

近赤外線栄養成分測定研究会

カロリーアンサーの活用事例
～レギュラーコーヒーの分類～

1

株式会社ジョイ・ワールド・パシフィック

レギュラーコーヒーは種類が豊富



キリマンジャロ



グアテマラ



ブラジルサントス



マンデリン



モカ シダモ

種類は異なるのに、外観は全く同じ

パッケージやラベルが無いと
見分けがつかない!!



リアルな情報である近赤外スペクトルで分類できないか？

レギュラーコーヒーはメーカーや加工も様々



A社ブラジル
コーヒー



B社ブラジル
コーヒー

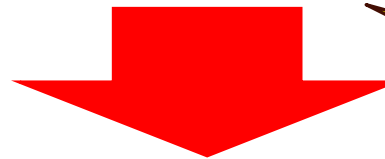


通常のカモカ



カフェインレス
のカモカ

同じ種類のコーヒーだが、加工工程が異なる

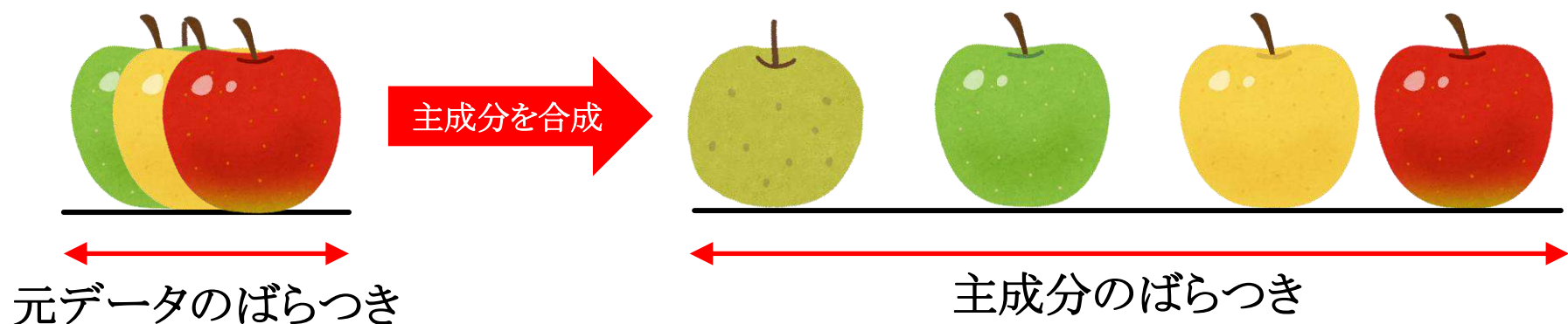


同じ種類だけど焙煎や
加工の違いで区別したい!!

近赤外スペクトルで加工工程の違いを区別できないか？

主成分分析 (principal component analysis) とは？

多変量解析の一種で、多数の変数からデータ全体の**ばらつきを最もよく表す**少数の変数(主成分)を合成する手法。

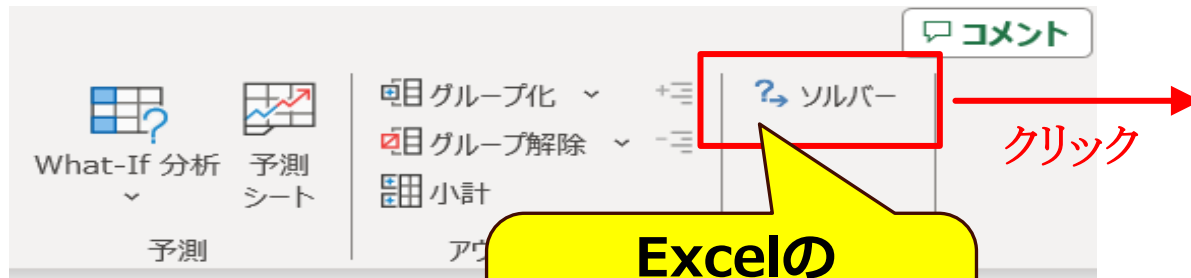


ばらつきが小さいと
サンプルが重なり合って
区別がつかないが...

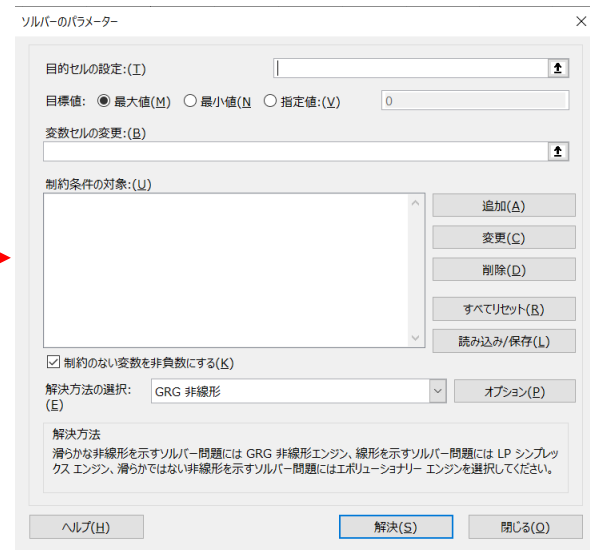
ばらつきが大きくなると
サンプル同士の区別が
つきやすくなる!!

Excelで主成分分析

主成分分析は統計解析用のソフトを必要とする複雑な計算なのですが、Excelのソルバー機能を利用することでほぼ同等の計算が実行できます。



Excelの「データ」タブに表示されます

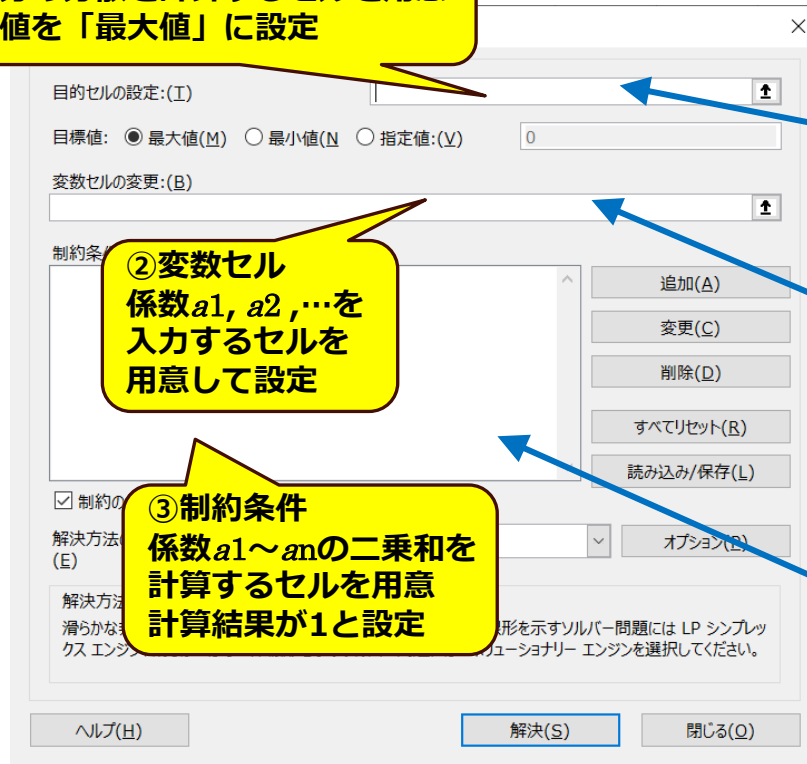


主成分の計算条件とソルバー機能の設定

①目的セル・目標値
主成分の分散を計算するセルを用意
目標値を「最大値」に設定

②変数セル
係数 a_1, a_2, \dots を入力するセルを用意して設定

③制約条件
係数 $a_1 \sim a_n$ の二乗和を計算するセルを用意
計算結果が1と設定



主成分の分散

寄与率

各サンプルの主成分

係数 a

分散

波長

波長	クリマンジヤ1	クリマンジヤ2	クリマンジヤ3	グアテマラ1	グアテマラ2	グアテマラ3
1674	0.0026978	0.002561	0.002646	-0.001103896	-0.00088	-0.00085
1676	0.0027438	0.002619	0.002714	-0.001157206	-0.00097	-0.00103
1678	0.0027555	0.002648	0.002746	-0.00119735	-0.00104	-0.0011
1680	0.0027248	0.002637	0.002738	-0.00122132	-0.0011	-0.00116
1682	0.0026481	0.002588	0.002682	-0.001225214	-0.00114	-0.00119
1684	0.0025189	0.002479	0.002572	-0.001203566	-0.00115	-0.0012
1686	0.0023321	0.00232	0.00232	-0.00115498	-0.00114	-0.00118
1688	0.0020867	0.002104	0.002176	-0.0010786	-0.0011	-0.00113
1690	0.0017776	0.001827	0.001884	-0.000971079	-0.00102	-0.00106
1692	0.001407	0.001487	0.001526	-0.000832871	-0.00092	-0.00095
1694	0.0009788	0.001085	0.001105	-0.000664858	-0.00078	-0.00081
1696	0.0004981	0.000626	0.000626	-0.000470167	-0.00062	-0.00064
1698	-2.49E-05	0.000121	0.000102	-0.000254616	-0.00044	-0.00046
1700	-0.000579	-0.00042	-0.00046	-2.25658E-05	-0.00023	-0.00025

係数の二乗和

吸光度二次微分
スペクトルの形式で
データを出力

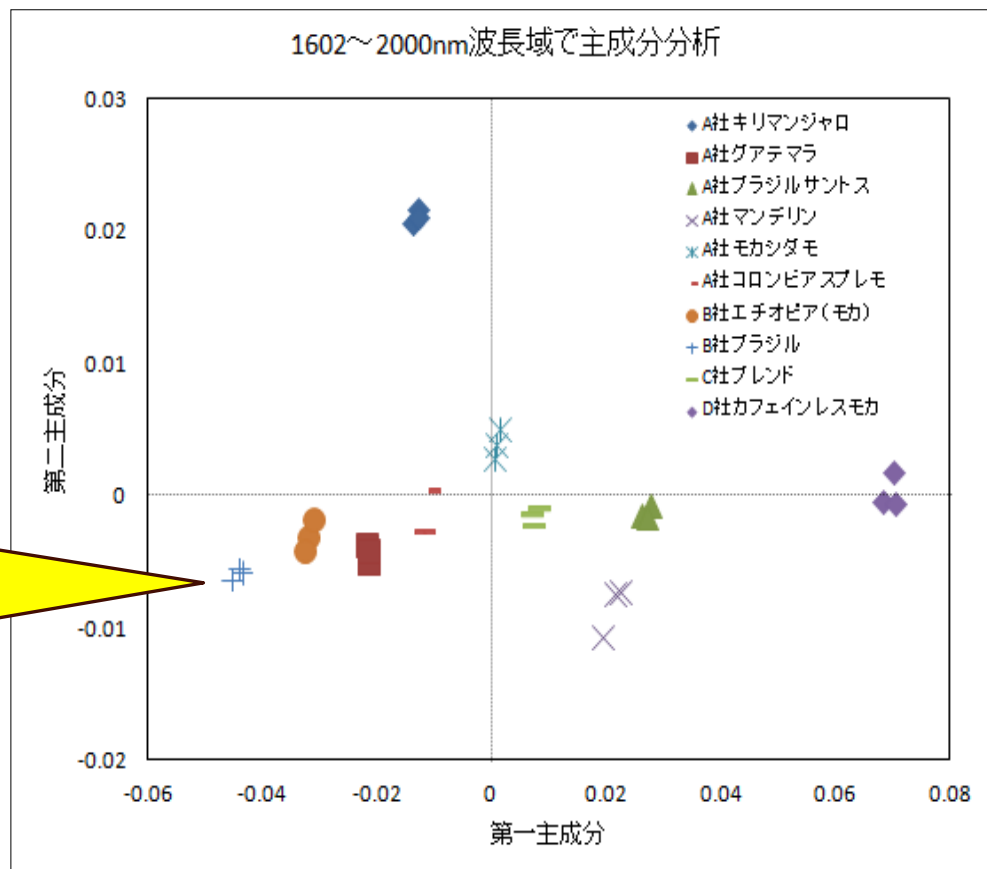
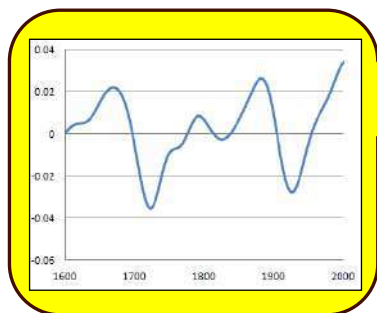


波形データ



主成分得点で散布図を描くと…(スコアプロット)

元の近赤外
スペクトルを
グラフ上の点
一つで表現

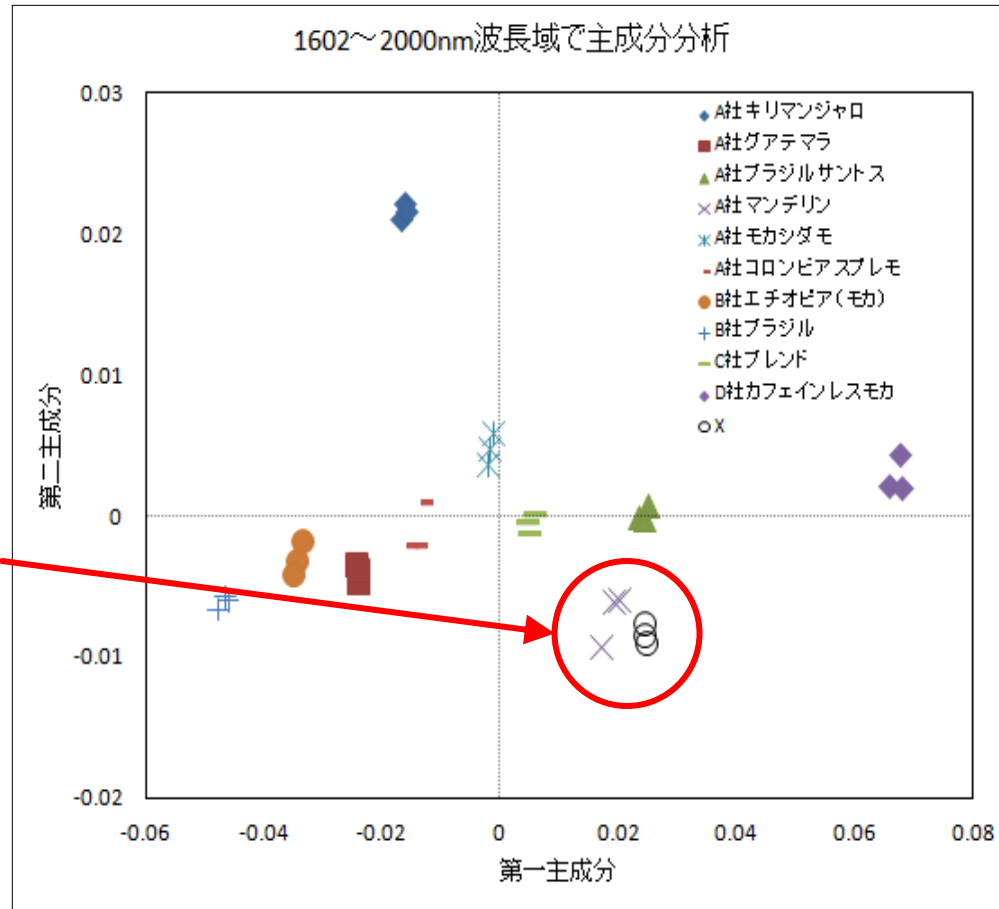


主成分として特徴が
要約されているので、
同じサンプル(=同じ
特徴)はまとまった
位置で表現されます。



重なり合っていた
近赤外スペクトルが
サンプルごとに
判りやすく可視化
されました!!

未知のサンプルを合わせて主成分分析を行うと…



未知サンプルXがマンデリンの側にプロットされている



二つのサンプルは似ているのでは？

スペクトルの特徴が主成分として要約されているので、近い位置にあるものは似た者同士と言える？



未知のサンプルが既存のサンプルに似ているか否かを判断する材料にもなりそうです。

まとめ

- 近赤外スペクトルにはサンプルの特徴や個体差の情報がある
 - 多変量でもあるスペクトルは主成分分析で情報を要約できる
- 制限はあるが、Excelのソルバー機能で実行可能
- 要約した数値を図にすることでデータ全体を可視化できる



- 通年製造・流通している製品の季節変動(旬)を可視化
 - 仕入れた商品が既存のブランドや区分に似ているか推定
- ……などに応用できるのではないのでしょうか。

ご清聴、ありがとうございました。

jwp

