

(続紙 1)

京都大学	博士 (農 学)	氏名	単 佳佳
論文題目	Prediction of Roasting Degrees and Chlorogenic Acid Concentration of Coffee by NIR Spectroscopy (近赤外分光法によるコーヒーの焙煎度とクロロゲン酸濃度の推定)		
(論文内容の要旨)			
<p>コーヒーは世界で最も人気のある飲料の一つであり、最近の研究からコーヒー中のCGA (Chlorogenic acid) に血糖値調整等の機能が示唆されていることから、食品メーカーなどからも注目されている。この物質は焙煎過程で減少することや芳香成分の一種であることから、コーヒー豆から飲料物が製造される工程においてこの物質がモニタリングできることが望まれており、現在はこの定量分析には高速液体クロマトグラフィーなどの化学分析による手法が使われている。しかしながら、この手法は、抜き取り検査が基本となり、時間も要するためコーヒー製造工程への迅速なフードバックが困難である。近年、近赤外分光法は非侵襲かつ非破壊で定量・定性評価が可能なことから、さまざまな食品や農産物検査への応用が検討されているが、コーヒーのCGA濃度の推定に利用されている例は無い。そこで本研究では近赤外分光法で得た分光スペクトルに対してケモメトリックスを適用し、コーヒー中のCGA濃度を推定する技術の開発を目指している。</p> <p>本論文は6章で構成され、第1章で研究背景や先行研究について整理したのち研究目的が述べられている。第2章では本研究で用いた計測装置の仕様や原理が述べられた後、スペクトル解析に供したケモメトリックスの手法およびデータの評価方法について整理されている。コーヒー豆は、大きく Arabica 種と Robusta 種に大別される。そこで第3章ではまず、Antigua 産のこれら2種類の未焙煎の豆を入手し、グラインダーで細かく粉砕した後に近赤外領域におけるスペクトルで、これら2種類の判別が可能か否かの検討を行った。このとき拡散反射光を用い、Arabica 種 24 サンプル、Robusta 種 25 サンプルにおいて、1000 nm から 2200 nm 帯域のスペクトルを取得したのち、主成分分析 (Principle component analysis, PCA) を用いて判別を試みた結果、MSC (Multiplicative scatter correction) でスペクトル間の補正を行って PCA を行うことで、100 %の精度で判別することに成功した。さらにコーヒー豆に含まれる CGA 量は、焙煎の過程でその一部が芳香となって空気中に抜け出すため、焙煎の程度でコーヒー中の CGA 量が減少することとなる。そこで近赤外分光スペクトルを利用して焙煎時に減少する水を観測することで、焙煎の程度を判別することを提案した。グラインダーで粉砕した焙煎の程度の異なる Arabica 種を用いた結果、部分最小二乗 (Partial least square, PLS) 回帰を用いることで、1111 nm, 1225 nm, 1450 nm, 1725nm, 1940 nm で高い相関を得た。さらに線形重回帰 (Multiple Linear Regression) で最適化した結果、1225 nm, 1725 nm, 1940 nm の3つが選択され、RMSECV が 0.61, $R_c v^2$ が 0.98 という良好な結果を得ることに成功した。</p> <p>第4章では、自身で高速液体クロマトグラフィーを用いて分析した CGA 濃度と近赤外スペクトルの関係について調査し、PLS 回帰を用いて検量線モデルを開発してい</p>			

る。ここでは、異なる前処理（平滑化，MSC，一次，二次微分，標準正規化，ベースライン補正）を検討した。最終的に構築したモデルでは RMSECV が 1.10 %， Rcv^2 が 0.76 という結果を得ることに成功し，拡散反射法を用いた近赤外分光法が，粉碎したコーヒー豆中の CGA 濃度の推定に利用できる可能性を明らかにした。さらに第 5 章にてフィルタリングして抽出された液体コーヒー中の CGA 濃度の推定には，直交シグナル補正（OSC）の前処理と区間部分最小二乗（iPLS）法を用いることで，水の影響を受けにくい検量線モデルの開発に有効であることを明らかにした。iPLS 回帰モデルの性能をフルバンドのスペクトルを利用した PLS 回帰モデルと比較したところ，iPLS 回帰モデルの方が良好であり，800-950 nm，1000-1150 nm，1350-1400 nm，1550-1650 nm を選択することで，RMSEP と $Rval^2$ はそれぞれ 0.62%，0.68 という結果を得た。

第 6 章ではコーヒーの品質評価のために近赤外分光法を適用した本研究の結果，コーヒーの CGA 量と関連の深い焙煎の程度に，近赤外領域の吸収と高い相関が認められ，本研究で提案する本手法が簡便かつ迅速な計測法になると論じている。最後に本手法を実際のコーヒー生産の検査に適応する際の技術課題について論じ，本研究を総括している。

注) 論文内容の要旨と論文審査の結果の要旨は 1 頁を 38 字×36 行で作成し，合わせて，3,000 字を標準とすること。

論文内容の要旨を英語で記入する場合は，400～1,100 words で作成し
審査結果の要旨は日本語 500～2,000 字程度で作成すること。

(続紙 2)

(論文審査の結果の要旨)

本研究は、近赤外分光法を用いて機能性食品として注目されているコーヒー中のCGA(クロロゲン酸)濃度の簡便かつ迅速な計測手法の開発を目指した実学的な研究である。これまで、近赤外分光法でコーヒーの香りや味といった官能的なパラメータを評価する試みや、カフェインの定量評価への試みは報告されているが、CGA濃度の推定はほとんど報告されていない。本論文は、コーヒー豆の焙煎の程度やCGA濃度と近赤外分光スペクトルの関係をケモメトリックスによる解析手法と組み合わせて検討したものであり、評価できる点は以下の通りである。

1. 近赤外領域に存在する水の情報を積極的に利用し、すでに報告されているCGA濃度と焙煎の程度との関係を水分量の変化として近赤外分光法で評価するという手法を提案し、高い決定係数と測定精度を得ることに成功した。
2. ケモメトリックスを組み合わせることによりCGA濃度を推定するための最適な波長を決定し、高い相関を得た。これにより、分光装置を用いることなく、LED等の簡便かつ安価な技術を用いたCGA濃度の推定可能性を示した。
3. 近赤外分光法による水溶液中の成分分析では必ず水の影響を受けるが、iPLSを利用することで抽出後のコーヒー中の水による吸収影響を低減し、その有効性を示した。

以上のように、本論文は近赤外分光法によるコーヒー中のクロロゲン酸濃度の推定を目指した研究として、ケモメトリックスを適用することで、その可能性を明らかにしたものであり、生物センシング工学、フィールドロボティクス、農業システム工学の発展のみならず、食品や農産物等の非破壊検査にも寄与するところが大きい。

よって、本論文は博士(農学)の学位論文として価値あるものと認める。

なお、平成27年1月9日、論文並びにそれに関連した分野にわたり試問した結果、博士(農学)の学位を授与される学力が十分あるものと認めた。

また、本論文は、京都大学学位規程第14条第2項に該当するものと判断し、公表に際しては、当該論文の全文に代えてその内容を要約したものとすることを認める。

注) 論文内容の要旨、審査の結果の要旨及び学位論文は、本学学術情報リポジトリに掲載し、公表とする。

ただし、特許申請、雑誌掲載等の関係により、要旨を学位授与後即日公表することに支障がある場合は、以下に公表可能とする日付を記入すること。

要旨公開可能日： 年 月 日以降 (学位授与日から3ヶ月以内)