

2024年度 近赤外線栄養成分測定研究会

カロリーアンサーによる
コーヒーをモデルとした異常品の判別

2024年6月5日

株式会社ジョイ・ワールド・パシフィック

田中 清人

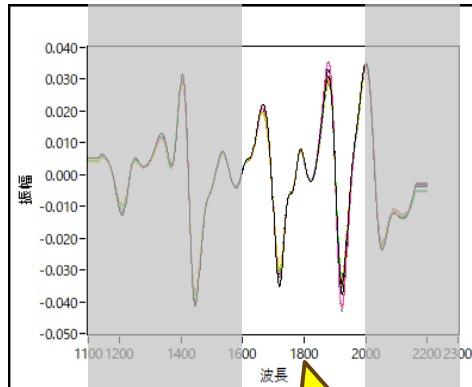
測定装置は最新モデルを使用



2023年8月 販売開始の最新モデル
カロリーアンサー CA-Hi

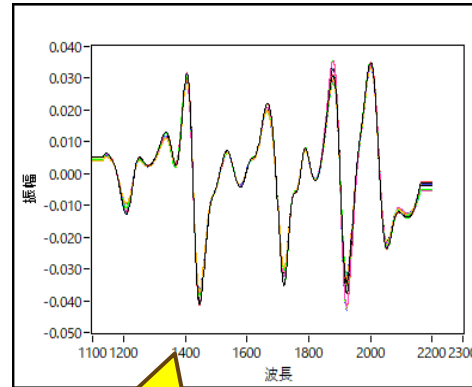
コーヒーの近赤外スペクトルを主成分分析

前回のPCA



スペクトルの一部だけをExcelで計算

今回のPCA



スペクトル全体を計算
サンプルから得られる情報をフル活用!!

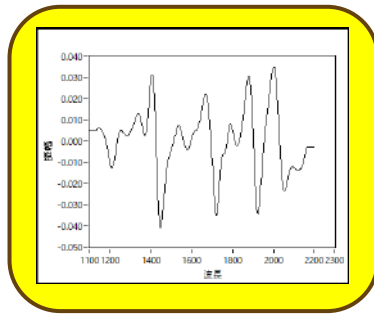


サンプル名	第一主成分	第二主成分	寄与率	
	0.01893	-0.016438	第一主成分	62.1%
キリマンジャロ	⋮	⋮	第二主成分	21.3%
	0.017617	-0.017372		
	0.021757	0.017887	累積寄与率	83.4%
グアテマラ	⋮	⋮		
	0.022026	0.018924		
⋮	⋮	⋮		
⋮	⋮	⋮		
	0.025679	0.011119		
コロンビアスプレモ	⋮	⋮		
	⋮	⋮		
	0.02566	0.011435		

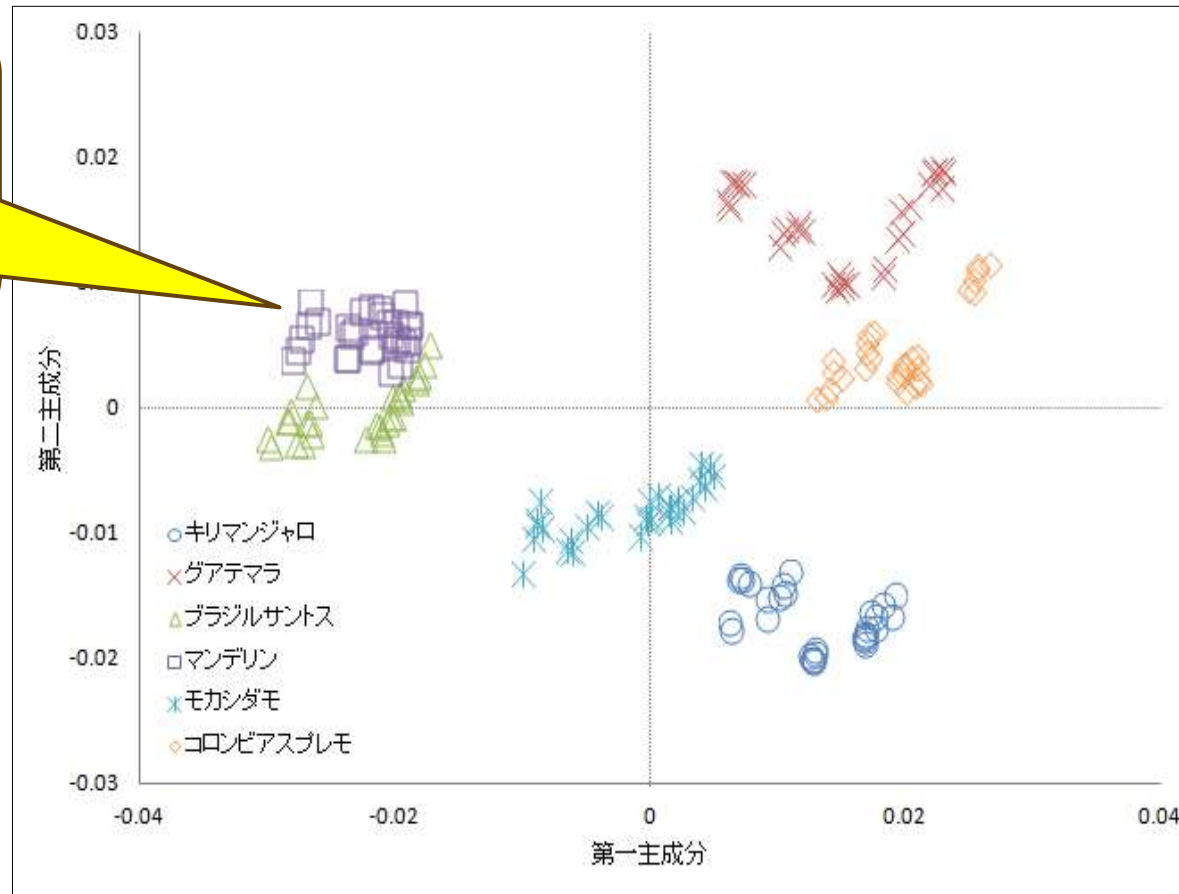


サンプルの情報が2つの数値に要約されたので、散布図を作成

主成分スコアで散布図を描画(スコアプロット)



近赤外スペクトルの
83.4%に相当する
情報が散布図の点で
表現されている



主成分として特徴が
要約されているため、
同じサンプル(=同じ
特徴)は互いに近い
位置にまとまる。

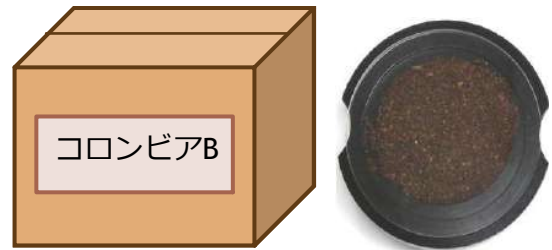


互いに遠い位置に
あるサンプルは、
特徴が異なるもの
(=互いに別物)で
あると考えられる。

判別したい未知のサンプルを測定



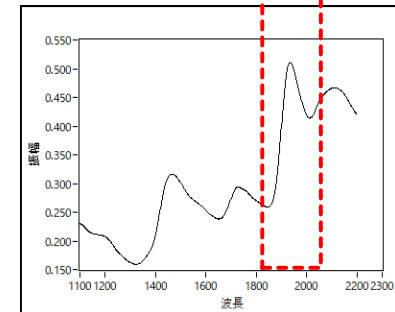
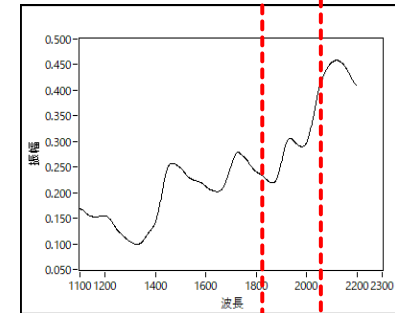
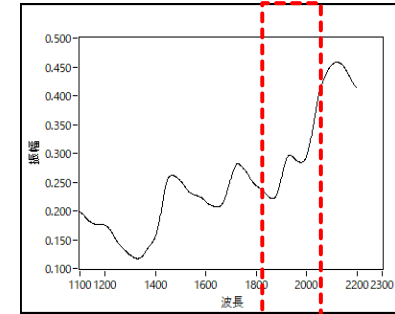
サンプル①



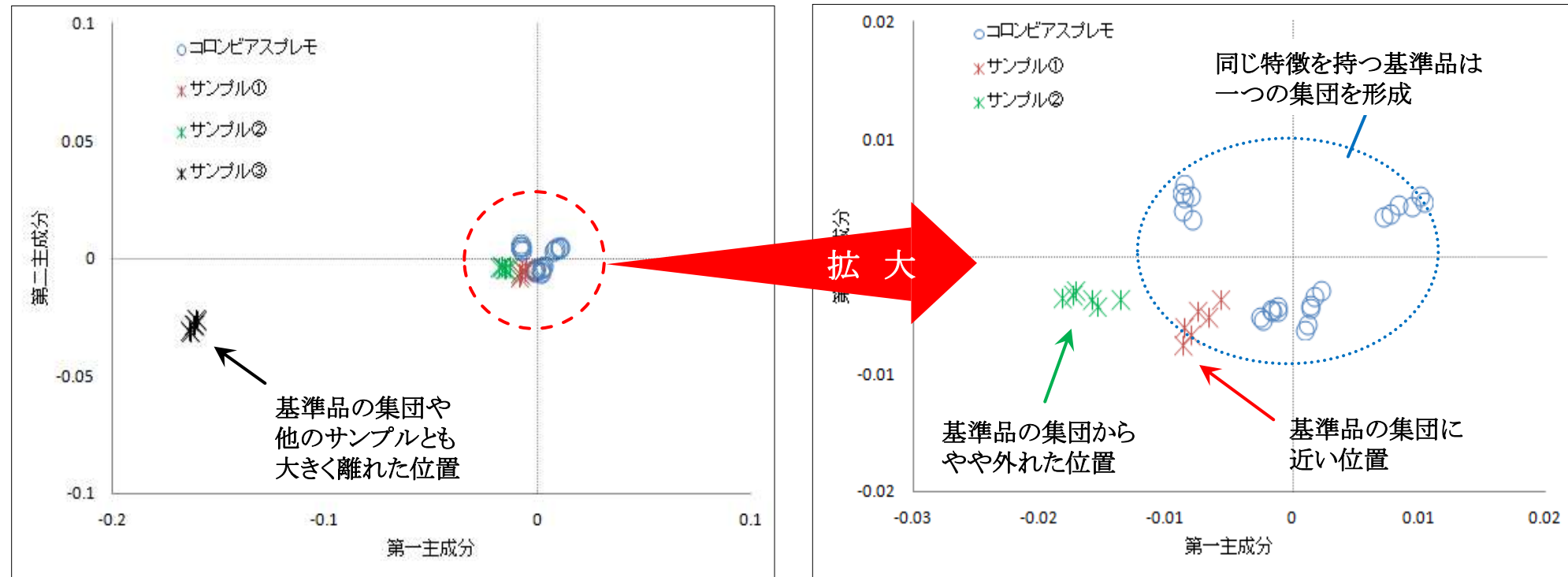
サンプル②



サンプル③

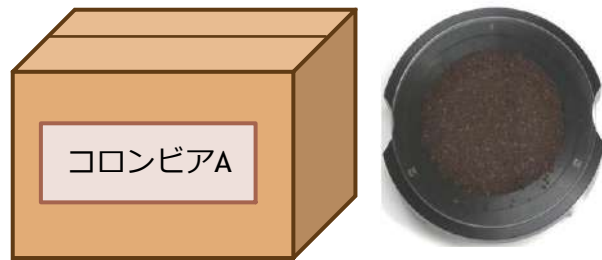


未知品のスコアを基準品のスコアプロットに描画

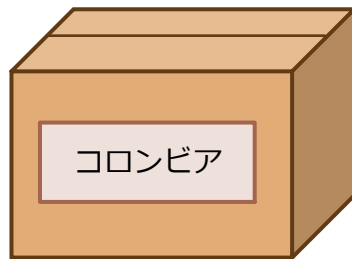


基準品と特徴が異なると考えられるサンプルが浮き彫りに!!

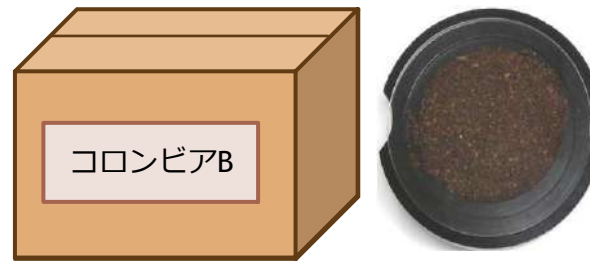
未知のサンプル①～③の正体



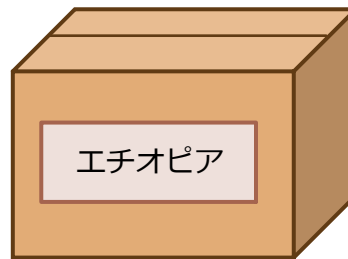
サンプル①
(基準品に近い)



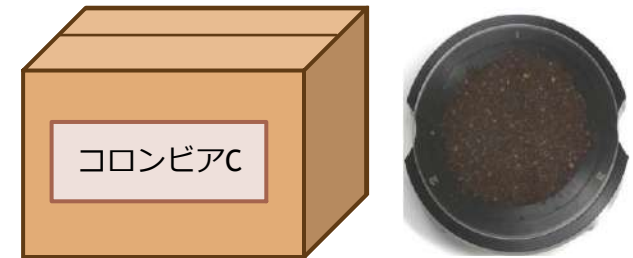
コロンビア産コーヒー
(基準品と同じもの)



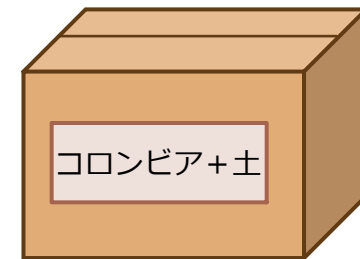
サンプル②
(基準品からやや離れた位置)



エチオピア産コーヒー
(基準品と異なるもの)

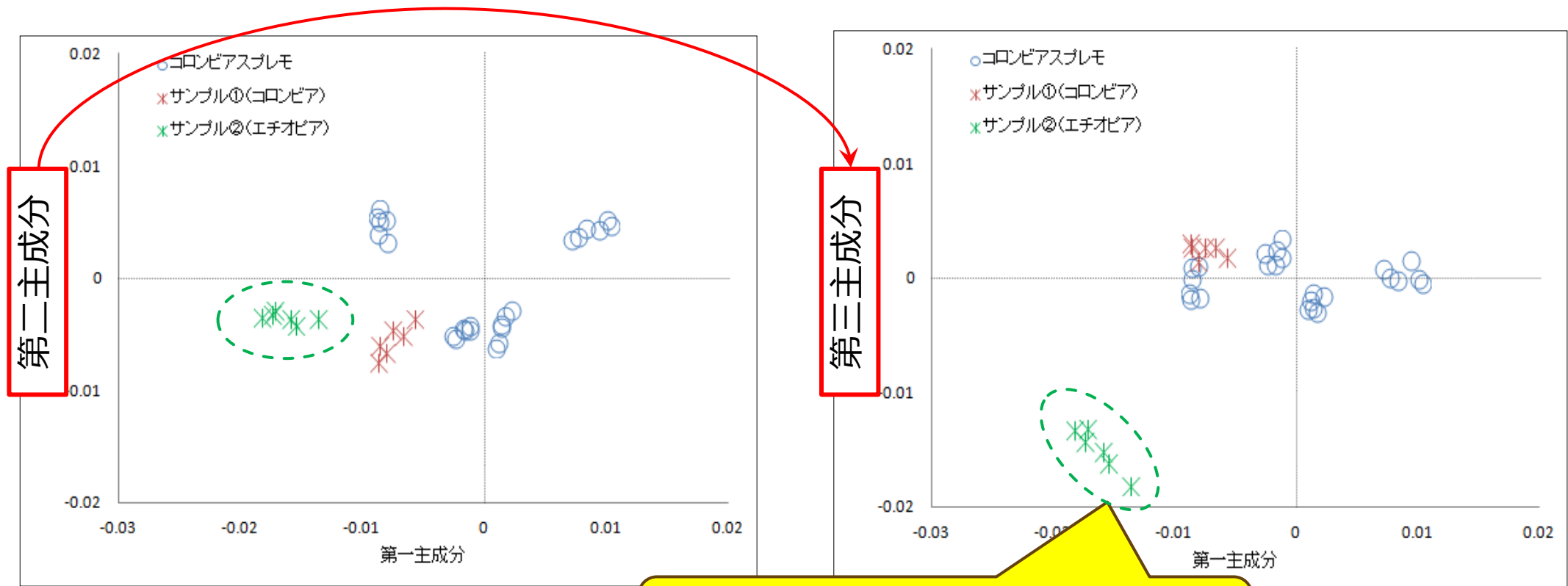


サンプル③
(他と大きく離れた位置)



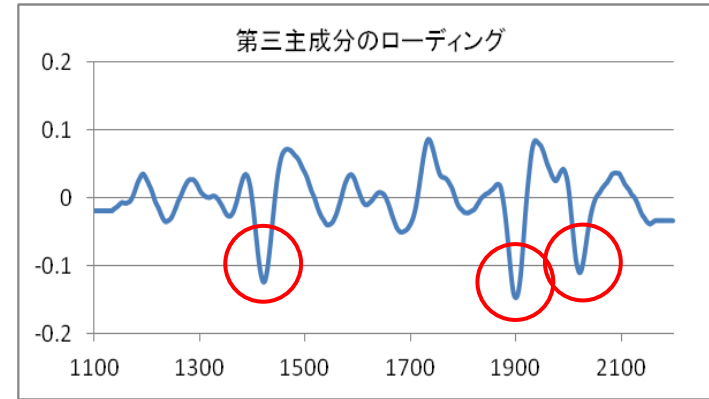
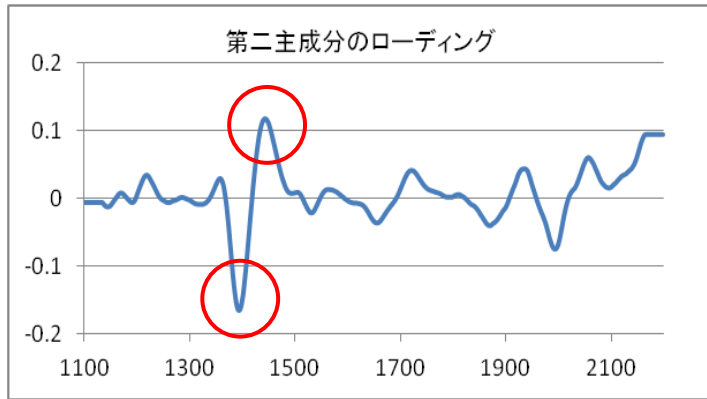
コロンビア産コーヒーに
土が混ざったもの

スコアプロットに引用する主成分を変更

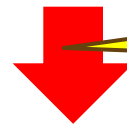


異常品と判断したいサンプル②が
基準品とより離れた状態に!!

第二主成分と第三主成分は何が異なる？



近赤外スペクトルをスコアに変換するためのローディングが異なる



各主成分が要約している
特徴はそれぞれ異なる

ローディングは主成分分析で要約した特徴の「中身」を表している

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り、主成分分析で情報を要約、分かりやすく可視化できる
- スコアプロット上の位置を利用して異常品を判別できる
(引用する主成分を変更して判別に必要な情報を増やせる)



- 良品群を基準として新規の製品・仕入品に異常がないか確認
- 既存の商品等と比較して類似性または異質さを評価
……などに応用できると考えられる。

ご清聴、ありがとうございました。

jwp



Joy World Pacific Co., Ltd. All rights reserved.