

修士論文

マルチスペクトルカメラの光学フィルタ最適化
による特定物質の定量

櫻井 俊

2017 年 3 月 16 日

奈良先端科学技術大学院大学
情報科学研究科

本論文は奈良先端科学技術大学院大学情報科学研究科に
修士(工学) 授与の要件として提出した修士論文である。

櫻井 俊

審査委員：

向川 康博 教授	(主指導教員)
萩田 紀博 教授	(副指導教員)
舩富 卓哉 准教授	(副指導教員)
久保 尋之 助教	(副指導教員)

マルチスペクトルカメラの光学フィルタ最適化 による特定物質の定量*

櫻井 俊

内容梗概

分光分布に対し百数十の分解能をもつハイパースペクトルカメラは、土壌や森林のモニタリング、地質の分類など広い分野で多目的に活用されている。しかしカメラが高価、撮影に時間がかかるという問題から産業的利用は限定的であった。一方、化学分野では物質が固有の特定少数の波長の光を吸収すること、濃度に比例した光を吸収することが知られ、これらの知見を用いた物質の定量が行われる。そこで本研究では、物質を限定すれば定量に必要な波長は離散的で少数となる性質を利用し、少数の光学フィルタを通して撮影を行うマルチスペクトルカメラを用いることで、安価かつ高速な物質量の定量を実現することを目的とする。本論文は、(1) 市販されている光学フィルタがもつ有限幅の分光透過率を考慮して多変量校正モデルを再定義し、(2) 候補となるフィルタから特定物質の定量に用いる最適なフィルタの組み合わせを Adaptive lasso により選択する手法を提案する。こうして選択された少数の光学フィルタを用いて構成された (3) 簡易なマルチスペクトルカメラにより物質量の定量が行えることを示す。実環境下での提案手法の有効性を確認するため、最適なフィルタの選択とこれを備えるマルチスペクトルカメラを作成し、その応用例として果実における糖度分布の推定精度を検証する。

キーワード

糖度，マルチスペクトルカメラ，分光法，計量化学，スパース推定

*奈良先端科学技術大学院大学 情報科学研究科 修士論文, NAIST-IS-MT1551046, 2017 年 3 月 16 日.

Specific Substance Quantification by Optical filter Optimization of Multispectral Camera *

Shun Sakurai

Abstract

Hyperspectral camera which has hundreds of spectral resolution is widely used in many applications such as soil, forest monitoring and geological classification. However, industrial use is limited due to the problem that the camera is expensive and it takes long time to photograph. On the other hand, it is well known that a substance absorbs few specific wavelengths of light and the absorption is proportional to the concentration of the substance, that is used for quantifying the substance. Therefore, in this research, we aim to realize the quantification of specific substances by using multispectral camera which has a small number of optical filters from the knowledge. This paper (1) redefines the multivariate calibration model considering the spectral transmittance of a finite width possessed by available optical filters, (2) proposes a method to select the optimal combination of the filters to quantify a specific substance using adaptive lasso, and we show that the substance can be quantified with (3) multispectral camera constructed of a few selected optical filters in this way. In order to confirm the effectiveness of the proposed method in the real environment, we select optimal filters and construct a multispectral camera equipped with it, and we verify the estimation accuracy of sugar content distribution in a fruit as an application example.

Keywords:

Sugar content, multispectral camera, spectroscopy, chemometrics, sparse estimation

*Master's Thesis, Graduate School of Information Science, Nara Institute of Science and Technology, NAIST-IS-MT1551046, March 16, 2017.

目次

1. はじめに	1
2. 関連研究	3
2.1 分光イメージング	3
3. 分光情報と計量化学	5
3.1 多変量校正モデル	5
3.2 変数の選択	6
4. マルチスペクトルカメラの光学フィルタ最適化	8
4.1 提案手法の概要	8
4.2 フィルタを用いた多変量校正モデルの再定義	10
4.3 Adaptive lasso を用いたフィルタの選択方法	13
4.4 選択されたフィルタの係数推定	14
4.5 係数に基づく未知データの推定	16
5. 実験	17
5.1 データの取得方法	17
5.2 波長選択の予備実験	19
5.3 フィルタ選択の実験	23
5.4 選択されたフィルタを用いた糖度可視化	25
6. 結論	31
謝辞	32
参考文献	33

図 目 次

1	MSC システム	8
2	光学フィルタの透過特性の例	10
3	フィルタを透過させた場合に撮影される画像	11
4	行列積のイメージ	12
5	用いるフィルタによる応答の違い	16
6	フィルタ行列の疑似カラー表示	18
7	屈折糖度計	19
8	イチゴの計測装置	20
9	選択された波長数 $ c _0$ とスコア D の関係	21
10	交差検定による推定結果	22
11	選択された波長数 $ c _0$ とスコア D の関係	23
12	交差検定による推定結果	23
13	選択されたフィルタ 4 枚を用いた糖度推定の結果	24
14	HSC を用いたイチゴの透過光の撮影環境	25
15	選択されたフィルタ数とスコアの関係	26
16	選択したフィルタを用いた糖度可視化のシミュレーション	27
17	選択されたフィルタ 4 枚を用いた時の糖度推定の結果	27
18	購入したフィルタ	28
19	作成した MSC を用いたイチゴの撮影環境	28
20	設計された MSC を用いた糖度可視化	30
21	真値と推定値のグラフ	30

表 目 次

1	本研究の位置付け	9
2	データの性質に応じた回帰手法	14
3	フィルタの種類	18
4	購入したフィルタ	26

1. はじめに

コンピュータビジョンの分野では，ヒトと同等，もしくはそれ以上にシーンを理解することを目指す研究が行われており，近年のセンシング技術の発展により，ヒトの目を越えた知覚の情報処理も行われている．例えば，暗視野センサ，サーモセンサ，距離センサなどはヒトの目が知覚できない光の情報を手掛かりとする．特に，ヒトが知覚する赤緑青の3バンドを拡張した分光イメージングは，農作物，土壌，森林のモニタリング，生物医工学，バイオメトリクスなどを目的とした高度な分析を可能とする非常に重要な手がかりである．

分光情報は，プリズムまたは回折格子を備える分光器によって光をスペクトルへ分解 (分光) することで獲得できる．このような機器によって得た分光情報は一般的に波長に対して高い分解能を有するが，単一点でのみの計測しかできず，空間分解能が十分ではなかった．そこで，分光器を拡張し空間的な分光情報を獲得する分光イメージングの研究が行われている．ハイパースペクトルカメラ (HSC:HyperSpectral Camera) は分光イメージングの手段の一つであり，百数十バンドのスペクトル画像が取得できる．

また，従来の3バンドカメラの拡張として，複数の光学フィルタにより離散的な分光情報を得るマルチスペクトルカメラ (MSC:MultiSpectral Camera) も分光イメージングの手段の一つである．一般的に分光感度の固定されたフィルタを備え，十数バンドのスペクトル画像を撮影できる．

バンド数の観点から，HSCはMSCに対して大きな利点があるが，市販のHSCの多くは撮影時間が長く費用がかかる問題がある．これに対し，MSCはこの問題を比較的緩和しているが，特定のタスクに特化した光学設計とはなっていないため，HSCに比べて十分な精度を達成することは困難である．用途に応じて光学フィルタの組を設定可能な製品 [1] もあるが，数や組み合わせを選定する方法は明らかではない．

そこで本研究では特定物質の定量を目的とした場合に MSC に用いる光学フィルタの組をどう設計すれば良いかの戦略を立てる方法について検討を行う．特定物質の定量に有用な光学フィルタを少数選択することで，測定におけるシステムの実用性やコストはもちろん，精度についても HSC と同等の結果を得ることが

可能になると考えられる．本稿では，市販の光学フィルタから特定の物質分布のイメージングに有効な少数の組を選択する最適化手法について述べる．また，提案手法によるフィルタ選択に基づき MSC を設計し，果実の糖度分布のイメージングを行った結果について述べる．

本論文は6章から構成される．第2章では分光イメージングや変数の選択方法などの関連研究について述べ，第3章では提案手法への導入となる定量化学の多変量校正モデルを用いた分光情報の解析方法について述べる．第4章で提案システムの概要，フィルタを考慮した多変量校正モデルを定義した後，フィルタの選択方法およびフィルタを用いた物質分布のイメージングについて述べる．第5章では提案手法の有効性を示すため，イチゴの糖度分布のイメージングを題材とし，最適なフィルタの選択とこれを備える MSC の作成，このカメラを用いた糖度分布のイメージングを行う．最後に第6章で本論文をまとめる．

2. 関連研究

2.1 分光イメージング

分光イメージングとは空間的な分光情報を取得することであり、広範囲を効率的に監視する RGB カメラに変わる手段として注目を集めている。例えば、地球観測やリモートセンシング [28, 33], 食品の安全や品質の検査 [12, 23, 19, 7, 41], 化学薬品工場での品質モニタリング [32, 10] などは分光イメージングを使った応用の一部であり、その他様々な用途で重要な役割を果たす。この分光イメージングは取得するバンドの数や各バンドの狭さに応じて、HSC および MSC の 2 つのタイプに分類することができる。

HSC(ハイパースペクトルカメラ): HSC はプリズムのような分光装置を用いることで、百数十のバンドを連続的に撮影する。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。例えば、SOC710-VP(Surface optics 社) は約 3 万ドルで一回の撮影に 5-30 分を要する。これらの問題を解決するために、より高効率な代替手法が提案されている。圧縮センシング (CS) の枠組みでは、スペクトル方向の情報を固有の 2D パターンとして記録し、復号することで、完全な分光画像を再構成した Coded Aperture Snapshot Spectral Imaging が提案されている [21, 38]。一方、波長と空間方向のパターンをあらかじめ学習した辞書ベースによる分光イメージング Spatial-Spectral Encoded Compressive Hyperspectral Imager も提案されている [22]。制御可能な照明を用いた表面の反射スペクトル復元も行われている。光源として LED アレイ [39, 27], 最適化された広帯域フィルタとキセノンランプによるもの [5] や DLP(Digital light processing) プロジェクタが用いられる [14]。Ohらは複数のコンシューマレベルのカメラが持つ微妙なセンサの分光感度の違いを利用しハイパースペクトル画像を再構成した [26]。これらのアプローチは様々なフィルタまたは複数種類のカメラを用いることで生じるスペクトルの微小な観測結果の違いを利用している。

HSC で取得されるスペクトル画像は 1 画素あたり百数十の分光情報を持つ高次

元なデータと捉えることができる。様々な目的に対し、このような高次元データからクラス分類や回帰を行う予測モデルを構築する際には、波長数(次元数)の増加に由来する“ヒューズの現象”¹が避けられない[16]。例えばリモートセンシングでは、現地調査数の限界から標本の数に限られるため、通常の回帰モデルの適用は困難である[36, 20]。そこで、混合ガウス分布モデル(GMM:Gaussian Mixture Model)や縮小推定を用いた波長選択(次元圧縮)が行われてきた[32, 30, 42]。

MSC(マルチスペクトルカメラ): 一方でMSCは、光学フィルタによって3から10程度のバンドのスペクトル画像を取得するものである。ほとんどのMSCは、一般的に分光感度の固定されたフィルタを備え、十数バンドのスペクトル画像を撮影する。汎用的な目的のため各バンドの分光感度は等間隔に設計されているため、その応用分野は主に天体物理学、リモートセンシング、軍事用途などに限られていた。一方で一部の製品では、フィルタの組み合わせによって取得バンドが自在に設定でき、用途に応じてフィルタを切り替えることができる[1]。このフィルタの組み合わせの選択手法に注目した研究が存在する。Preeceらは遺伝的アルゴリズムによって最適化された複数のフィルタを用い、人間の皮膚を表現するパラメータを復元する方法を提案した[29]。Stylesらは組合せ最適化によって用いるフィルタの最適化を行い、眼底のマルチスペクトル画像から病理診断に有効なパラメータの推定を行った[34]。これらの例は、用途を限定すればハイパースペクトル画像のような高次元データは必ずしも必要というわけではないことを示している。しかし、用いるフィルタはシミュレーション上で合成された理想的な形状を想定しており、実際に購入、実現できるかどうかは考慮されていない。一方、Richterらは購入可能なフィルタを考慮したフィルタ選択の方法を提案し、それらを用いた簡易な視覚検査(タバコやトウモロコシの選別)の実現可能性を示した[31]。しかし、これらの方法はシミュレーション上での検証にとどまっているだけでなく、眼底の病理診断や選別などに特化したモデルに基づいてフィルタを選択しているため、物質の定量などに適用することはできない。

¹次元数の増加にともない標本間の距離が等しく(球面集中現象)なっていく、それら間の識別が困難になること。

3. 分光情報と計量化学

1章で述べたように、本研究では少数の光学フィルタを備えるMSCによる特定物質の定量を目指す。化学物質は光を照射すると、それを構成する分子が構造に応じたエネルギーを吸収し、熱や化学エネルギーに変化する。この時波長 λ に応じたエネルギー $h\nu$ (h はプランク定数; 振動数 $\nu = \frac{c}{\lambda}$; c は光速)を吸収する。このエネルギーは、物質の取りうる複数の固有のエネルギー準位によって決まるため、化学物質はその構造固有の吸収波長を少数持つ。これを利用し、特定の化学物質の定量を行う研究が行われている。

例えば、クロロフィル (葉緑素) と糖度の含有量の相関を利用したメロンの糖度分布の可視化が提案されている [35]。この方法はクロロフィルが675nmの光を吸収するという事前知識を利用した簡易な装置であるが、一般的な果実がクロロフィルとの相関を持つとは限らないため、汎用的な手法ではないと言える。また、4つのレーザーダイオードを用いた幼児の脳血液の酸素変化の観察装置が提案されている [24]。この方法は、ヘモグロビンのもつ近赤外領域における吸収特性に注目している。これらの研究は、少数の波長を選択することによって簡易な分光法を実現している。

3.1 多変量校正モデル

分光情報を用いた化学物質の定量は、分光計測などにより得られる多変量データ $\mathbf{X}$ と化学、物理の性質 (物理量) $\mathbf{y}$ の間にある線形性を重要な前提とする。これを以下の式により関連付け、多変量校正モデルと呼ぶ。

$$\mathbf{y} = \mathbf{X}\mathbf{c} + c_0\mathbf{1}, \quad (1)$$

ここで、 $\mathbf{y}$ は M サンプルの物理量を表す $M \times 1$ の目的変数ベクトル、 $\mathbf{X}$ は N 個の変数と M サンプルの説明変数を持つ $M \times N$ の行列、 c_0 は切片、そして $\mathbf{c}$ は $N \times 1$ の係数ベクトル (検量線ベクトル, 回帰ベクトル) を表す。

多変量校正においては、未知のサンプル $\mathbf{x}$ に対し、 $\hat{y} = \mathbf{x}^\top \mathbf{c} + c_0$ による妥当な物理量の予測モデルを与える係数 $\mathbf{c}$ を推定することが目的となり、これを回帰と

呼ぶ。最も基本的な係数の推定には最小二乗 (OLS: Ordinary Least Squares) 回帰が用いられ、以下の式の最小化により得る。ただし、多変量校正モデルに含まれる切片 c_0 は省略し、これ以降も断りなく省く。

$$\min_c \|\mathbf{X}\mathbf{c} - \mathbf{y}\|^2. \quad (2)$$

しかし、OLS 回帰から信頼できる予測モデルを得るためには説明変数間に高い相関が存在する場合に係数の推定が不安定となる多重共線性の問題に留意する必要がある [45]。主成分回帰 (PCR: Principal Component Analysis) は説明変数に対し主成分分析を行い、無相関な主成分を新たな説明変数として用いることでこの問題を解決した。寄与率の大きな主成分のみを用いれば、次元の圧縮による相関の高い変数の削減だけでなくノイズなどの影響を除けるという利点もある。また、偏最小二乗 (PLS: Partial Least Squares) 回帰では主成分回帰における主成分抽出に際し目的変数も利用することで、より良い予測モデルを得ることができる。しかし、以上の回帰モデルにおいてはサンプル数 M が変数の数 N に比べ十分大きいことを重要な前提としている (未知数 < 式の数)。そのため、十分なサンプル数を確保できないときや、変数の数が多い場合には変数の削減により回避されることがある。

3.2 変数の選択

一般に回帰においては変数の数を増やしすぎると過学習により推定精度が悪くなることが知られる。これは、回帰モデルの表現力の高さ (変数の多さ) によって訓練データに対し過剰に適合してしまうことによる。推定の汎化性能を高めるには現実のデータの持つ潜在変数の少なさに注目し、変数の選択・削減を行う必要がある。最も原始的には、OLS 回帰で決定された係数を手掛かりとし手動により得ることができる。これに対し、半自動による変数選択の方法としてステップワイズ法、Moving Window PLS [17]、人工ニューラルネット [4] が提案されているが、局所解に陥りやすいという問題がある [18, 40]。

そこで、ダーウィンの自然選択説に着想を得た遺伝的アルゴリズム (GA: Genetic Algorithm) [11] が、非局所的探索を行う手法として提案されている。Genetic Al-

gorithm and PLS, Genetic Algorithm-based WaveLength Selection [15, 2] は遺伝的アルゴリズムを用いた変数選択法, 変数領域の選択法であるが, 確率的な収束を待つため極端に遅くなることや, パラメータの設定が膨大となる問題がある [3].

そこで近年, 凸コスト関数の最適化により変数選択に対する大域解を得る縮小推定と呼ばれる方法が計量化学の分野において導入されている. ここでは変数の選択問題を, 係数 $\mathbf{c}$ の非ゼロ要素, すなわち ℓ_0 ノルム $\|\mathbf{c}\|_0$ の最小化により解決する. 具体的には OLS 回帰のコスト関数式 (2) に正則化項を加え, 次のように書き替える.

$$\min_{\mathbf{c}} \|\mathbf{X}\mathbf{c} - \mathbf{y}\|_2^2 + \alpha \|\mathbf{c}\|_0, \quad (3)$$

第二項目の正則化項は, 係数肥大による罰則を与えるもので, 非負の正則化パラメータ α により罰則の強さを調節する. α が大きくなると変数は縮小し, 十分大きい時いくつかの変数は 0 に一致する. 正則化項は係数ベクトルに対する事前情報を与える事に相当し, 所望の性質を得るために設計される. しかしこの問題は NP 困難 [25] のため, ℓ_0 ノルム罰則を ℓ_1 ノルム罰則に凸緩和し近似解を得る. すなわち,

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

を最小化するもので, lasso と呼ばれる [37]. 高速な解法として, Least Angle Regression [6], 局所線形近似 [44], Continuous Descent Approach [8], GPS [9] などがあげられる. より一般化した最適化手法の一つである近接勾配法によっても解ける. 以上により, $M < N$ のような不良設定 (ill-posed) の場合においても大域的な近似解が定まる. 過学習回避の観点からは, $M \geq N$ の場合においても変数選択は有効である.

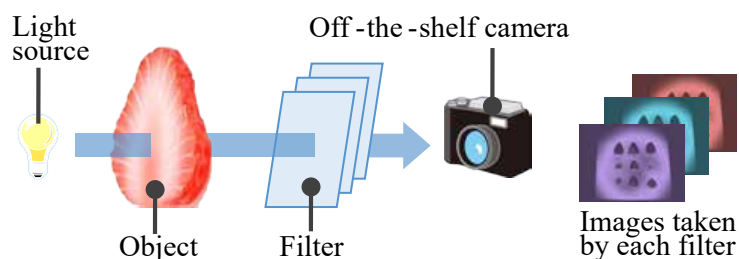


図 1: 市販のカメラと複数のバンドパスフィルタを複数用い各バンドの画像を撮影する MSC システム．少数のバンドを撮影する．

4. マルチスペクトルカメラの光学フィルタ最適化

4.1 提案手法の概要

計量化学におけるアプローチを HSC を用いて撮影されたハイパースペクトル画像に適用することによって、物質量のイメージングを行うことができる．しかし、HSC は上に述べた理由より高価で撮影に時間がかかるため、その利用は実用における問題となると考えられる．ハイパースペクトル画像は汎用的な目的に利用できるが、特定の化学物質の定量という目的に対しては物質に吸収される少数の波長のみが有用であり、ほとんどの波長は不要である．もし対象とする化学物質に関する事前の知識があれば、その分布定量には重要な波長のための観測で十分である．複数のバンドパスフィルタとカメラからなる MSC を利用し、それらの波長における吸光度を計測できれば、化学物質の定量に関する撮影コストを大幅に減らすことが可能である．図 1 に提案手法の概念図を示す．撮影するバンドは、特定の光学的な透過特性を持つカラーフィルタ、またはバンドパスフィルタをカメラや光源の前に設置し取得する．以降それらをまとめて光学フィルタと呼ぶ．従来の手法に対する本研究の位置付けを表 1 に示す．

表 1: 本研究の位置付け

データの性質	時間	値段	特定物質の定量における精度
HSC			✓
MSC-general	✓	conditional	
MSC-specific (MSC)	✓	✓	✓

このシステム実現のため、HSC によって効率的に収集された高次元スペクトル画像を用い、計量化学に基づく解析を行うことによって実用可能な MSC を作成する方法を提案する。提案手法は以下のステップからなる。

1. ハイパースペクトル画像による、回帰分析に基づく最適な光学フィルタの組み合わせの選定 (4.2 章, 4.3 章)
2. MSC の各フィルタの係数の決定 (4.4 章)
3. 選択されたフィルタを備える MSC を用いた未知データに対する分布定量 (4.5 章)

ステップ 1, 3 は、訓練データを用いた学習と推定に相当する。ステップ 1 の教師データを用いた学習では、3.2 章で述べたように多数のサンプルを必要とする。そこで HSC を用いることで画像の各ピクセルを 1 サンプルとして扱い、回帰に必要なサンプルの効率的な収集を行う。また、多変量校正モデルをフィルタを用いる形に拡張することで重要な光学フィルタの選定を行う。また、ステップ 2 によってフィルタの係数の再推定を行う。これは、学習に用いる HSC と推定に用いる MSC の各カメラのイメージセンサの分光感度の違いから、理想的なフィルタの係数はそれぞれにおいて異なるという理由に基づく。ステップ 3 では、決定した係数と作成した MSC を用いた物質量の定量について述べる。このステップでは、選択された光学フィルタを備える MSC システムによって行うため HSC は不要である。以下の章では各ステップについて詳細に述べる。

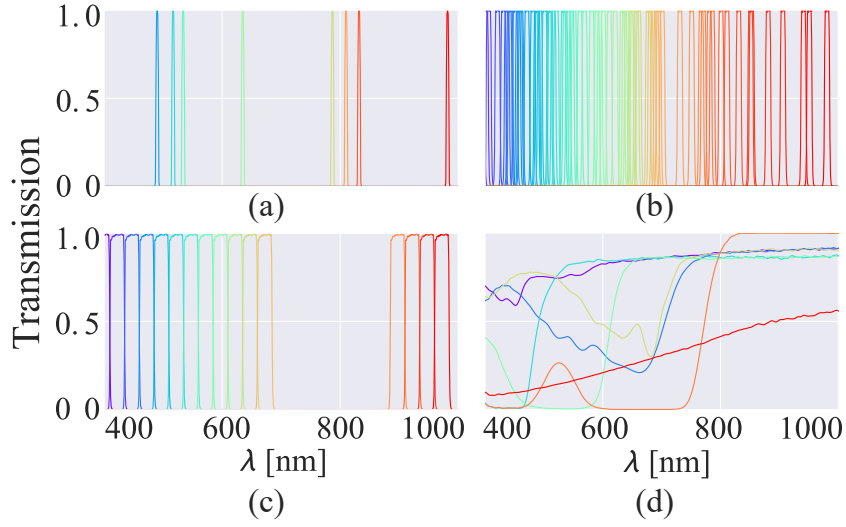


図 2: 光学フィルタの透過特性の例. (a) は 3nm(Laser-Line Bandpass Filter, Edmund optics corp.), (b) は 10nm(Hard Coated Bandpass Interference Filter, Edmund optics corp.), (c) は 25nm(Hard Coated Bandpass Interference Filter, Edmund optics corp.) の半値幅 (FWHM) をもつバンドパスフィルタ, (d) はカラーフィルタ (Roscolux, Rosco Laboratories, Inc.) の例を示す.

4.2 フィルタを用いた多変量校正モデルの再定義

光学フィルタは、波長を限定した計測が可能である。したがって、特定の波長での対象の透過率、または反射率の変化を捉えることができる。この波長を限定した計測には、光学フィルタのうち特に狭帯域波長の撮影が可能なバンドパスフィルタを用いる必要がある。しかし、狭帯域のうち商用で購入可能なものは図 2(a) に示すように分光感度のバリエーションが限られており、任意の波長を狙って撮影することが難しい。そこで、図 2(b)-(d) に示すような広い透過特性を持つバンドパスフィルタやカラーフィルタを用いることで、欠けた領域を互いに補う効果を狙う。我々は波長ではなく広い透過帯域を持つフィルタを選択する必要があるため、3.2 章で述べた波長選択のアプローチをそのまま適用することができない。従って、フィルタの持つ光学的な透過特性を考慮するような拡張が必要である。

フィルタ選択の取り組みは GA や組合せ最適化 [29, 34] によって行われている

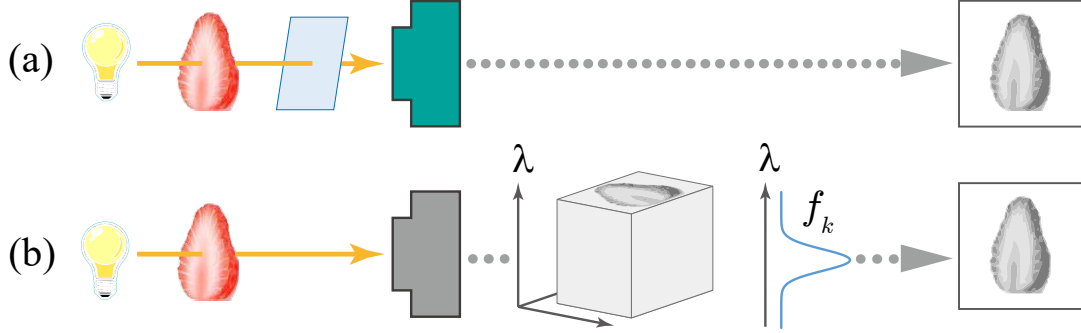


図 3: (a) 光学的なフィルタとカメラによって記録される画像と，(b)HSC とフィルタの透過率を用いて仮想的に計算される画像．

が，実際に利用できるものを想定していなかった．そこで本研究では，フィルタを用いた形で多変量校正モデルを再定義することで，3章の波長選択と同様の枠組みによってフィルタ選択を行う．

候補となる K 種類のフィルタ各々を用いた場合にセンサで取得される特徴ベクトル $\mathbf{z} = (z_1, \dots, z_K)$ と目的の物理量 y の関係を，多変量校正モデルにならい以下のように書くこととする．

$$y = \sum_{k=1}^K z_k d_k + d_0, \quad (5)$$

d_k は係数ベクトル $\mathbf{d} = (d_1, \dots, d_K)$ の k 番目要素， d_0 は切片を表し，フィルタを用いた場合に観測される光量と目的の物理量との間の線形性を仮定する．サンプル数が M の場合，式 (5) は次のような行列表現に書き換えられる．

$$\mathbf{y} = \mathbf{Z}\mathbf{d} \quad (6)$$

$\mathbf{Z}$ は， $\mathbf{z}$ を縦に M サンプルを配列した $M \times K$ 行列．結局，式 (1) における $\mathbf{X}$ を $\mathbf{Z}$ で置き換えることによって3.2章で述べたような波長選択と同様の議論に持ち込むことができる．また，この記法によって，以下で述べるフィルタを導入した場合の多変量校正モデルを簡潔に記述できる．

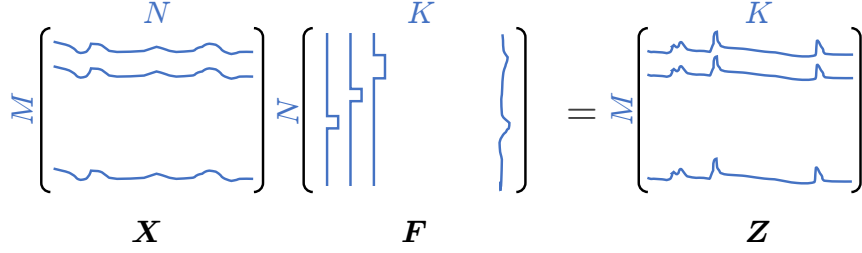


図 4: フィルタの特性を考慮する場合に加えるフィルタ行列 F と HSC によって撮影される分光情報 X の行列積のイメージ。

学習データ Z は以下の2つの方法によって収集することができる。1つ目に、図3(a)のようにMSCによって各フィルタを何回も切り替え撮影する方法である。候補となるフィルタの数 K 全ての交換が必要なため、撮影コストが高い。2つ目に、図3(b)に示すようにハイパースペクトル画像と、あらかじめ取得したフィルタの透過率を用いることで、仮想的にフィルタを透過させた画像を取得する方法である。MSCとHSCの分光感度が同じ場合、本来カメラセンサで観測される光量をHSCによって分光した状態で撮影し、後に数値的に積分すれば等価となる。すなわち、透過特性 f_k をもつ k 番目のフィルタによって撮影される光量 z は、分光情報 x を用い、以下の波長 n についての積分

$$z = \sum_{n=1}^N f_{nk} x_n \quad (7)$$

として計算することができる。ただし、フィルタが広帯域の透過特性を持つ場合、多重共線性を有する分光情報との積分はより深刻なそれを引き起こすことに留意する。 K 枚のフィルタをまとめて行列 $F = \{f_{nk}\}$ と書けば、 Z が単に行列の積 $Z = XF$ によって表される(図4参照)。これは、単に式(1)の拡張としてフィルタを考慮した多変量校正モデルが記述できることを意味する。

$$y = Zd = XF d \quad (8)$$

本稿では後者の方法によって、仮想的に学習データ Z の取得を行う。

結局、重要なフィルタの組み合わせは3.2章の波長選択と同様 $\mathbf{d}$ の縮小推定によって得ることができる。しかし、以上は MSC と HSC の分光感度が同じ場合の議論であることに注意しなければならない。4.4章ではこれが異なる場合について述べる。

4.3 Adaptive lasso を用いたフィルタの選択方法

縮小推定の方法は3.2章で紹介した lasso の他、解析するデータの形や性質に応じて様々な派生が提案されている。その背景として、lasso の適用できる範囲の制限があげられる [13]。Fan らは lasso のような縮小推定が持つべき望ましい性質として以下のオラクル性を提案した [18]。

- 変数選択の一致：サンプル数 M が増加すると、係数が0でない説明変数が正しく選択される確率は1に収束する性質。
- 漸近正規性：非ゼロ係数を用いた推定量の分布が正規分布に近似できる性質。

それに対し本研究での問題点は、HSC を用いることによるサンプル数 M の増加と利用できるフィルタ数 K の制限である。データの性質として $M \gg K$ を持つため、フィルタの選択に係る変数選択の一致を保証したい。そこで、本研究ではオラクル性を満たす adaptive lasso [43] を用いることでより正しいフィルタ選択を行うことを考える。Adaptive lasso は、式 (4) の lasso における正則化項に重み係数 $\mathbf{w}$ を加えたものとして解釈することができる。つまり、フィルタ特性を考慮した最適化問題として以下のようなコスト関数の最小化を考える。

$$\min_{\mathbf{d}} \|\mathbf{Z}\mathbf{d} - \mathbf{y}\|_2^2 + \alpha \|\mathbf{w}^\top \mathbf{d}\|_1, \quad (9)$$

ここで、

$$w_k = \frac{1}{|d_k|^\gamma} \quad (10)$$

adaptive lasso では、重み $\mathbf{w}$ の更新と $\mathbf{d}$ の推定を繰り返すことによって最終的な推定量を得る。重み w_k は、0に近い推定量に対しては大きな重みを与え0にし、大きな推定量に対しては小さな重みを適用することで係数 $\mathbf{d}$ のばらつきを抑える。

なお，初期の重み w_k は，共線性が問題でない限り OLS 回帰によって求めることが推奨されている．また ridge 回帰によっても推定に安定性を与えることができる [43]．本稿では，パラメータ $\gamma > 0$ を $\gamma = 1.0$ とする．また，正則化項の強さを与えるパラメータ α によって選択される係数の数すなわちフィルタの数の制御を行う．

以上から，データの性質が $M \gg K$ の場合においても正しい変数選択を期待することができる．コスト関数の形をとることで，値段や非負制約などの要因を正則化項として加えることもできるため，状況に応じて柔軟な変更が可能である．結局，データの性質に応じた有効な回帰の手法は以下の表 2 にまとめられる．

表 2: データの性質に応じた回帰手法

データの性質	回帰手法
Feature $\ll$ Sample	OLS, ridge, lasso, adaptive lasso
Feature $\leq$ Sample	OLS, ridge, lasso, adaptive lasso
Feature $>$ Sample	lasso, ridge, adaptive lasso

4.4 選択されたフィルタの係数推定

MSC 実現には以下の 2 つが必要となる．

- 必要なフィルタを備える MSC
- それらフィルタによって撮影される画像を合成するための係数

4.3 章によってフィルタの選択と係数は明らかに求まるが，4.2 章の最後に述べたように，図 3 において (a) と (b) が等価つまり，MSC と HSC の分光感度が同じであることを仮定していた．この仮定は推定した係数が MSC においても流用できることを保証する．しかし一般的にはカメラの分光感度が同じであることは考えにくい．そこで本章ではそれらが異なる場合を想定し，手法に加えるべき変更について述べる．

各カメラの分光感度が既知の場合: はじめに MSC と HSC の分光感度が既知である場合を考える. この場合あらかじめカメラの分光感度を含めた最適化とすればよい. つまり式 (7) に MSC と HSC の分光感度 S_{MSC} と S_{hsc} の商 $\mathbf{S} = \{s_1, \dots, s_n\} = S_{MSC}/S_{hsc}$ を加え, $\mathbf{z}$ を計算する.

$$\mathbf{z} = \sum_n f_{nk} x_n s_n \quad (11)$$

この $\mathbf{z}$ を用いることで, フィルタの選択と係数の推定を同時に行うことができ, 以下で行う分光感度が未知である場合の議論を回避することができる. しかし, カメラレンズや計測環境の微小な違いなどが係数の推定に影響を与え, 設計した MSC で期待の性能が得られない可能性がある. 従って, 以下で述べる係数の再推定が推奨される.

各カメラの分光感度が未知の場合: 各カメラの分光感度が未知の場合, $\mathbf{z}$ には式 (7) による算出を用いる. ここで推定される係数は, MSC の分光感度が考慮されていないため, そのまま流用することができない. したがって, フィルタの選択と係数決定のステップを分離することを考える. つまり, HSC を用いたデータからフィルタを選択しておき, MSC で各フィルタの画像を取得した後, 係数の推定を行う. この方法は, カメラの分光感度が未知の場合の 1 つの解法ではあるが, 正しくフィルタが選択されることを期待する場合, 以下で述べる理由により用いることのできるフィルタの制限がある.

多変量校正モデルに立ち返り, 説明変数と目的変数の間に仮定された線形性を思い返す. ここでフィルタの透過特性を一般的に f_k とすると, 図 5(a) に示すように特に広い帯域を持つ光学フィルタを用いた際の応答が非線形となる. この結果, 分光感度の異なるカメラ間で選ばれる最適なフィルタはそれぞれで異なると思われるべきである. したがって, MSC の分光感度にとって最適なフィルタ選択とならない可能性がある. 一方, 図 5(b) に示すように, フィルタがバンドパスフィルタのような狭帯域の透過特性を持つ場合, 応答の線形性は保たれるため, 選択されるフィルタは 2 カメラ間で一致する. 任意形状のフィルタを用いることができない点は提案する手法での制限の 1 つである.

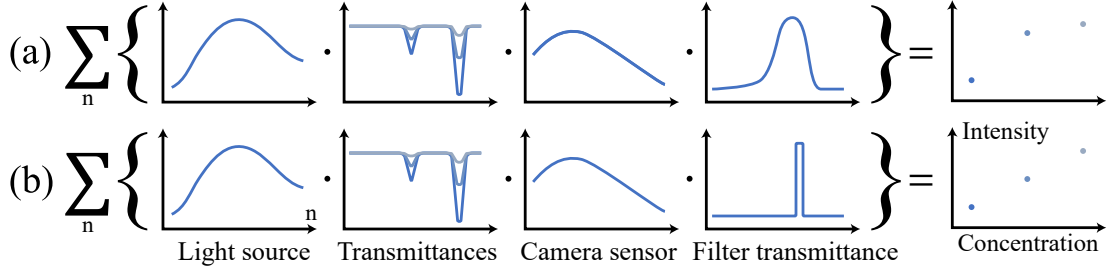


図 5: 用いるフィルタによる応答の違い. ドット ($\cdot$) は要素同士の掛け算を表す. 濃度の異なる媒質の透過特性は濃度と線形の関係にあるため, 透過させるフィルタの形状によってカメラで観測される光強度は変わる. 広帯域のフィルタを用いた場合は非線形の応答, 狭帯域の場合は線形の応答となる.

結局, 候補となるフィルタの係数 $\mathbf{d}$ を, 式 (10) に適当な $\mathbf{Z}$ を用いることで推定したのち, $\mathbf{d}$ の非ゼロ要素に対応するフィルタを使い MSC を作成する. ここで, 推定された係数 $\mathbf{d}$ のうちゼロの要素を削除した係数ベクトルを $\mathbf{d}'$ とする. また, 係数の非ゼロ要素に基づくフィルタ選択の後, 作成する MSC によって取得される行列を $\mathbf{Z}'$ とすると, $\mathbf{y} = \mathbf{Z}'\mathbf{d}'$ のフィルタ係数 $\mathbf{d}'$ が OLS などによって推定できる.

4.5 係数に基づく未知データの推定

4.2 章では, フィルタを用いた場合の多変量校正モデルを定義し, 学習データ $\mathbf{Z}$ の効率的な取得方法および, フィルタの選択が係数 $\mathbf{d}$ の縮小推定によって行えることを示した. また, 4.3 章では HSC のような高次元データに対し有効な変数選択法について述べ, 4.4 章ではより現実的なシチュエーションにおいて必要な MSC の各フィルタの係数 $\mathbf{d}'$ の推定について述べた.

ここで, この係数 $\mathbf{d}'$ を用いてあるピクセルにおける未知のマルチスペクトルデータを $\mathbf{z}'$ に対する推定量が $\hat{\mathbf{y}} = \mathbf{z}'^T \mathbf{d}'$ によって得られる.

5. 実験

本章では、特定物質をイチゴの糖度と設定し、糖度分布のイメージングを行う MSC を作成することで、実環境下における提案手法の有効性を検証する。今回目的とするイチゴの糖度推定について、多変量校正モデルを適用することの妥当性を検証するため、はじめに変数選択の予備実験を行う (5.2 章)。次に Adaptive lasso に基づく重要フィルタの選択を行い簡易な MSC の作成を行う (5.3 章)。最後に作成した MSC の各フィルタの係数を決定し、糖度分布のイメージングを行う (5.4 章)。

5.1 データの取得方法

本稿では特にイチゴのうち品種エランを用いた糖度推定の実験を行なう。4.2 章で述べたように、Adaptive lasso 最適化を用いた学習のステップにはフィルタを透過した光の強度を記録した行列 $\mathbf{Z}$ と糖度 $\mathbf{y}$ が必要となるため、本節で各データの取得方法について述べる。

行列 $\mathbf{Z}$: 4.2 章では、 $\mathbf{Z}$ はフィルタを透過した光の強度を記録した行列であり、手動または仮想的に撮影できると述べた。手動によっては、候補となるフィルタの枚数 K の回数フィルタを切り替え撮影しカメラに記録し、各ピクセルの $K \times 1$ の特徴ベクトルを縦に配列する。一方、仮想的な方法によっては式 (8) のフィルタ行列 $\mathbf{F}$ と HSC によって撮影した分光画像 $\mathbf{X}$ の行列積によって得られる。 $\mathbf{F}$ と $\mathbf{X}$ の各撮影方法について以下で述べる。

フィルタ行列 $\mathbf{F}$: フィルタ行列は各フィルタの透過率を横に配列した行列で、各列の透過率は分光器などを用い計測を行うことができる。本稿で用いるフィルタは購入可能なものと制限するため、Edmund optics 社で購入可能なものを候補フィルタとし、透過率はホームページのカタログスペックを基にした透過率データとする。以上から、用いるバンドパスフィルタの半値幅 (FWHM: Full Width at Half Maximum) とその種類数を表 3 にまとめ、図 6 に今回用いるフィルタ行列を示す。

表 3: フィルタの種類

FWHM [nm]	フィルタ数 [枚]
3	10
10	69
25	16
50	24
total	119

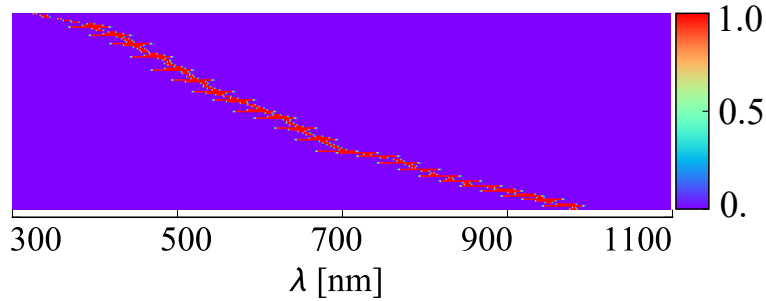


図 6: フィルタ行列の疑似カラー表示. 横軸が波長, 色は透過率の大きさを表し, 赤いほど透過しやすいことを表す. 候補となるフィルタの数 K だけ縦に配列し, 中心波長で並び替えた. なお表示上, 行列は転置してある.

ただし, 実験では HSC と MSC のカメラセンサの分光感度は未知とするため, 4.4 章よりカラーフィルタは含まれない.

分光画像 $\mathbf{X}$: 分光画像は 2 章で述べたように様々な取得方法があるが, 本稿では HSC(SOC710-VP, Surface optics corp.) を用いて撮影を行なった. この HSC は 400–1,000nm の波長域を 128 バンドの分解能, 空間方向を 696×520 の解像度で取得する. 行列 $\mathbf{X}$ は, 分光画像の各ピクセルを縦に配列した行列とする.

糖度 $\mathbf{y}$: 本稿では糖度を図 7 に示す屈折糖度計 (PR-101 α , Atago Co. Ltd.) によって計測した Brix 値とし, $\mathbf{y}$ は, $\mathbf{X}$ または $\mathbf{Z}$ の各ピクセルに対応する糖度を



図 7: 屈折糖度計. 金属のポケットに果汁を滴下し糖度を計測する. 温度によって屈折率が変化するため, 実験のはじめに室温程度の水を Brix 値 0 として補正する.

縦に配列したベクトルとする. Brix 値とは, 果実や液体に含まれる糖やショ糖含量の指標であり, 糖類が水に溶けることによって変化する屈折率の測定によって間接的に計測される. Brix 値はショ糖溶液の質量パーセント濃度と定められ, 30%濃度の溶液で 30 度を示し, 一般的にも糖度は Brix 値と認識されている. しかし, 屈折率に基づく算出のため, 同様に屈折の作用を持つ食塩水溶液に対しても質量パーセント濃度に相当する Brix 値が得られることに注意する必要がある.

5.2 波長選択の予備実験

目的と方法: 本節では少数の波長からのイチゴの糖度推定を試み, 今回目的とするイチゴの糖度推定に多変量校正モデルを適用することの妥当性を検証する. そのために, adaptive lasso による係数 $\mathbf{c}$ の推定を行い, 波長の選択数と推定精度の関係を調べる. 今回は波長の選択を行うため, 多変量校正モデル $\mathbf{y} = \mathbf{X}\mathbf{c}$ に対する係数 $\mathbf{c}$ の縮小推定を考える.

計測対象は 100 サンプルのイチゴとし, 目的変数 $\mathbf{y}$ の糖度は屈折糖度計, 説明変数 $\mathbf{X}$ の分光分布は 600-1,000nm を 1nm 刻みで計測可能な分光器を用いて取得した. イチゴは図 8 に示すように $\phi 20$ mm 径の穴からハロゲンランプに照射される. さらに対象を透過した光をファイバーで受け分光器に導く. 波長の選択数は, 式 (10) の adaptive lasso の持つ重み γ を 1.0 で固定し, α を変えることで調節す

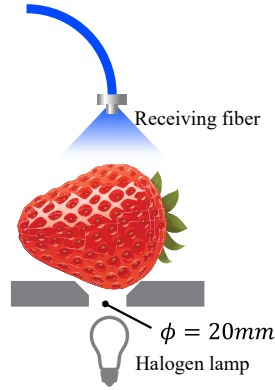


図 8: イチゴの計測装置. 対象は直径 20cm の穴を持つ皿に乗せられ, 底の穴から光が照射される. イチゴを透過し拡散した光は, 空中に設置したファイバーによって青い円錐形で示す広い範囲で集められる.

る. ここで, 推定精度を以下の決定係数と呼ばれるスコア D で評価する.

$$D = 1 - \frac{\|\mathbf{y} - \hat{\mathbf{y}}\|_2^2}{\|\mathbf{y} - \bar{\mathbf{y}}\mathbf{1}\|_2^2} \quad (12)$$

ここで, $\bar{\mathbf{y}}\mathbf{1}$ は $\mathbf{y}$ の平均値を要素とするベクトル, $\mathbf{y}$ は真値, $\hat{\mathbf{y}}$ は推定値を表す. 決定係数は, 推定量に対し全て平均値 $\bar{\mathbf{y}}\mathbf{1}$ を出力すると $D = 0$, 全て正答した場合には $D = 1.0$ を返す. また評価スコアには 10-分割交差検証をおこなった結果を採用する.

結果と考察: 選択波長数を変えた時のスコアを図 9 に示す. 波長数が増加することで過学習が起き, スコアが低下していく様子が確認できる. また, 選択数 $|c|_0 = 400$ の場合と $|c|_0 = 14$ の場合の糖度推定の結果を図 10 に示す.

400 波長を用いた場合のスコア D は $D = 0.006$, 14 波長を用いた場合で $D = 0.130$ という結果となり, 波長数に関わらず全体的に低いスコアを記録している. この理由として, 説明変数の分光分布としての性質に問題があり, 糖度の関係を表す係数 $\mathbf{c}$ がうまく推定できなかったことが原因と分かった. その分光分布を歪める理由となるのが, イチゴの持つ個体間の大きさの違いによって説明できる. 大きさの異なる個体間では, 光の経路の違いからファイバーによって取得される

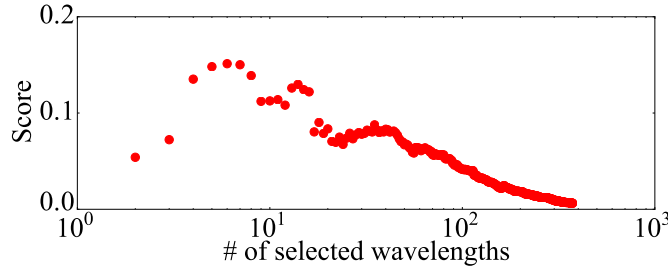


図 9: 選択された波長数 $|c|_0$ とスコア D の関係

光量に違いが生じる．修正ランベルト-ベールの法則によると媒質に入射する光 I_0 とファイバーによって観測される光 I が以下の関係式で記述できる．

$$\log_{10}\left(\frac{I}{I_0}\right) = \epsilon Cl' + S_{\text{scattering}}(\lambda) \quad (13)$$

ここで， ϵ はモル吸光係数， C は媒質のモル濃度， l' は媒体中での平均光路長， $S_{\text{scattering}}(\lambda)$ は散乱による減衰を表す．本来，個体のもつ化学物質などの量に由来する光吸収を表す 1 項目に比べ，2 項目の散乱による影響が支配的となり，説明変数として相関を取り出せる形になかったと考えられる．従来こういった散乱による影響を低減する方法として λ に関する 2 次微分を使った前処理がしばしば行われる．これは，式 (13) における第 2 項散乱の量が波長 λ に関する 1 次式までで表されると仮定し，これが微分により消える効果を狙うものである．

これに基づき，はじめの分光分布に対し 2 次微分を施し係数の推定を行なった．選択波長数を変えた時のスコアの変化を図 11 に示す．波長の選択数 $|c|_0 = 8$ の場合スコア $D = 0.683$ を得，また，波長の増加にともなう過学習によるスコアの低下及び，波長削減によるスコア向上が確認でき，波長選択の有効性が確認された．最後に，波長数を $|c|_0 = 400$ ， $|c|_0 = 8$ とした場合に糖度推定を行なった結果を図 12 に示す． $|c|_0 = 400$ では過学習に伴う推定のばらつきが見られた．これらの結果から，前処理による散乱の影響の除去がスコアの向上に大きく貢献することが分かる．

したがって，今回目的とするイチゴの糖度推定に多変量校正モデルは，2 次微分のような前処理または正規化によって散乱の影響を除去するという条件のもと有効であることがわかる．上で述べた 2 次微分値は，本稿の提案するシステムで

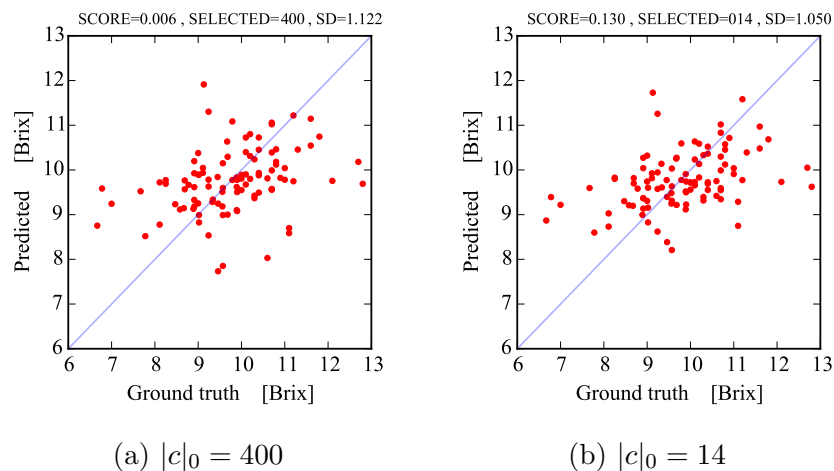


図 10: 交差検定による推定結果. 横軸と縦軸はそれぞれ真値 y と推定値 $\hat{y}$ を表す. 左右の図はそれぞれ波長数を $|c|_0 = 400$ とした場合と, $|c|_0 = 14$ とした場合の結果.

は直接カメラで撮影することができない. 前後のフィルタを複数用い, 擬似的に 2 次微分フィルタを作成することも考えられるが, 最適化の中で変数間の関係性を考慮することができないため, 次節で他の方法による散乱の影響の除去を試みそれに対するフィルタ選択を検討する.

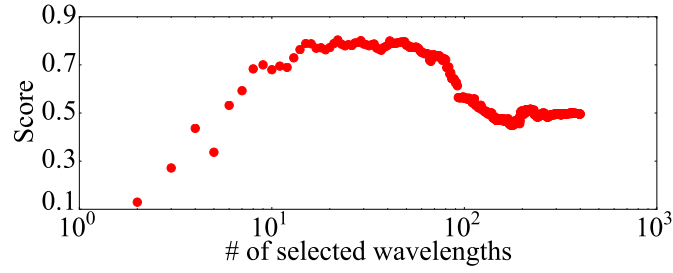


図 11: 選択された波長数 $|c|_0$ とスコア D の関係

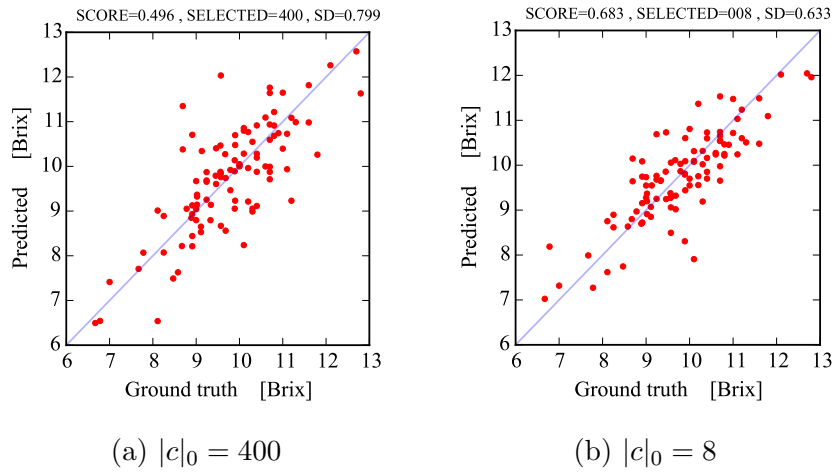


図 12: 交差検定による推定結果．横軸と縦軸はそれぞれ真値 y と推定値 $\hat{y}$ を表す．

5.3 フィルタ選択の実験

本節では，提案する MSC を作成するためのフィルタ選択の実験を行う．そのために，5.2 章で用いた adaptive lasso による c の推定を行い，波長の選択数と推定精度の関係を調べる．

実験対象はイチゴ (品種:エラン)22 個を用いる．散乱による影響を取り除くために対象をあらかじめ 5mm 厚にスライスし，光の経路をある程度揃える効果を狙う．本節ではフィルタの選択を目的とするため，説明変数は $\mathbf{Z}$ となる．図 14 のように，スライスしたイチゴを拡散板の上に配置し，その下からハロゲンランプ (HL-2000, Ocean optics corp.) を照射し，その透過光 y を HSC により撮影し，

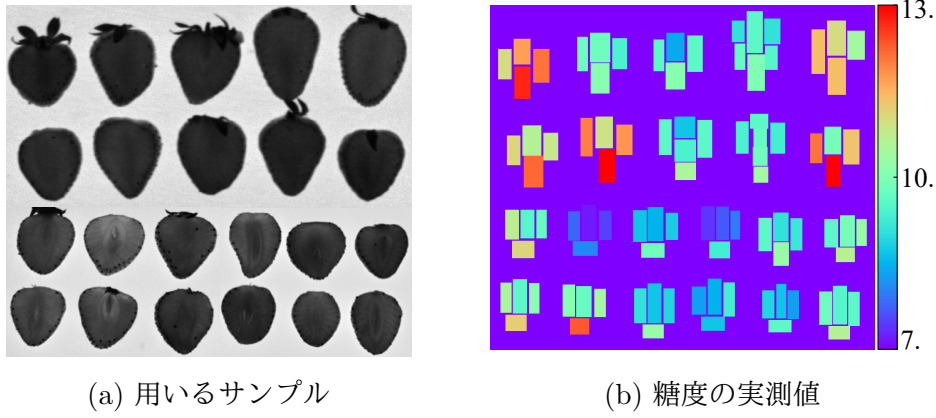


図 13: 選択されたフィルタ 4 枚を用いた糖度推定の結果

Z を計算する．撮影したのち，対象を計 93 個の切片に切り離し，各切片での糖度値を屈折糖度計により計測した (図 13)．目的変数 y は， Z の各ピクセルに対応する糖度を縦に配列したベクトルとする．しかし光源の配光特性が一定ではないため，前節で述べた散乱の影響による個体間での光量の違いと同様の問題が発生すると考えられる．そのため式 (7) の Z の計算を以下のように修正する．

$$Z = \frac{\{X F\}_{mk}}{\{X_0 F\}_{mk}} \quad (14)$$

ここで， X は対象の透過光を HSC によって撮影し， X_0 は拡散板を通した光源のみを HSC で撮影する．また，行列 Z には図 13 に示す糖度値をラベル付けした領域と対応するピクセルが縦に配列されている．つまりサンプル数は $M = 47,596$ となる．

この実験では，フィルタの数 ($K = 119$) に対しサンプル数 ($M = 47,596$) が十分大きいため，変数の選択は前章で述べた adaptive lasso を用いる．式 (10) の γ は 1.0 で固定とし， α を変えることで波長の選択数を調節する．その時の選択数 $\|d\|_0$ と推定精度の関係を調べる．推定モデルの当てはまり，つまり精度を式 (12) によって評価する．スコアにはクロズドテストを行なった結果を採用する．

実験結果について述べる．図 15 は選択されたフィルタ数 $\|d\|_0$ と lasso および adaptive lasso を用いた際のスコアの関係を表す．adaptive lasso は全てのフィルタを用いた場合に $D = 0.469$ ，フィルタを 4 枚用いた場合に $D = 0.407$ となった．

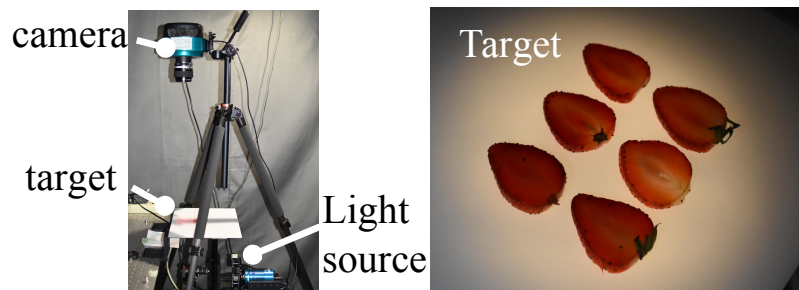


図 14: HSC を用いたイチゴの透過光の撮影環境．対象は拡散板の上に乘せられ，底面のハロゲンランプによって照らされる．光源は拡散板で拡散し，対象を通過した後 HSC によって観測される．

大幅なフィルタ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る．一方，lasso を用いた場合は適切なフィルタを選択することができなかった．図 16 にフィルタを 4 枚使った場合の糖度分布の推定結果を示す．今回実験に用いたイチゴは個体間の糖度のばらつきが大きかったため 1 個体内の分布ではなく，全体としての糖度の差異を吸収するようにフィルタが選択されたと考えられる．

図 17 に糖度の推定結果を示す．糖度の推定値にばらつきはあるものの，高糖度付近を除けば概ね傾向を捉えているといえる．また全体として正の相関を持つため，少なくとも糖度が高いか否かの可視化はできていると考えられる．

表 4 に $\|d\|_0 = 4$ の場合に選択されたフィルタのリストを示す．特に今回選択された 675nm フィルタは先行研究のメロン糖度可視化において使われた波長である．この波長はクロロフィルの吸収帯であり，いちごの糖度分布可視化においても重要な手がかりであることが示唆される．以上から，これら 4 枚を備える MSC の作成によって計測がより簡易になると期待される．次節で購入したフィルタを用いた実験を行う．

5.4 選択されたフィルタを用いた糖度可視化

本節では，上の実験で選択したフィルタの結果に基づき提案する MSC を作成し，糖度の可視化実験を行う．それに際し，4.4 章で述べた各フィルタの係数の

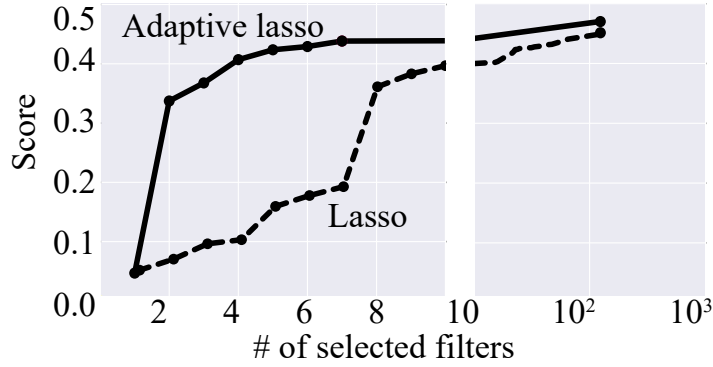


図 15: 選択されたフィルタ数とスコアの関係．実線は adaptive lasso の結果，破線は lasso を用いた場合の結果を示す．Adaptive lasso を用いた場合のスコアは $\|\mathbf{d}\|_0=119$ のとき 0.469, $\|\mathbf{d}\|_0=4$ のとき 0.407 となった．

表 4: 購入したフィルタ

中心波長 [nm]	FWHM [nm]
600	50
625	50
690	10
675	25

再推定をおこなう．

まずフィルタの係数の再推定について述べる．実験対象はイチゴ (品種:エラン) を 6 個用いる．本節ではフィルタの係数再推定を目的とするため，説明変数は $\mathbf{Z}'$ となる． $\mathbf{Z}'$ の取得は手動でフィルタを 4 回切り替え撮影する．その後，26 個の切片に切り離し，5.3 章と同様各切片の糖度を屈折糖度計により計測した．目的変数 $\mathbf{y}$ は， $\mathbf{Z}'$ の各ピクセルに対応する糖度を縦に配列したベクトルとする．実際に購入したフィルタを図 18 に，作成した MSC のシステムを図 19 に示す．本実験では，フィルタはカメラの前ではなく光源の前に配置するが，撮影される結果に違いは生じない．したがって，図 19 のように，スライスしたイチゴを拡散板の上に配置し，その下からフィルタを透過させたハロゲンランプを照射し，そ

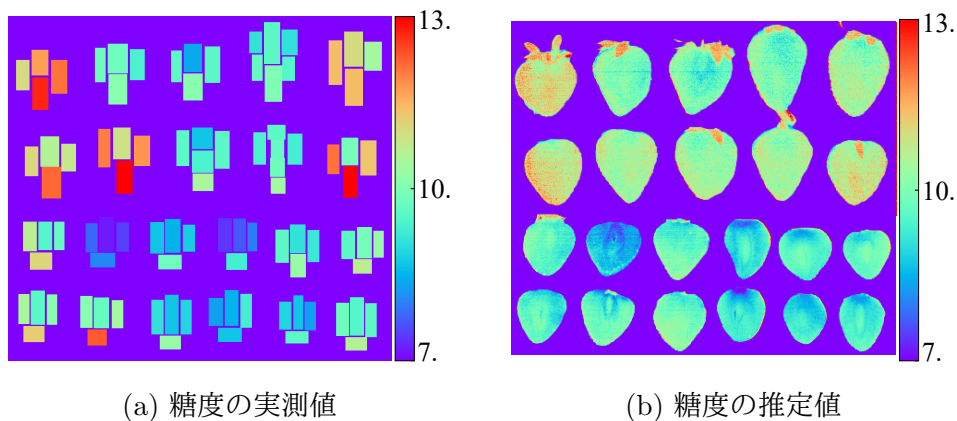


図 16: 選択したフィルタを用いた糖度可視化のシミュレーション．一つの個体内での分布よりは，各個体間での糖度の差異が現れるように推定された．図 17 の結果からも，少なくとも糖度が高いか否かの推定は反映されていると考えられる．

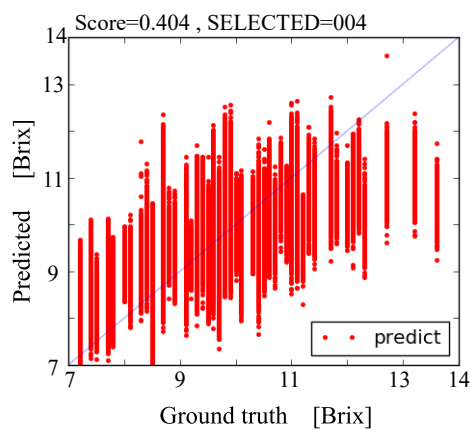


図 17: 選択されたフィルタ 4 枚を用いた時の糖度推定の結果．横軸と縦軸はそれぞれ真値 y と推定値 $\hat{y}$ を表す．縦に点が並ぶ理由は，糖度の実測値 1 つあたりに複数のピクセルが対応づいているためである．

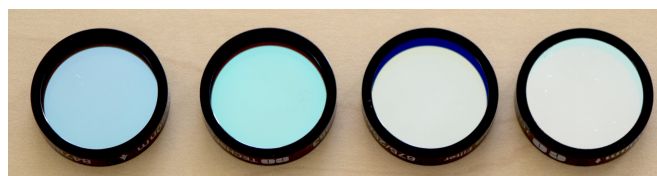


図 18: 購入したフィルタ. 中心波長-FWHM の表記によって左から順に 600nm-50, 625nm-50, 675nm-25, and 690nm-10 のフィルタを示す.

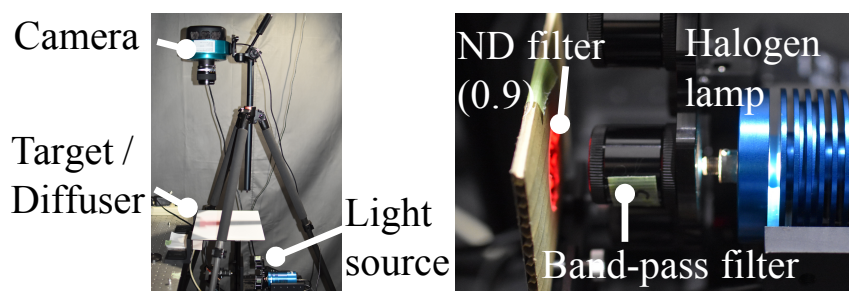
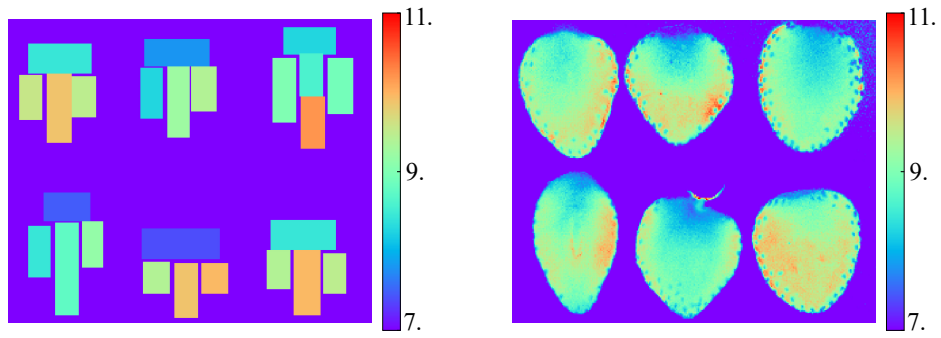


図 19: 作成した MSC を用いたイチゴの撮影環境. 対象は拡散板の上に乗せられ, 底面の光源によって照らされる. 光源は, フィルタを設置しその透過光を 90% の ND フィルタによって減光したものをを用いる. 最終的にイチゴを透過した光を冷却 CCD によって観測する. 今回用いるフィルタは回転式の機構に取り付けられており, 手動で回転させることで各フィルタの切り替えを行う.

の透過光を冷却 CCD(Aspen CG6 LowNoise Apogee) により撮影する。

提案する MSC の係数決定のため、これまでと同様多変量構成モデルを仮定し、最小 2 乗法により係数の推定を行う。ただし、6 個体に対し Leave-one out Cross validation(LOOCV) を用い計 6 回の係数推定を行い、最も高いスコア (式 (12)) の係数を採用する。

図 20 に推定された係数を用いた糖度分布の推定結果を示す。一般に、イチゴにおいては先端部の糖度が高いということが知られている。それに対し、先端部の糖度が高く推定されている様子が確認できる。各ピクセルにおける糖度の推定値 $\hat{y}$ は $\mathbf{z}^\top \mathbf{d}'$ と真値のグラフを図 21 に示す。糖度の分布のようなものは得られたが、糖度の実測値と比較すると傾向を捉えられていない事が分かる。フィルタを用いた実験では予備実験での結果を踏まえスライスしたが、これによって十分内部の化学物質の情報を取り出すことができなかったと考えられる。また、修正ランベルト-ベールの法則では内部は均一なものと仮定されている一方、イチゴは内部の構造が不均一となっていた、これによって間違ったフィルタを選択してしまったと考えられる。



(a) 糖度の実測値

(b) 糖度の推定値

図 20: 設計された MSC を用いた糖度の可視化結果

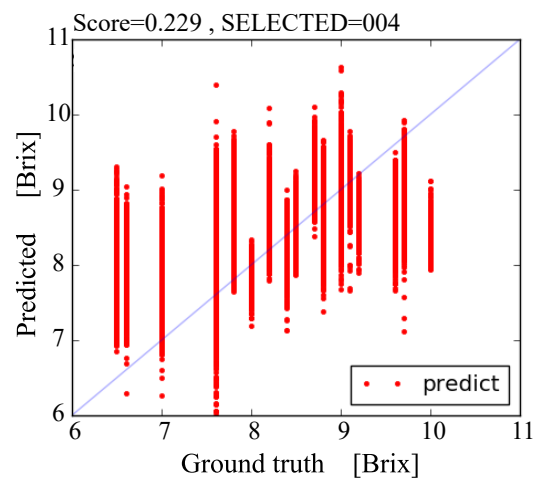


図 21: 真値と推定値のグラフ

6. 結論

本論文では、特定物質の分布イメージングを安価かつ高速に実現することを目的とし、市販の光学フィルタから最適な組を選択して MSC を構成する手法を提案した。提案手法は従来の研究とは異なり、市販のフィルタのみを用いるという制約のもとで MSC の光学フィルタの選択を行う。これを実現するために、市販の光学フィルタがもつ分光透過率を考慮した多変量校正モデルを再定義した。また、HSC を利用して分光解析のためのサンプルを効率的に収集し、市販されている数百の光学フィルタによる撮影を仮想的に行うことで、特定物質の定量に最適な光学フィルタの組み合わせを選択する手法について述べた。ハイパースペクトル画像のように各ピクセルをサンプルとして扱う場合など、多くのサンプル数が利用できる場合にフィルタ選択の手法として Adaptive lasso が lasso に比べ有効であることを確認した。実験ではイチゴの糖度推定というタスクに対し最適な光学フィルタの選定を行い、それらフィルタを用いた MSC の作成した。これを用いた糖度分布の可視化結果を示し、提案手法の有効性を検証した。

本研究における課題として、実験で用いた散乱体などを対象とする場合に形状に与える制約が挙げられる。例えば形状に左右されない反射型のアプローチはひとつの解法である。スライスする場合においても、内部の構造や目的とする化学物質が十分観察されるような厚みとする必要がある。また、本論文では撮影の速度については触れてこなかったが、SpectroCam[1] などを用いることで、任意の光学フィルタを備える MSC とすることが可能である。有用なタスクに対しては CCD のカメラセンサのベイパターンのように実装することでワンショットでの撮影が可能である。

本手法は視点を変えると、誰（何）かにとっての情報を最大化する波長（バンド）の特定である。人、動物、昆虫や鳥は、その種間で異なる視覚特性を持つことが知られ、これは進化の過程でタスクに応じた色覚を獲得した結果と言われる。本研究はこれにも根拠を持ち、他にも様々な用途での適用が可能であると考えられる。

謝辞

本研究を進めるにあたって、素晴らしい研究環境と終始丁寧なご指導を賜りました光メディアインタフェース研究室 向川康博教授に深く感謝申し上げます。本研究の遂行にあたり、有益なご助言、ご鞭撻を賜りました環境知能学研究室 萩田紀博教授に厚く御礼申し上げます。本研究の遂行及び本論文の執筆にあたり、日頃から丁寧かつ細やかなご指導をいただきました光メディアインタフェース研究室 船富卓哉准教授に心から感謝致します。本研究の遂行及び本論文の執筆にあたり、いつも新鮮な視点からのご指摘をいただきました光メディアインタフェース研究室 久保尋之助教 に心から感謝いたします。本論文の執筆にあたっては、ヤンマーグリーンシステム株式会社開発部 研究開発グループ 山田久也氏に貴重な資料を提供していただきました。厚く御礼申し上げます。本研究の遂行にあたり、貴重なご意見、ご指導をいただきました光メディアインタフェース研究室 研究員 青砥隆仁博士に心より感謝致します。本研究の遂行にあたり、解析のアイデアなど多くのご助言をいただきました光メディアインタフェース研究室 岩口堯史氏に心より感謝致します。公私にわたり多くのご助言をいただきました光メディアインタフェース研究室 特別研究学生 田中賢一郎博士 に心より感謝致します。本研究の遂行及び本論文の執筆にあたり多くのご助言をいただきました光メディアインタフェース研究室 高谷剛志氏 に心より感謝致します。最後に、研究に関する議論だけでなく日常生活面でもお世話になりました光メディアインタフェース研究室 のスタッフ、学生の皆様方に感謝申し上げます。

本研究に全うの力を注げたのも皆さまの協力あってのものです。本当にありがとうございました。

参考文献

- [1] Spectrocam. <http://pixelteq.com/spectrocam/>.
- [2] Masamoto Arakawa, Yosuke Yamashita, and Kimito Funatsu. Genetic algorithm-based wavelength selection method for spectral calibration. *Journal of Chemometrics*, 25(1):10–19, 2011.
- [3] Roman M. Balabin and Sergey V. Smirnov. Variable selection in near-infrared spectroscopy: Benchmarking of feature selection methods on biodiesel data. *Analytica Chimica Acta*, 692(1-2):63–72, 2011.
- [4] Christopher M Bishop. *Neural networks for pattern recognition*. Oxford university press, 1995.
- [5] Cui Chi, Hyunjin Yoo, and Moshe Ben-Ezra. Multi-spectral imaging by optimized wide band illumination. *International Journal of Computer Vision*, 86(2-3):140–151, 2010.
- [6] Bradley Efron, Trevor Hastie, Iain Johnstone, Robert Tibshirani, et al. Least angle regression. *The Annals of statistics*, 32(2):407–499, 2004.
- [7] Gamal ElMasry, Ning Wang, Adel ElSayed, and Michael Ngadi. Hyperspectral imaging for nondestructive determination of some quality attributes for strawberry. *Journal of Food Engineering*, 81(1):98–107, 2007.
- [8] Jerome Friedman, Trevor Hastie, and Rob Tibshirani. Regularization paths for generalized linear models via coordinate descent. *Journal of statistical software*, 33(1):1, 2010.
- [9] Jerome H Friedman. Fast sparse regression and classification. *International Journal of Forecasting*, 28(3):722–738, 2012.

- [10] C Gendrin, Y Roggo, and C Collet. Pharmaceutical applications of vibrational chemical imaging and chemometrics: a review. *Journal of pharmaceutical and biomedical analysis*, 48(3):533–553, 2008.
- [11] David E. Goldberg. *Genetic Algorithms in Search, Optimization and Machine Learning*. Addison-Wesley Longman Publishing Co., Inc., Boston, MA, USA, 1st edition, 1989.
- [12] AA Gowen, CPo O’Donnell, PJ Cullen, G Downey, and JM Frias. Hyperspectral imaging—an emerging process analytical tool for food quality and safety control. *Trends in Food Science & Technology*, 18(12):590–598, 2007.
- [13] T. Hastie H. Zou. Regularization and variable selection via the elastic net. *Journal of the Royal Statistical Society B*, 67:301—320, 2005.
- [14] Shuai Han, Imari Sato, Takahiro Okabe, and Yoichi Sato. Fast spectral reflectance recovery using dlp projector. In *Asian Conference on Computer Vision*, pages 323–335. Springer, 2010.
- [15] Kiyoshi Hasegawa, Yoshikatsu Miyashita, and Kimito Funatsu. Ga strategy for variable selection in qsar studies: Ga-based pls analysis of calcium channel antagonists. *Journal of Chemical Information and Computer Sciences*, 37(2):306–310, 1997.
- [16] Gordon Hughes. On the mean accuracy of statistical pattern recognizers. *IEEE transactions on information theory*, 14(1):55–63, 1968.
- [17] Jian-Hui Jiang, R James Berry, Heinz W Siesler, and Yukihiro Ozaki. Wavelength interval selection in multicomponent spectral analysis by moving window partial least-squares regression with applications to mid-infrared and near-infrared spectroscopic data. *Analytical chemistry*, 74(14):3555–3565, 2002.

- [18] Fan Jianqing and Li Runze. Variable Selection via Nonconcave Penalized. 96(456):1348–1360, 2001.
- [19] MS Kim, YR Chen, and PM Mehl. Hyperspectral reflectance and fluorescence imaging system for food quality and safety. *Transactions of the ASAE*, 44(3):721, 2001.
- [20] Kyu Sung Lee, Warren B. Cohen, Robert E. Kennedy, Thomas K. Maier-Sperger, and Stith T. Gower. Hyperspectral versus multispectral data for estimating leaf area index in four different biomes. *Remote Sensing of Environment*, 91(3-4):508–520, 2004.
- [21] Chengbo Li, Ting Sun, Kevin F Kelly, and Yin Zhang. A compressive sensing and unmixing scheme for hyperspectral data processing. *IEEE Transactions on Image Processing*, 21(3):1200–1210, 2012.
- [22] Xing Lin, Yebin Liu, Jiamin Wu, and Qionghai Dai. Spatial-spectral encoded compressive hyperspectral imaging. *ACM Transactions on Graphics (TOG)*, 33(6):233, 2014.
- [23] S Mahesh, A Manickavasagan, DS Jayas, J Paliwal, and NDG White. Feasibility of near-infrared hyperspectral imaging to differentiate canadian wheat classes. *Biosystems Engineering*, 101(1):50–57, 2008.
- [24] D.T.Delpy M.Cope. System for long-term measurement of cerebral blood and tissue oxygenation on newborn infants by near infra-red transillumination. *Medical and Biological Engineering and Computing*, 26(3):289–294, 1988.
- [25] Balas Kausik Natarajan. Sparse approximate solutions to linear systems. *SIAM journal on computing*, 24(2):227–234, 1995.
- [26] Seoung Wug Oh, Michael S Brown, and Marc Pollefeys. Do It Yourself Hyperspectral Imaging with Everyday Digital Cameras. *2016 IEEE Conference*

- on *Computer Vision and Pattern Recognition (CVPR)*, pages 2461–2469, 2016.
- [27] Jong-Il Park, Moon-Hyun Lee, Michael D Grossberg, and Shree K Nayar. Multispectral imaging using multiplexed illumination. In *2007 IEEE 11th International Conference on Computer Vision*, pages 1–8. IEEE, 2007.
 - [28] Antonio Plaza, Jon Atli Benediktsson, Joseph W Boardman, Jason Brazile, Lorenzo Bruzzone, Gustavo Camps-Valls, Jocelyn Chanussot, Mathieu Fauvel, Paolo Gamba, Anthony Gualtieri, et al. Recent advances in techniques for hyperspectral image processing. *Remote sensing of environment*, 113:S110–S122, 2009.
 - [29] Stephen J Preece and Ela Claridge. Spectral filter optimization for the recovery of parameters which describe human skin. *IEEE transactions on pattern analysis and machine intelligence*, 26(7):913–922, 2004.
 - [30] Y Qian, J Zhou, M Ye, and Q Wang. Structured sparse model based feature selection and classification for hyperspectral imagery. *Geoscience and Remote Sensing Symposium (IGARSS), 2011 IEEE International*, pages 1771–1774, 2011.
 - [31] Matthias Richter and Juergen Beyerer. Optical filter selection for automatic visual inspection. In *Applications of Computer Vision (WACV), 2014 IEEE Winter Conference on*, pages 123–128. IEEE, 2014.
 - [32] Oxana Ye Rodionova, Lars P Houmøller, Alexey L Pomerantsev, Paul Geladi, James Burger, Vladimir L Dorofeyev, and Alexander P Arzamastsev. Nir spectrometry for counterfeit drug detection: a feasibility study. *Analytica Chimica Acta*, 549(1):151–158, 2005.
 - [33] Michael E Schaepman, Susan L Ustin, Antonio J Plaza, Thomas H Painter, Jochem Verrelst, and Shunlin Liang. Earth system science related imaging

- spectroscopy—an assessment. *Remote Sensing of Environment*, 113:S123–S137, 2009.
- [34] Iain B Styles, A Calcagni, Ela Claridge, Felipe Orihuela-Espina, and JM Gibson. Quantitative analysis of multi-spectral fundus images. *Medical Image Analysis*, 10(4):578–597, 2006.
 - [35] Junichi Sugiyama. Visualization of sugar content in the flesh of a melon by near-infrared imaging. *Journal of Agricultural and Food Chemistry*, 47(7):2715–2718, 1999.
 - [36] Prasad S Thenkabail, Ronald B Smith, and Eddy De Pauw. Hyperspectral vegetation indices and their relationships with agricultural crop characteristics. *Remote Sensing of Environment*, 71(2):158 – 182, 2000.
 - [37] Robert Tibshirani. Regression Selection and Shrinkage via the Lasso, 1996.
 - [38] Ashwin A Wagadarikar, Nikos P Pitsianis, Xiaobai Sun, and David J Brady. Video rate spectral imaging using a coded aperture snapshot spectral imager. *Optics Express*, 17(8):6368–6388, 2009.
 - [39] Feng Xiao, Jeffrey M DiCarlo, Peter B Catrysse, and Brian A Wandell. Image analysis using modulated light sources. In *Photonics West 2001-Electronic Imaging*, pages 22–30. International Society for Optics and Photonics, 2001.
 - [40] Jianming Ye Xiaotong Shen. Adaptive model selection. *Journal of the American Statistical Association*, 97(457):210–221, 2002.
 - [41] Juan Xing, Stephen Symons, David Hatcher, and Muhammad Shahin. Comparison of short-wavelength infrared (swir) hyperspectral imaging system with an ft-nir spectrophotometer for predicting alpha-amylase activities in individual canadian western red spring (cwrs) wheat kernels. *Biosystems Engineering*, 108(4):303 – 310, 2011.

- [42] Xia Zhang, Jianting Wen, and Dong Zhao. Band selection method for retrieving soil lead content with hyperspectral remote sensing data. In *Remote Sensing*, pages 78311K–78311K. International Society for Optics and Photonics, 2010.
- [43] H. Zou. The adaptive lasso and its oracle properties. *Journal of the American Statistical Association*, 101:1418–1429, 2006.
- [44] Hui Zou and Runze Li. One-step sparse estimates in nonconcave penalized likelihood models. *Annals of statistics*, 36(4):1509, 2008.
- [45] 日本分光学会. 近赤外分光法. 測定法シリーズ 32. 学会出版センター, 2005.