

## 調理科学とケモメトリックス (IV, 最終回)

## 最適化手法とその利用

相島 鐵郎\*

## 1. 最適化とは

豊かな経験や鋭い勘は、その「最適化」能力によって高く評価される。板前は素材に応じて大きさ、調味料の組み合わせ、添加時期と量、火加減、加熱時間などの最適化に名人芸を発揮する。しかし、調理が科学であるためには、そのような最適条件の設定理由を物理や化学の言葉で明確に説明すると共に、法則性を導き出さなければならない。このような最適条件の設定をルール化し、優れた調理を容易に再現できることが望ましい。

本稿の主題である最適化手法は、一定の制約条件下における最適化手順の規則化を目的に開発されてきた<sup>1-3)</sup>。しかし現在のところ①あらゆる最適化問題に適用可能な手法は存在しないし、②複数目的を同時に最適化することは不可能なことを初めに断っておきたい。

## (1) 目的関数と因子

調理の例は最適化問題の中でも複雑な部類に属する。比較的単純な例として魚を焼く火加減と時間を考えてみよう。サンマやアジのように魚の大きさが一定ならば、経験を積んだ主婦や板前ならば最適火加減と時間を直感的に設定するであろう。もちろん火が強すぎれば、内部の蛋白質が熱変成する以前に外側が炭化してしまうし、逆に弱すぎれば熱収支バランスにより、いつになっても内部に火が通らないことになる。

魚を焼いた経験に乏しければ、ある範囲内で火力を調節しながら試行格誤で、美味しく焼くために必要な時間を探する違いない。許容範囲内で火力が強ければ短時間で焼けるであろうし、弱ければ長時間を要する。このように火力に応じて最適時間が変わる場合、火力を固定して最適時間を決めても、火力が変わると最適時間も変化することになる。このような関係は揚げ物における油の温度と時間、クッキーを焼くオープン温度と時間なども同様であろう。

最適化においては魚の焼き具合を表す  $y$  が目的関数である。そして温度と時間を  $x_1$  と  $x_2$  で表し因子と呼び、上記関係を1式で表す。

$$y=f(x)=f(x_1, x_2) \quad (1)$$

1式で個々の因子水準に対応する焼き具合が応答なので、 $y$  を応答関数とも呼ぶ。

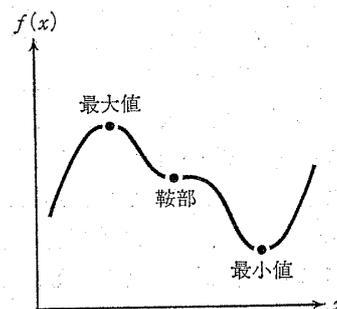


図1: 1因子関数  $f(x)$  における因子水準 ( $x$ ) と応答の関係

さらに簡単な例で、一つの因子により最適値が決定される目的関数では、両者の関係は図1となる。このような系では、制約範囲内で  $x$  の水準を一定方向に増減させて  $f(x)$  の変化を調べる一因子最適化法により最大値、最小値およびそれに対応する因子水準を容易に決定できる。なお目的関数では符号を逆にすると最大化問題は最小化問題となるので、全く同じと考えてよい。

## (2) 複数因子の最適化

因子数が二つ以上になると因子と目的関数との関係は二次元では表せず、二つの因子と応答から成る三次元となる。このような複数因子の組み合わせに対して応答が示す曲面を応答曲面と呼び、それを二次元平面に投影して得られるのが等高線である(図2)。もし二つの因子間に相互作用が存在しなければ、単に因子数が増えただけなので応答曲面の等高線は円となり、一因子最適化手法の繰り返して最適点に到達できる(図3)。

\* キッコーマン(株)研究本部

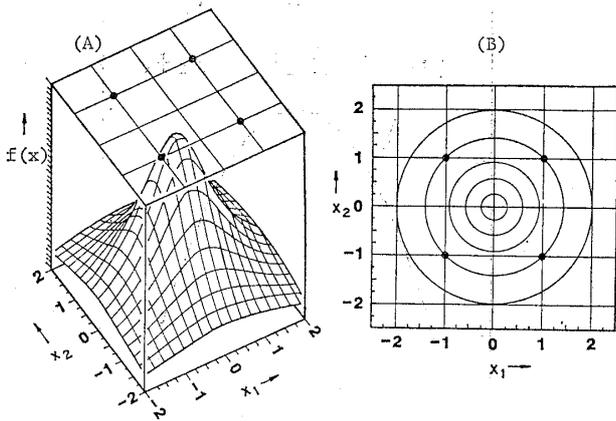


図 2. 2 因子 ( $x_1, x_2$ ) 最適化における  
応答曲面 (A) と等高線 (B)  
●: 実験を行った格子点

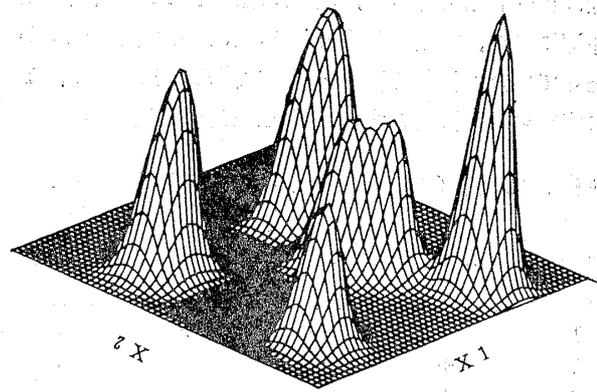


図 5. 極値が複数ある応答曲面

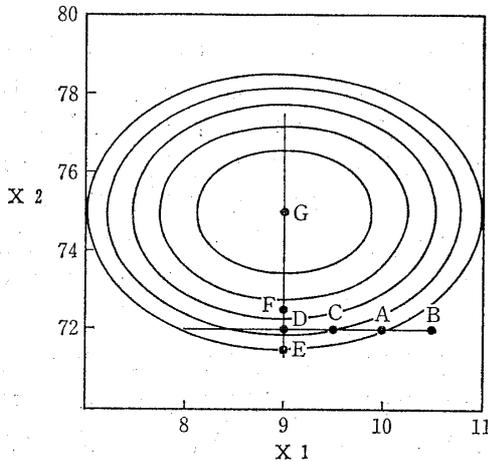


図 3. 因子間に相互作用が存在しない系における 1 因子最適化  
まず温度 ( $x_2$ ) を  $72^\circ\text{C}$  に固定し  $x_1$  (pH) の最適点 D を探し、次に  $x_1$  を D に固定し  $x_2$  と応答の関係を調べれば、最適点 G に到達できる。

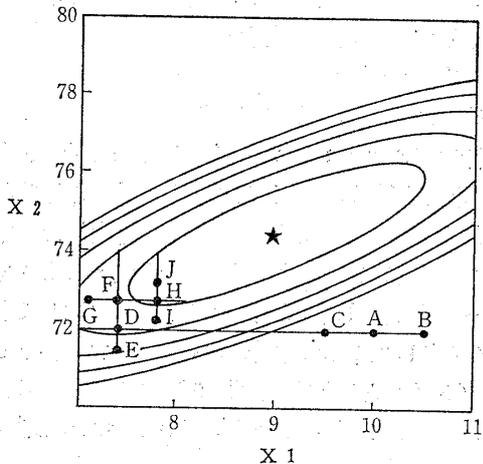


図 4. 因子間に相互作用が存在する系における 1 因子最適化  
まず  $x_2$  (温度) を  $72^\circ\text{C}$  に固定して  $x_2$  の最適点 D を決める。次に  $x_1$  (pH) を D に固定して求めた  $x_2$  の最良水準 F は、真の最適点 (★) ではない。

ところが魚焼きにおける温度と時間のように、因子どうしが相互作用を有する系、つまり相関する系では話は大幅複雑で応答曲面はラグビーボールのようになり、一因子最適化の繰り返しでは最適点を見つけれない (図 4)。このような応答曲面を示す最適化では、 $x_1$  と  $x_2$  の二つの因子水準を同時に動かさなければ最適点にたどり着けない。そして因子どうしが相互作用を有する系でも、間違いなく最適点に到達できるように、手順をルール化したのが最適化手法に他ならない。さらに因子の数が増えると、そのままでは応答曲面を描けないが、二次元や三次元への投影図を描くことは可能である。

もし極大点や極小点が探索範囲内に二つ以上で真の極値が一つ、他は偽の極値 (ローカル) の場合、さらに複雑な応答曲面となり最適点探索は格段に難しくなる (図 5)。複数最適点の探索は非常に難しいが、Ⅲ検査法で紹介した遺伝アルゴリズムと焼き鈍し (Simulated Annealing) 模倣アルゴリズム<sup>4)</sup> は共に一度登りだした山から他の山へ向かうことができるので最適化は可能である。しかし両手法は共に最適化に要する実験回数が膨大となり、関数化した目的関数には適用できても、実際に実験を行う最適化への適用は難しい。

つまりこれから紹介する最適化手法は、予備実験から最適点の存在する領域までは明らかにできたケースに適用するものである。今日まで食品分野における最適化手法の利用例は決して多くはない<sup>5)</sup>。これを契機に今後、経験と勘が幅を利かす食品分野において、最適化手法の適用例が増えることを期待したい。

## 2. 実験計画法

最適点探索に複数因子水準の規則的な組み合わせを利用するのが実験計画法である。この手法では最適化対象の全因子の探索範囲を適当な数に区切り、それらの因子水準の組み合わせで実験して応答を比較する。因子数が

少なければ有用であるが、因子が増えるにつれ実験回数も急速に増え、実用性が失われる。ただし必要な設備が備わっていれば複数の実験を同時に進められるので、1回の実験に長時間を要する最適化には適する。

表 1. 3 因子 (A, B, C) に対する完備型要因実験計画

実験 No.	因 子			測定値
	A	B	C	
1	+	+	+	$y_1$
2	+	+	-	$y_2$
3	+	-	+	$y_3$
4	-	+	+	$y_4$
5	+	-	-	$y_5$
6	-	+	-	$y_6$
7	-	-	+	$y_7$
8	-	-	-	$y_8$

全因子の考え得る全組み合わせで実験する完備型実験計画法と (表 1), 組み合わせの一部だけの実験をする不完備型の実験計画法がある。完備型では  $n$  因子で水準数を  $m$  とした場合、すべての組み合わせでは  $m^n$  の実験回数となる。(+, -) の 2 水準で実験するケースでは、因子数が 2 と 3 ならば実験回数は 4 と 8 で済むが、6, 7 因子では実験数が急速に増え  $2^6=64$ ,  $2^7=128$  となる。

### 3. 応答曲面法

#### (1) 考え方と手順

コーヒー中の砂糖 ( $x_1$ ) とミルク ( $x_2$ ) の量、及びそれらに依存する満足度 ( $y$ ) の関係を考えてみたい。まず砂糖単独では、コーヒー中の砂糖量と満足度の関係は図 6 のようになり、その関係は 2 式で表される。ただし向きが凸なので係数  $a_1$  はマイナスとなる。なお  $e$  はこのモデルにより説明されない誤差である。

$$y = a_0 + a_1 x_1^2 + a_2 x_1 + e \quad (2)$$

つぎに砂糖抜きでコーヒーに加えるミルク量と満足度の関係も、同様な凸型の二次関数となり 3 式で表される。

$$y = b_0 + b_1 x_2^2 + b_2 x_2 + e \quad (3)$$

コーヒーに砂糖とミルクを共に加えるケースではミルクは甘味に、甘味は好みのミルク量に影響を及ぼすことから 4 式となる。

$$y = c_0 + c_1 x_1 + c_2 x_1^2 + c_3 x_2 + c_4 x_2^2 + c_5 x_1 x_2 + e \quad (4)$$

4 式の関係を図示するには ( $x_1, x_2$ ) の平面と満足度  $y$  からなる三次元が必要で、対応する応答は上方へ湾曲した曲面、すなわち図 2 のような応答曲面となり、その二次元への投影図は図 4 となる。この応答曲面を利用し

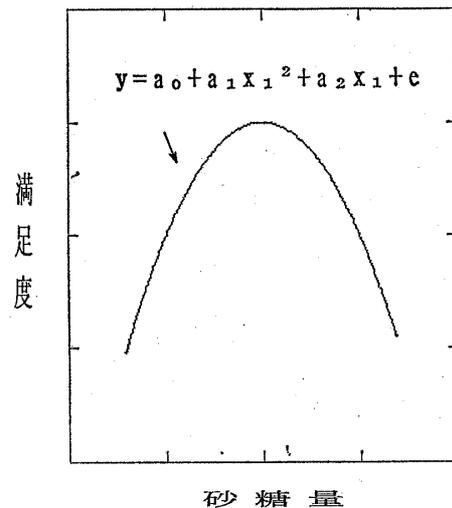


図 6. 砂糖量 ( $x_1$ ) と満足度 ( $y$ ) の関係

た最適点探索が応答曲面法 (RSM: Response Surface Methodology) である。応答曲面に関数を当てはめれば、その関数から最適点が求まる。通常、因子どうしは相互作用を有するので応答曲面法では、交互作用の項 ( $x_1 \cdot x_2$ ) を加えた二次関数を利用する。このように二次関数を利用する理由として、最適点近傍の応答はすべて二次曲面との説もあるが<sup>6)</sup>、十分納得できる説明はなされていない。

応答曲面を描くための観測点ができるだけ均一に全領域をカバーするように、中心複合計画を利用したシンプレックス図形を探索範囲内に構築し、図形の頂点や中心点に因子水準を設定する (図 7)。

なおシンプレックスは単体と訳され、変数 (次元数) よりも一つ頂点が多い幾何学図形を意味する。2 変数ならば三角形、3 変数ならば四面体となる。因子水準とそこで実験して得た応答を利用し、重回帰分析から 4 式の係数を決定して最適点を探索する。

#### (2) 応用例

##### ① 呈味成分の濃度と嗜好性<sup>7)</sup>

澄まし汁にグルタミン酸ソーダ (MSG:  $x_1$ ) と食塩 (NaCl:  $x_2$ ) を添加して、RSM により最適な塩味強度と旨味を最大化する濃度の組み合わせを探索した。中心複合計画の格子点に対応する濃度の食塩と MSG を添加したスープを調製し (図 8), 食味と旨味に関して [+3 ~ -3] で評点して得た官能検査スコアを応答とした。応答関数 (5 式) と応答曲面 (図 9) から推定された最適組み合わせは MSG=0.379%, NaCl=0.806% であった。

$$f(x_1, x_2) = -4.54 + 6.50x_1 + 8.64x_2 - 5.54x_1^2 - 4.69x_2^2 - 2.86x_1x_2 \quad (5)$$

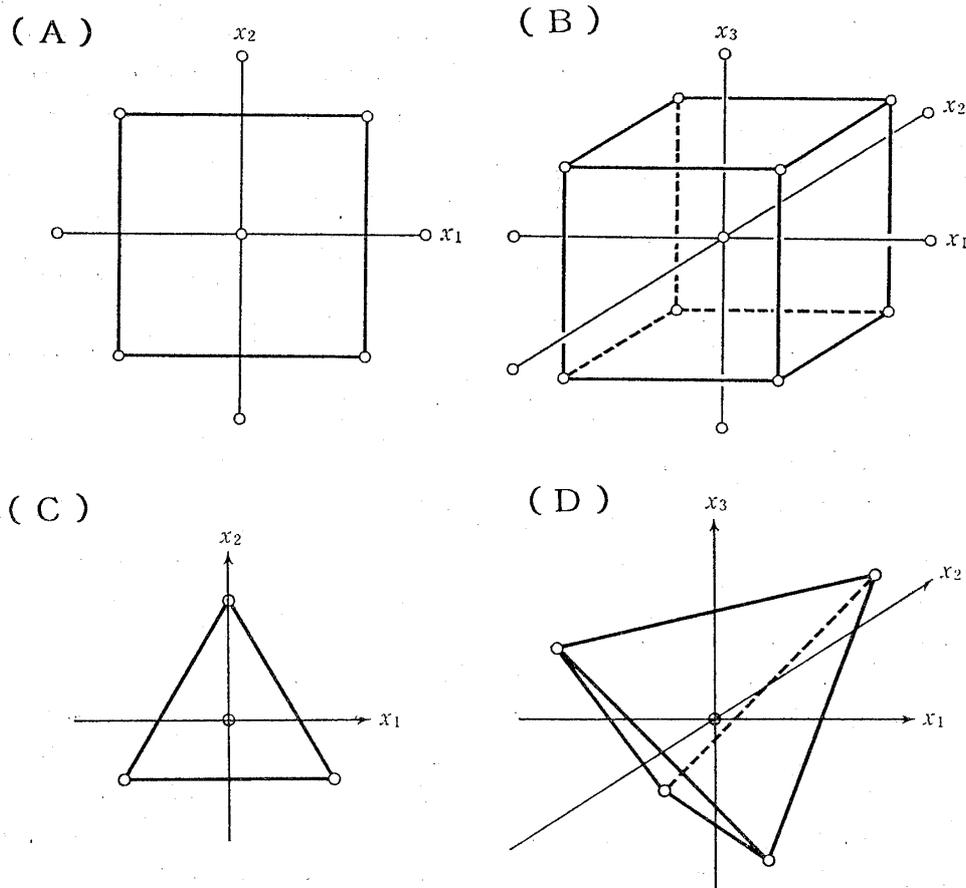


図 7. 2 因子と 3 因子の中心複合計画 (A, B) とシンプレックス計画法 (C, D) における実験点 (○)

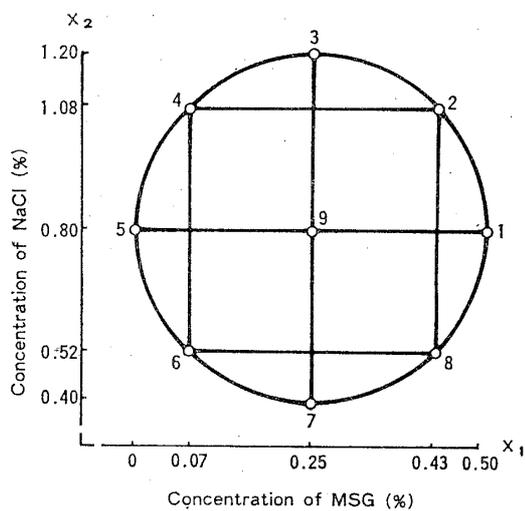


図 8. 中心複合計画を利用した MSG と NaCl 濃度の組み合わせ

② すり身の添加物とテクスチャー<sup>8)</sup>

含水量, 卵の白身, デンプンの添加量はすり身の圧縮強度と針入強度に影響を及ぼす。テクスチャーの面からは両強度とも強いことが望ましい。そこで予備実験から含水量を 78% に固定し, 卵白とデンプンの最適添加量

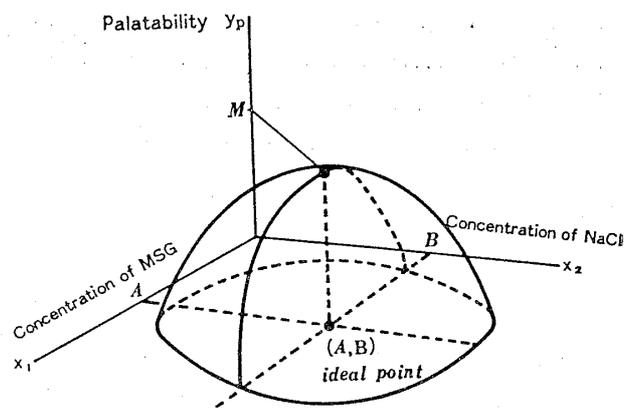


図 9. MSG( $x_1$ ) と NaCl( $x_2$ ) 濃度に対する嗜好性 ( $y_p$ ) の応答曲面

を RSM により求めた。探索範囲は卵白, デンプンともすり身当たり 0-10% (W/W) とした。卵白とデンプンを [0, 10], [2, 8], ..., [10, 0] の 2% 間隔で組み合わせて添加したところ, その応答曲面は図 10 となり応答関数として 6 式を得た。

$$y = 39.67 + 1.94 X_1 + 4.16 X_2 - 0.21 X_1 X_2 - 0.27 X_1^2 - 0.34 X_2^2 \quad (6)$$

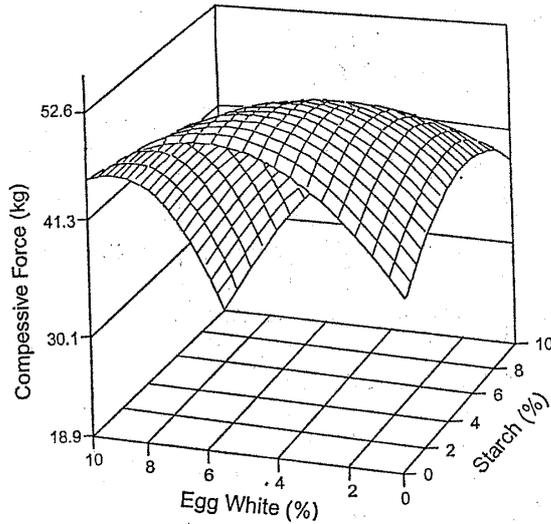


図 10. デンプンと卵白濃度に対する圧縮強度の応答曲面

応答関数から得たデンプンと卵白の最適添加量はそれぞれ3.5%と5.0%であり、その添加量における圧縮強度と針入強度は実際に最大であった。

#### 4. シンプレックス法

実験計画法と RSM では選択した因子の探索範囲内で一定のルールに基づき探索点を決定、そこから得られた応答から最適点を決定した。つまり、これらの手法が示唆する最適点とは、あくまでもなめらかな応答曲面の存在の仮定の下に推定した最適点である。しかし実際には目に見えない応答曲面の形は問題ごとに異なるはずであるし、なめらかな保証もない。まさに闇夜の登山である。ここで紹介するシンプレックス最適化法は特定関数で

表される応答曲面を仮定せず、あらかじめ決められた探索範囲で実験を逐次おこない、その結果を利用してながら最適点を探索する。このように逐次実験を通して最適点を正確に突き止めるために、下記の4点がルール化された。

- ① 探索範囲の決定
- ② 最初に探索する因子水準の決定
- ③ 得られた応答に基づく移動方向の決定
- ④ 移動距離の決定

ケモメトリックス分野では最適分析条件の探索などに適用例が非常に多い<sup>2)</sup>。

#### (1) 正規シンプレックス法

1962年イギリス人の Spendley が考案したのが正規シンプレックス法<sup>9)</sup>であり以後、最適化効率を上げるために幾多の改良法が考案されて今日に至っている。この手法では、まず探索範囲の中に変数の数よりも一つ多い図形、すなわちシンプレックスを設定する。その頂点に対応する因子水準で実験を行ない、得られた応答に基づき逐次図形の頂点を最適点に向けて伸ばす。このような最適化の図示は、応答を加えて三次元となる2因子最適化が限界である。しかし理論上は何次元でも、それより一つ頂点の多いシンプレックスは作れるし、それぞれの次元における因子水準と応答との関係を投影図として図示することは可能である。図示した応答は最適点の探索に大きな助けとなる<sup>10,11)</sup>。

探索範囲を決めた後の最適化手順を以下に示す。

#### ① 出発シンプレックスの決定

最初に探索する出発シンプレックスの頂点は7式と8式から得られる頂点座標の行列を利用して決定する(表

表 2. シンプレックス最適化法の頂点座標

頂点	次 元						
	1	2	3	4	...	n-1	n
1	0	0	0	0	•	0	0
2	p	q	q	q	•	q	q
3	q	p	q	q	•	q	q
4	q	q	p	q	•	q	q
5	q	q	q	p	•	q	q
•	•	•	•	•	•	•	•
•	•	•	•	•	•	•	•
n	q	q	q	q	∩	p	q
n+1	q	q	q	q	•	q	p

探索範囲が(0, 100)の2因子系で頂点1の因子水準を(10, 10)とした場合、頂点2と3はそれぞれ(10+ap, 10+aq)と(10+aq, 10+ap)となる。aはシンプレックスのサイズを決める任意の係数である。a=0.6とすると、頂点2の因子水準は{(0.966×0.6×100)+10}=68と{(0.259×0.6×100)+10}=25.5となる。同様に頂点3の因子水準は(25.5, 68)である。

2)。

$$p = \frac{1}{n\sqrt{2}} \{(n-1) + \sqrt{n+1}\} \quad \text{但し, } n = \text{因子数} \quad (7)$$

$$q = \frac{1}{n\sqrt{2}} \{\sqrt{n+1} - 1\} \quad (8)$$

両式から 2, 3, 4 因子では  $p$  と  $q$  の組み合わせはそれぞれ (0.966, 0.259), (0.942, 0.236), (0.926, 0.218) となる。

二次元における出発シンプレックス, すなわち三角形の各頂点における応答を比較, 順序づけて表すと図 11 となる。応答の好ましさの順に頂点は B(best) > N(next to the best) > W(worst) と呼ばれる。W の反対側の線分や平面の重心がセントロイド (p) である。

② 応答に基づく移動方向と距離の決定

a. W の鏡像点 (R) を優れた応答を示す可能性が高い点とみなし, ここを次の探索点とする。

$$R = P + (P - W)$$

b. もし R での応答が, 新たなシンプレックスで最も好ましくない応答を示したら, 新たなシンプレックスにおける N の鏡像点で実験する。このルールの目的は最悪頂点 (W) 間の往復を避けるためである。

c. もし新たな頂点が探索範囲の外に出てしまったら, そこで実験をせず W における応答よりさらに劣る応答を割り当て, シンプレックスを探索範囲内に戻す。

a-c の 3 ルールを利用しながらシンプレックスが最適点に近づく様子を図 12 に示す。しかし直感的にも分かるように, このようにサイズを固定したシンプレックス法では, 幾つか都合の悪い点がある。まず応答曲面が不明では, 出発シンプレックスの適切なサイズを決めることが難しい。大き過ぎれば最適点まで頂点を伸ばせないし, 小さ過ぎれば最適化に要する実験回数が増える。

(2) 改良シンプレックス法 (MDS: Modified Simplex)<sup>12)</sup>

正規シンプレックス法の欠点を克服するために考案されたのが MDS である。MDS では応答曲面の形状に応じてシンプレックスのサイズを伸縮することで, 最適点の遠方での加速, 近傍での減速を可能とした (図 13)。出発シンプレックスは正規法と同じであるが, 得られた応答に基づく頂点の設定に新たなルールを導入した。

① R での応答が B より良い場合, 同じ方向にさらに延長した E で実験する。

$$E = P + \alpha(P - W)$$

② R での応答が N よりも良いが B より劣る場合, N の鏡像点で実験する。

③ R での応答が N よりも劣るが W よりは良い場

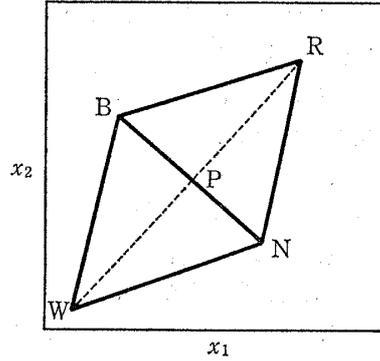


図 11. シンプレックス頂点の応答比較と鏡像点  
応答の好ましさは B > N > W で, P, R  
は中点と鏡像点。

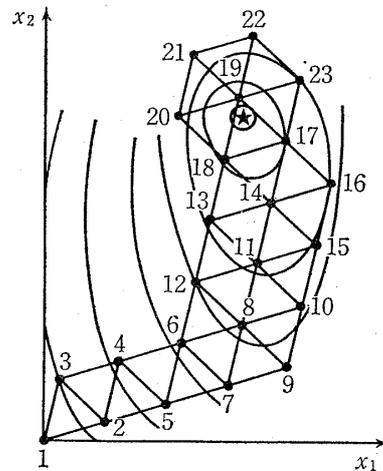


図 12. 正規シンプレックス法による最適点探索  
1-23: 頂点番号, ★: 最適点

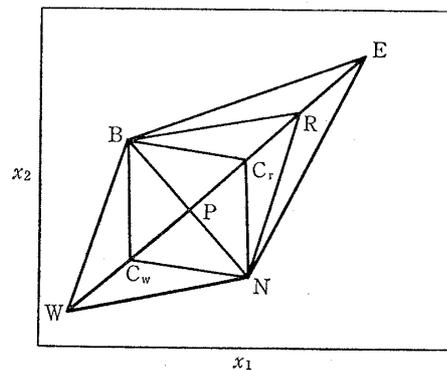


図 13. MDS 法におけるシンプレックスの伸縮  
各頂点の意味については本文参照

合,  $C_r$  で実験する。

$$C_r = P + \beta(P - W)$$

④ R での応答が W よりも劣る場合,  $C_w$  で実験する。

$$C_w = P - \beta(P - W)$$

⑤ もし  $C_w$  での応答が W より劣る場合, 探索を中止し範囲を変えて再出発する。

シンプレックス法の伸縮係数  $\alpha, \beta$  としては 2.0 と 0.5 がよく用いられる。しかし最適な係数は応答曲面の形状に応じて異なることから、次に示す SMS 法など様々な改良法が考案されている。

### (3) 改良シンプレックス法 2 (SMS: Super-Modified Simplex)<sup>13)</sup>

最適点の応答が同じならば、最適化に要する実験回数は、より少ないことが望ましい。より高い最適化効率を目指して考案されたのが SMS 法である。

SMS 法ではシンプレックスの伸縮係数の決定に最悪頂点 (W)、中点 (P)、鏡像点 (R) の因子水準 ( $x$ ) と応答 ( $y$ ) に二次関数 ( $y=b_1x^2+b_2x+b_0$ ) を当てはめて伸縮係数を決定する (図 14)。そのため、P における実験も必要となる。応答の最大値を求める探索では凸型の場合、その頂点が最も高い応答を示す可能性が強い因子水準となる。また凹型では二次関数を外挿する形となり、探索範囲の境界が次の探索点となる。SMS 法では応答曲面に応じてシンプレックスを柔軟に伸縮し、最適点遠方での加速と近傍での減速ができるので、より効率的な最適化が可能である (図 15)。

今日でも、高い最適化効率を目指した様々な改良法の考案は続いている。創意工夫に自信のある読者には、改良に挑戦されることを勧めたい。

### (4) 適用に際しての留意点

シンプレックス法の適用に際しては、下記の 4 点に留意して実験計画をたてる必要がある。

① 因子と応答の選択 因子数や探索範囲が増加すると最適化に要する実験回数も増えるので、効率的な最適点探索には有用因子と探索範囲を選ばなければならない。応答に寄与しない因子を選んだり因子水準が広すぎると、最適点到達に要する実験回数が増える。しかし逆に狭すぎると、ローカルな極値に収束してしまい、真の極値を見落とすことになる。また原料と生産量のように、因子水準を上げると応答も比例して増えるような関係は適用対象にならない。このような場合、応答の単位原料当たり収量への基準化が必要である。

② 実験誤差 実験結果に応じて次の因子水準を決定する逐次探索法では、応答の違いは実験誤差よりも有意に大きくなければならない。最適化手法の適用に先立ち、同一条件下で繰り返し実験を行い、その実験が本来有する誤差を算出し実験の精度、言い換えると再現性の確認を勧める。

③ 早すぎる収束 極めて少ない実験回数で極値に収束した場合、因子水準の範囲を変えて最適化を行い、再び同じ因子水準と応答に収束するかを調べ、それがローカルな極値でないことを確認することが望ましい。

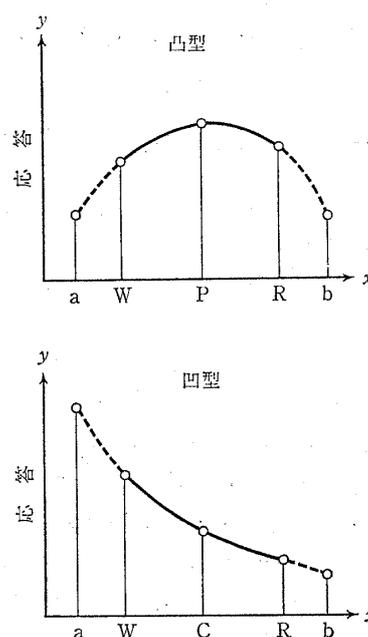


図 14. SMS 法における頂点座標の決定法

a: 探索範囲の下限, b: 探索範囲の上限, W: 最悪頂点の因子水準, P: 中点の因子水準, R: 鏡像点の因子水準

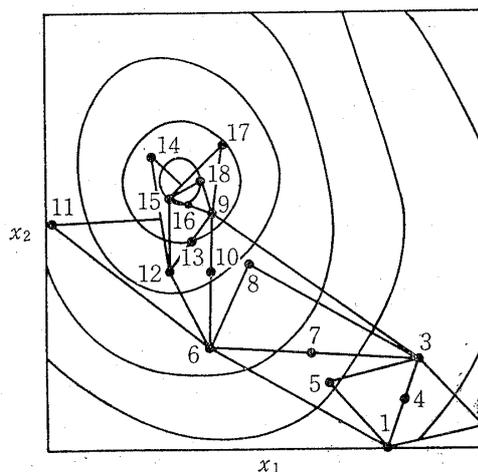


図 15. SMS 法による最適点探索

④ 最適点の証明 最適点であることを完璧に証明できる方法はない。真の最適点かどうかを確認するためには、その水準を中心点とする中心複合計画を適用するか、出発点を変えた最適化が適用されている。

ただし真の最適点への到達が技術やコスト面から非常に困難であったり、ローカルな極値と応答にそれほど違いがないときは、ローカルな極値を最適点として受け入れても一向に差し支えない。

### ⑤ 応用例

分析化学を初め様々な分野ではよく利用されているシンプレックス法であるが、食品分野での利用例は少ない。ここでは食品分析に深い関係を有する HPLC 分析条件

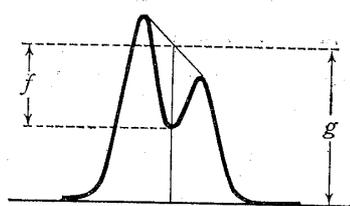


図 16. クロマトグラムの隣接ピーク対における分離能 ( $f/g$ )

の最適化と食品に直接関係する例を紹介したい。

### ① HPLC 分析条件の最適化

隣接ピーク間の分離を図 16 のようにして測り 9 式により定量化し、温度、圧力などが許される範囲内において 10 式の応答関数を最大化する HPLC の操作条件を探索する。

$$P=f/g \quad (9)$$

$$CRF=\sum \ln(P_i) \quad (10)$$

基本となる応答関数は 10 式であるが、分析時間を制約条件に加えた式など、様々な応答関数が考案されているので、詳細は成書<sup>14)</sup>や総説<sup>15)</sup>を参照されたい。HPLC 分析条件の最適化には市販のソフトウェアもあるが、それらはほとんど溶媒組成のみの最適化を目的に開発されたものである。しかしシンプレックス法を利用すれば、流速や温度までも組み込んだ最適化が可能となる。

### ② メイラード反応物の抗菌活性の最大化<sup>16)</sup>

リジン (Lys) とグルコース (Glc) またはキシロース (Xyl) の混合液を加熱し、反応物の *Staphylococcus aureus* に対する阻止円半径 (mm) を最大化する条件を探索した。因子は ① リジンと糖の混合比 (1.0–2.5), ② 混合物濃度 (30–50% W/V), ③ pH (9–10), ④ 温度 (75–85°C), ⑤ 反応時間 (25–30 時間) の 5 因子である。Lys-Glc 系では、22 回の実験により出発シンプレックスの最良応答であった 22 mm を 35 mm まで高めることができた。一方、Lys-Xyl 系では 18 回目の実験で示された 33 mm が最大値であった。阻止円半径と因子水準をそれぞれ目的変数と説明変数として重回帰分析をしたところ、Lys-Glc 系では濃度と pH, Lys-Xyl 系では pH と反応時間が抗菌活性の発現に重要な因子であることが分かった。

### ③ 濃縮果汁へのエッセンス添加割合の最適化<sup>17,18)</sup>

還元ジュースの調製に際し、濃縮果汁への複数エッセンスの添加割合を以下の手順で SMS により最適化した。そして調製した還元ジュース香気の品質を官能検査で確認した。具体的な手順は以下の 6 ステップである。① 新鮮果汁、濃縮果汁、複数エッセンスの GC 分析。② エッセンスの添加量範囲の設定。③ 出発シンプレックス

の頂点に対応するエッセンス量を濃縮果汁に添加したジュース香気の GC パターンの計算、すなわちシュミレーション。④③ で得た GC パターンと新鮮果汁香気 GC パターン間の類似率 ( $0 \leq S(A, B) \leq 1.0$ ) の計算。⑤ SMS によるパターン類似率を最大化するエッセンス添加割合の探索。⑥ 還元ジュースと新鮮果汁の香りの官能検査による比較。

このケースでは「エッセンス添加→GC 分析→パターン類似率の計算」は実際の実験ではなく、SMS を利用したシュミレーションの繰り返しにより最適添加割合を探索した。

## 5. コンピュータとソフトウェア

RSM は実験データに対する重回帰分析の適用により係数を算出できるので SPSS, SAS, Unscrambler などが利用できる。また、これらのソフトウェアにより応答曲面や等高線も描ける。Unscrambler の実験計画メニューでは、探索範囲を入力すれば因子水準を指示してくれる。もっとも Unscrambler がこのような実験計画法を備える目的は、PLS や PCR の適用に先立つ検量用データの作成である。一方、シンプレックス法は電卓でも因子水準を計算できるが、各種改良法を利用可能なソフトウェアもアムステルダム Elsevier<sup>19)</sup> やヒューストンの Statistical Programs<sup>20)</sup> などから IBM 互換機用に公開されている。なお筆者らは既に BASIC で書いたソフトウェアを公開済みであるし<sup>21)</sup>、IBM PC 及びその互換機用ならば提供可能である。

## 6. 結 び

多くの読者にとって初めて遭遇する考え方や、開き慣れない用語に満ちた連載となってしまったことをお詫び申し上げる。しかしケモメトリックスは問題を理解し解決するための手段であるに過ぎず、生命や宇宙の本質解明を目指す分野とは性格が異なり、実際に身近なテーマや問題解決に応用されて初めて真価を発揮するものであることは、ご理解いただけたことと思う。

読者ご自身の研究テーマや問題解決に役立つと思われる手法は、是非遊び心で応用を試みていただきたい。その際、初めてのことであれば当然、幾多の不明点への遭遇は避けられない。そのような困難に対しては共に食べ物を生業とする“a colleague”として、微力ながら能力の範囲内で喜んで協力させていただく (〒278 野田市野田 399 キョーマン (株) 研究本部, Tel: 0471 23 5980, Fax: 0471 23 5550)。どのような分野においても好奇心は進歩のエネルギー源であり、研究者数の増加はレベルアップの必須条件である。

最後に、一年間にわたるご愛読に深く感謝するものである。

#### 参考文献

実験計画法と応答曲面法に関しては本シリーズ第1回の文献1-6の他、各種実験計画法の成書に詳しい。その他、下記の成書や総説を参照されたい。

- 1) G. E. P. Box and N. R. Draper: *Empirical Model-Building and Response Surfaces*, John Wiley & Sons, New York (1987)
- 2) F. H. Walters, L. R. Parker, Jr., S. L. Morgan and S. N. Deming: *Sequential Simplex Optimization*, CRC Press, Boca Raton (FL) (1991)
- 3) 相島鐵郎, 中井秀了: 日食工誌, **33**, 358, 463 (1986)
- 4) J. H. Kalivas: *Chemom. Intell. Lab. Systems*, **15**, 127 (1992)
- 5) 相島鐵郎: 農化, **62**, 953 (1988)
- 6) G. S. G. Beveridge and R. S. Shechter: *Optimization: Theory and Practice*, McGraw-Hill, New York (1970)
- 7) S. Yamaguchi and C. Takahashi: *J. Food Sci.*, **49**, 82 (1984)
- 8) J. S. Chen, C. M. Lee and C. Crapo: *J. Food Sci.*, **58**, 535 (1993)
- 9) W. Spendley, G. R. Hext and F. R. Himsworth: *Technometrics*, **4**, 441 (1962)
- 10) S. Nakai, K. Koide and K. Eugster: *J. Food Sci.*, **49**, 1143 (1984)
- 11) T. Aishima and S. Nakai: *J. Food Sci.*, **51**, 1297 (1986)
- 12) J. A. Nelder and R. Mead: *Comput. J.*, **7**, 308 (1965)
- 13) M. W. Routh, P. A. Swartz and M. B. Denton: *Anal. Chem.*, **49**, 1422 (1977)
- 14) J. C. Berridge: *Techniques for the Automated Optimization of HPLC Separations*, John Wiley & Sons, Chichester (1985)
- 15) S. N. Deming, J. M. Palasota, J. Lee and L. Sun: *J. Chromatogr.*, **485**, 15 (1989)
- 16) P. K. Cruickshank: Master Thesis, The University of British Columbia (1985)
- 17) T. Aisima, D. L. Wilson and S. Nakai: in *Flavour Science and Technology*, M. Martens, G. A. Dalen and H. Russwurm, Jr. eds.: John Wiley & Sons, Chichester, p. 501 (1987)
- 18) T. Aishima and S. Nakai: *Anal. Chim. Acta*, **248**, 41 (1991)
- 19) Elsevier Scientific Software: P. O. Box 330, 1000 AH Amsterdam, The Netherlands
- 20) Statistical Programs: 9941 Rowlett, Suite 6, Houston, Texas 77075, U. S. A.
- 21) 相島鐵郎, 八田 一, 中井秀了: 日食工誌, **33**, 546 (1986)