、学習回数を100回、学習率を0.01とした。

また、主成分分析の場合と同様、特徴ベクトルの正規化処理の有無による結果の比較を行い、正規化による前処理の効果を確認した。

3. 結果

3.1 温度可変型におい計測装置

測定対象サンプルを、ペルチェ素子を用いて温度コントロールしながらおの計測が行える温度可変型におい計測装置（写真1）を開発した。

温度コントロール範囲：10℃～100℃

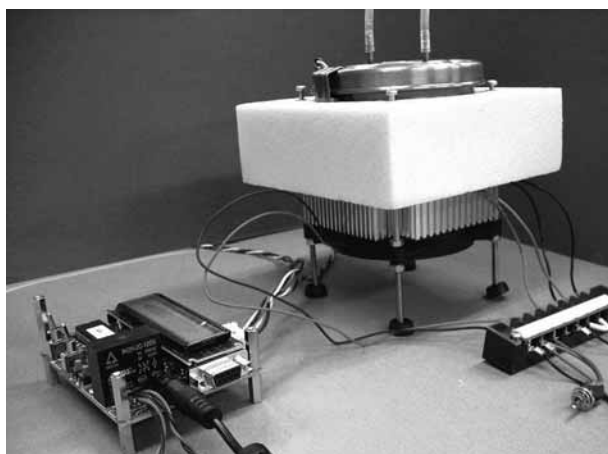


写真1 温度可変型におい計測装置

3.2 QCMにおいセンサ応答

試料Aから試料Dのセンサ応答を図4から図7に示す。

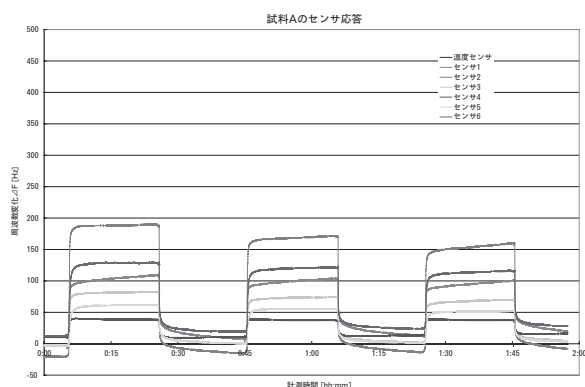


図4 試料Aのセンサ応答

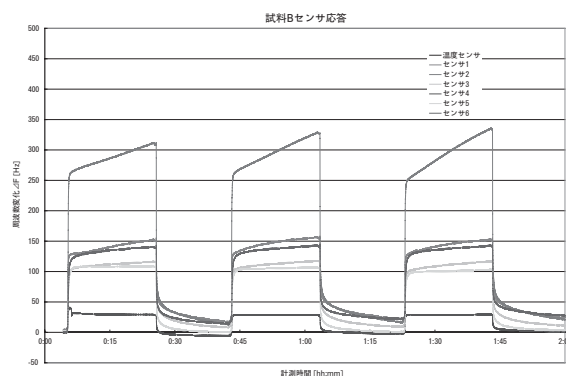


図5 試料Bのセンサ応答

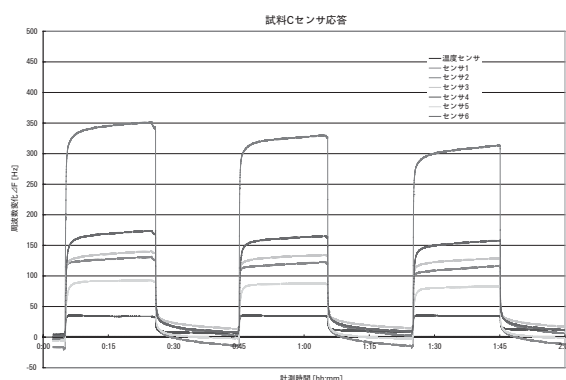


図6 試料Cのセンサ応答

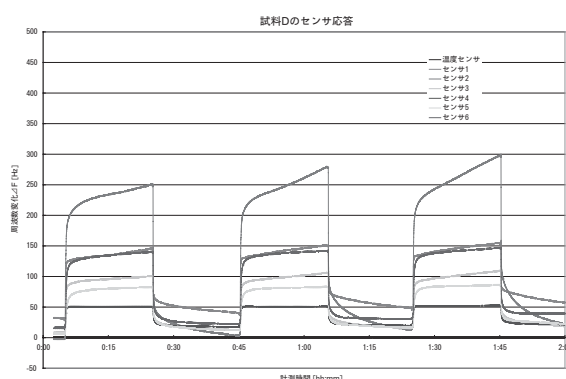


図7 試料Dのセンサ応答

3.3 主成分分析 (PCA)

各試料のセンサ応答から2.3項にて抽出した特徴ベクトルに対して、正規化処理なしと正規化処理後についてそれぞれ主成分分析を行った結果を図8、図9に示す。(a)は第1主成分 (PCA1) と第2主成分 (PCA2) のプロット、(b)は第1主成分 (PCA1) から第3主成分 (PCA3) までのプロットである。

図8に示した正規化処理なしは、PCA2までの寄与率が94%でほとんどの特徴がPCA1とPCA2で表されており、(a),(b)より各試料の群が重なっていることが確認できる。

一方、図9に示した正規化処理後はPCA2までの

【報告】

寄与率が80%であるが、PCA3の寄与率も13%あるため、(b)により3つの軸で特徴を見ると、各試料の群がある程度分離できると考えられる。

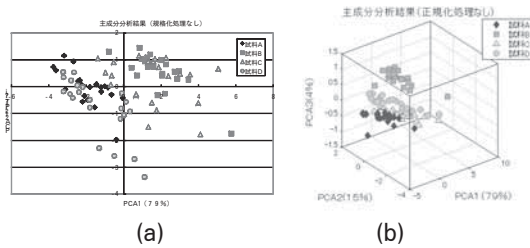


図8 主成分分析結果 (正規化処理なし)

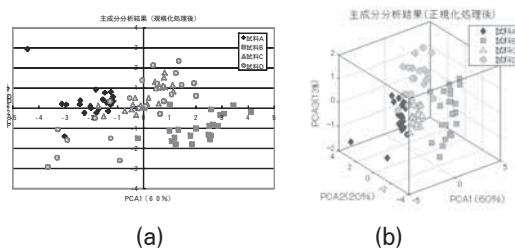


図9 主成分分析結果 (正規化処理後)

3.4 学習ベクトル量子化法 (LVQ)

正規化処理なし、正規化処理後とも参照ベクトル、学習ベクトルの個数を増減させた組み合わせ9通りの中からLVQによる識別率が最も高かった結果のみ表1、表2に示す。どちらの場合も参照ベクトルの個数が7個の場合が最も識別率が高かった。

また、データの正規化処理については、処理後の

表1 LVQによる識別結果 (正規化処理なし)

識別データ	識別結果				87%
	A	B	C	D	識別率
A	184	0	7	12	91%
B	0	187	16	0	92%
C	2	10	181	10	89%
D	28	0	18	157	77%

表2 LVQによる識別結果 (正規化処理後)

識別データ	識別結果				92%
	A	B	C	D	識別率
A	180	0	15	3	91%
B	0	190	1	7	96%
C	11	0	187	0	94%
D	9	3	12	174	88%

方が平均で5%、試料によっては10%以上の識別率の向上が確認できた。

4. 考察

4種類の発泡素材のにおいをQCMにおいて計測システムで計測を行い、得られたQCMセンサ応答からLVQによるにおい識別を行った結果、90%以上の比較的良好な識別結果が得られた。

LVQによる学習と識別に用いた特徴ベクトルは、各試料とも20分間の計測データにおける最大値としたが、試料やセンサによっては20分間では定常状態まで到達せず応答値が増加中のももあるため、今回のような特徴ベクトルの選び方では識別結果を悪くする要因が含まれていると思われる。特徴ベクトルとして最大値を用いる場合は、定常状態に達していない応答については最大値を推定するなどの工夫が必要であると考えられる。

その他の特徴ベクトルの選び方として、応答の微分値を用いることなどを含めて、識別率の向上のため検討を行っていく予定である。

謝辞

本研究は平成18年度～平成20年度の静岡県プロジェクト研究「におい情報処理の産業応用に関する研究」の一部として行ったものである。

本研究を遂行に当たり、ニューラルネットワークによる解析について懇切丁寧なご指導を賜りました東京工業大学大学院理工学研究科中本准教授、並びに大阪府立大学大学院工学研究科大松教授に深謝いたします。

参考文献

- 1) 田中、宮原、油上、竹居：静岡県工業技術研究所研究報告第1号,1-4 (2008)
- 2) 自己組織化マップ (改定版) T.コホネン／著 徳高平蔵／大藪又茂／堀尾恵一／藤村喜久郎／大北正昭／監修 シュプリンガー・ジャパン (2005)