

講演番号：4H02-05

質疑応答日時、会場：3月18日 09:30～ ミーティングルーム H

機械学習を利用した機器分析によるしょうゆの官能的な特徴の予測

Prediction of sensory characteristics of soy sauce by using instrumental analysis and machine learning

○大野 直土、戸塚 直哉、大友 裕絵、今村 美穂 (キッコーマン株式会社)

○Naoto OHNO, Naoya TOTSUKA, Hiroe OTOMO, MIHO IMAMURA (Kikkoman Corporation)

食品の開発において、食に対するヒトの感覚を明らかにする官能評価は重要である。しかしながら、官能評価には大きな資源（ヒト・時間）が必要となり、また感覚疲労により多サンプルの評価が難しいという課題がある。加えて、昨今では COVID-19 により人々の行動変容が生じ、ヒトを集って官能評価を行うことが困難になっている。そこで本研究では、しょうゆの香りや味に関連する成分情報を機器分析により取得し、その官能的な特徴を予測するシステムの構築を試みた。

サンプルには国内の市販のこいくちおよび減塩しょうゆを用いた。官能評価では訓練された社外パネルを対象に定量的記述分析(QDA)法を実施し、各官能特性の数値化を行った。香気成分および呈味成分のデータは、GC/MS および  $^1\text{H}$ 、 $^{13}\text{C}$ -NMR 分析を用いて未同定成分を含め網羅的に取得した。次いで、各官能特性の評点を目的変数、成分データを説明変数とし部分的最小二乗回帰 (PLS) により予測モデルを作成した。また、クロスバリデーション (Leave-One-Out 法) にて予測精度を評価した。その結果、訓練データと比較してテストデータでは予測精度が低下し、予測モデルは過学習していることが明らかとなった (例) 甘い香り -  $R^2 : 0.92$ 、 $\text{RMSE} : 0.077$ 、 $R^2_{\text{cv}} : 0.32$ 、 $\text{RMSE}_{\text{cv}} : 0.27$ 。過学習の原因として成分データが多く (847) 官能的な特徴と関係のない成分も多く含まれることが考えられた。そこで PLS に加えて LASSO、Elastic Net、Random Forest を用いて予備的な予測式を算出し、各成分の予測式への寄与度を見積もり、その寄与度を得点化することで官能的な特徴に重要な成分を抽出した (変数選択)。この変数選択により抽出された成分を説明変数とし、再度 PLS モデルを作成したところ、テストデータにおいても高精度な予測式が得られた (例) 甘い香り - 説明変数の数 : 35、 $R^2 : 0.99$ 、 $\text{RMSE} : 0.029$ 、 $R^2_{\text{cv}} : 0.92$ 、 $\text{RMSE}_{\text{cv}} : 0.077$ 。以上より GC/MS および NMR 分析を用いた網羅的な香気成分および呈味成分のデータから、複数の予測モデルを組み合わせた変数選択を行い、しょうゆの官能的な特徴を高精度に予測可能なシステムを構築した。

Sensory evaluation requires a large amount of resource and the COVID-19 infection has made it difficult to conduct. Therefore, we attempted to develop a system that can quickly predict sensory characteristics of soy sauce by using instrumental analysis and machine learning. We found that prediction models made using all the data obtained from GC/MS and the NMR were overfitted. In order to reduce the overfitting, we applied a variable selection method to calculate the importance of compounds from multiple prediction models. As a result, it was confirmed that this method contributes to improve the accuracy of prediction models.

Soy Sauce, GCMS, NMR

発表責任者：大野 直土 (naoono@mail.kikkoman.co.jp)