

線上型近紅外光梨果糖度分級系統之開發

李汪盛、蕭介宗¹⁾

摘 要

本研究利用美國 Oriel 公司 MS260i 型矽材質光二極體陣列式分光光度計，波長範圍 900–1100 nm，研發線上型梨果糖度分級系統，44 個梨果經過線上掃描取得吸收光譜後，經二階差分前處理過之光譜，再利用 Unscrambler[®]軟體進行 PLSR 模式分析，結果顯示，使用 1 個因子之 PLSR 模式梨果糖度校正線，其交叉驗證相關係數及標準差分別為 0.698 及 0.335。以線上型機種開發而言，若能在維持 SECV 值情況下，擴大梨果樣本糖度分佈範圍以增加 RPD 值及結合相關之分級設備，則此技術的應用是可以期待的。

關鍵詞：近紅外光分光光度計、梨、糖度。

前 言

因應市場消費型態之轉變，「以量為主」的生產方式已轉變為以「品質為主」之生產導向。國內目前在高品質水果生產方面之研究成果相當豐碩，舉凡品種改良、栽培技術之改進等方面均有顯著成果；惟在生產後之品質檢測技術，國內方面雖有相關品質分析之研究，但大部分僅限於實驗階段之破壞性品質檢測，無法應用於快速、非破壞性線上檢測之需求。

國外有關水果非破壞性線上檢測之應用系統方面研究，以日本為主。日本雖較早投入，研究成果亦領先各國^(17, 23)，惟非破壞性線上檢測之相關技術報告被視為機密資料並未對外公佈。近幾年來，國內雖有引進日本製造之相關機種，但是售價太高（4,000–5,000 萬）及實用性方面受到限制（品質檢測方程式掌控於日本），而且國內部分水果具地域性，日本無樣本可應用於建立品質檢測方程式，推廣不易；韓國自 1998 起投入大量人力與物力進行水果非破壞性線上檢測系統研發^(13, 15, 16, 21, 22)。另外，其他國家如比利時、義大利等歐美各國亦積極投入相關研究^(19–20)。目前在有關應用於蘋果方面線上檢測系統已接近實用階段。至於國內有關此技術之研究^(1–12)，仍僅限於破壞方式或靜態方面整粒樣本分析研究較多，至於動態

方面研究則有待加強。因此，如何加強開發適合本省水果品質檢測之非破壞性應用系統，有其必要性。

傳統上之分級方式侷限於顏色、大小、重量、外觀有無瑕疵等外部品質，至於影響水果品質之內部品質如質地、糖度、酸度、氨基酸及維生素等成分含量則未予分析。利用人工檢視農產品外部品質以決定等級與售價，不但費時、費力，成本高，而且無法對農產品內部品質如甜度等進行判別，容易造成等級與實際品質差異過大。因此，開發國產優良品牌水果內外品質之線上非破壞性品質檢測系統，並與國內目前現有之分級及自動貼標籤機進行機電整合，完成非破壞品質檢測系統並應用於國內水果分級，乃當務之急。

¹⁾台灣大學生物產業機電工程學系教授

材料與方法

一、材料

2001 年 12 月 5 日市售之 30 個新世紀梨(*Pyrus serotina* Rehd. cv. 'Nijisseki')及 14 個新興梨(*Pyrus serotina* Rehd. cv. 'Sinse')，樣本數共計 44 個。

二、近紅外光線上檢測機反射光譜之取得

- 1.以白色鐵氟龍為白板，取得反射光譜之參考值。
- 2.將水果置於輸送帶上之水果承載盤上，以動態方式進行光譜截取，每分鐘測定水果數目 90 個。掃描位置為梨中間部分，掃描波長範圍為 900 nm–1100 nm，使用所有吸光二極體（1024 個），積分時間（integration time）為 0.0166 秒。

三、化學分析方法

- 1.糖度（可溶性固形物）測定：將近紅外線分光光度計掃描過之樣品，以榨汁機榨汁，以滴管取一滴寄接梨汁滴在屈折計上測定其糖度（°Brix）。進行二重複。若兩次之誤差值超過 5%，則再進行一次分析。分析值取較接近值的平均值為糖度含量。

四、有關建立校正線之相關理論

有關建立校正線之基本相關理論如部分最小平方迴歸分析(Partial Least-Squares Regression; PLSR) 及 PLSR 模式選擇最佳因子的方法，請參考 Marten 及 Naes⁽¹⁸⁾研究，Haaland 及 Thomas⁽¹⁴⁾研究。

五、試驗設備

本研究著重於硬體架構及控制軟體之設計與開發，整個系統是由鹵素光源、聚光鏡、光譜儀、控制電腦、感測器及試驗用水果輸送機等設備組合而成，分述如下：

- 1.近接開關(proximity sensor)：SUNX GX - 18H 型金屬感應式近接開關，使用電源範圍 +10–30 V DC，感應距離 7 mm 以內。
- 2.光電開關 (Photoelectric sensor)：Omron E3JK-DS30M1 型光電開關，使用電源範圍 12–240 V DC 或 24–240 V AC，感應距離 30 cm 以內。
- 3.光譜儀：美國 Oriel 公司 MS260i 型分光光度計，使用範圍 900–1100 nm。
- 4.控制軟體：美國 Oriel 公司 InstaSpec BasicTM 程式語言。

5.控制電腦：PIII 等級個人電腦。

六、分析軟體

本研究中所用到之分析軟體為挪威 CAMO 公司所提供之統計軟體 Usrambler 6.1 版光譜分析軟體，主要用於光譜資料之處理與迴歸分析。

七、有關性能評估的相關統計定義

下列有關性能評估的相關統計符號說明如下：Y 為校正組之實驗室化學成分分析值， \hat{Y} 為校正線預測值， \bar{Y}_c 為校正組之實驗室化學成分分析值之平均值， \bar{Y}_p 為校正線預測值之平均值， n_{cal} 為校正樣本數目，A 為 PLSR 校正線使用之因子數目。

1.校正標準偏差(SEC)：

$$SEC = \left[\frac{\sum_{i=1}^{n_{cal}} (Y - \hat{Y})^2}{(n_{cal} - A - 1)} \right]^{1/2} \quad (1)$$

2.交叉證標準偏差(SECV)：

$$SECV = \left[\frac{\sum_{i=1}^{n_{cal}} (Y - \hat{Y})^2}{(n_{cal} - A - 1)} \right]^{1/2} \quad (2)$$

3.交叉驗證相關係數(r_{cv})：

$$r = \left[\frac{\sum (\hat{Y} - \bar{Y}_p)^2}{\sum (Y - \bar{Y}_c)^2} \right]^{1/2} \quad (3)$$

4.交叉驗證判定係數為 r_{cv}^2

5.界外值之剔除：

$$(Y - \hat{Y}) > \left(3 \times RMSEC \times \sqrt{\frac{n_{cal} - 1 - A}{n_{cal}}} \right) \quad (4)$$

結果與討論

一、檢測單元之軟硬體設計與開發

本研究著重於硬體架構及控制軟體之設計與開發，整個系統是由鹵素光源、聚光鏡、光譜儀、控制電腦、感測器及試驗用水果輸送機等設備組合而成，其設計之構造如圖 1 所示。開發軟體工具為 Oriel 公司 Array Basic 語言。試驗用分級水果輸送機主要零組件包括 110 V 單相馬達、機架(450 mm 高× 400 mm 寬× 2000 mm 長)、輸送鏈條及水果承載座等。水果承載座可以左右翻轉進行出料。鹵素光源與聚光鏡相對位置保持入射與反射呈 45° 位置。金屬式近接開關用於檢查有無水果承載座進入分級區且位於鹵素光源入射與反射點，即水果承載座中央位置，Oriel 公司的介面卡具有 4 個位元輸入控制埠，本研究利用其中兩個位元輸入控制埠為水果承載座金屬感應式近接開關及水果光電開關的輸入控制埠。若有且光電開關又檢查到水果承載座上有水果，則利用外部觸發模式，觸發分光光度計進行光譜取樣。取樣光譜值與糖度校正線經過數學公式計算後所得到值即為糖度值，糖度值與使用者預先設定之等級大小進行比較，將糖度值區分轉為“微甜”、“甜”、“特甜”等三個等級，三個等級之區分可以由使用者自行設定。因為考慮將來本系統之擴充性，近紅外光糖度分級系統運算之糖度分級結果不直接輸出於 LED 等級顯示器，而是將分級訊號傳送至另一部電腦(品質整合電腦)，品質整合電腦再將等級訊號輸出於 LED 等級顯示器。與整合電腦的電腦傳遞資料的方式，是利用 Oriel 公司的介面卡具有 4 個位元輸出控制埠，本研究利用其中兩個位元輸出控制埠為水果等級的輸出控制埠，2 個位元具有 (0,0)、(0,1)、(1,0)、(1,0) 四種組合，本研究利用 (0,1)、(1,0)、(1,0) 三個組合代表糖度三個等級，此訊號可透過整合電腦 8255 I/O (輸入、輸出) 介面卡，接收來自近紅外內部品質分級系統所傳送之等級信號，達成線上分級之目的。

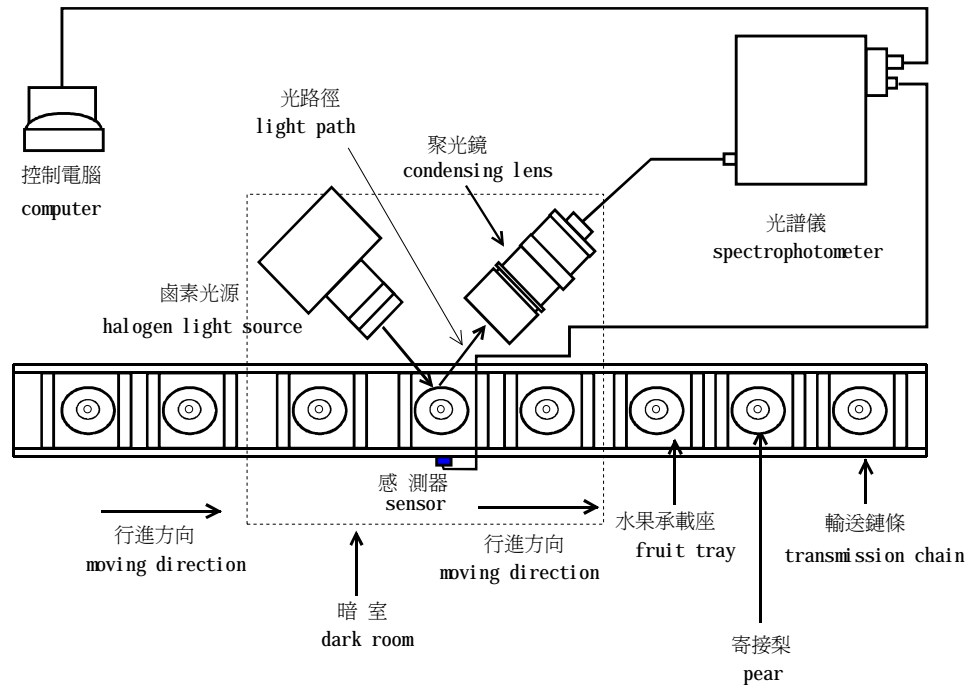


圖 1. 近紅外光線上檢測機示意圖

Fig. 1. Schematic diagrams of the on-line near-infrared quality inspecting system.

二、寄接梨糖度近紅外光線上檢測機應用結果

梨果糖度分佈情形，如表 1。參考分析方法之標準差 (SREF) 值為 0.26，SREF 代表屈折計測定糖度值二重複分析誤差量，此為 NIR 分析誤差之最小值，糖度分佈範圍在 9.5–11.9 °Brix 之間，平均值為 11.02 °Brix，標準偏差為 0.55 °Brix。

表 1. 梨果糖度分佈情形

Table 1. Distribution of sugar content of the pear samples

Chemical component	Minimum (°Brix)	Maximum (°Brix)	Average (°Brix)	Standard deviation (SD) (°Brix)	SREF (°Brix)
Sugar content	9.5	11.9	11.02	0.55	0.26

利用前述線上型近紅外線分光光度計試驗設備，將梨果至於輸送帶上動態取得梨果光譜資料並結合傳統式破壞方式梨果糖度屈折計分析資料，以部分最小平方迴歸法 (PLSR) 建立糖度校正線。同時

為了節省化學分析所需時間與經費及增加校正樣本數目，驗證部分捨棄一般認為較佳之不同樣本之驗證方式而採用原校正樣本進行驗證，驗證方法為交叉驗證，將所有校正樣本以隨機方式分為 20 個群組，然後進行驗證。

經由原始光譜、一階或二階差分前處理後之光譜進行分析並剔除界外值 (式 5)，結果列於表 2。採用二階差分前處理後之光譜進行回歸分析結果優於使用原始光譜、一階差分前處理後之光譜。梨果樣本之糖度 PLSR 模式校正結果，如圖 2 所示。由圖 2 可發現模式之可被解釋變異(explained variance) 隨著使用之因子數增加而增加，然而超過某一因子數之後即發生增加減緩或減少趨勢。根據 Unscrambler® 軟體之建議，針對梨果樣本之糖度之 PLSR 校正線為 1 個因子之校正線，此校正線梨果糖度預測能力約 50%。分級速度可達 90 個/分鐘，校正樣本糖度範圍 9.5~11.9 °Brix，平均值為 11.02 °Brix，標準差 (SD) 為 0.55 °Brix。

為了判別梨果糖度校正線預測能力，校正樣本糖度分佈標準差 (SD) 與交叉驗證標準差 (SECV) 的比值 (RPD) 被引用以做為判斷模式建立優劣的參考⁽²⁴⁾，RPD 提供優於單獨使用 SECV 做為判斷模式優劣依據，因為 RPD 係經過標準化處理，較 SECV 客觀。一般而言當 RPD 大於 3 以上時，模式發展成功。二階差分光譜 1 個因子之梨果校正線 RPD 值為 1.642 (0.55/0.335)。RPD 值雖未達 3 以上，但以如此小的梨果樣本數目及糖度分佈而言，若能增加梨果樣本糖度分佈標準差且不增加 SECV 的條件下，RPD 值是有提昇空間。圖 3 為梨果糖度近紅外線校正線預測值與化學分析值之關係圖，使用模式為 1 個因子之 PLSR 校正線，其 r_{cv}^2 、 r_{cal} 、SECV 分別為 0.487、0.698 及 0.335。以線上型機種開發而言，若能在維持 SECV 值情況下，擴大梨果樣本糖度分佈範圍以增加 RPD 值及結合相關之分級設備，則此技術的應用是可以期待的。

表 2. 線上型近紅外線分光光度計之梨果糖度 PLSR 校正線之性能檢定

Table 2. PLSR model performances for sugar content in pear fruits by a on-line near-infrared spectrophotometer.

Maths	PCs	n	r_{cal}	SEC	r_{cv}	SECV	RPD
0	1	44	0.660	0.375	0.404	0.401	1.372
0	1	42	0.718	0.331	0.510	0.410	1.341
0	1	38	0.795	0.282	0.636	0.362	1.519
D ₁ ^a	1	44	0.658	0.380	0.427	0.429	1.282
D ₁	1	37	0.819	0.268	0.616	0.347	1.585
D ₂ ^b	1	44	0.680	0.366	0.425	0.455	1.209
D ₂ [*]	1	37	0.988	0.070	0.698	0.335	1.642

^a: Savitsky-Golay first derivative method, polynomial order = 2, No. of left and right side points = 2, 2.

^b: Savitsky-Golay second derivative method, polynomial order = 2, No. of left and right side points = 3, 3.

*: The recommended model for pear calibration.

SEC: Standard error of calibration.

r_{cal} : Coefficient of determination of calibration.

r_{cv} : Coefficient of determination of cross validation.

SECV: Standard error of cross validation.

RPD: The ratio of the SECV to the standard deviation of the reference method.

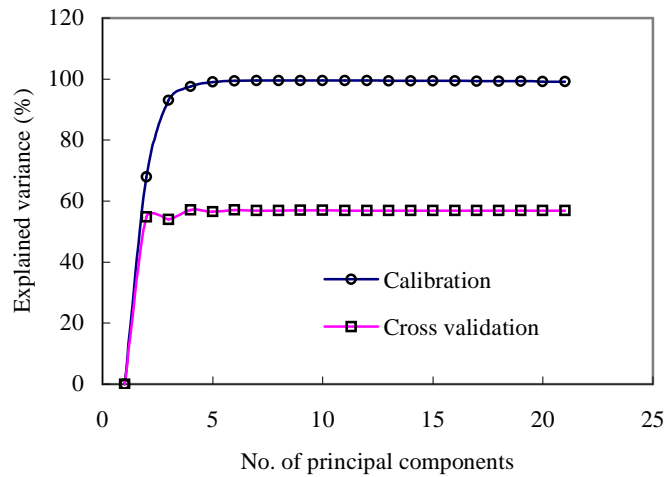


圖 2. 梨果糖度校正線分析中可被解釋變異 (explained variance) 百分比與主成分間之關係圖，預測能力的評估是利用交叉驗證，進行交叉驗證時將所有校正樣本以隨機方式分為 20 個群組，然後進行驗證。

Figure 2. Percentage correctly predicted variance for sugar content as a function of the number of principal components in the calibration models. This predictive ability was estimated by cross validation, and the calibration set was, randomly, divided into 20 segments.

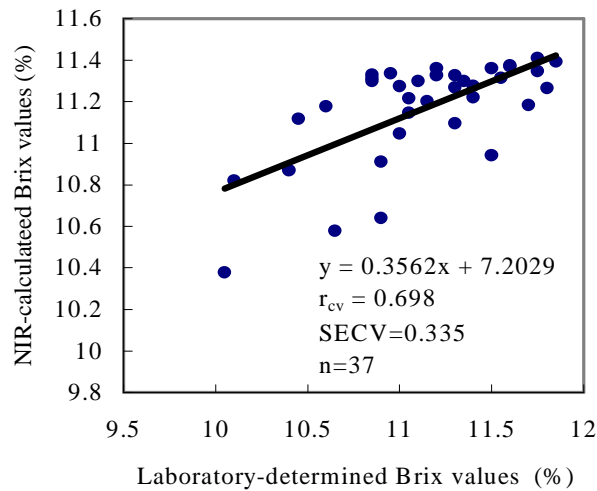


圖 3. 梨果糖度校正線交叉驗證預測值與化學分析值之關係圖

Figure 3. Plots of laboratory-determined Brix values v. NIR-calculated Brix values for

pears in the cross-validation data.

結 論

利用美國 Oriel 公司 MS260i 型分光光度計，使用波長範圍 900–1100 nm，兩個梨品種 44 個樣本進行線上掃描，經由 Unscrambler 軟體 PLSR 回歸法分析，結果顯示使用 1 個因子之 PLSR 模式分析，其梨果糖度校正線 r_{cv}^2 、 r_{cv} 、SECV 分別為 0.487、0.698 及 0.335。以線上型機種開發而言，若能在維持 SECV 值情況下，擴大梨果樣本糖度分佈範圍以增加 RPD 值及結合相關之分級設備，則此技術的應用是可以期待的。

誌 謝

本研究進行期間承蒙本場林金隆先生、陳國元先生及黃芬芳小姐協助進行糖度化學分析試驗，謹此致謝。

參考文獻

1. 李汪盛、蕭介宗。2000。以手提式近紅外線分光光度計非破壞性偵測梨果酸度。桃園區農業改良場研究彙報 41: 6–16。
2. 李汪盛、蕭介宗。2000。以手提式近紅外線分光光度計非破壞性偵測蘋果內部品質。桃園區農業改良場研究彙報 43: 45–54。
3. 邱鶴園、陳世銘、林宗賢。1999。近紅外光應用於芒果內部品質分析之研究。88 年農業機械論文發表會論文摘要集 p.71–72。國立嘉義技術學院編印。
4. 區少梅、林聖敦、林添立、吳松杰、田美純。1997。近紅外線光譜技術分析椪柑品質相關成分之研究。中國農業化學會誌 35(4): 462–474。
5. 陳文誠、謝俊夫、謝欽城。1999。以近紅外光線光譜分析蓮霧之糖度。88 年農業機械論文發表會論文摘要集。國立嘉義技術學院編印。p. 105–106
6. 陳加增、陳世銘、黃峻吉、楊宜璋。2000。近紅外光應用於芒果內部品質分析之研究。89 年農業機

- 械論文發表會論文摘要集。國立屏東科技大學編印。p. 111–112
7. 陳加增、陳世銘、楊宜璋、黃峻吉。2000。以近紅外光技術檢測葡萄糖酸度之研究。89 年農業機械論文發表會論文摘要集。國立屏東科技大學編印。p. 113–114
 8. 陳世銘、張文宏、郭立穎。1998。洋香瓜糖度檢測之研究 - (2)近紅外線分析法。農業機械學刊 7(1): 87–98。
 9. 陳世銘、張文宏、謝廣文。1998。果汁糖度檢測模式之研究。農業機械學刊 7(3): 41–60。
 10. 陳致平，蕭介宗。1999。以手提式近紅外線分光光度計偵測梨的糖度及酸度。農業機械學刊 8(1): 49–57。
 11. 蔡兆胤、謝俊夫、謝欽城。以近紅外光線光譜分析預測小蕃茄之糖度。88 年農業機械論文發表會論文摘要集。國立嘉義技術學院編印。p. 107–108
 12. 鍾允睿。1998。以可攜式近紅外線分光光度計偵測鳳梨果實糖度。台北。國立台灣大學農業機械工程學研究所碩士論文。
 13. Choi C. H. etc. 1998. Development of apple sorter by soluble solid content using photodiodes, Proc. of Winter Conference of KSAM, Korea. Vol. 22(2): 256–265.
 14. Haaland, D. M. and E. V. Thomas. 1988. Partial least-squares methods for spectral analyses. Anal. Chem. 60: 1193–1202.
 15. Hwan In-Geung. 1999. Development of on-line apple (Fuji) sorting system by the soluble solid and acid contents using VIS/NIR spectroscopy. Ph. D. Dissertation of Seoul National University.
 16. Hwan In-Geung and Sang-Ha Noh. 1998. Preliminary study for development of algorithm for on-line sugar content of intact fruits using NIR spectroscopy. In: Proceedings of the 9th International Conference on Near Infrared Spectroscopy, p. 379–384, Verona, Italy.
 17. Irawan, R. S., Y. Ikeda, and T. Nishizu. 1995. Determination of individual sugars and acid content in apple by NIRS. In: Proceedings of ARBIP95, Kobe, Japan. p. 103–108.
 18. Marten, H. and T. Naes. 1989. Methods for calibration. In: Multivariate calibration. New York: John Wiley & Sons.
 19. Meurens M. and E. Moon, 1999. High performance of a low-cost visible near infrared spectrophotometer. In: Proceedings of the 9th International Conference on Near Infrared Spectroscopy, p. 125–126, Verona, Italy.
 20. Moon E and P. Dardenne, 1999. Determination of internal apple quality by non-destructive visible and near infrared spectroscopy. In: Proceedings of the 9th International Conference on Near Infrared Spectroscopy, p. 785–790, Verona, Italy.
 21. Ryu, Dongsoo, S. H. Noh, and H. Huang. 2002. Non-destructive internal defects evaluation for agricultural products using VIS/NIR transmittance spectroscopy. In: Proceedings of Internal Symposium on Automation and Mechatronics of Agricultural and Bioproduction System, p. 458–465, Chiayi, Taiwan.
 22. Sohn M. R. and R. K. Cho, 1999. Development of calibration equation for firmness and determination of cell wall composition in apple fruits using NIR reflectance spectroscopy. In: Proceedings of the 9th

International Conference on Near Infrared Spectroscopy, p. 791–798, Verona, Italy.

23. Tanabe, T., Y. Kohda, and T. Akinaga. 1995. Fundamental studies on NIR technique for measurement of internal quality of pineapple and mangoes grown on Okinawa. In: Proceedings of ARBIP95, p. 109–115. Kobe. Japan.
24. Williams, P. C., and D. C. Sobering. 1993. Comparison of commercial near infrared transmittance and reflectance instruments for analysis of whole grains and seeds. *J. Near Infrared Spectrosc.* 1: 25–32.

Development of On-line Pear Sorting System by Sugar Content Using Near-infrared Spectroscopy

Wang-Sheng Li and Jai-Tsung Shaw

Summary

This work aimed to utilize an Oriel spectrograph named MS260iTM with silicon photodiode array spectrophotometer in the wavelength range between 900 and 1100 nm for on-line pear fruits grading. Spectra of forty-four pear fruits scanned on-line, pretreated by second derivative method, and then analyzed by PLSR model supplied by Unscrambler[®] software. The calibration curve of sugar content in pear fruits had correlation coefficient and standard error of cross validation 0.698, 0.335 °Brix, respectively. The result shows the possibility of using NIR spectroscopy in the pear grading process in the future provided that the RPD value will be increased by broadening the standard deviation of sugar content in pear samples and maintained the SECV value and appropriate sorting instruments are developed.

Key words: near infrared spectroscopy, pear, sugar content.