

近赤外分光法によるクリ‘ぼろたん’と‘国見’の非破壊判別

佐野健人・森田陽一・鹿島恭子*

Nondestructive Discrimination between ‘Porotan’ Chestnut and ‘Kunimi’ Chestnut
by Near-Infrared Spectroscopy

Taketo SANO, Youichi MORITA and Kyouko KASHIMA

Summary

We can discriminate between ‘Porotan’ chestnut and ‘Kunimi’ chestnut by using partial least-squares regression with second derivative spectra of near-infrared spectroscopy. By using this technique, approximately 90% of cases can be discriminated correctly.

キーワード：クリ，品種判別，近赤外線分光法，ぼろたん

I. 緒言

近赤外分光法は、一般には光センサーとして知られ、メロンの糖度（伊藤 2007）など、特定の成分を非破壊で定量する用途で実用化が進んでいる。さらに、メロンの内部障害（伊藤 2007, 奥村ら 2008）、メロン（奥村ら 2008）・ウメ（恩田ら 1997）の硬度、リンゴのかたさ・シャリシャリ感・おいしさ（相良ら 2004）など、成分を特定せずに対象の性質を評価する研究も行われている。

今後、果実の非破壊検査技術はいろいろな場面で活用されると期待されているが、クリでは渋皮のむけやすい品種として注目を集めている‘ぼろたん’の品種判別へ利用できないか検討した。

すなわち、‘ぼろたん’の特長を活かすためには他品種と区別して流通・販売する必要があるが、品種別取り扱い体制の確立が求められている。クリでは品種を区別しての取り扱いが従来はほとんど無く、現在の対策は「混ぜない」ための対策のみであり、「混ぜってしまった」場合の対応策は充分ではない。とくに、収穫期が重なる‘国見’とは外観が酷似しており、混入した場合の区別は難しいと懸念されている。

そこで、近赤外分光法によるクリ‘ぼろたん’と‘国見’の判別を試み、若干の知見を得たので報告する。

II. 材料および方法

クリ果実は平成 22 年、23 年とも園芸研究所内で栽培・収穫した‘ぼろたん’および‘国見’を使用した。果実は階級（大きさ）の選別を行わず、装置の測定部位に密着させる必要があるため、球形の果実は除外し、平面を持つ果実を測定対象とした。平成 22 年 11 月 9 日、‘ぼろたん’ 30 果、同 11 月 10 日‘国見’ 28 果、平成 23 年 10 月 25 日‘ぼろたん’‘国見’各 50 果を測定した。

測定には（株）クボタ製フルーツセレクター K-BA100 を用いた。K-BA100 は PC と接続し、付属のソフトウェア K-Support を用いて測定を行った。サンプル測定条件は蓄積時間を 5,000ms、平均回数を 1 とした。データ処理条件は、K-Support による 2 次微分処理を中心± 12 点の 25point の設定で行った（表 1）。

果実は測定後切断し、双子および果肉の変質など障害の有無を目視で確認した。

双子果、障害果および後述する異常値を除いた果実の近赤外線領域である 800nm 以上の波長を用い、近赤外線 2 次微分スペクトルから PLS（Partial Least Squares）回帰法により品種を推定する検量モデルを作成し、その評価を行った。

* 現：退職

表1 測定およびデータ処理条件

装置および測定条件	
K-BA100 (株)クボタ	
サンプル測定条件	
蓄積時間	5,000 ms
平均回数	1
ダミー回数	2
リファレンスおよび波長校正フィルタ条件	
蓄積時間	50 ms
平均回数	5
ダミー回数	2
データ処理条件	
2次微分処理	K-Support (K-BA100付属) 25point(中心±12点)
PLS回帰	R version2.11.1および追加パッケージ‘pls 2.1-0’
説明変数	800~986nm、2nm毎(94波長)
目的変数	‘国見’を0, ‘ぼろたん’を1

III. 結果および考察

1. 測定データの前処理

本報告では近赤外分光法による品種判別の可能性の検討を目的としているため、測定結果に影響を与える品種以外の要因の除去を行った。すなわち、双子果、障害果および渋皮が剥け難く‘ぼろたん’であるか疑わしい果実(平成23年のみ)の測定結果を除き、さらに、品種と産年ごとに2次微分スペクトルが平均値 $\pm 2 \times$ 標準偏差の範囲を超えるものを異常値として除外した(図1)。以下の処理には除外後のデータ群を用いた。除外後の個体数は15~24果と産年・品種に

より異なった。近赤外線2次微分スペクトルは820nm付近と850~900nmで‘ぼろたん’が‘国見’より大きく、840nm付近と940~960nmで‘ぼろたん’が‘国見’より小さく、その違いは平成22年、23年ともに同様の傾向を示した(図2)。佐藤ら(2009)は、クリ6品種の渋皮に含まれるフェノール物質を分画・定量し、‘ぼろたん’の全フェノール含量は一般のニホングリ並みであるが、水溶性画分の量は渋皮剥皮性の優れるチュウゴグリなみに少ないことを明らかにしている。水溶性画分が渋皮細胞から漏出し、果肉と接着するものと推定されているため、‘ぼろたん’の易渋皮剥皮性は水溶性画分の量が少ないことに

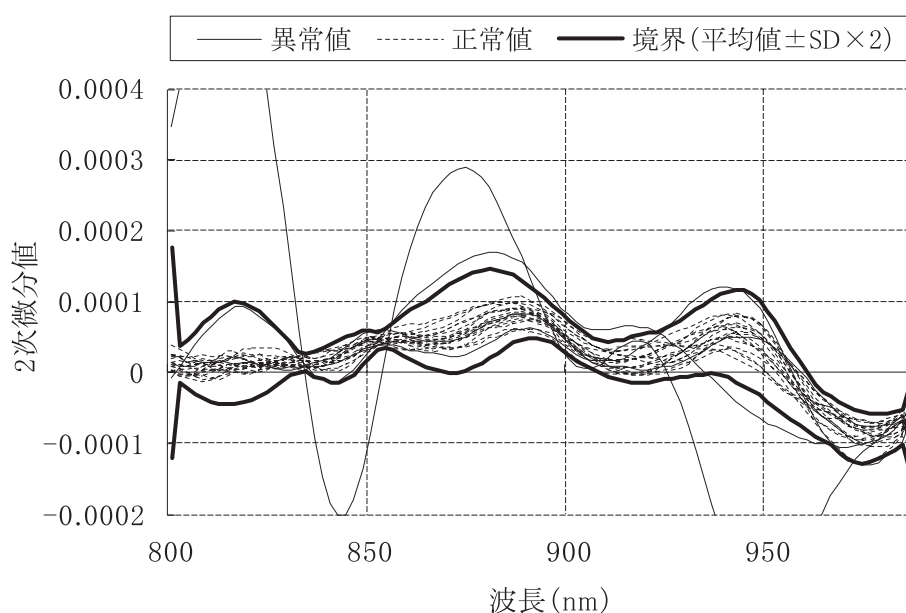


図1 異常値の例 (H22 ‘国見’)

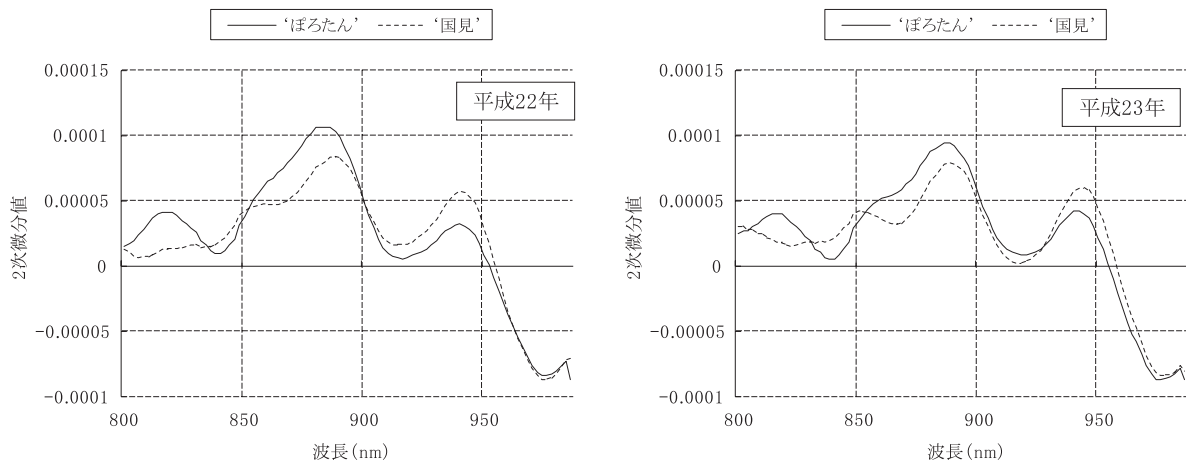


図2 品種ごとの近赤外線2次微分スペクトル

よると考えられている。近赤外線スペクトルの差は、このようなフェノール物質の形態や量の差異を反映したものと推測される。

2. PLS 回帰法による検量モデルの作成とその評価

検量モデル作成に特定の性質に偏ったデータ群を用いると、その偏りを反映した偏った検量モデルとなることがあるため、検量モデル作成には産年・品種ごとにそれぞれ12果を、検量モデル評価には残りの3～12果を充てた(表2)。用途別仕分け(検量モデル作成向けか評価向けか)は無作為に行った。

伊藤(2007)・恩田ら(1997)はそれぞれメロンおよびウメの検量モデル作成に重回帰法を採用している。相良ら(2004)はおいしさやシャリシャリ感を推定する研究で、ニューラルネットワークへの入力値の算出には重回帰法を、また、奥村ら(2008)はメロンでPLS回帰法を採用している。

重回帰法は特定の波長データのみを使用し検量を行うものである。波長と成分等の関連性を評価しやすい利点を持つが、波長の選定に任意性が入る余地があるとともに、選定された波長同士の相関が高い場合にモデルが不安定になる(多重共線性と呼ばれる)問題点

がある。

PLS回帰法は全波長のデータを用いて検量モデルの作成を行う方法であり、説明変数と目的変数それぞれに主成分分析を行うものである。主成分分析は、多変量(複数の波長データ)をその分散を最も良く表現する少数の因子(主成分分析では成分と呼び、PLS回帰法では成分もしくは因子と呼ぶ。ここでは因子と呼ぶ)に収束させることにより、基の波長の取捨選択を行わずに検量モデルを作成する方法である。因子分解は、基のデータへの寄与の高い因子から順に、データ数から自由度を引いた数まで行われるが、分解が進むにつれ寄与の低い因子、ノイズであるとされる。そのため因子数は必要以上に多くせず、ノイズまで回帰モデルに取り込むこと(オーバーフィッティングと呼ばれる現象)を防ぐ必要がある。

本報告では品種の判別の成否について、多成分系で成分を特定しないままに検量を行うため、PLS回帰法を使用し、検量モデルを作成した。検量モデル作成向けデータは産年・品種ごとに12果の合計48果を用いた。また、検量モデルの作成プログラムでcross validationにLeave-One-Outを設定した。そのため、因子数を1とした場合の検量モデルから、因子数46

表2 サンプルの内訳

産年	品種	測定数	双子果	剥皮不良※	障害果	異常値	検量モデル作成向け	検量モデル評価向け
H22	ぼろたん	30	1	—	5	4	12	8
	国見	28	4	—	3	4	12	5
H23	ぼろたん	50	4	3	13	6	12	12
	国見	50	0	—	30	5	12	3

※ H23‘ぼろたん’のみ測定

の場合の検量モデルまで、合計 46 の検量モデルが作成された。

因子数の決定には、PRESS (PRedicted Error Sum of Squares : 各サンプルの予測と実測の差を 2 乗し、合計したもの) が指標として用いられ、最小の PRESS を与える因子数が採用されることが一般的である。しかし、今回の品種判別のように質的データの評価では、量的指標である PRESS は不適當と考えられたため、検量モデル評価向けデータ群の正答率を基にして因子数を決定した。すなわち、品種‘国見’を 0、‘ぼろたん’を 1 とし 0.5 を基準として判別した場合、‘国見’の予測値は 0.5 未満であれば正答であるが、PRESS という実測値との差を基にした指標では 0.6 (誤答) を -1.0 (正答) より望ましい値として評価することが起こりうるため (表 3)、PRESS に代えて検量モデル評価向けデータ群の正答率を基にして因子数を決定した。因子数が 6 および 8~11 の場合に、検量モデル評価向けデータ群の正答率は 86% と最大となったため、オーバーフィッティングを考慮し、この中で最小の 6 を因子数とした (図 3)。

因子数 6 の時、検量モデルの作成向け群で 92%、評価向け群で 86% が品種を正しく判別できた (表 4)。

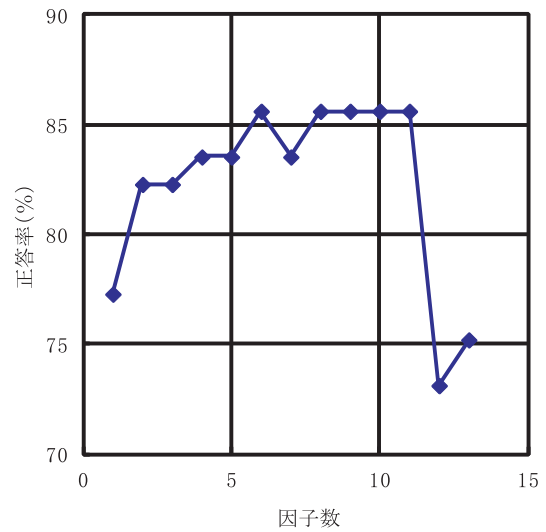


図 3 因子数と正答率

※ 因子数決定の手順

1. すべての検量モデルに評価向け群の各データを当てはめ評点を算出
2. 評点 0.5 を基準として、正答・誤答を判定
(‘国見’は評点 0.5 未満を、‘ぼろたん’は 0.5 以上を正答とした)
3. 各産年・品種ごとの正答率を平均
4. 3 の平均値が最も高くなる因子数の中で、最小の因子数を採用

表 3 PRESS の概念と正答数

実測値	ケース1					ケース2				
	予測値	差	差の2乗	差の2乗の計*	正答数	予測値	差	差の2乗	差の2乗の計*	正答数
0	-0.1	-0.1	0.01	0.54	3	-0.1	-0.1	0.01	1.18	4
0	0.6	0.6	0.36			-1.0	-1.0	1.00		
1	0.6	-0.4	0.16			0.6	-0.4	0.16		
1	1.1	0.1	0.01			1.1	0.1	0.01		

※ PRESS (PRedicted Error Sum of Squares : 各サンプルの予測と実測の差を 2 乗し、合計したもの) に相当

表 4 6 因子時のモデル適合と評価結果

項目	検量モデル作成向け群							検量モデル評価向け群						
	試料数			率			平均	試料数			率			平均
	H22	H23	小計	H22	H23	H22		H23	小計	H22	H23			
ぼろたん	正答	12	11	23	100%	92%	96%	7	9	16	88%	75%	81%*	
	誤答	0	1	1	0%	8%	4%	1	3	4	13%	25%	19%*	
	小計	12	12	24				8	12	20				
国見	正答	12	9	21	100%	75%	88%	4	3	7	80%	100%	90%*	
	誤答	0	3	3	0%	25%	13%	1	0	1	20%	0%	10%*	
	小計	12	12	24				5	3	8				
品種計	正答	24	20	44	100%	83%	92%	11	12	23	84%*	88%*	86%*	
	誤答	0	4	4	0%	17%	8%	2	3	5	16%*	13%*	14%*	
	小計	24	24	48				13	15	28				

※ 試料数の違いを考慮し、率の平均とした

本報告では、近赤外分光法による品種判別の可能性を示すことができた。

今後は、現場適応性の高い機器の開発・選定、測定条件の最適化や双子果や障害果などの取り扱いを含めた実用場面への適用を考えた検討を重ねる必要がある。

IV. 摘要

非破壊で測定したクリ‘ぼろたん’と‘国見’の近赤外線2次微分スペクトルをPLS回帰法による検量モデルに適合することで、クリ‘ぼろたん’と‘国見’を9割程度の正答率で判別することができた。

謝辞 本研究を実施するに当たり（独）農業・食品産業技術研究機構 食品総合研究所 食品分析研究領域 非破壊評価ユニットの河野澄夫ユニット長（現：鹿児島大学農学部教授）、池羽田晶文主任研究員には貴重なご助言を賜りました。この場を借りて厚く御礼申し上げます。

V. 引用文献

- 伊藤秀和. 2007. 近赤外分光法によるメロン品質の非破壊計測法の開発. 野菜茶業研究所研究報告. 第6号（平成19年3月）：83-115
- 奥村 理・大場敏嗣. 2008. 光センサーによるメロン品質（糖度・果肉硬さ・内部障害）の測定. 新しい研究成果. 北海道農業研究センター：30-33
- 恩田 匠・飯野修一・乙黒親男. 1997. 近赤外分光法によるウメ果実の硬度計測. 農流技研会報 212：13-16（フレッシュフードシステム. 26（5））
- 相良泰行・池田岳郎. 2004. 9. リンゴの非破壊テクスチャ評価システム. おいしさをさぐる食品感性工学. pp.236-243. 化学工業日報社. 東京都
- 佐藤明彦・田中敬一・高田教臣・澤村 豊・平林利郎. 2009. 渋皮剥皮性に優れるニホングリ‘ぼろたん’の渋皮に含まれるフェノール含量. 園学研 8 別 1：307

