

目的

自社製品やその製造プロセスを業界のリーディングカンパニーの製品と比較する競争的ベンチマーキングは、企業の商品開発で行われています。この手法により、競合他社と比較して市場に製品を位置づけ、製品の改善、再設計または再配合化のための指示を与えることが可能となります。

本研究では、電子嗅覚・電子味覚システムを用いて、2つのブランドのコーヒーカプセルを分析しました。その目的は、2種のブランドのコーヒーカプセルの詳細な官能情報を得て、コーヒー強度スケールで各々を比較することでした。



サンプルと分析手法

サンプル

ブランドAのコーヒーマシンを使用し、実使用条件下で12サンプルのコーヒーを調製し(表1)、フラッシュGCノーズ HERACLES、電子味覚システム ASTREE (Alpha MOS, フランス) を用いて分析しました。

表1: コーヒーサンプル

ブランド	ラベル	強度	産地
A	SD00	カフェインレス	
	SB05	5	Brazil
	SE06	6	
	SK06	6	Kenya
	SC07	7	Colombia
	SU08	8	
B	CD03	3	
	CC04	4	Colombia
	CK06	6	Kenya
	CE08	8	
	CE09	9	
	CE11	11	

各ブランドで独自の強度スケールが定義されています。

- ブランドA: 1 ~ 10
- ブランドB: 3 ~ 11



多感覚器システム

HERACLES と ASTREE を用いて、香り、および味の属性に関する試験をそれぞれ行いました。

超高速GC 技術を基盤としたフラッシュGC ノーズ HERACLES (図1・左) には、極性の異なる2種類のメタルキャピラリーカラムが並行に配置され(本研究では、微極性のMXT-5 と低/中極性のMXT-1701、長さ10m、内径180 μ m を使用)、各々に水素炎イオン化検出器 (FID) が接続されています。同時に2つのクロマトグラムが得られるため、保持指標データによる化合物検索の際、より明確な絞り込みが可能となります。また、ペルチエ式クーラー (0 - 260 $^{\circ}$ C) により温度制御された固相吸着トラップが内蔵されているため、低分子の揮発性化合物の効果的なプレ濃縮を実現し、優れた感度 (pg オーダー) を得ることができます。

装置本体には、サンプリングと注入の自動化のためにオートサンプラ (RSI) が据え付けられています。分析はヘッドスペース注入モードで行われました。また、本システムには、保持指標&においライブラリAroChemBase が付属しています。ライブラリには、化合物ごとの名称、分子式、CAS 番号、分子量、保持指標といった化学情報に加え、官能記述子や閾値情報、そして関連する文献情報まで含まれています。AroChemBase によって、HERACLES のクロマトグラムから化合物の予備スクリーニングを行うことができます。

電子味覚システムASTREE (図1・右) は、液体センサーアレイを基盤とし、各センサーと参照電極間の電位差の計測を原理としています。個々のセンサーは、固有の有機膜を持ち、膜固有の規則に従って液体中の溶解成分と相互作用します。

データ取得およびデータ解析は、2システムに共通のソフトウェア AlphaSoft を介して行います。本分析に最適化された分析パラメータを表2に示します。



図1：フラッシュ GC ノーズ HERACLES (左)
電子味覚システム ASTREE (右)

表2：装置の分析パラメータ

HERACLES パラメータ	
サンプル量	20 mL バイアルに入れたコーヒー溶液 1g
インキュベーション条件	70°C, 20 min
ヘッドスペース注入量	5 mL
トラップ温度	60°C / 240°C (脱着)
カラム昇温条件	50°C - 80°C @ 1°C/s 80°C - 280°C @ 3°C/s
FID 温度	260°C
ASTREE パラメータ	
サンプル調製	コーヒーカプセル1と脱イオン水によるコーヒーの調製
サンプル量	25 mL
データ取得時間	120 s

香り分析

HERACLES による分析で得られたクロマトグラムの比較により、2 種のブランドのコーヒーの香りのプロファイルと強度にいくつかの有意差があることが示されました (図2)。

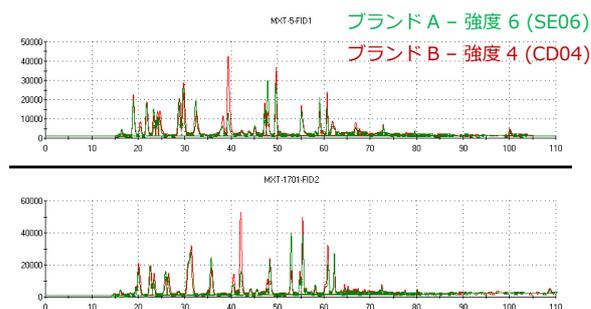


図2：HERACLESで得られた2種のブランドのコーヒーカプセルのクロマトグラムの比較

コーヒーのヘッドスペース中に検出されたすべての化合物を用いて、主成分分析 (PCA) を行い、香りマップを構築しました (図3)。ブランドBのコーヒーは、香りマップ上で強度に大きな違いがありますが、ブランドAのコーヒーは、香りのフィンガープリントがすべて近いことが示されました。

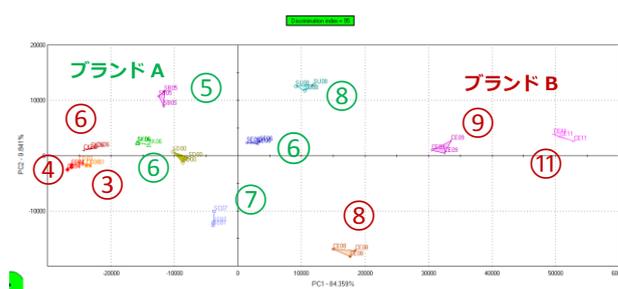


図3：全ピークを用いた主成分分析 (PCA) に基づくコーヒーの香りマップ

検出されたピークの保持指標とAroChemBase を用いて、コーヒーの香りの差異に最も関与する揮発性化合物の性質を調べました (表4)。識別に寄与する化合物は、ピーク面積の比較に基づいて評価されます (図4)。

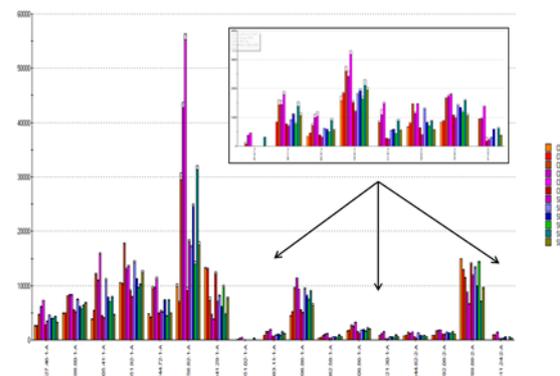


図4：12サンプル間の識別に寄与する様々な揮発性化合物の濃度

市販で入手可能なコーヒーの強度に関する官能情報とHERACLESによる分析結果との相関付けを行うことができます(図5)。このモデルは高い相関(決定係数= 0.9316)を示し、このモデルでカフェインレスのサンプルをプロジェクトしてその強度を推定することができました。

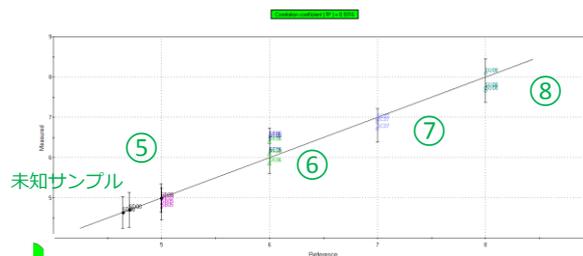


図5: HERACLESによるブランドAサンプルの分析結果と官能評価スコアの相関付け
- SD00を未知サンプルとしてプロジェクト

表4: 保持指標&に有关ライブラリ AroChemBase を用いた識別力の高い化合物の同定

RT MXT-5 (± 0.1s)	RT MXT-1701 (±0. 1s)	KI MXT-5 (± 20)	KI MXT-1701 (± 20)	Possible identification	Descriptors
16.4	18.3	446	545	Ethanol	Alcoholic
20.3	20.03	527	593	Methyl acetate*	Etheral, fruity
24.0	26.4	599	692	2,3-butanedione	Butter, caramelized, creamy
24.6	23.3	605	645	2-methylfuran*	Burnt, chocolate, metallic, musty
28.7	30.8	652	742	3-methylbutanal	Almond, fruity, green, toasted
29.7	30.8	662	742	2-methylbutanal	Almond, cocoa, green, malty
31.3	35.0	678	782	n-butanol*	Fruity
32.4	35.7	693	790	2,3-pentanedione	Butter, caramelized, sweet
36.2	38.9	729	822	Pyrazine	Nutty, roasted hazelnuts
38.1	40.5	745	840	Pyridine*	Rancid, acid
39.0	41.9	757	856	2-Methyl-1-butanol	Butter, malty
45.9	47.1	821	911	Ethyl 2-methylbutyrate	Fruity, green, sweet
47.8	53.0	841	985	Furfural	Almond, bread, sweet
48.8	55.5	851	1021	3-methylbutanoic acid	Rancid, acid
59.7	58.1	983	1062	Ethyl hexanoate	Apple, fruity, sweet
60.7	60.9	997	1106	3-octanol	Nutty, mushroom
66.1	68.4	1083	1249	4-hydroxy-2,5-dimethyl-3(2H)-furanone	Baked, burnt sugar, caramelized
67.7	65.2	1107	1186	Tetramethylpyrazine	Chocolate, cocoa, coffee, nutty, roast
68.4	65.7	1121	1196	Nonanal	Floral, fruity, green, sweet

* Most correlated to coffee intensity

味覚分析

電子味覚システム ASTREE による分析により、2種のブランドのコーヒーがかなり異なる味覚プロファイルを示すことが確認できました(図6)。

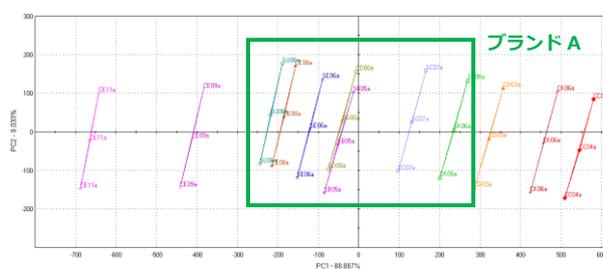


図6: ASTREEによるコーヒーサンプル分析に基づく主成分分析 (PCA)

ブランドBのサンプル間には明確な違いがありますが、ブランドAのサンプル群は、類似した味覚プロファイルを示したため、互いに近い位置にマッピングされました。

コーヒーの味は、特に酸味の高いものでもよく識別されることが示され、味ランキングを構築しました(図7)。



図7: ブランドBサンプルの酸味強度に基づく味ランキング

統合データによる風味マップ

コーヒー製品の全体的なプロファイル比較を行うため、HERACLES および ASTREE による分析データの統合を行いました。嗅覚および味覚情報は、各サンプルに関連付けられます。統合データの主成分分析を行い、風味マップを作成しました（図 8）。

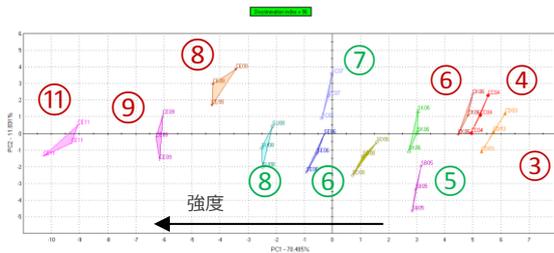


図 8: 統合データによる風味マップ

結論

多感覚器分析システム（電子嗅覚・味覚システム）を用いて様々な種類のコーヒーについて実施された今回のベンチマーキング研究により、主な違いが「香り」および「味」特性に関連していることが示されました。

ブランド A のコーヒーサンプルは、香り・味の官能プロファイルが類似している一方、ブランド B のコーヒーでは、サンプル間の官能プロファイルに明確な差があることが分かりました。

コーヒーの強度スケールを構築することで、これらのブランドの他のコーヒーを評価するために使用することができます。

本資料は発行時の情報に基づいて作成されており、予告なく改訂することがあります。 2017年6月