

薬膳茶レシピのケモインフォマティクスに関するネットワーク解析 Network analysis on the recipe ecosystem using chemoinformatics of medicinal teas

1180225 清家遥香
Haruka Seike

【背景】食材の組み合わせに関する新しい原理として、フードペアリングおよびフードブリッジングの仮説が注目されている。[1][2] 今回は薬膳茶に着目し解析を行った。

【方法】14種類の薬膳茶に含まれている各成分の構造式をFingerprint形式（線形表記法）で表す。Fingerprint形式で表現した化学構造を比較する指標としてTanimoto係数を用い、類似度を算出した。14種類の薬膳茶と77種類の成分を関連付けるネットワーク図を作成した。

【結果】図1は、得られた結果である。構成成分は、化学的類似制度の観点から見ると、二つのグループに分けられることが示唆される。また、よく知られた薬膳茶レシピで用いられる茶葉の組み合わせは、各々の茶葉に含まれる構成成分の化学的類似度は低い傾向が見られることがわかった。以上の傾向は、ブレンドで用いる2種茶葉間のパス長（ネットワーク上での距離指標）として定量評価できる。

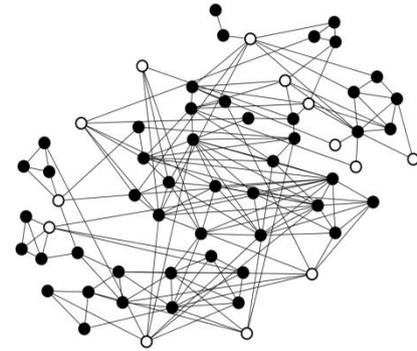


図1. 薬膳茶-成分ネットワーク構造：
白丸が薬膳茶、黒丸が成分を示す。

[1] Ahn, Y. Y., Ahnert, S. E., Bagrow, J. P., & Barabási, A. L. (2011). Flavor network and the principles of food pairing. *Scientific reports*, 1.

[2] Simas, T., Ficek, M., Diaz-Guilera, A., Obrador, P., & Rodriguez, P. R. (2017). Food-bridging: a new network construction to unveil the principles of cooking. *arXiv preprint arXiv:1704.03330*.