

論文 / 著書情報  
Article / Book Information

題目(和文)	電界非対称イオン移動度スペクトロメトリーを用いた混合ガスの濃度定量
Title(English)	Gas Mixture Quantification Using Field Asymmetric Ion Mobility Spectrometry
著者(和文)	横式康史
Author(English)	Yasufumi Yokoshiki
出典(和文)	学位:博士(工学), 学位授与機関:東京工業大学, 報告番号:甲第11436号, 授与年月日:2020年3月26日, 学位の種別:課程博士, 審査員:中本 高道,山口 雅浩,小池 康晴,小尾 高史,長谷川 晶一
Citation(English)	Degree:Doctor (Engineering), Conferring organization: Tokyo Institute of Technology, Report number:甲第11436号, Conferred date:2020/3/26, Degree Type:Course doctor, Examiner:,,,,,
学位種別(和文)	博士論文
Category(English)	Doctoral Thesis
種別(和文)	論文要旨
Type(English)	Summary

## 論文要旨

THESIS SUMMARY

系・コース： Department of, Graduate major in	情報通信 情報通信	系 コース	申請学位 (専攻分野)： 博士 (工学) Academic Degree Requested Doctor of
学生氏名： Student's Name	横式 康史		指導教員 (主)： Academic Supervisor(main) 中本 高道 教授
			指導教員 (副)： Academic Supervisor(sub)

要旨 (和文 2000 字程度)

Thesis Summary (approx.2000 Japanese Characters )

近年の技術をもってしても、匂いを記録・再生する技術に関しては未だ完成に至っていない。匂いは複数の化学物質から構成される混合ガスであるため、匂いを再現する方法の一つとして混合ガスの複数成分の濃度比を変えて調合する手法がある。混合ガスを計測する必要があるが、先行研究で用いられた水晶振動子 (QCM) センサには多重共線性で解が不安定になるという問題があった。

電界非対称イオン移動度スペクトロメトリー (FAIMS) は、高感度なイオン分離計測手法の一つであり、移動度に基づいた情報から高感度、高速に混合ガスを計測することができる。それに加え、先行研究で用いられた QCM センサアレイと比較して、FAIMS は多くの情報量を持っていると考えられ、先行研究での問題を解決できる可能性があった。

混合ガスの濃度定量を行うためには、ガス分析装置が必要である。研究動向の調査から、大規模センサアレイや実時間質量分析器が混合ガスの濃度定量に用いられていることが分かった。大規模センサアレイでは混合ガスの成分の数が多くなると、濃度定量が難しくなるという問題があり、一方で実時間質量分析器は高価であるという欠点がある。FAIMS による混合ガスの濃度定量が実現できれば、多成分の混合ガスが濃度定量可能かつ安価なシステムとなり、どちらの装置に対しても優位性があると考えられる。更に FAIMS の研究動向の調査では、FAIMS は主に病気の診断などの匂いの分類問題を解くことに対して使われており、FAIMS を用いて混合ガスの濃度定量を行った研究例は他にないことも分かった。

FAIMS で得られるデータは従来のセンサアレイから得られるデータと異なり、強い非線形を有しかつ次元数が多いため、データ解析が難しい。その課題に対して、アクティブセンシングの概念を用いて混合ガスの濃度を定量することができる。アクティブセンシングとはシステムに能動性を付与し、システム全体の性能、センシングの効率、柔軟性を高めようという考え方である。本研究では混合ガスをシステム内で作り出し、濃度定量対象と比較するという相対計測手法によりアクティブセンシングの手法を実現した。本研究で構築した濃度定量のシステムは混合ガスの作成部、混合ガス計測部、混合ガスの濃度定量アルゴリズムに分類できる。混合ガスの作成部で混合したガスを混合ガス計測部である FAIMS 装置で逐次計測し、得られた計測データから濃度定量アルゴリズムで混合ガスの濃度比率を求めるシステムを構築した。

混合ガスを作り出すために、流量を制御することのできるデバイスであるマスフローコントローラ (MFC) を用いて流量比でガスの濃度を制御した。FAIMS は低濃度ガスの計測に向いている装置であるため、低濃度の混合ガスを調合できるガス供給装置を構築した。濃度比の異なる混合ガスの計測を手動で行うのは困難であるため、それを自動で行うためのシステムも構築した。

混合ガスの濃度定量アルゴリズムとして、濃度定量を最適化問題とみなしてそれを解く方法が考えられる。最適化問題を解くためのアルゴリズムとしてシンプレックス法やシミュレーテッドアニーリングなど様々な手法があるが、本研究では収束速度の点から最急降下法を選択した。更に、学習係数の自動調整機能を加えてその収束をより速くした。

濃度定量の実験においては、混合ガスとしてケトン、アルコール、エーテルから代表的なものとしてアセトン、エタノール、ジエチルエーテルを用いた。実験ではまず最急降下法が FAIMS の濃度定量アルゴリズムに適応可能かどうかを調べた。濃度空間上の格子点を離散的に計測し、濃度定量対象のデータとの差分を線形近似して各濃度点における勾配の推定値を求めた。その求めた推定勾配値から濃度定量の計算機実験を行い、濃度定量が可能であることを示した。その後システムを拡張し、最急降下法の勾配の計算に必要な濃度点のみを計測するオンライン計測を実装し、濃度定量が可能であることを実験でも示した。

実際の濃度定量においては、混合ガスの濃度が時間的に変化する可能性がある。その場合、濃度定量にかかる時間が長いと正確な濃度定量は難しくなる。そこで本研究では最急降下法による濃度定量の手法以外に、最適制御を用いた多入力多出力フィードバックによる手法をシミュレーションで検討し、濃度定量を更に高速化できる見通しを得た。

本研究の主な成果は強い非線形性のために濃度定量が困難であった FAIMS に対して、アクティブセンシングによる相対計測を適用することにより非線形性の問題を解決し、FAIMS による混合ガス濃度定量を世界で初めて行ったことである。今後の課題としては、濃度定量の多成分化や濃度定量の高速化が挙げられる。それらが実現できれば、匂い記録・再生装置を実現する研究へ発展可能である。

備考：論文要旨は、和文 2000 字と英文 300 語を 1 部ずつ提出するか、もしくは英文 800 語を 1 部提出してください。

Note：Thesis Summary should be submitted in either a copy of 2000 Japanese Characters and 300 Words (English) or 1 copy of 800 Words (English).

注意：論文要旨は、東工大リサーチリポジトリ(T2R2)にてインターネット公表されますので、公表可能な範囲の内容で作成してください。

Attention: Thesis Summary will be published on Tokyo Tech Research Repository Website (T2R2).

(博士課程)  
Doctoral Program

## 論文要旨

THESIS SUMMARY

系・コース： Department of, Graduate major in	情報通信 情報通信	系 コース	申請学位 (専攻分野)： Academic Degree Requested	博士 Doctor of	(工学)
学生氏名： Student's Name	横式 康史		指導教員 (主)： Academic Supervisor(main)	中本 高道 教授	
			指導教員 (副)： Academic Supervisor(sub)		

要旨 (英文 300 語程度)

Thesis Summary (approx.300 English Words )

In this study, we demonstrated the feasibility of gas mixture quantification using Field Asymmetric Ion Mobility Spectrometry (FAIMS) for the first time in the world. FAIMS, which is a rapid, sensitive gas sensing method, can obtain rich information related to the mobility of ionized gas. However, it is not easy to apply the conventional approach to FAIMS for quantification because it has a strong nonlinearity characteristic. The problem of the strong nonlinear characteristic for FAIMS was solved by using active sensing to enhance functions such as performance, effectivity, and flexibility, whereas the passive one is used in most of the sensing systems.

The active sensing was realized using the relative measurement method, which compares the target gas and gas mixture generated by the system. The flow rate of each component of the gas mixture was controlled by mass flow controllers to adjust ingredient concentration in the gas mixture. If the relative measurement method is used, the quantification of the gas mixture with FAIMS can be regarded as an optimization problem. Gradient descent method was selected to solve the optimization problem since the speed of convergence is faster than other algorithms such as simulated annealing.

The computer simulation reveals that it is possible to apply the gradient method to solve the optimization problem because the quantification was successful using estimate gradients. The estimate gradients were calculated from the difference between the target data and the data of the gas mixture generated by the system, estimated by interpolating a discrete set of data points measured in advance. The mixture quantification was also experimentally confirmed. Moreover, the computer simulation demonstrates the possibility of multi-input multi-output feedback based on optimal control for speed up of the mixture quantification.

備考：論文要旨は、和文 2000 字と英文 300 語を 1 部ずつ提出するか、もしくは英文 800 語を 1 部提出してください。

Note：Thesis Summary should be submitted in either a copy of 2000 Japanese Characters and 300 Words (English) or 1copy of 800 Words (English).

注意：論文要旨は、東工大リサーチリポジトリ(T2R2)にてインターネット公表されますので、公表可能な範囲の内容で作成してください。

Attention: Thesis Summary will be published on Tokyo Tech Research Repository Website (T2R2).