

糖度の可視化に向けた重要波長の選択方法

櫻井 俊^{1,a)} 青砥 隆仁¹ 船富 卓哉¹ 久保 尋之¹ 向川 康博¹

1. はじめに

果実の品質評価において、糖度は重要な要素である。そのために近赤外分光法による非破壊の糖度計測が行われてきた。しかし、従来は果実のある 1 点での計測であったために、測定箇所の糖度しか分からなかった。いちごやメロンなど多くの果実では、部位による甘さの偏りがあるため、従来の 1 点計測では品質評価として不十分である。

糖度分布の可視化を行うために、従来の 1 点のみだった分光計測を面へ拡張することが考えられる。面での分光計測は、ハイパースペクトルカメラによって実現可能である。例えば、SOC710-VP は 400-1,000nm の範囲で 128 バンドの撮影ができるため、従来の近赤外分光法を各画素に適用することで糖度を可視化できる。しかし、このようなカメラは高価であり、また撮影に時間がかかるため、実際に選果場などの現場に導入することは困難である。

そこで杉山らは、メロンに含まれる Chl(クロロフィル)と糖度の相関を用いた糖度可視化を提案した [1]。ここでは、675nm 付近の Chl の吸収帯のみを観察する簡易なシステムによる糖度の可視化を行っている。しかし、あらゆる種類の果実が Chl と糖度の相関を持つとは限らない。そこで我々は、Chl の有無や果実の種類に限定されない汎用的な糖度の可視化手法を提案する。

2. 提案手法

2.1 バンドパスフィルタとカメラを用いた糖度の可視化

糖度は多数の化学物質の影響を受け、また各化学物質は Chl のようにそれぞれ特有の吸収波長を持つため、糖度の推定に有効な波長域は少数に限定される。観測すべき波長域を少数に絞り込むことができれば、高価なハイパースペクトルカメラでなくとも、バンドパスフィルタとカメラによる簡易なシステムで糖度の可視化を実現することが可能となり、撮影速度とコストという点で優位となる (図 1)。使用すべきバンドパスフィルタの数や構成について検討するために、糖度の可視化に重要な波長の選択方法について述べる。

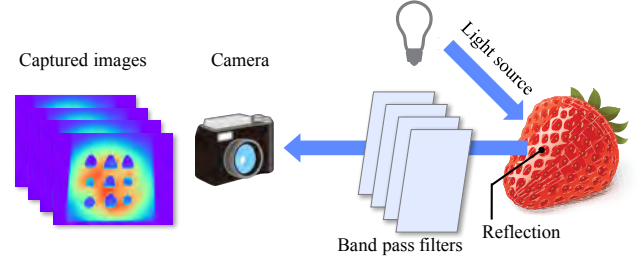


図 1: バンドパスフィルタとカメラを用いたマルチバンド撮影システム。バンドパスフィルタが通す特定波長をカメラで撮影する。

2.2 重要な波長と係数の選択

一般に、近赤外分光法を用いた糖度計測は、未知の測定対象に近赤外光を照射したときの吸収スペクトル $\mathbf{x} = \{x_1, \dots, x_n\}^T$ と、係数ベクトル $\mathbf{c} = \{c_1, \dots, c_n\}^T$ の線形和によって以下のように算出される。

$$y = \sum_{i=1}^n x_i c_i + b \quad (1)$$

y は糖度、 b は切片、添字 i は波長 $i = 1, \dots, n$ を表す。また、サンプル数が m の場合、式 (1) は次のような行列表現に書き換えられる。

$$\mathbf{y} = \mathbf{X}\mathbf{c} + b \quad (2)$$

$\mathbf{y}$ は糖度を並べた m 次元ベクトル、 $\mathbf{X}$ は吸収スペクトル $\mathbf{x}$ を並べた $m \times n$ 行列を表す。また、 $\mathbf{b} = \{b, b, \dots, b\}^T$ とする。

従来、係数ベクトル $\mathbf{c}$ や切片の推定は以下の式 (3) の最小化問題を解く最小二乗回帰 (LS) によって実現されていた。

$$\min_{\mathbf{c}, b} \|\mathbf{X}\mathbf{c} + \mathbf{b} - \mathbf{y}\|^2 \quad (3)$$

また、推定モデルの汎化性能を高めるため、手作業や Step-wise 法により変数選択が行われてきた。しかしこの手法では、熟練した技能が必要であったり、変数選択が局所解に陥る可能性があったりした。

これに対し本研究では、この変数選択の問題を、疎に (非零要素をできるだけ少なく) 係数ベクトル $\mathbf{c}$ を推定する問題と捉えた。具体的には、式 (3) に $\alpha \|\mathbf{c}\|_0$ を正則化項とし

¹ 奈良先端科学技術大学院大学 〒630-0192 奈良県生駒市高山町 8916 番地 5

^{a)} sakurai.shun.sk4@is.naist.jp

て加え、最小化問題を解くことで達成される。しかしこの問題は NP 困難 [2] のため、擬似的 L0 罰則を L1 ノルムへ緩和し近似解を得る lasso が提案されている。

$$\min_{c,b} \|Xc + b - y\|_2^2 + \alpha \|c\|_1 \quad (4)$$

lasso は変数選択と係数の推定が同時に可能であるが、サンプルサイズが大きい時に真の係数 c が求まるとは限らず、変数選択の一致性を持たないことが知られている [3]。そこで本提案では、式 (4) に重み関数 w を加え、一致性を持たせた adaptive lasso を用いる [4]。

$$\min_{c,b} \|Xc + b - y\|_2^2 + \alpha \|w^T c\|_1 \quad (5)$$

ここで、 $w_i = 1/|\hat{c}_i|^\gamma$, $\gamma > 0$ である。初期係数 $\hat{c}$ は LS によって決定する。

3. 実験

少数の波長から糖度の可視化ができるかどうかを検証するため、実測データを用いてさまざまな α で adaptive lasso による c, b の推定を行い、波長の選択数と推定精度の関係を調べた。計測対象は 100 サンプルのイチゴとし、目的変数 y は屈折糖度計 (PR-101 α , Atago Co. Ltd.)、説明変数 X は 600-1,000nm を 1nm 刻みで計測可能な分光器を用いて取得した。

推定モデルの当てはまりを以下のスコア S で評価した。

$$S = 1 - \frac{\|y - \hat{y}\|_2^2}{\|y - \bar{y}\|_2^2} \quad (6)$$

ここで、 $\bar{y}$ は y の平均値を要素とするベクトルを表す。評価スコアには 10-分割交差検証をおこなった結果を採用した。糖度の推定結果を図 2、選択波長数を変えた時のスコアを図 3 に示す。400 波長を用いた場合は $S = 0.677$ 、3 波長を用いた場合では $S = 0.592$ という結果となった。大幅な波長数の削減にもかかわらず、スコアを維持していることが確認でき、3 波長でも十分糖度推定が可能であることが確かめられた。最後に、ハイパースペクトルカメラを用いた糖度分布の可視化結果を図 4 に示す。図 4(c) は波長数を限定した推定にもかかわらず、全波長を用いた場合と遜色ない結果が得られ、提案システムの有効性が示せた。

4. おわりに

本稿では糖度可視化システムと、そのための重要波長の選択方法について述べた。実際にシミュレーションによる糖度推定を行い、3 波長で十分糖度の可視化が可能であることを示した。今後は、バンドパスフィルタを用いた計測装置の作成と糖度の可視化実験を通し、提案システムの有効性を実証する。

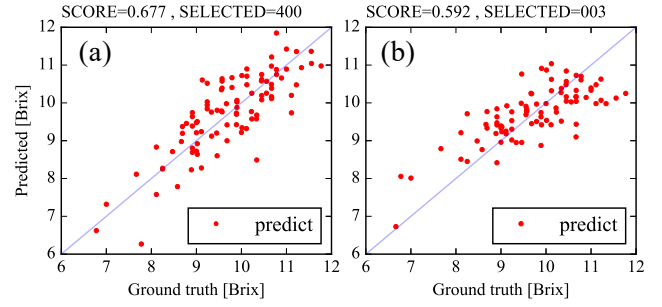


図 2: 交差検定による推定結果。横軸と縦軸はそれぞれ真値 y と推定値 $\hat{y}$ を表す。左右の図はそれぞれ波長数を 400 とした場合と、3 とした場合を示す。

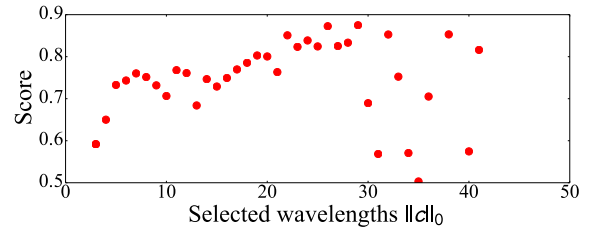


図 3: 選択された波長数 $|c|_0$ とスコア S の関係を示す。

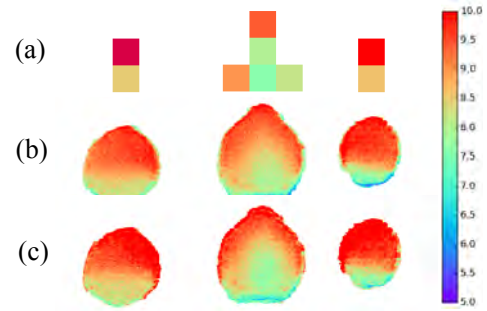


図 4: (a) 屈折糖度計による糖度の計測結果 (b) 全ての波長を用いた推定結果 (c) 3 波長を用いた推定結果

謝辞

ヤンマー株式会社による助成、ヤンマーグリーンシステム株式会社によるデータ提供に謝意を表す。

参考文献

- [1] J. Sugiyama, "Visualization of Sugar Content in the Flesh of a Melon by near-Infrared Imaging", J. Agric. Food Chem., vol.47, pp.2715-2718, 1999.
- [2] B. K. Natarajan. "Sparse approximate solutions to linear systems". SIAM Journal on Computing, 24(2):227234, 1995.
- [3] J. Fan, R. Li, "Variable selection via nonconcave penalized likelihood and its oracle properties", Journal of the American Statistical Association, vol.96, pp.1348-1360, 2001.
- [4] H. Zou, "The Adaptive Lasso and Its Oracle Properties", Journal of the American Statistical Association, vol.101, pp.1418-1429, 2006.