

# 化合物情報に基づく食材の表現学習

吉丸 直希<sup>†</sup> 楠 和馬<sup>†</sup> 波多野賢治<sup>††</sup>

<sup>†</sup> 同志社大学大学院文化情報学研究科 〒610-0394 京都府京田辺市多々羅都谷 1-3

<sup>††</sup> 同志社大学文化情報学部 〒610-0394 京都府京田辺市多々羅都谷 1-3

E-mail: <sup>†</sup>{yoshimaru,kusu}@mil.doshisha.ac.jp, <sup>††</sup>khatano@mail.doshisha.ac.jp

**あらまし** 人間の基本的な活動である食事を支援するために、レシピを活用した研究が盛んに行われている。特に食材をベクトルで表す食材分散表現を構築することができれば、食にまつわるさまざまな応用先での活用が期待できる。多くの既存手法では応用先に特化するために、レシピ集合から得られる情報をもとに食材の表現学習を行っている。しかし食材分散表現の汎用性を高めるためには、食材を構成する情報のみを用いた表現学習が望まれる。そこで本研究では、食材に含まれる化合物情報に基づき食材の表現学習手法を提案する。食材と化合物から成る異種グラフを構築しグラフ学習を行うことで、化合物の性質を保持した食材分散表現を獲得することが可能になる。提案手法により得られた食材表現の性能が既存手法と比べ向上した。このことから、食材・化合物の関係性を考慮した提案手法が精緻化に起因することが明らかになった。

**キーワード** 食とレシピ, レシピ・料理, 食材表現学習,

グラフニューラルネットワーク, ケモインフォマティクス表現を構築することは容易ではない。例えば「リンゴ」という食材をりんごに関する文献や辞書にあるりんごの説明から構築することは、本質的な食材の理解にはつながらない。なぜなら、食材には化学的な性質や料理での使われ方など様々な側面が存在するため、人による知識だけでは構築することができないためである。そのため、健康維持を目的とした食材推薦や相性の良い組合せを推薦などのさまざまな食タスクを正確に解くことができる高精度な表現を獲得することが必要になる。

## 1 はじめに

食は人間にとって最も基本的な活動の一つであり、食にまつわる知識は生活する上では無くてはならない重要なものである。そのため食に関する研究は、人間の基本的な生活の支援するために伝統的に行われてきており、栄養学の分野に限らず、医学や情報学など幅広い分野で扱われている。特に情報学においては、これまで書籍やアンケート等の古典的な方法でレシピデータの収集を行い、それを活用する研究が行われてきた [1, 2]。近年ではレシピ提供サイトの充実化が図られ、さまざまなレシピが日々生成・蓄積され、これまで以上に容易にレシピデータを用いた研究が行える環境が整ってきている [3]。

レシピデータはマルチメディアデータであり、文字列により表現される食材や使用器具といったテキストデータ [4] に始まり、レシピで使用される食材の使用量や含有栄養素量などの数値データ<sup>1</sup>、完成画像や調理手順を示すための画像 [5] や調理の様子を表した動画 [6] など多岐にわたる。こうしたデータを活用すれば、食文化の把握や調理技術の習得・伝達・継承、そして、食事に基づく健康管理などの分野において応用研究が可能となっており、こうした研究は Food Computing (食メディア) としてさまざまな研究が行われている [3]。

食メディアにおける課題の一つに、食材を計算機で扱える形式変換する食材表現の構築に関する研究がある。特に自然言語処理分野や画像処理分野において、各ドメインデータから抽象表現の構築することによる概念獲得が流れを受けたものである。食材とは何かを表す抽象的な表現を構築することによりレシピ推薦や健康支援、食材分類などさまざまな応用先が考えられる [7]。しかし、計算機上で食材を正しく区別できるような

グラフニューラルネットワーク, ケモインフォマティクス表現を構築することは容易ではない。例えば「リンゴ」という食材をりんごに関する文献や辞書にあるりんごの説明から構築することは、本質的な食材の理解にはつながらない。なぜなら、食材には化学的な性質や料理での使われ方など様々な側面が存在するため、人による知識だけでは構築することができないためである。そのため、健康維持を目的とした食材推薦や相性の良い組合せを推薦などのさまざまな食タスクを正確に解くことができる高精度な表現を獲得することが必要になる。

食材の分散表現を構築した既存手法では、レシピの共起グラフを構築し、各食材に対して分散表現を得ていた。しかし、構築したグラフにはレシピから得られるユーザによる表記揺れの激しい食材データが多く含まれており、精緻な食材表現を構築する上で負の影響を及ぼしていることが考えられる。これは例えば “tomato” (トマト) と “mini-tomato” (ミニトマト) といった食材があった場合、含まれる化合物を考えるとそれらには大きな違いはない。しかし、文献 [7] のようにレシピにおける食材の共起情報など、レシピから得られる食材情報を元に構築すると、人間由来の情報が入ってしまい、これらの食材をベクトル空間上で近くに位置させることが難しくなる。これは、前述の “tomato” (トマト) と “mini-tomato” (ミニトマト) を例に挙げれば、同じレシピ内で同時に登場する頻度は少ないからである。そのため、まずは化合物との関連性が明らかになっている食材のみで分散表現を構築して、その表現を利用してレシピ内の食材に適用する必要がある。

そこで本研究では、正確な食材表現を構築する上で生じる問題を解決するために、食材分散表現の構築を行う。具体的にはレシピデータを用いることなく食材・化合物グラフを構築し、グラフ学習を適応することでより精緻な食材表現の獲得を目指す。

1 : U.S. DEPARTMENT OF AGRICULTURE, “USDA”, <https://www.usda.gov/>, 2023 年 3 月 22 日閲覧。

## 2 関連研究

本節では食材と化合物の関連性を考慮した食材分散表現を構築する研究を述べる。食材の埋め込み表現を構築した研究として FlavorGraph を構築した研究がある [7]。背景として、食材ペアの相性問題について着目しており、全ての組合せを把握することができないという問題が存在していた。これは、逐次的に食材ペアの相性を把握することが難しいことに起因しているこの問題を解決する方法の一つとして、この研究ではレシピと化合物のデータベースから異種グラフを構築した。このグラフは食材と化合物がノードになっているものであり、グラフ学習を適応することで各食材ノードの固定長ベクトルを算出している。食材間のエッジには、レシピ内の共起確率が高い食材同士にエッジを構築しており、これは組合せ相性が良いものにエッジが張られることを意味している。

固定長ベクトルの算出には異種グラフに対応したグラフ埋め込み手法である Metapath2vec [8] を採用している。グラフを構築したデータソースとして、大規模レシピデータセットである Recipe1M [9] と食材に含まれる化合物を収集した FlavorDB [10], HyperFoods [11] を用いている。これらのデータから構築されるグラフを用いて、各食材に対してベクトル表現を得ることで、食材ペアの相性を計算可能にしている。これは、グラフの構築上、関係が強いものほどグラフ上で近くに位置するように設計しているため、グラフ学習により関係が強いものがベクトル空間上で近くに位置している。そのため単純な食材同士のベクトル演算によりペア相性の把握を可能にしている。

しかし FlavorGraph における課題点として以下の二点が挙げられる。

- レシピ情報を使った食材組合せ特化の食材表現
- 化合物情報の欠如

一つ目は、レシピ情報が入ったグラフを構築している点である。Park らの研究では、背景として抽象的な食材表現の構築によりペア相性を把握するとしているものの、グラフの構造上組合せが良いものほどグラフ上で近くに位置するようになっている。つまり、レシピにおける食材に使われ方を反映した食材表現を持つことを意味している。しかし食材は本来、人の手が加わっておらず、自然から得られる物質であることを考えると、レシピの情報から食材表現を得ることは応用先に特化する形になるため適切ではない。

そのため、食材そのものを表すために用いることが可能な情報として化合物が挙げられるが、化合物を扱う際にも FlavorGraph には課題点が残されている。この点が二つ目の項目であり、化合物の観点から見ると、FlavorGraph のグラフ構造は不完全である。具体的には化合物間のエッジが貼られておらず、化合物同士の関係性を考慮することができていない。食材に含まれる化合物は多種多様で、複雑に絡み合って混在していること [12] を考えると、化合物の関係性を考慮した状態で食材表現に埋め込むべきである。化合物の僅かな違いによって人体へ与

える影響が大きく変わることを<sup>2</sup>を考えると、化合物は食材表現に取り込むべき情報であるといえる。

そこで本研究では食材に関連する化合物を扱うとともに、化合物間の関係も保持した関係性が密なグラフを構築しグラフ表現学習を行うことで、食材表現の精緻化を測る。

## 3 基礎分析

本研究が構築するグラフは、食材と化合物が混在した異種グラフであるため、食材同士や食材-化合物、化合物同士のエッジを張る必要がある。食材に関連するエッジ情報は既存の食材化合物データベース FlavorDB [10] を用いることで得ることができるが、化合物同士のエッジはグラフ上に化合物の類似性を表現する必要があるため、化学情報学分野で頻繁に行われる化合物類似性の演算手法を用いることが必要である。

そこで本節では、提案する異種グラフにおいて、化合物同士のエッジを構築する際に判断基準となった基礎分析について述べる。情報学と化学を融合した化学情報学(ケモインフォマティクス)における重要なタスクとして化合物類似度の計算がある。これは、“Similar property principle” という考え方 [13] に基づいており、構造的に似た化合物は性質も似るというものである。この考え方は今回扱う食ドメインでも例外ではなく、化合物の類似度が高ければ人体に及ぼす影響も類似すると考えられる。そのため食材に関連する化合物を考える場合、その化合物に関連する化合物の情報も考慮して埋め込む必要がある。

化合物の類似度を計算するためには、それぞれの化合物を計算機で扱える形式で表す必要があるが、その主要な方法として Fingerprint (FP) というものがある。これは化合物をビット配列で表すもので、具体的な様子を図 2 に示す。図 2 の通り、ある化合物に対して固定長のビット配列で表現する。化合物を FP に変換した後、そのビット配列を化合物の特徴量として類似度を計算する。FP で表された化合物の類似度を計算する指標として主要なものに、式 (1) で定義される Tanimoto 係数 ( $S_T$ ) と式 (2) で定義される Dice 距離 ( $S_D$ ) がある。両者とも化合物の類似度を計算方法として用いられており、0 から 1 の範囲の値を取り、1 に近いほど類似性が高いことを示す。Tanimoto 係数は簡単に直感的な計算を行うことができる一方、Dice 距離は共通の要素が多い場合により高い類似度を示すため、似た化合物同士を見つけるのに適している。使うデータによって適する手法が異なるため基礎分析を行う必要がある。

$$S_T = \frac{c}{a + b - c} \quad (1)$$

$$S_D = \frac{2c}{a + b} \quad (2)$$

ここで、 $a$ ,  $b$  はそれぞれの化合物 A, B から得られるビット配列で 1 である要素で、 $c$  は化合物 A, B の中で共通して 1 で

2: 農林水産省, “トランス脂肪酸”, [https://www.maff.go.jp/j/syouan/seisaku/trans\\_fat/t\\_kihon/trans\\_fat.html](https://www.maff.go.jp/j/syouan/seisaku/trans_fat/t_kihon/trans_fat.html), 2023 年 3 月 22 日閲覧。

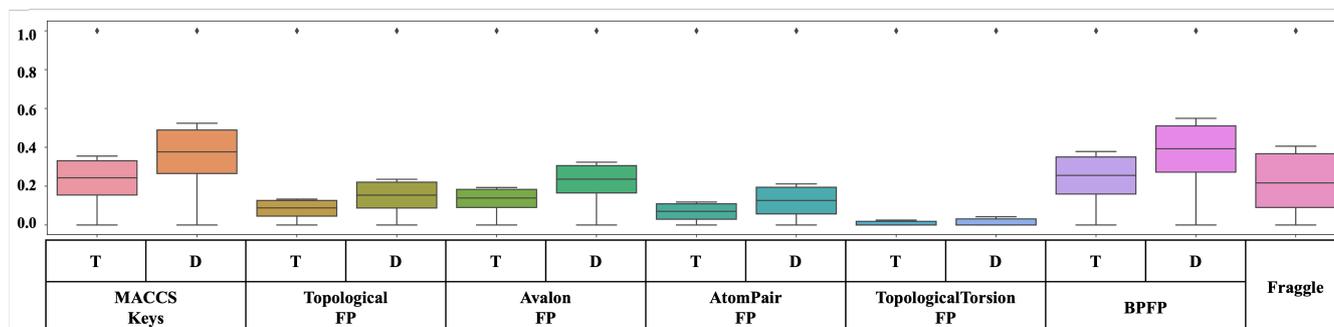


図 1: 各種 FP による類似度の統計

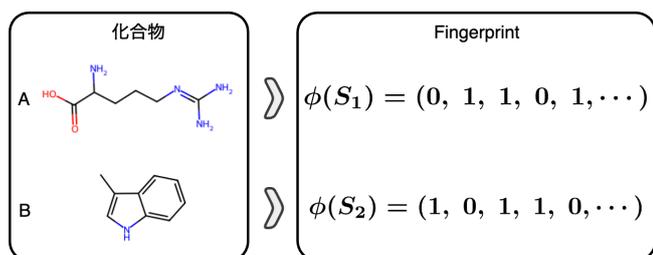


図 2: Fingerprint の概要

ある要素を数えたものである。これらの手法により、FP に変換された化合物の類似度を計算することができる。

化合物を扱う際に有用な Python のオープンソースライブラリである RDKit<sup>3</sup> の中で用いることができる以下の表 1 に示す FP を試した。

表 1: 本手法で扱った FP の種類

MACCS Keys	TopologicalFP
MinHashFP	AvalonFP
AtomPairFP	TopologicalTorsionFP
DPFP	Fraggle

各種 FP に対する Tanimoto 係数、Dice 距離のそれぞれと、Fraggle という距離の測る方法と FP が融合した手法で化合物同士の類似度を計算した。Fraggle は、Tanimoto 係数や Dice 距離などの既存の類似度計算手法と比べ、化合物の構造を重視した計算方法であり、分子構造全体を見た時に影響が少ないと考えられる部分構造の影響を受けにくいアルゴリズムである。対象とした化合物は FlavorDB2 に収集されている化合物 1,784 個で、その組合せである 1,583,310 ペアの類似度を計算し統計を取った。その結果が図 1 であり、図中のそれぞれの箱ひげ図の下にある表の (T) が Tanimoto 係数で、(D) が Dice 距離に対応している。

図中の箱ひげ図を見ると、一番右に位置する Fraggles により計算された類似度の四分位範囲が最も大きく、それぞれの類似度に差が出る類似度計算手法であることがわかる。これらの結果から、グラフを構築した場合エッジの重みとしてそれぞれで差異が出やすいと考えられる Fraggles を採用して化合物間のエッジを構築する。

## 4 提案手法

本研究では化合物情報を加味した食材分散表現を構築するために、先行研究では考慮できていなかった化合物間の関係を加えた異種グラフを提案する。食材と食材に含まれる化合物に重視したグラフ構造を構築することでより精緻な食材分散表現の構築を目指す。

提案手法の流れを図 3 に示す。提案するグラフは全て FlavorDB2 から構築されており、4.1 で FlavorDB2 を、4.2 でグラフの構築方法、4.3 でノード埋め込みについて説明を行う。

### 4.1 データセット

本研究を遂行するにあたり用いた食材と化合物のデータについて記述する。本研究では食材情報とその食材関連した化合物を数多く収集しているデータベースである、FlavorDB2<sup>4</sup> を使用した。FlavorDB2 は 2 の先行研究に当たる FlavorGraph で用いられていた FlavorDB [10] の後継となる研究であり、FlavorDB2 に移行するにあたり特に化合物に関するデータの充実化が図られている。FlavorDB2 の Web ページに対してスクレイピングを行い、4.2 で説明を行うカテゴリデータを含む食材データと化合物データを取得した。ここでの食材データは “apple” や “orange” といった表記が整っている食材データであり、化合物データは “decanal” (デカノール: 分子式  $C_{10}H_{22}O$ ) や “pentanal” (ペンタノール: 分子式  $C_5H_{12}O$ ) といった分子式で表すことができる粒度のデータである。

### 4.2 異種グラフの構築

本研究で提案する異種グラフの構築方法について述べる。提案するグラフは食材と化合物のノードが混在した異種グラフであり、食材-食材、食材-化合物、化合物-化合物の全てにエッジが貼られている。

#### ノード: 食材

食材ノードは FlavorDB2 に登場する食材であり、合計 936 種類を収集しており、“apple” や “orange” などのデータである。

#### ノード: 化合物

同じく化合物ノードについても FlavorDB2 に掲載されてい

3: “RDKit”, <https://www.rdkit.org/>, 2023 年 3 月 22 日 閲覧.

4: “FlavorDB2”, <https://cosylab.iiitd.edu.in/flavordb2/>, 2023 年 3 月 22 日 閲覧.

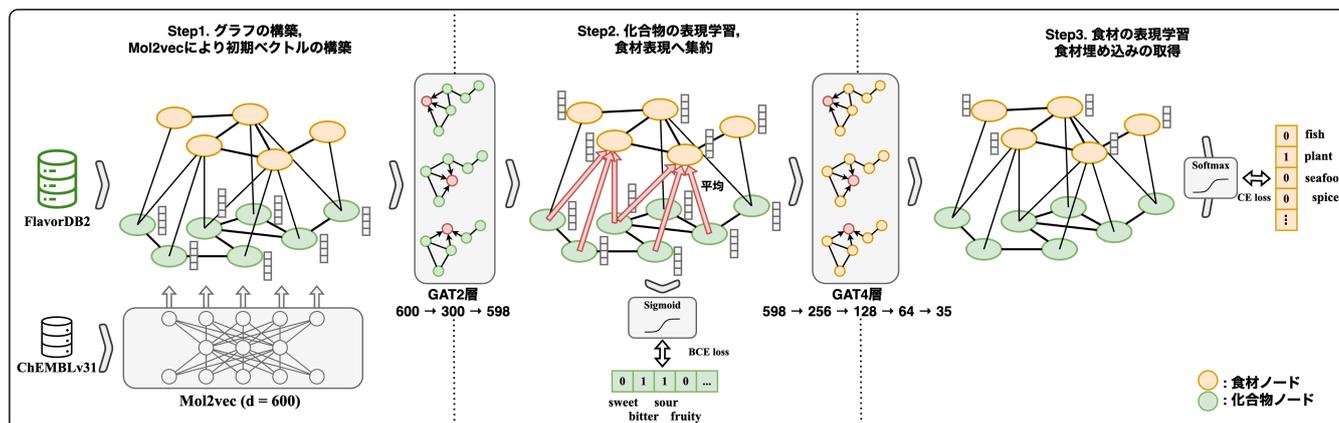


図 3: 本研究の概要図

る化合物を採用しており、各食材に関連付けられている化合物を収集した。その結果合計 1,779 件の化合物をノードとして扱った。

### エッジ：食材-食材

食材同士の関係性について、2 節で説明した既存手法ではレシピを元に構築していたが、本研究では FlavorDB2 に存在するデータから構築した。具体的には食材に含まれる化合物を用いて計算を行っており、各化合物に対して含まれるかどうかの 0/1 ベクトルを特徴量として式 (3) で表すコサイン類似度を用いて計算した。

$$I_d = \frac{\sum_{i=1}^n A_i \cdot B_i}{\sqrt{\sum_{i=1}^n A_i^2} \cdot \sqrt{\sum_{i=1}^n B_i^2}} \quad (3)$$

ここで、 $A, B$  はそれぞれ食材であり、 $A_i, B_i$  は各食材の  $i$  次元目の化合物が存在するかどうかの値である。 $n$  の値は今回扱った FlavorDB2 の化合物数と一致するため、1,784 である。そして、食材間のスコア  $I_d$  が 0 より大きいものに対してエッジを構築した。

### エッジ：食材-化合物

FlavorDB2 が提供しているサイトには各食材のページが存在し、各食材に対して化合物の一覧が列挙されている。4.1 で行ったスクレイピングからそれらのページを収集し、食材と化合物にエッジを構築した。つまり食材  $A$  のページに化合物  $B, C, D$  が掲載されていれば、エッジは  $A-B, A-C, A-D$  のように貼られる。

### エッジ：化合物-化合物

化合物間のエッジは 3 にある通り、Fraggle を用いて構築した。それぞれの化合物の組合せ全てで類似度を計算し、0 より大きいものに対してエッジを構築した。また得られた類似度の値をそのエッジの重みとしている。

最終的に構築された異種グラフの構成を表 2 に示す。構築されたグラフは、ノード数に対してエッジの数が多い密なグラフ構造である。

食材ノードの表現学習を行うにあたって必要となる食材と化合物のラベルを収集した。表現学習ではこれらのラベルの違いを表現できるようにパラメータが精緻化される。

食材に関するラベルはその食材がどのような分類を持つかの

カテゴリデータである。そのため、食材に紐付いているカテゴリデータは“apple”であれば“fruit”であり、“onion”であれば“vegetable”である。また化合物に紐付いているラベルは“Flavor Profile”と呼ばれるものである。これは化合物に対して食材に影響を及ぼす属性が付与されたデータであり、“bitter” (苦い) や “sweet” (甘い) などのデータである。以上の手法で得られたラベルの数とラベルの例を表 3 に示す。

表 2: 構築した異種グラフの構造

要素	カテゴリ	数
ノード	食材	936
	化合物	1,779
エッジ	食材 - 食材	356,872
	食材 - 化合物 化合物 - 化合物	60,261 1,388,919

### 4.3 ノード埋め込み

4.2 で得られたグラフをもとにグラフ学習を行うことで食材表現を得る。4.2 で構築したグラフを既存のグラフ学習手法に適用することも可能である。しかし、本手法で扱うグラフは食材化合物が混在したグラフであり、なおかつ、階層的な意味関係を持つ特殊なグラフであるため、通常のグラフ学習で関係を埋め込み表現に表すことができない可能性がある。そのため、本研究ではグラフ学習手法の一種である Graph Attention Networks (GAT) [14] を段階的に扱い、学習を進めることでこれらの問題に対処した。

GAT はグラフ構造からノードの表現学習を行うグラフニューラルネットワーク (GNN) の一種である。GNN では通常各ノードに対して表現を保持している状態を想定しており、その

表 3: ノードラベルの集計

カテゴリ	ラベル数	ラベルの例
食材	35	fish, fruit, meat, vegetable, berry plant, seafood, spice, ...
化合物	598	bitter, fatty, floral, fresh fruity, green, sweet, waxy, ...

表 4: 食材分類の結果

手法	次元数	MLP		XGBoost	
		macro $F_1$	micro $F_1$	macro $F_1$	micro $F_1$
FlavorGraph(既存手法)	300	0.1325	0.2875	0.2044	0.3402
GAT(提案手法)	35	<b>0.3152</b>	<b>0.4637</b>	<b>0.3159</b>	<b>0.4579</b>

集約を行い、ノード表現を得る。その中でも GAT は集約する際に、ノード同士の重要度 (Attention) を考慮しつつノード集約を行う手法であり、通常の GNN [15] や GCN [16] などの手法と比べ精度が高い。

学習の手順は以下の手順で構成され、その流れを図 3 に表す。

(1) Mol2vec [17] により化合物表現を取得。得られた化合物表現を初期ベクトルとして、化合物グラフに対して GAT [14] を適応

(2) 前項で得られた化合物表現を食材ベクトルに集約

(3) 食材グラフに対して GAT [14] を適応

これらの手順を踏まえることで食材ベクトルを得る。各手順について以下で詳細に述べる。

### (1) Mol2vec により化合物表現を取得

最初のステップでは、グラフ学習を行う際に扱う初期ベクトルとして化合物に関する埋め込み表現を用いる。これは各ノードに特徴を持つグラフ学習の場合、初期ベクトルとしてランダムな値よりも、そのノードが持つ性質や意味といった情報を用いる方が性能が向上する [18] ことに起因しており、今回の場合は化合物の表現学習の一つである Mol2vec [17] を用いた。Mol2vec は大規模な化学データから教師なしで化合物表現を得る方法であり、言語リソースから単語表現を得る Word2vec [19] に類似した手法である。Word2vec における「文」を化合物、「単語」をその化合物の部分構造として扱い、skip-gram 方式で学習する。今回は化合物データとして、化学や生理活性、ゲノムデータなどを大規模に収集した化合物データベースである ChEMBL version31<sup>5</sup> を使用し、Mol2vec を学習した。学習に使用した化合物の数は 2,304,875 であり、その結果 600 次元の化合物埋め込み表現を得た。これにより大規模な化合物データから今回扱う化合物の汎用的な意味を持った埋め込み表現を得た。

### (2) GAT (化合物グラフ) を学習し化合物表現を食材ベクトルに集約

前項で得られた化合物埋め込み表現を初期ベクトルとして GAT によりグラフ学習を行う。この GAT を用いて化合物表現を得るが、このステップで対象とするものは提案グラフの化合物ノードのみで構成されたグラフであり、Mol2vec により得られた埋め込み表現を学習していく。その際のグラフ学習の設計は 2 層の GAT 層を経ており、埋め込み次元はそれぞれ 600 次元から 300 次元へ圧縮し 598 次元へ推移し、598 個の化合物の複数ラベルを予測する。入力された表現を緻密な潜在表現を得て学習することで、得られる化合物表現の精緻化を図る。そし

て集約された最終的な表現を正解ラベルとして 4.2 で述べた “Flavor Profile” を正解とする。通常の GAT では単一のラベルを想定しているが、“Flavor Profile” はある化合物に対して、複数のラベルが付与されているデータであるため、そのままでは適応することができない。そのため、GAT の最終層で得られるベクトルを Sigmoid 関数 (式 (4)) を適応することで、各ラベルに該当する確率とし、その確率と正解ラベルとの損失を Binary Cross Entropy Loss (二値交差エントロピー: 式 (5)) を計算し、その損失が小さくなるように学習を進めた。

$$f(x) = \frac{1}{1 + \exp(-x)} \quad (4)$$

$$l_n = \frac{1}{n} \sum \{y_n \cdot \log x_n + (1 - y_n) \cdot \log(1 - x_n)\} \quad (5)$$

これらの手順で得られた化合物表現を食材表現に集約する。その際、ある食材についてエッジが貼られている化合物の埋め込み表現についての平均を計算する。

### (3) GAT (食材グラフ) を学習

最後のステップでは前項で平均して集約された食材表現を初期ベクトルとしてさらに GAT を適応する。その際のグラフ学習の設計は 4 層の GAT 層であり、埋め込み表現は 598,256,128,64,35 と段階的に減るように推移し、35 個の食材の複数ラベルを予測する。最終的に得られたベクトルを 4.2 節で述べた食材カテゴリの予測を行う。その際、最終的に得られたベクトルを softmax 関数を適応することでカテゴリの確率を計算する。そして式 (7) に示している、softmax 関数で算出された確率と正解ラベルとの交差エントロピー損失を計算し、その損失が小さくなるように学習を行った。

$$f(x) = \frac{\exp(x_i)}{\sum_j \exp(x_j)} \quad (6)$$

$$l_n = - \sum \{-x \cdot \log y + (1 - x) \cdot \log(1 - y)\} \quad (7)$$

以上の工程で食材の埋め込み表現を得た。また通常の GAT の学習では、エッジにおける重みを考慮することができないため、ノード特徴量を更新する際に以下のような変更を加えた。GAT ではアテンション行列 ( $\alpha_{ij}$ ) を元に特徴量を更新するが、その際ノード間の重要度である  $e_{ij}$  (式 (8)) を元に作成する。

$$e_{ij} = a(Eh_i, Wh_j) \quad (8)$$

ここで、 $W(\mathbf{R}^{F \times F'})$  は  $F$  次元から  $F'$  次元に線形変換する際の重みパラメータであり、 $h_i, h_j$  はそれぞれノード  $n_i, n_j$  の特徴量、 $a$  は GAT における attention 関数である。

通常  $e_{ij}$  に softmax 関数をかけてアテンション行列  $a_{ij}$  を作成するが、その計算の時に、エッジの重みを考慮した (式 9)。

5: ChEMBL, <https://www.ebi.ac.uk/chembl/>, 2023 年 3 月 21 日閲覧。

表 5: カテゴリごとの正解数

カテゴリ	データ数	既存手法	提案手法	増加率 (%)	カテゴリ	データ数	既存手法	提案手法	増加率 (%)
additive	17	1	4	+17.68	legume	7	1	0	-14.29
bakery	20	3	8	+25.00	herb	26	8	16	+30.77
berry	17	2	10	+47.06	maize	5	0	3	+60.00
beverage alcoholic	23	14	20	+26.09	meat	16	2	4	+12.50
beverage caffeinated	3	0	3	+100.00	nut	11	1	4	+27.27
cabbage	10	2	3	+10.00	plant	6	0	41	+16.67
cereal	13	0	1	+7.69	plant derivative	13	1	2	+7.69
dish	28	18	9	-32.14	seafood	12	3	8	+41.67
fish	20	8	9	+5.00	spice	22	7	17	+45.45
flower	2	0	2	+100.00	vegetable	11	0	4	+36.36
fruit	32	12	25	+40.62	vegetable root	7	0	1	+14.29
fruit citrus	6	0	4	+66.67	vegetable tuber	6	0	2	+33.33

$$\alpha_{ij} = \text{softmax}(e_{ij} * \omega_{ij}) \quad (9)$$

価指標である.

ここで  $\omega_{ij}$  はノード間に存在するエッジを表す.

これらの GAT の改変をステップ (2), (4) で行った食材, 化合物の表現学習において適応した.

$$\text{macro } F_1 = \frac{1}{N} \sum_k \frac{2P_k R_k}{P_k + R_k} \quad (10)$$

$$\text{micro } F_1 = \frac{2\bar{P}\bar{R}}{\bar{P} + \bar{R}} \quad (11)$$

## 5 評価実験

本節では本研究で構築された食材表現の有効性を確かめる評価実験について述べる.

本手法で得られる食材表現を先行研究 (2) である Flavor-Graph から得られる食材表現との比較を行う. それぞれから得られる食材分散表現の性能確かめる方法として, 食材分類タスクを行う. これは計算機により得られた食材表現が, 実際の食材分類の結果を再現できていなければならないほど, 食材の性質を正確に表すベクトル表現を得ることができたと判断できるからである.

### 5.1 実験設定

先行研究 (2) と提案手法のグラフから得られるそれぞれ食材分散表現を特徴量として多クラス分類を行う. 多クラス分類における正解データは 4.2 で収集された食材カテゴリのデータであり, その中で FlavorGraph に存在する食材と共通する 382 件, 35 ラベルを対象とした. そして, 分類手法について  $k=5$  で  $k$  分割交差検証を行い, そのそれぞれの指標の平均を計算した. 分類手法における訓練データは 306 件, テストデータは 76 件である.

多クラス分類手法として, ニューラルネットワークベースの多層パーセプトロン (MLP) と決定木ベースの XGBoost を用いて行った. これは分類手法による精度依存を解消するために複数の手法を用いており, 異なるアルゴリズム系で代表的な 2 種の方法を取り入れている.

また評価指標として, macro  $F_1$  と micro  $F_1$  を用いて評価を行った. 式 (10) で表される macro  $F_1$  は各ラベルでの  $F_1$  を平均した値であり, クラス全体から特徴量の評価を行う. 式 (10) で表される micro  $F_1$  は適合率と再現率の平均値を計算した後,  $F_1$  を計算した値であり, 特にラベルの不均衡性を考慮した評

ここで  $P_k, R_k$  はクラス  $k$  での適合率 (Precision), 再現率 (Recall) であり,  $\bar{P}, \bar{R}$  は全クラスで平均をとった Precision, Recall である.

### 5.2 結果・考察

多クラス分類で用いた特徴量の次元数と, 分類した結果を表 4 に示す. どちらの分類手法においても, 提案手法による埋め込み表現がカテゴリを分けることができる精緻な表現を得ることが可能になった.

分類結果について, 具体的にどのような食材表現が新たに正解しており, 精度向上に起因したかを考察する. 具体的には, 正しく分類できた食材の数を集計しており, MLP, XGBoost 両方で正解することができた食材の数の集計を表 5 に示す.

結果より多くの項目で提案手法の方が正しく分類できた数が増えており, 新たに正解することができるようになったカテゴリも存在した. 特に “vegetable”, “vegetable root”, “vegetable tuber” といった野菜に関連する食材について, 既存手法は認識できなかったものの, 提案手法では正しく分類できていることがわかる. 一方, 提案手法で正しく分類できなかったもので特に先行研究差があるものとしては, dish (小皿料理) が挙げられた. これらのカテゴリに属する食材は, レシピなどの完成した料理とはならないものの, ある程度加工が入るような食材であり, 本手法がレシピの情報が欠損した学習を行ったため, 食材が組み合わせられる情報を構築できなかった結果であると考察する.

また, 表 5 において, 特に精度向上に寄与したカテゴリについてさらなる考察を行った. 対象としたカテゴリは “beverage caffeinated” と “flower” でありこれらは増加率が 100%, つまり先行研究では一つも正しく分類できなかったが, 提案手法では全て正しく分類可能になったカテゴリを対象とする. そして

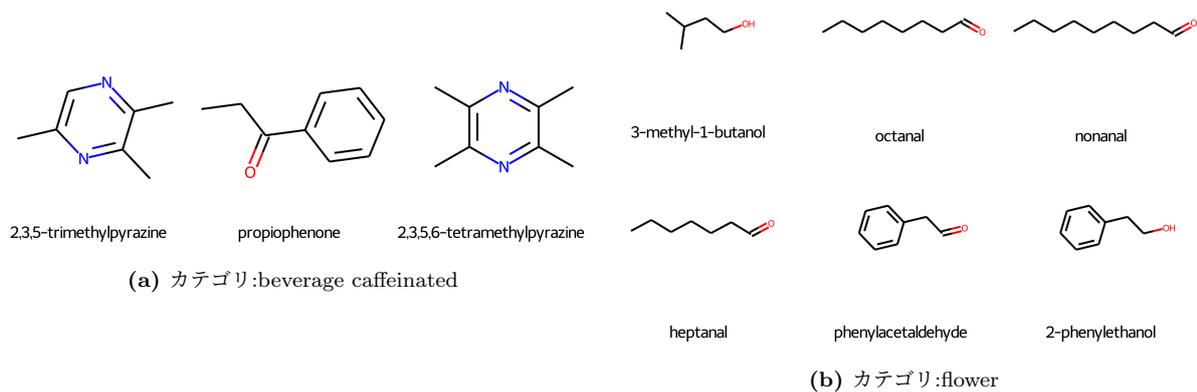


図 4: 共通化合物の構造

そのカテゴリについて、グラフ上での化合物に関する食材の性質を考察した。具体的には、同じカテゴリの食材について、それぞれの食材とエッジが構築されている化合物をグラフから抽出し、共通する化合物の構造を図示した。その結果が、図 4 である。

図 4 より、同じカテゴリ内で構造が似ている化合物を見られた。カテゴリ “beverage caffeinated” では、ピラジン（六員環で窒素を含む複素環式化合物）を部分構造に持つ化合物 (“2,3,5-trimethylpyrazine”, “propiophenone”) が共通している。一方、カテゴリ “flower” では直鎖のアルキル基が共通している化合物 (“octanal”, “nonanal”, “heptanal”) やフェニル基 ( $C_6H_5-$ ) が共通する化合物 (“phenylacetaldehyde”, “2-phenylethanol”) が見られた。このことから、性質が似た食材について、提案手法で構築したグラフ上では構造が似た化合物を位置することが可能になった結果であると言える。

## 6 おわりに

本研究では食材と化合物を考慮したグラフ構築し食材分散表現の構築方法を提案した。得られた食材表現をカテゴリに分類するタスクにおいて、既存手法と比べ性能向上が明らかになった。

今後の課題としては二つ存在する。一つ目はレシピデータを用いた食材データの拡張である。本研究では食材データに重きを置くため、食材と化合物データのみを収集した FlavorDB2 を用いてグラフを構築した。しかし応用先での活用を考えると、レシピに登場する食材に対しても対応できる形が望まれる。そのため今後は表揺れの激しいレシピの食材データを扱うことが可能になるように本手法を改良してしていく。

二つ目については、化合物データの拡張である。本研究では FlavorDB2 に存在する化合物、つまり食材との関連性が明らかになっている化合物のみを対象としてグラフを構築した。しかし、これらの化合物は実世界に存在する化合物のごく一部であるため、食材同士が使われた時に新たに作用する化合物など、今回のデータ以外の化合物の情報を考慮することができない。食材は単体で使われることはなく、なおかつ実世界での化合物

はさらに大量にあることを考えると、考慮すべき課題である。そのため、今後は食材に関連がまだ明らかになっていない化合物 (FlavorDB2 以外のデータ) を含めた表現学習の手法を模索する。

## 謝 辞

本研究の一部は日本学術振興会科学研究費助成事業基盤研究 (A) JP19H01138, および基盤研究 (B) JP19H04218, 同志社大学大学院文化情報学研究科研究推進補助金の助成を受けたものである。

## 文 献

- [1] Marion Nestle, Rena Wing, Leann Birch, Lorelei DiSogra, Adam Drewnowski, Suzette Middleton, Madeleine Sigman-Grant, Jeffery Sobal, Mary Winston, and Christina Economos. Behavioral and social influences on food choice. 1998.
- [2] Marvin Harris. *Good to eat: Riddles of food and culture*. Waveland Press, 1998.
- [3] Weiqing Min, Shuqiang Jiang, Linhu Liu, Yong Rui, and Ramesh Jain. A survey on food computing. *ACM Computing Surveys (CSUR)*, Vol. 52, No. 5, pp. 1–36, 2019.
- [4] Markus Rokicki, Christoph Trattner, and Eelco Herder. The impact of recipe features, social cues and demographics on estimating the healthiness of online recipes. In *Twelfth International AAAI Conference on Web and Social Media*, 2018.
- [5] Jun Harashima, Yuichiro Someya, and Yohei Kikuta. Cookpad image dataset: An image collection as infrastructure for food research. In *Proceedings of the 40th International ACM SIGIR Conference on Research and Development in Information Retrieval, SIGIR '17*, p. 1229–1232, New York, NY, USA, 2017. Association for Computing Machinery.
- [6] Dima Damen, Hazel Doughty, Giovanni Maria Farinella, Sanja Fidler, Antonino Furnari, Evangelos Kazakos, Davide Moltisanti, Jonathan Munro, Toby Perrett, Will Price, and Michael Wray. Scaling egocentric vision: The epic-kitchens dataset. In *Proceedings of the European Conference on Computer Vision (ECCV)*, September 2018.
- [7] Donghyeon Park, Keonwoo Kim, Seoyoon Kim, Michael Spranger, and Jaewoo Kang. Flavorgraph: a large-scale food-chemical graph for generating food representations and recommending food pairings. *Scientific reports*, Vol. 11,

No. 1, pp. 1–13, 2021.

- [8] Yuxiao Dong, Nitesh V. Chawla, and Ananthram Swami. Metapath2vec: Scalable representation learning for heterogeneous networks. In *Proceedings of the 23rd ACM SIGKDD International Conference on Knowledge Discovery and Data Mining*, KDD '17, p. 135–144, New York, NY, USA, 2017. Association for Computing Machinery.
- [9] Amaia Salvador, Nicholas Hynes, Yusuf Aytar, Javier Marin, Ferda Ofli, Ingmar Weber, and Antonio Torralba. Learning cross-modal embeddings for cooking recipes and food images. In *Proceedings of the IEEE conference on computer vision and pattern recognition*, pp. 3020–3028, 2017.
- [10] Neelansh Garg, Apuroop Sethupathy, Rudraksh Tuwani, Rakhi Nk, Shubham Dokania, Arvind Iyer, Ayushi Gupta, Shubhra Agrawal, Navjot Singh, Shubham Shukla, et al. Flavordb: a database of flavor molecules. *Nucleic acids research*, Vol. 46, No. D1, pp. D1210–D1216, 2018.
- [11] Kirill Veselkov, Guadalupe Gonzalez, Shahad Aljifri, Dieter Galea, Reza Mirnezami, Jozef Youssef, Michael Bronstein, and Ivan Laponogov. Hyperfoods: Machine intelligent mapping of cancer-beating molecules in foods. *Scientific reports*, Vol. 9, No. 1, pp. 1–12, 2019.
- [12] David R Jacobs and Linda C Tapsell. Food synergy: the key to a healthy diet. *Proceedings of the Nutrition Society*, Vol. 72, No. 2, pp. 200–206, 2013.
- [13] Mark A Johnson and Gerald M Maggiora. *Concepts and applications of molecular similarity*. Wiley, 1990.
- [14] Petar Veličković, Guillem Cucurull, Arantxa Casanova, Adriana Romero, Pietro Liò, and Yoshua Bengio. Graph attention networks. In *International Conference on Learning Representations*, 2018.
- [15] Franco Scarselli, Marco Gori, Ah Chung Tsoi, Markus Hagenbuchner, and Gabriele Monfardini. The graph neural network model. *IEEE transactions on neural networks*, Vol. 20, No. 1, pp. 61–80, 2008.
- [16] Thomas N. Kipf and Max Welling. Semi-supervised classification with graph convolutional networks. In *International Conference on Learning Representations (ICLR)*, 2017.
- [17] Sabrina Jaeger, Simone Fulle, and Samo Turk. Mol2vec: unsupervised machine learning approach with chemical intuition. *Journal of chemical information and modeling*, Vol. 58, No. 1, pp. 27–35, 2018.
- [18] Yuxiao Lin, Yuxian Meng, Xiaofei Sun, Qinghong Han, Kun Kuang, Jiwei Li, and Fei Wu. BertGCN: Transductive text classification by combining GNN and BERT. In *Findings of the Association for Computational Linguistics: ACL-IJCNLP 2021*, pp. 1456–1462, Online, August 2021. Association for Computational Linguistics.
- [19] Tomas Mikolov, Kai Chen, Greg Corrado, and Jeffrey Dean. Efficient estimation of word representations in vector space. *CoRR*, Vol. abs/1301.3781, , 2013.