

TUMSAT-OACIS Repository - Tokyo

University of Marine Science and Technology

(東京海洋大学)

ニューラル・ネットワーク・モデリングによる
「おいしさ」評価と設計法

メタデータ	言語: jpn 出版者: 公開日: 2020-03-23 キーワード (Ja): キーワード (En): 作成者: 柴田, 真理朗 メールアドレス: 所属:
URL	https://oacis.repo.nii.ac.jp/records/1885

ニューラル・ネットワーク・モデリングによる 「おいしさ」評価と設計法

東京海洋大学 学術研究院 食品生産科学部門 助教

しば た ま り お
柴 田 真 理 朗

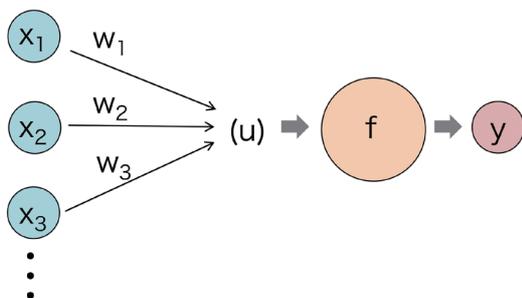
1. はじめに

近年、機械学習の一手法であるニューラルネットワークをベースとした深層学習によるAI技術が話題となっている。本稿では、ニューラルネットワークの基礎的知識および、そして魚肉のおいしさ、つまり鮮度と、機器計測データをニューラルネットワークによって関連付けた事例について述べる。

2. ニューラルネットワーク

2.1 パーセプトロン

パーセプトロン (Rosenblatt 1958) はニューラルネットワークの起源となるモデルであり、脳における情報伝達のモデルの1つである。第1図に示すように、パーセプトロンは複数の信号 x_1, x_2, \dots, x_k に結合荷重 (Connection weight) w_1, w_2, \dots, w_k によって重みづけをした上で定数を含めて加算した u を入力として受け取り、活性化関数 (Activation function もしくは伝達関数 (Transfer function)) と呼ばれる関数 f によって y を出力する。活性化関数 f としては、ステップ



第1図 パーセプトロン

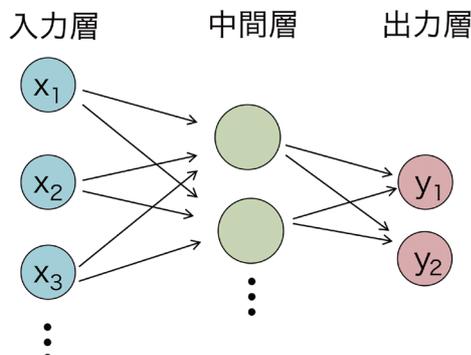
関数、シグモイド関数やランプ関数などが用いられる。

2.2 ニューラルネットワーク

ニューラルネットワークは上述のパーセプトロンを任意に接続したモデルである。最も著名なのは、第2図に示す三層ニューラルネットワークと呼ばれるモデルである。このモデルでは、任意の数の入力変数 (説明変数)、パーセプトロンおよび出力変数 (目的変数) を図のように並べ、入力変数とパーセプトロン、パーセプトロンと出力変数が結合荷重をつけた上で接続されている。左の列を入力層、中間の列を中間層 (もしくは隠れノード (Hidden layer)), 一番右の列を出力層、と呼ぶ。この構造の優れた点は任意の関数を近似できることである (Cybenko 1989)。

2.3 ニューラルネットワークにおける学習および最適化

三層ニューラルネットでは任意の関数を近似できるのなら、万能性ゆえにニューラルネットは最も有力なツールと考えられるが、実際にニューラルネットワークは相当の試行錯誤を必要とする。ま



第2図 三層ニューラルネットワーク

ず、ニューラルネットワークモデリングは、ニューラルネットの結合荷重を求める様々なパラメータ設定を含むプロセス（学習）に依存する。そのため、それらの最適化が必要である。三層ニューラルネットワークに限れば、活性化関数、ノード数（パーセプトロンの数）、さらに学習法を変化させることができる。代表的な学習法として逆誤差伝播法 (Back-propagation) (Rumelhart et al. 1986)、共役勾配法 (Barnard et al. 1989) および Levenberg-Marquardt 法 (Marquardt 1963, Hagan et al. 1994, Lera et al. 2002) などが知られている。基本的には教師付学習が主であるが、教師なし学習 (Rumelhart et al. 1985) や強制学習 (reinforcement learning) (Kaelbling et al. 1996) も存在する。さらに、その他のネットワークの形を許すならば、層の数やノードの接続など多数の要素が最適化される必要がある。

また、ニューラルネットワークモデリングでは、モデルがモデリングに用いたデータにはよく適合するが、別のデータセットに対しては適合しなくなる過学習 (Overtraining または Overfitting) がしばしば生じる。そのためには、最低限データを学習データ (Training set) と検証データ (Validation set) に分割し、学習データによってニューラルネットワークを決定し、検証データへのあてはめによってモデルの良し悪しを評価する必要がある。さらに、学習は学習データにも依存する。これは人間に例えると、学習教材によって、学習結果が変わるようなことである。

つまり、ニューラルネットワークモデリングで重要なことは、いかに過学習を避けて一般性もしくは合目的性を持つモデルを作る (汎化, Generalization) ことにある。モデルの汎化のためには、コスト関数に正則化項 (Regularization term) を付加すること (Girosi et al. 1995) や、早期終了アルゴリズム (Early stopping) (Prechelt 1998, Yao et al. 2007) の適用などが行われる。Early stopping は学習データをさらに、学習データとクロスバリデーションデータに分割し、クロ

スバリデーションデータセットのコスト関数値が上昇するところで、学習を止める方法である。また、局所最適を防ぐため、ヒューリスティックアプローチ (Ojha et al. 2017) が併用されることがある。

3. 食品分野でのニューラルネットワーク適用例

ニューラルネットワークは食品分野の研究では数多く適用されている。Ikeda et al. (2004) は緑茶のチャーム値とアミノ酸総量と官能評価を三層ニューラルネットワークで結びつけ、パネル属性により官能特性を最適化した。Michishita et al. (2010) はコーヒーのレトロネイザルアロマの設計評価のために、官能評価と匂い嗅ぎガスクロマトグラフィー (GC) のデータを三層ニューラルネットワークでモデル化した。ウェイトの荷重積和 (sum of products) によって、官能評価 (Roast, sweet, soy sauce, earthy) に貢献度の高いチャーム値 (sweet-caramel, smoke-roast, acidic) を明らかにした。Llave et al. (2012) はデンプンモデル食品を用い、レトルト加熱中のサンプルパウチの冷点 (cold spot) 温度を、温度、時間、レトルト温度から予測するモデルを構築した。Kono et al. (2015) は、保存温度および期間から冷凍米飯中の氷結晶の相当円直径を予測するモデルをニューラルネットワークにて構築した。

4. ニューラルネットワークと蛍光指紋による魚肉の鮮度予測および魚種判別モデル

4.1 背景

さて、ここでは著者がニューラルネットワークを用いた研究例を紹介する。具体的には、蛍光の網羅的計測手法である蛍光指紋データによって魚肉の鮮度を予想するモデルをニューラルネットワークによって構築した例である。

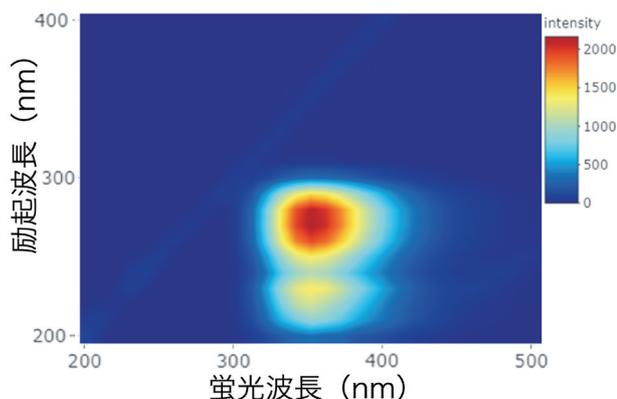
魚肉の鮮度は、おいしさの重要な要因である。様々な鮮度に関する指標が存在するが、刺身用などに用いる魚肉の初期の鮮度変化を示すものとし

では、アデノシン三リン酸 (ATP) の分解物に関する指標である K 値が用いられることが多い。魚介類中の ATP は死後、ATP → ADP → AMP → IMP → Inosine → Hypoxanthine という代謝経路をとる。これらの ATP 分解物の合計に対する Inosine と Hypoxanthine の合計の割合を % で表したものが K 値であり (Saito et al. 1959), 式 (1) (下記) に示す。K 値は一般に、活魚では 0 ~ 10%, 刺身用魚肉は K 値が 20% 以下、またすり身などの加工用魚肉は 60% 以下とされている (小関ら 2006)。また、他にも ATP に関連した指標としては、K 値の他に K_i 値 (Karube et al. 1984) や AEC (Adenylate energy charge) (Atkinson 1968) などが知られている。

蛍光指紋は励起および蛍光波長を走査して得られる網羅的蛍光データである。励起波長、蛍光波長および蛍光強度を等高線図で表すと、**第3図**のように指紋のように見えることから蛍光指紋と呼ばれる。蛍光特性に関する網羅的な情報量を持つ蛍光指紋の特徴を利用して、これまで数多くの食品および農産物の成分を計測した研究例が存在する (Shibata et al. 2011, Yoshimura et al. 2014, Kokawa et al. 2015, Kokawa et al. 2017, Trivittayasil, et al. 2017)。

これまでに魚肉の鮮度評価を目的としたセンシング技術は、Karube et al.(1984) が開発した酵素反応を利用したセンサー、Hoshi et al.(1991) による微生物を利用したセンサーなどがある。しかしこれらの鮮度評価方法は試料の破壊を含む前処理が必要である。蛍光指紋を用いれば、少ない前処理で試料を非破壊で迅速に測定できる。そのため魚肉の鮮度に関しても研究が進められている (ElMasry et al. 2015, ElMasry et al. 2016, Shibata, et al. 2018)。

以下にマグロ魚肉を試料として、その蛍光指紋



第3図 蛍光指紋図

からマグロの鮮度 (K 値) および種類 (クロ, メバチ, キハダ) をニューラルネットワークで予測した研究例を述べる。

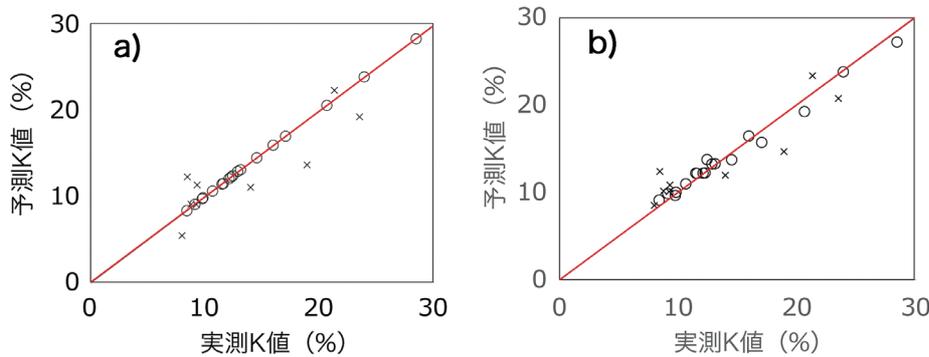
4.2 蛍光指紋および鮮度 (K 値) の測定

水中解凍 (1, 2, 3 h), 氷水解凍 (2, 3, 4 h), 低温解凍 (24, 42, 72h) の9つの解凍条件にしたがってマグロ試料を解凍後、その表面の蛍光指紋を励起および蛍光の同軸ファイバを接続した蛍光分光光度計 (F7000, 日立ハイテクサイエンス) を用いて測定した。その際、励起および蛍光波長は、250から600nm まで10nm ごとに設定した。蛍光指紋測定後、試料の光照射部位を中心に2.5 g 採取後、0.4M 過塩素酸水溶液20mL を加えホモジナイズし、遠心分離後の上澄み液 5 mL を分取し、2 M 炭酸カリウム 1 mL を加えてさらに遠心分離した。得られた上澄み液を 0.22μm のメンブランフィルタで濾過した後、HPLC 分析に供した。HPLC 測定は高速液体クロマトグラフィー (日立ハイテクサイエンス) を使用した。カラムは、Asahipak GS-320HQ (昭和電工) を用い、ATP 関連物質を260nm の吸収波長で定量した後、K 値を算出した。

4.3 解析方法

説明変数を蛍光指紋の各波長条件に対応する蛍光強度とし、K 値を予測するモデルを中間層のノード数 10 の三層ニューラルネットワークにより構築した。なお、

$$\text{式(1)} \quad K \text{ 値}(\%) = \frac{\text{Inosine} + \text{Hypoxanthine}}{\text{ATP} + \text{ADP} + \text{AMP} + \text{IMP} + \text{Inosine} + \text{Hypoxanthine}} \times 100$$



第4図 K値の実測値と予測値のプロット
 a) PLS回帰分析 b)ニューラルネットワーク (○…トレーニング群 x…バリデーショング群)

中間層は正接シグモイド関数とした。比較対象として、ケモメトリクスで比較よく用いられる部分最小二乗回帰 (PLS 回帰) 分析を行った。

さらに、複数のマグロの魚種を判別するモデルを、中間層のノード数10の三層ニューラルネットワークにより構築した。なお、中間層は正接シグモイド関数、分類層はソフトマックス関数を用いた。比較のために、正準判別分析 (ステップワイズ法) を行った。また、ニューラルネットワークでは式 (2) に示す正則化項を付加したコスト関数を利用し、ネットワークを最適化した。

$$\text{cost} = (1 - \gamma) \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N e_i^2 + \gamma \frac{1}{M} \sum_{j=1}^M w_j^2 \quad (2)$$

ここで、 e_i は誤差、 γ は正則化率、 w_j は結合荷重である。なお、解析ソフトウェアは、JMP 11 (SAS Institute, Inc) および MATLAB R2017b (MathWorks, Inc.) を用いた。

4.4 結果

第4図にK値の実測値と予測値のプロットを示す。a)はPLS回帰分析、b)はニューラルネットワークによるものである。平均二乗誤差 (Root mean squared error) は、PLS回帰分析ではトレーニング群0.00%、バリデーショング群8.86%であり、一方、ニューラルネットワークのときはトレーニング群0.56%、バリデーショング群6.07%であった。ニューラルネットワークの方がバリデーショングにおいてやや良いあてはめを示した。この理由

として、ネットワークの最適化によって過剰適合が抑えられたことが考えられる。

正準判別分析およびニューラルネットワークによる種類判別の結果を第1表に示す。行方向に判別結果を示されている。例えば、正準判別分析の第1行は、クロマグロのデータが入力されたとき、クロマグロと判別

されたのが6サンプル、キハダマグロが1サンプル、およびメバチマグロが2サンプルという意味である。誤判別率は、正準判別分析では22.2%、一方ニューラルネットワークでは11.1%となった。ニューラルネットワークは正準判別分析と比較して高い精度を持つモデルが得られた。

第1表 正準判別分析およびニューラルネットによる魚種判別結果

正準判別分析			
	判別結果		
	クロ	キハダ	メバチ
クロ	6	1	2
キハダ	0	8	1
メバチ	2	0	7

ニューラルネット			
	判別結果		
	クロ	キハダ	メバチ
クロ	9	0	0
キハダ	0	7	2
メバチ	0	1	8

5. まとめ

ニューラルネットワークは万能ではあるが、過剰適合を防ぐためにモデルのパラメータおよび学習方法の最適化を必要とする。正則化項を付加したコスト関数を用いた三層ニューラルネットワークによって魚肉の鮮度の予測および魚種の判別において既存の手法よりも良いあてはめが得られた。今後は他の魚種や条件の異なる試料などにモデルが適用可能か検証していく予定である。

参 考 文 献

- Atkinson, D. E. (1968). Energy charge of the adenylate pool as a regulatory parameter. Interaction with feedback modifiers. *Biochemistry* **7**(11): 4030-4034.
- Barnard, E. and Cole R. A. (1989). A neural-net training program based on conjugate gradient optimization. <https://digitalcommons.ohsu.edu/cgi/viewcontent.cgi?article=1198&context=csetech> (2018/11/26アクセス)
- Cybenko, G. (1989). Approximation by superpositions of a sigmoidal function. *Math. Control Signals Syst.* **2**(4): 303-314.
- ElMasry, G., Nagai, H., Moriya, K., Nakazawa, N., Tsuta, M., Sugiyama, J., Okazaki, E. and Nakauchi, S. (2015). Freshness estimation of intact frozen fish using fluorescence spectroscopy and chemometrics of excitation–emission matrix. *Talanta* **143**(1): 145-156.
- ElMasry, G., Nakazawa, N., Okazaki, E. and Nakauchi, S. (2016). Non-invasive sensing of freshness indices of frozen fish and fillets using pretreated excitation–emission matrices. *Sensor Actuat. B* **228**: 237-250.
- Girosi, F., Jones, M. and Poggio, T. (1995). Regularization Theory and Neural Networks Architectures. *Neural Comput.* **7**(2): 219-269.
- Hagan, M. T. and Menhaj, M. B. (1994). Training feedforward networks with the Marquardt algorithm. *IEEE Trans. Neural Netw.* **5**(6): 989-993.
- Hoshi, M., Sasamoto, Y., Nonaka, M., Toyama, K. and Watanabe, E. (1991). Microbial sensor system for nondestructive evaluation of fish meat quality. *Biosen. Bioelectron.* **6**(1): 15-20.
- Ikeda, G., Nagai, H. and Sagara, Y. (2004). Development of Food Kansei Model and Its Application for Designing Tastes and Flavors of Green Tea Beverage. *Food Sci. Technol. Res.* **10**(4): 396-404.
- Karube, I., Matsuoka, H., Suzuki, S., Watanabe, E. and Toyama, K. (1984). Determination of fish freshness with an enzyme sensor system. *J. Agri. Food Chem.* **32**(2): 314-319.
- Kokawa, M., Ikegami, S., Chiba, A., Koishihara, H., Trivittayasil, V., Tsuta, M., Fujita, K. and Sugiyama, J. (2015). Measuring Cheese Maturation with the Fluorescence Fingerprint. *Food Sci. Technol. Res.* **21**(4): 549-555.
- Kokawa, M., Nishi, K., Ashida, H., Trivittayasil, V., Sugiyama, J. and Tsuta, M. (2017). Predicting the Heating Temperature of Soymilk Products Using Fluorescence Fingerprints. *Food Bioprocess Tech.* **10**(3): 462-468.
- Kono, S., Kawamura, I., Yamagami, S., Araki, T. and Sagara, Y. (2015). Optimum storage temperature of frozen cooked rice predicted by ice crystal measurement, sensory evaluation and artificial neural network. *Int. J. Refrig.* **56**(0): 165-172.
- Lera, G. and Pinzolas, M. (2002). Neighborhood based Levenberg-Marquardt algorithm for neural network training. *IEEE Tran. Neural Netw.* **13**(5): 1200-1203.
- Kaelbling, L. P., Littman, M. L. and Moore, A. W. (1996). Reinforcement Learning: A Survey. *J. Artif. Intell. Res.* **4**: 237-285.
- Llave, Y. A., Hagiwara, T. and Sakiyama, T. (2012). Artificial neural network model for prediction of cold spot temperature in retort sterilization of starch-based foods. *J. Food Eng.* **109**(3): 553-560.
- Marquardt, D. W. (1963). An Algorithm for Least-Squares Estimation of Nonlinear Parameters. *Soc. Ind. Appl. Math.* **11**(2): 431-441.
- Michishita, T., Akiyama, M., Hirano, Y., Ikeda, M., Sagara, Y. and Araki, T. (2010). Gas Chromatography/Olfactometry and Electronic Nose Analyses of Retronasal Aroma of Espresso and Correlation with Sensory Evaluation by an Artificial Neural Network. *J. Food Sci.* **75**(9): S477-S489.
- Ojha, V. K., Abraham., A and Snášel, V. (2017). Metaheuristic design of feedforward neural networks: A review of two decades of research. *Eng. Appl. Artif. Intell.* **60**: 97-116.
- Prechelt, L. (1998). Automatic early stopping using cross validation: quantifying the criteria. *Neural Netw.* **11**(4): 761-767.
- Rosenblatt, F. (1958). The perception: a probabilistic model for information storage and organization in the brain. *Psychol. Rev.* **65**(6): 386-408.
- Rumelhart, D. E., Hinton, G. E. and Williams, R. J. (1986). Learning representations by back-propagating errors. *Nature* **323**(9): 533-536.
- Rumelhart, D. E. and Zipser, D. (1985). Feature discovery by competitive learning. *Cognitive Sci.* **9**(1): 75-112.
- Saito, T., Arai, K. and Matsuyoshi, M (1959). A New Method for Estimating the Freshness of Fish. *B. Jpn. Soc. Sci, Fish.* **24**(9): 749-750.
- Shibata, M., ElMasry, G., Moriya, K., Rahman, M. M., Miyamoto, Y., Ito, K., Nakazawa, N., Nakauchi, S.

- and Okazaki, E. (2018). Smart technique for accurate monitoring of ATP content in frozen fish fillets using fluorescence fingerprint. *LWT* **92**: 258-264.
- Shibata, M., Fujita, K., Sugiyama, J., Tsuta, M., Kokawa, M., Mori, Y. and Sakabe, H. (2011). Predicting the Buckwheat Flour Ratio for Commercial Dried Buckwheat Noodles Based on the Fluorescence Fingerprint. *Biosci. Biotechnol. Biochem.* **75**(7): 1312-1316.
- Trivittayasil, V., Kameya, H., Shoji, Y., Tsuta, M., Kokawa, M. and Sugiyama, J. (2017). Simultaneous estimation of scavenging capacities of peach extract for multiple reactive oxygen species by fluorescence fingerprint method. *Food Chem.* **232**: 523-530.
- Yao, Y., Rosasco, L. and Caponnetto, A. (2007). On Early Stopping in Gradient Descent Learning. *Constr. Approx.* **26**(2): 289-315.
- Yoshimura, M., Sugiyama, J., Tsuta, M., Fujita, K., Shibata, M., Kokawa, M., Oshita, S. and Oto, N. (2014). Prediction of Aerobic Plate Count on Beef Surface Using Fluorescence Fingerprint. *Food Bioprocess Technol* **7**(5): 1496-1504.
- 小関聡, 北上誠, 加藤登, 新井健 (2006). 魚介類の死後硬直と鮮度(K値)の変化. 東海大学紀要海洋学部 **4**: 31-46.