

VIS/NIR 스펙트럼 측정모드에 따른 신고 배의 당도 예측성능 비교

서상룡 이경환 유승화 유수남 최영수

Comparison of Performance of Measuring Method of VIS/NIR Spectroscopic Spectrum to Predict Soluble Solids Content of 'Shingo' Pear

S. R. Suh K. H. Lee S. H. Yu S. N. Yoo Y. S. Choi

Abstract

Three modes of VIS/NIR spectroscopic measurement (interactance and two modes of transmission) were compared for their ability to estimate soluble solids content (SSC) of 'Shingo' pear non-destructively. The two transmission modes are named as full- and semi-transmission, where full-transmission stands for passing of light through abdomen of pear and semi-transmission is for transit of light mainly through flesh of pear. For comparison of the modes, prediction models developed from the collected spectroscopic data by the three modes were developed and tested for comparison of their performance. Partial least square regression (PLSR) was used to develop the models and various pre-processing methods were applied to develop models of high accuracy. The experiment was repeated three times with pears produced in different regions.

The experiments resulted that selection of pre-processing is very important to attain accurate models, and multiplicative scatter correction (MSC) was selected as a pre-processor of high accuracy for the three modes of spectroscopic measurement in every experiment. Except for MSC, different group of pre-processing methods were selected for the three modes of measurement in every experiment without any tendency to the tested modes of measurement and pears of different produced region.

Root-mean-square error of prediction (RMSEP) of prediction models of the three modes of measurement using pre-processor of MSC were compared for their ability to estimate SSC. The models resulted in ranges of 0.37~0.57°Brix, 0.65~0.72°Brix, 0.39~0.51°Brix for interactance, full- and semi-transmission, respectively. As shown, modes of semi-transmission and interactance resulted about the same level of prediction accuracy and were noted as modes of high performance to predict SSC.

Keywords : SSC, Spectroscopy, Interactance mode, Transmission mode, Pear

1. 서론

콩농산물을 생산하는 농업인이 높은 소득을 얻기 위해서는 생산지에서의 철저한 재배관리와 출하 전 고품위 상품의 규격 출하가 전제되어야 한다. 농산물이 다양한 품질을 가진 생산물임을 고려할 때 이의 규격화를 위한 선별작업은 가능하

면 전수검사가 바람직하며 이를 위해서는 비파괴적인 방법으로 그 품질을 판정하여야 한다. 최근 광전자공학(opto-electronics) 분야는 빠른 속도로 발달하고 있으며, 그에 따라 농산물을 비파괴적인 방법으로 품질을 판정할 수 있는 가시광선 및 근적외선(Vis/NIR) 대역의 분광분석기술(spectroscopy)이 당도를 포함한 농산물의 내부품질 관련 인자를 예측하는데 있어 매

This study was financially supported by Chonnam National University, 2009. The article was submitted for publication on 2010-03-10, reviewed on 2011-03-31, and approved for publication by editorial board of KSAM on 2011-04-11. The authors are Sang-Ryong Suh, Kyeong-Hwan Lee, Soo-Nam Yoo, Yeong-Soo Choi, Professor, Seung Hwa Yu, Graduate Student, KSAM member, Institute of Agricultural Science and Technology, College of Agric. & Life Science, Chonnam Nat'l University. Corresponding author: K. H. Lee, Dept. of Rural & Bio-Systems Engineering, College of Agric. & Life Science, Chonnam Nat'l University, Gwangju 500-757, Korea; Tel: +82-62-530-2156; E-mail: <khlee@jnu.ac.kr>.

우 유용한 기술로 사용되고 있다.

배는 사과와 함께 국내에서 생산과 소비가 가장 많은 과실 중 하나인 고소득 과수작물이기 때문에 우수 상품으로 인정 받기 위하여 비파괴방법으로 측정할 내부품질(주로 당도)에 따른 선별이 요구되어 왔고, 이를 위해 국내외에서 가시광선 및 근적외선 대역의 분광분석법을 이용한 다양한 연구가 수행되었다.

분광분석 기술을 이용하여 농산물의 내부품질 관련 인자를 예측하는 광학적 방법은 과실에 조사한 빛(incident light)에 대한 반사광을 이용하는 방법(reflectance 또는 diffuse reflectance mode), 과실 내부 투과광을 이용하는 방법(transmission mode), 과실 내부의 일부만을 경유한 빛을 이용하는 방법(interactance 또는 body reflectance mode)로서 본문에서는 이를 “체반사”로 칭함)의 3가지로 구분(Schaare and Fraser, 2000; Lee et al., 2004; Nicolai et al., 2007)된다.

반사광을 이용하는 방법은 조사부와 수광부가 비접촉식으로서 주로 입사광과 반사광의 각도를 45°로 하여 정반사된 빛이 수광부(receptor)로 입사되지 않도록 하거나 적분구(integrating sphere)를 사용(Lu et al., 2000 & 2001; He et al., 2005; Bureau et al., 2009)하여 반사광을 측정한다. 투과광을 이용하는 방법은 조사부와 수광부를 광학적으로 분리하고 조사한 빛(조사광)이 주로 피측정물의 중심을 관통하도록 하는 구조의 광학장비를 사용(Hwang et al., 2000; Lee et al., 2001; Zude et al., 2006; Kim and Suh, 2008; Moghimi et al., 2010; Kim et al., 2010)한다. 내부반사광을 이용하는 방법을 보면, 조사광은 필히 피측정물 내부의 일부분을 경유(부분 투과, partial transmission)한 후 수광부에서 받아들일도록 구성한다. 보통 조사부는 비접촉식이나 수광부는 외란광(조사광이나 피측정물의 반사광)의 침입을 차단하는 구조로서 조사부와 수광부의 광섬유를 동심원의 이중 관에 배치 제작(Lu et al., 2006; Subedi et al., 2007; Zude et al., 2007)한다.

농산물의 내부품질을 예측하는데 있어 전술한 3가지 광학 경로를 비교하고자 Schaare and Fraser(2000)는 키위를 대상으로 과육의 당도와 밀도를 예측하기 위한 연구를 수행하였는데, 그 결과 키위의 당도 예측은 내부반사광과 투과광을 이

용한 방법이 반사광을 이용한 방법보다 우수한 것으로 보고한 바 있다. Fu 등(2007)은 반사광과 투과광(두 가지 투과 경로)을 이용하여 배의 내부부패(brown heart) 여부를 판단하는 실험을 수행하였는데 그 결과 투과광 방법이 반사광보다 효과적임을 보고한 바 있다.

분광분석을 이용한 배의 당도 예측 연구결과를 보면, Lee 등(2002)은 반사광을 이용하여 당도를 예측하고자 하였으며 이 경우 온도 영향을 줄일 수 있는 예측모형 개발 방법을 제시하였고, Ryu 등(2003)은 투과광을 이용하여 배의 내부결함(부패)을 검출하는 방법을 제시한 바 있으며, Sirisomboon 등(2005)은 내부반사광을 이용하여 배의 pectin 성분을 예측하는 연구를 수행하였고, Fu 등(2007)은 반사광을 이용하여 배의 품종을 구분하는 방법을 제시한 바 있다.

현재 국내 배 유통에 있어 비파괴 선별은 거의 필수이며 이를 위해 사용되고 있는 설비의 대부분은 당도 예측을 위하여 가시광선 및 근적외선을 이용하는 장비로서 주로 투과광(보통 배 중심을 관통하는 방법)을 이용하고 있다. 그러나 최근 배의 수출 증대를 위해 좀 더 신뢰도가 높은 선별이 요구되고 있어 본 연구에서는 배의 당도 예측 성능을 높이고자, 내부반사광과 투과광(180°와 90° 투과의 두 가지 모드)을 이용하는 방법을 비교하고 동시에 그 예측모형 개발에 있어 다양한 전처리(preprocessing method)를 적용하여 예측모형을 개발하고 비교하여 그 예측 성능을 향상시킬 수 있는 방법을 제시하고자 하였다.

2. 재료 및 방법

가. 실험 재료

실험에 사용한 배는 2009년 10월과 11월에 수확한 “신고” 품종으로 실험은 3회에 걸쳐 수행하였다. 각 실험에 사용한 배의 생산지는 표 1에 나타낸 바와 같이 실험 1에서는 전남 장성군, 실험 2는 전남 장흥군, 실험 3에서는 전남 나주시로서 각 실험에 사용한 시료 수는 각각 56개, 80개, 100개의 시료를 사용하였다. 각 실험에 사용한 시료의 중량은 478~926

Table 1 Properties of the samples of the experiment 1~3

Item		Exp. 1	Exp. 2	Exp. 3
Produced place		Jangseong	Jangheung	Naju
Cultivar		Shingo	Shingo	Shingo
Harvest season		2009. 11	2009. 10	2009. 10
No. of sample		56	80	100
Weight (g)	Range	478~926	605~782	516~579
	Mean	693	656	548
	s.d.	106	28	14
SSC (°Brix)	Range	10.3~14.2	11.5~14.7	9.3~15.0
	Mean	12.7	13.1	12.7
	s.d.	0.80	0.70	1.01

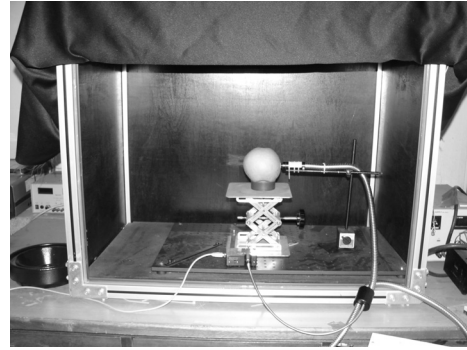
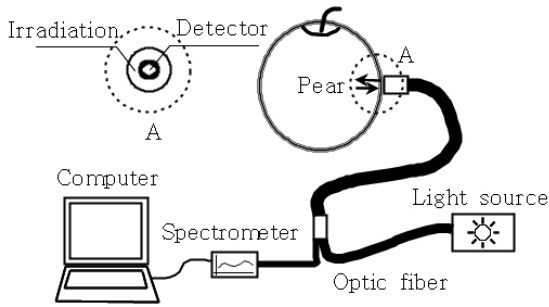


Fig. 1 Photo and schematic of the interreflectance mode of VIS/NIR spectral data acquisition system.

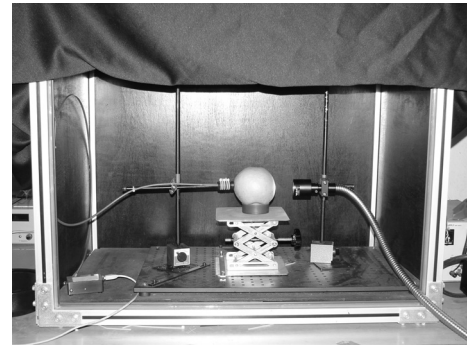
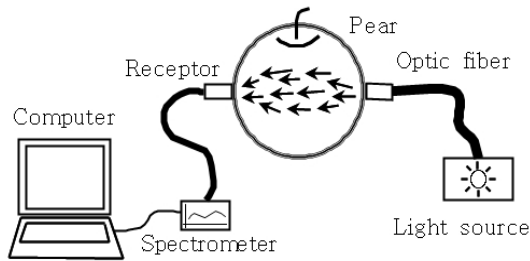


Fig. 2 Photo and schematic of the transmission mode of VIS/NIR spectral data acquisition system.

g이고 당도는 9.3~15.0°Brix 범위로서 그 평균과 표준편차는 표1에 나타난 바와 같다. 각 실험의 수행 시기는 각각 2009년 11월, 2010년 1월, 2010년 3월로서 실험 전 시료는 8±3°C의 저온 창고에 저장한 후 사용하였다.

나. 분광 측정장치

1) 구성

배의 분광특성을 측정하기 위하여 사용한 장치는 그림 1에 나타난 바와 같이 내부반사광과 투과광의 수광이 가능한 두 가지 구조로 구성하였다. 이는 본 연구 목적을 고려하여 피측정물의 광 조사와 피측정물로부터 수광 위치를 용이하게 변경할 수 있도록 한 일종의 기초실험 장치로 구성한 것이다.

내부반사광을 측정하기 위한 장치의 광섬유 다발은 그림 1(a)와 같이 동심원상 이중 구조의 것으로서 바깥 원은 광 조사용 그리고 안쪽 원은 수광용 광섬유를 각각 배치하였다. 내부반사광 실험에 사용한 장치의 조광부는 지름이 9 mm인 원에 배치한 유리 소재의 광섬유이고, 수광부는 지름이 1.5 mm 관 내에 180~1100 nm 파장의 빛이 통과할 수 있는 석영 소재의 광섬유(지름 200 μm)로 구성하였다.

투과광 측정용 장치의 조사 및 수광용 광섬유 다발은 그림 1(b)와 같이 각각 분리 제작하여 필요에 따라 조광과 수광 위치의 변경이 가능하도록 하였으며, 조광부와 수광부에 사용한 광섬유 소재는 내부반사광 장치의 것과 같다.

광원은 내부반사광의 경우 1개의 텅스텐-할로겐 등(100 W/12 V, 일본 Ushio의 JCR-12V) 그리고 투과광의 경우는 같은 텅스텐-할로겐 등 4개를 결합하여 사용하였으며, 광원의 조사 광량은 정전압-전류 조절장치를 사용하여 조절하였다. 내부반사광과 투과광을 측정하기 위해 사용한 분광분석기는 미국 Ocean Optics사의 USB 4000이였으며 이의 측정 파장대역은 470~1100 nm이고 스펙트럼 해상도는 약 0.2 nm이다. 본 장치의 광섬유 다발과 조광 및 수광 단자는 국내 서광옵티컬에 주문 제작하였다.

2) 분광자료 수집

시료의 분광 자료는 배 내부의 3가지 광경로(내부반사광 1종과 투과광 2종)로 구분하여 수집하였다. 내부반사광의 분광자료는 분광분석기 노출시간(integration time)을 100 msec로 하여 그림 3과 같이 각 시료의 적도면상 120° 간격의 3 지점에서 수집하였다. 분광자료 수집 시 평활화의 범위

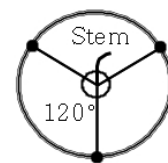


Fig. 3 Location of 3 points in a pear to measure spectrum data for the prediction of soluble solids content.

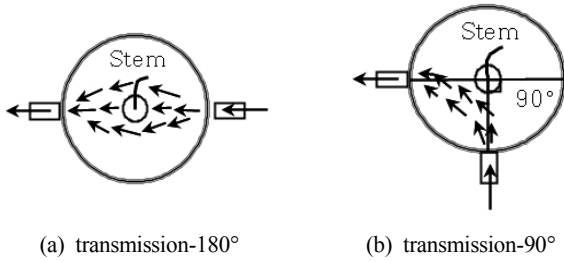


Fig. 4 Locations of light source and spectrum measurement in the two transmission modes.

(smoothing width)는 50개로 하였는데, 이는 다양한 당도를 갖는 시료를 대상으로 수집한 분광 스펙트럼을 관찰하여 분광 스펙트럼 곡선의 주요 특성에 미치는 영향은 거의 없으면서 스펙트럼에 혼입된 잡음을 최소화하는 수준으로 결정한 것이다.

투과광은 그림 4와 같이 두 가지 광경로에 대한 분광 자료를 수집하였다. 그 첫째는 배의 중심을 통과하는 직선상의 한 쪽 끝에서 빛을 조사하고 반대편에서 수광하는 경로(이하 ‘투과광-180°’로 약칭)이고, 둘째는 시료의 적도면에서 시료에 직각방향으로 빛을 조사한 후 그 방향과 수직인 적도면의 한 점에서 수광하는 경로(이하 ‘투과광-90°’로 약칭)이다. 이상의 두 가지 투과 광경로에 대한 분광자료도 하나의 시료에 대하여 내부반사광의 분광자료 수집 위치와 같이 적도선상 120° 간격 3 지점에서 수집하였는데 이때 분광분석기 노출시간은 두 가지 투과 광경로 모두 1000 msec로 하고 평활화의 요소 수는 내부반사광의 경우와 동일하게 하여 수집하였다. 이상과 같이 각 시료의 3 지점에서 수집한 분광자료는 평균을 구하여 사용하였다.

실험에 사용한 각 시료의 당도는 그림 3과 같이 시료의 적도면상에서 120° 간격의 3 지점에서 시료의 절편(가로×세로×깊이 = 2×2.5×2.5 cm³)을 채취하여 착즙한 후 일본 Atago사의 휴대형 굴절당도계(model: PR-32a)로 측정하였다.

다. 실험 자료 분석

수집한 분광 자료는 측정범위 하단에 있어 잡음 혼입 정도가 심하여 486~1100 nm 범위의 자료만을 사용하였다. 이러

한 분광 자료를 이용하여 배의 당도를 예측하기 위한 모형 개발은 분광자료를 이용한 농산물의 내부품질 예측에 많이 사용(Hwang et al., 2000; Lee et al., 2001; Zude et al., 2006; Kim and Suh, 2008; Moghimi et al., 2010; Kim et al., 2010)하는 다변량 분석방법인 부분최소제곱회귀법(partial least squares regression, PLSR)을 사용하였다.

이러한 당도 예측용 PLSR 모형 개발에 있어 각 분광자료에 대한 전처리가 요구되며 적합(당도 예측성능이 우수)한 전처리를 구하는 것은 당도 예측모형 개발의 매우 중요한 과정이다. PLSR 모형 개발에 있어 최근 소개되고 있는 주요 전처리를 보면, Mean, Max, Range를 각각 적용하는 3종의 normalization(이하 ‘Norm’로 약칭), SNV, MSC, median filter(이하 ‘MedF’로 약칭), 그리고 Savitzky-Golay의 1차와 2차 미분(각각 ‘SG1’과 ‘SG2’로 약칭)과 Norris Gap의 1차와 2차 미분(각각 ‘NG1’과 ‘NG2’로 약칭)의 4종 미분법 등 10여 가지의 단일 적용 전처리(이하 ‘단일 전처리’라 칭함)가 있을 뿐만 아니라 MedF 및 SG와 NG 미분에서도 여러 종류의 선택사항이 있고, 또 필요에 따라서는 2 종류 이상 전처리를 조합(이하 ‘복합 전처리’라 칭함)하여 적용할 경우도 있으므로 모형 개발 시 고려할 수 있는 전처리는 대단히 많으며 모형 개발 시 적합한 전처리를 찾기 위해 이들 전처리를 모두 적용하는 것은 매우 비효율적이다.

수집한 분광자료에 적당한 전처리를 찾기 위하여 본 연구에서는 실험 1의 분광자료를 대상으로 하여 표 2와 같이 전술한 10종의 단일 전처리와 6종의 복합 전처리(SNV+MedF의 조합, SNV+SG1과 SNV+SG2의 조합, MSC+MedF의 조합, MSC+SG1과 MSC+SG2의 조합)를 선별하여 당도 예측모형을 개발하였다. 이상의 전처리 중 MedF 및 SG와 NG에 대해서는 그 적용상의 선택 변수의 효과를 확인하고자 MedF의 segment size가 3, 5, 7인 3 가지, SG1과 SG2의 평활화 수(number of smoothing)도 3, 5, 7인 경우, NG1과 NG2의 gap 크기도 3, 5, 7인 3 가지 경우에 대하여 각각 예측모형을 개발하였다. 따라서 하나의 분광 스펙트럼으로부터 구한 배 당도 예측모형의 종류는 전처리 않은 원자료(raw data)로부터 구한 예측모형을 포함하여 모두 39종이었다. 이러한 39종의 당도 예측모형에 대해서는 다음에 설명하는 당도 예측성

Table 2 Various preprocessing methods tried to develop models to predict SSC (soluble solids content) of pears

Group	Preprocessing Method*
Single	Norm-Mean, Norm-Max, Norm-Range, SNV, MSC MedF, SG1, SG2, NG1, NG2
Combined	SNV+MedF, SNV+SG1, SNV+SG2, MSC+MedF, MSC+SG1, MSC+SG2

* Norm = Normalization

SG1 = the 1st derivative of Savitzky-Golay

NG1 = the 1st derivative of Norris Gap

MedF = Median Filter

SG2 = the 2nd derivative of Savitzky-Golay

NG2 = the 2nd derivative of Norris Gap

능을 각각 조사한 다음, 비교하여 최종적으로 예측성능이 우수한 10여종 내외의 전처리를 선발하였다.

본 연구에서 수집한 실험 2와 3의 분광자료는 선발한 10여종의 전처리를 적용하여 당도 예측모형을 개발하고 그 예측성능을 조사하였다.

전술한 전처리 방법을 거쳐 PLSR 방법으로 개발한 당도 예측모형에 대해서는 개발 모형이 설명할 수 있는 실험 자료의 변이 수준을 판단하고자 개발 모형의 결정계수(coefficient of determination of calibration: R_c^2)와 표준오차(standard error of calibration; SEC)를 구하였다. 개발 모형의 예측성능은 교차검증(cross validation) 방법 중 full cross validation 방법으로 평가하였는데, 그 결과는 교차검증 결정계수(coefficient of determination of cross validation: R_{CV}^2)와 교차검증의 자승-평균-평방근 오차(root mean square error of prediction; RMSEP)를 조사하여 판단하였다.

이상의 전처리를 적용한 PLSR 예측모형 개발은 통계분석 전용 프로그램인 Unscrambler(노르웨이 CAMO사, ver. 9.7)

를 사용하여 수행하였다. 사용한 PLSR 모형 개발 프로그램은 모형 개발에 있어 모형의 독립변수인 인자(factor)수의 최대값을 지정할 수 있는데 본 연구에서는 이를 15로 하여 비교적 여유 있는 수의 인자로 예측모형을 개발하였다. 개발 모형의 교차검증에서의 모형 인자 수는 사용한 교차검증 프로그램이 내부적으로 최적 값을 찾아 적용하도록 함으로서 결과적으로 조사한 개발 모형의 성능은 최적 인자 수를 적용한 모형의 성능이며 그 인자 수는 교차검증 후 조사하였다.

3. 결과 및 고찰

가. 스펙트럼 비교

내부 반사광 1종과 투과광 2종 등의 3가지 광경로로부터 수집한 배의 분광 스펙트럼 중 대표적인 것은 그림 5에 나타난 바와 같다. 동일 광경로 내에서 수집한 스펙트럼의 형상 차이는 거의 없으나 각 실험에 있어 3가지 광경로 간 차이는 큰 것으로 나타났다. 이러한 광경로별 스펙트럼의 주요 특징

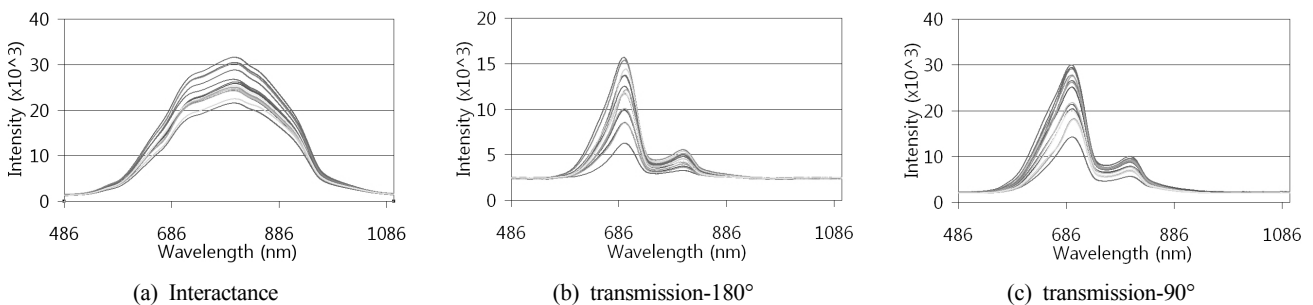


Fig. 5 Typical spectra collected by the 3 modes of the data acquisition method for the 1st experiment.

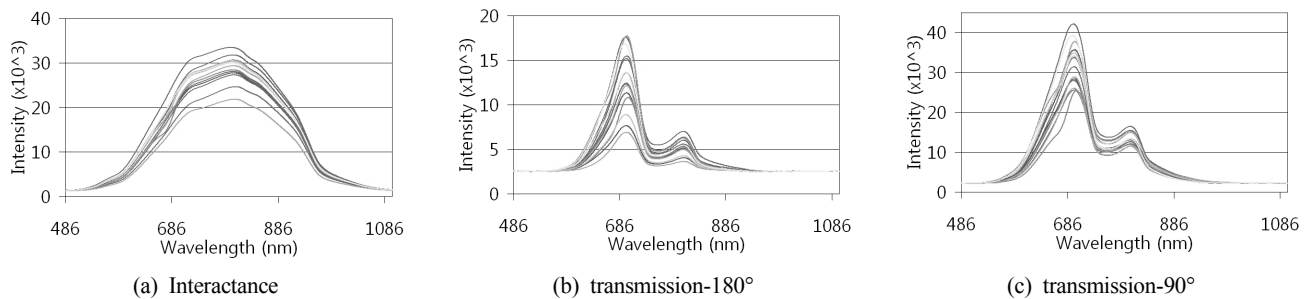


Fig. 6 Typical spectra collected by the 3 modes of the data acquisition method for the 2nd experiment.

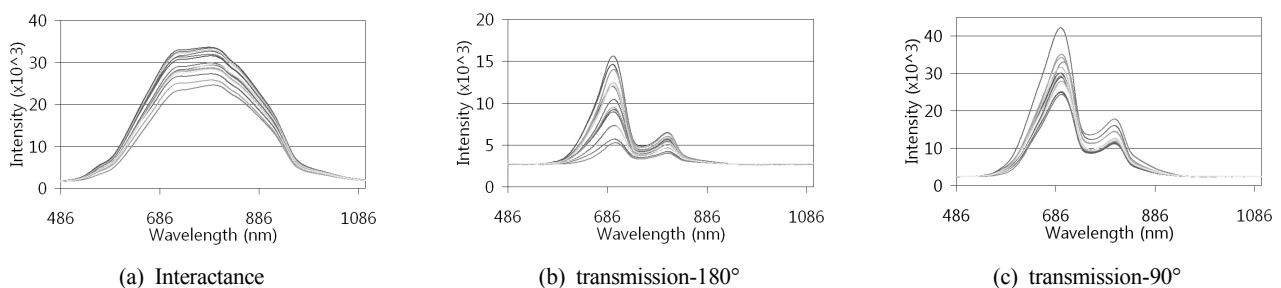


Fig. 7 Typical spectra collected by the 3 modes of the data acquisition method for the 3rd experiment.

을 보면, 내부반사광의 스펙트럼은 파장이 810 nm 부근의 근 적외선 영역에서 정점을 보이는 둥근 산 모양의 형상을 나타내고, 투과 스펙트럼은 실험한 2 종류 서로 비슷한 모습으로서 두 개의 정점(700 nm 부근의 높은 정점과 810 nm 부근의 낮은 정점)을 이루는 형태이다. 이러한 2개의 정점 중 810 nm 부근의 정점은 배 내부성분 중 당에 민감한 것(Kim et al., 2010)으로 판단된다.

나. 전처리 영향 분석 및 우수 전처리 선발

임의 분광 자료에 다양한 전처리 방법을 적용하여 개발한 예측모형 중 최선의 모형을 선택하는 기준은 RMSEP(Esbensen, 2004; Moghimi et al., 2010)로서 실험 1의 분광자료에 대하여 실험방법에서 설명한 전처리를 적용하여 개발한 예측모형의 RMSEP를 조사한 결과, 내부반사광, 투과광-180°, 투과광-90°의 경우 각각 0.37~0.83°Brix, 0.66~0.82°Brix, 0.48~0.76°Brix의 범위로서 같은 광경로에 있어서도 적용한 전처리에 따라 상당히 큰 차이를 보였다. 우수한 성능의 당도 예측모형을 얻을 수 있는 전처리(효과적인 전처리)를 찾기 위해 실험한 3 가지 광경로에 대하여 RMSEP를 기준으로 판단한 상위 7종의 전처리와 이를 적용하여 개발한 당도 예측모형의 RMSEP

와 R_{CV}^2 , SEC와 R_C^2 그리고 인자(factor) 수를 나타낸 것은 표 3에 나타내었다.

각 광경로에 있어 각 전처리별 RMSEP와 SEC의 수준을 비교하면, 낮은 RMSEP를 보인 전처리의 SEC도 낮은 값을 보여 전처리별 RMSEP와 SEC는 대체로 비슷한 특성을 갖는 것으로 나타났다. RMSEP와 R_{CV}^2 를 비교하면 RMSEP와 R_{CV}^2 의 증감 추세는 거의 정확하게 서로 반대임을 알 수 있으며, SEC와 R_{CV}^2 의 변화도 이와 비슷한 것으로 나타났다.

실험한 3 가지 광경로에 있어 선발한 상위 7종의 전처리가 보인 예측성능을 RMSEP를 기준으로 보면, 내부반사광에 있어서는 0.37~0.38°Brix, 투과광-180°에 있어서는 0.66~0.70°Brix. 투과광-90°에 있어서는 0.48~0.51°Brix로서 각 광경로별 상위 7종 전처리의 RMSEP는 광경로에 따른 차이는 크나 각 광경로에 있어 선발한 상위 7종 전처리간의 예측성능은 거의 비슷함을 알 수 있다.

당도 예측성능이 우수한 전처리인 상위 7종의 전처리를 광경로에 무관하게 종합하여 정리한 결과, 단일 전처리는 Mean, Max, Range 3종의 Norm과 SNV, MSC, MedF이고 복합 전처리는 SNV+MedF와 MSC+MedF 2종의 전처리로 나타났다. 이상 선발된 8종의 전처리에 포함된 MedF에 대해서는

Table 3 Selected 7 preprocessing methods of high performance to predict SSC of pear using VIS/NIR spectral data collected from the 3 modes of light path for the 1st experiment

Path of light	RMSEP (°Brix)	R_{CV}^2	SEC (°Brix)	R_C^2	Preprocessor	Factors
Interactance	0.37	0.785	0.20	0.938	SNV	11
	0.37	0.785	0.20	0.938	SNV+MedF	11
	0.37	0.780	0.26	0.891	Norm-Range	10
	0.37	0.780	0.24	0.906	MSC	10
	0.37	0.780	0.25	0.906	MSC+MedF	10
	0.38	0.777	0.26	0.891	Raw	11
	0.38	0.777	0.26	0.890	MedF	11
Transmission-180°	0.66	0.355	0.46	0.668	Norm-Mean	9
	0.66	0.347	0.45	0.677	Raw	10
	0.66	0.347	0.46	0.676	MedF	10
	0.69	0.349	0.34	0.819	Norm-Max	13
	0.70	0.327	0.42	0.726	Norm-Range	11
	0.70	0.311	0.45	0.677	MSC	9
	0.70	0.308	0.46	0.675	MSC+MedF	9
Transmission-90°	0.48	0.643	0.30	0.860	Raw	12
	0.48	0.642	0.30	0.859	MedF	12
	0.50	0.622	0.32	0.838	Norm-Mean	11
	0.50	0.612	0.30	0.857	Norm-Max	12
	0.51	0.610	0.32	0.838	MSC	10
	0.51	0.610	0.32	0.837	MSC+MedF	10
	0.51	0.599	0.31	0.854	Norm-Range	12

그 선택 변수인 segment size의 당도 예측성능에 미치는 영향을 조사한 결과 MedF 단일 또는 MedF가 포함된 복합 전처리 모두 segment size의 영향이 거의 없는 것으로 나타났다(이에 따라 이후 MedF 전처리 적용 시 segment size는 모두 3을 적용하였음).

선발한 전처리를 적용하여 개발한 당도 예측모형에 있어 교차검증의 최적화 과정에서 결정된 인자의 수는 표 3에 나타난 바와 같이 9~13 범위이고 실험한 광경로나 적용한 전처리에 따른 일정한 추세는 찾을 수 없었다.

본 연구의 실험 2와 3의 분광자료를 이용한 당도 예측모형 개발에 있어 적용한 전처리는 실험 1의 분광자료 분석 결과로부터 선발한 8 가지 전처리 외에 적어도 하나의 미분 전처리가 포함되도록 하였다. 이를 위해 실험 1의 예측모형 개발 결과에서 비교적 높은 당도 예측 성능을 보인 SG1(선택 변수인 평활화 수는 7을 적용) 전처리를 선발하였다. 따라서 실험 2와 3의 분광자료를 이용한 당도 예측모형 개발에 있어 적용한 전처리에는 실험 1에서 선발한 8종의 전처리 외에 SG1, SNV+SG1, MSC+SG1 3종의 전처리가 추가되었고, 이로부터 개발한 당도 예측모형은 전처리없이 원자료만으로 개발한 모형을 포함하여 모두 12종을 수집한 실험자료별로 개발하였다.

실험 2와 3의 분광자료에 이러한 전처리를 적용하여 개발한 당도 예측모형 중 낮은 RMSEP를 보인 상위 7개의 전처

리와 그 당도예측성능을 나타낸 것은 표 4에 나타내었다. 각 광경로에 있어 RMSEP와 SEC 그리고 RMSEP와 R_{CV}^2 및 SEC와 R_C^2 사이의 관계는 약간의 차이는 있으나 표 3에서 보인 결과와 대체로 비슷한 것임을 알 수 있었다.

각 광경로별 실험에서 효과적인 전처리를 선발하기 위하여 표 3과 표 4에서 보인 3회 실험의 분석 결과에서 공통적으로 나타난 전처리를 광경로 별로 구한 결과, 내부반사광에 있어서는 SNV와 MSC, 투과광-180°에서는 MSC와 Norm-Max와 MSC+MedF 그리고 전처리하지 않은 원자료, 투과광-90°에서는 MSC와 Norm-Mean과 Norm-Range와 MSC+MedF로 나타났다.

당도 예측용 모형 개발에 있어 적절한 전처리의 선택은 매우 중요한데, 각 실험에서 우수한 결과를 보인 전처리 방법은 위와 같이 실험한 3종의 광경로에서 MSC가 공통인 점을 제외하면 각 실험과 광경로에 따라 상이하며 일정한 경향을 찾을 수 없었다. 따라서 분광분석법으로 농산물의 내부품질을 예측할 경우 최선의 예측모형을 구하기 위해서는 본 연구 방법과 같이 가능한 다양한 전처리를 적용한 후 그 예측성능으로부터 구할 수밖에 없으며 이는 Moghimi 등(2010)과 김 등(2010)의 연구 방법과 같다.

교차검증의 최적화 과정에서 결정된 각 당도 예측모형의 인자의 수는 표 4에 나타난 바와 같이 3~15 범위로서 실험

Table 4 Selected 7 preprocessing methods of high performance to predict SSC of pear using VIS/NIR spectral data collected from the 3 modes of light path for the 2nd and 3rd experiments

(a) Experiment 2

Path of light	RMSEP (°Brix)	R_{CV}^2	SEC (°Brix)	R_C^2	Preprocessor	Factors
Interactance	0.43	0.634	0.28	0.836	Norm-Max	11
	0.44	0.626	0.26	0.868	SNV	12
	0.44	0.625	0.26	0.867	SNV+MedF	12
	0.44	0.623	0.26	0.861	MSC	11
	0.44	0.623	0.26	0.860	SNV+SG1	11
	0.44	0.620	0.25	0.874	Norm-Mean	12
	0.44	0.608	0.30	0.820	Norm-Range	10
Transmission-180°	0.64	0.207	0.49	0.509	Raw	11
	0.64	0.207	0.49	0.508	MedF	11
	0.65	0.198	0.55	0.399	MSC	6
	0.65	0.198	0.55	0.400	MSC+MedF	6
	0.65	0.175	0.58	0.316	SNV+SG1	3
	0.65	0.170	0.58	0.315	MSC+SG1	3
	0.65	0.144	0.60	0.268	Norm-Max	4
Transmission-90°	0.39	0.708	0.19	0.930	Norm-Mean	15
	0.39	0.707	0.19	0.929	MSC	14
	0.39	0.706	0.19	0.928	MSC+MedF	14
	0.38	0.702	0.29	0.931	SNV	11
	0.38	0.702	0.29	0.831	SNV+MedF	11
	0.40	0.671	0.30	0.822	Norm-Max	11
	0.41	0.667	0.29	0.824	Norm-Range	12

Table 4 Continued.

(b) Experiment 3

Path of light	RMSEP (°Brix)	R_{CV}^2	SEC (°Brix)	R_C^2	Preprocessor	Factors
Interactance	0.56	0.686	0.48	0.778	Raw	9
	0.56	0.686	0.48	0.778	MedF	9
	0.57	0.682	0.46	0.796	MSC	9
	0.57	0.682	0.46	0.795	MSC+MedF	9
	0.58	0.670	0.47	0.786	SNV	9
	0.58	0.670	0.47	0.786	SNV+MedF	9
	0.58	0.667	0.22	0.952	MSC+SG1	6
Transmission-180°	0.69	0.526	0.27	0.930	MSC+SG1	9
	0.70	0.520	0.27	0.930	SNV+SG1	9
	0.72	0.516	0.53	0.720	MSC	9
	0.72	0.514	0.54	0.714	MSC+MedF	9
	0.72	0.506	0.53	0.729	Norm-Mean	11
	0.73	0.502	0.49	0.767	Raw	13
	0.72	0.502	0.58	0.673	Norm-Max	9
Transmission-90°	0.39	0.852	0.30	0.912	Norm-Range	12
	0.39	0.851	0.31	0.905	Norm-Mean	11
	0.39	0.851	0.30	0.912	Norm-Max	12
	0.39	0.850	0.32	0.902	MSC	10
	0.39	0.850	0.32	0.902	MSC+MedF	10
	0.39	0.849	0.31	0.903	SNV	11
	0.39	0.849	0.31	0.903	SNV+MedF	11

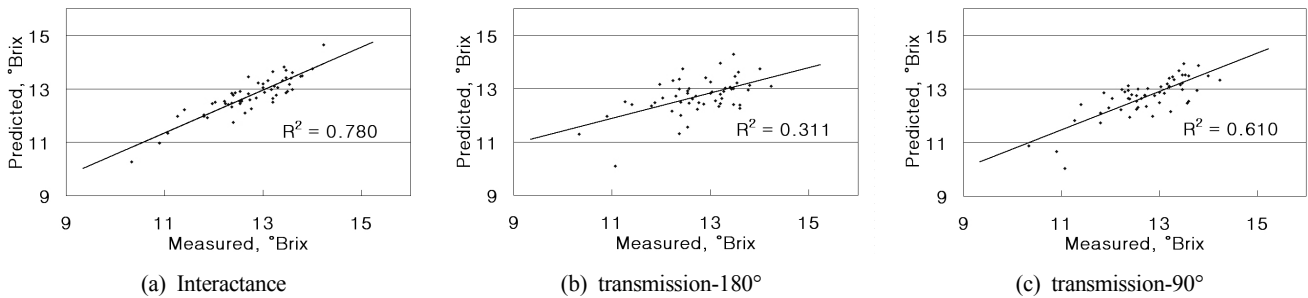


Fig. 8 Scatter plots of measured versus predicted SSC using MSC preprocessor for the spectral data collected by the 3 modes of the data acquisition method of the 1st experiment.

1의 분석 결과와 같이 실험한 광경로나 적용한 전처리에 따른 일정한 추세를 찾을 수 없었다.

다. 효과적인 광경로 선발

배 당도 예측에 효과적인 광경로를 찾기 위하여 3종의 광경로에서 공통으로 선발된 전처리인 MSC 전처리를 적용한 당도 예측모형의 교차검증 결과를 나타낸 것은 그림 8~10에 나타내었다. 광경로별 당도 예측성능을 비교하기 위하여 실험 1~3의 결과(표 3과 4)로부터 MSC 전처리를 적용한 당도 예측모형의 각 광경로별 RMSEP의 범위를 구한 결과, 내부반사광과 투과광-180°와 투과광-90°의 RMSEP는 각각 0.37~0.57°Brix, 0.65~0.72°Brix, 0.39~0.51°Brix의 범위로 나타났다. 이러한 결과로

부터 실험한 3종의 광경로 중 당도 예측성능이 우수한 것은 투과광-90°와 내부반사광의 경로이며 투과광-180° 경로는 3회 실험에서 모두 당도 예측성능이 가장 낮은 것으로 나타났다.

투과광-90° 경로와 투과광-180° 경로는 같은 투과광 경로임에도 불구하고 투과광-90° 경로의 예측성능이 투과광-180° 경로에 비하여 명백하게 우수한 결과로 나타났는데, 이는 투과광-180°의 경우 그림 4와 같이 배에 조사한 빛의 경로가 주로 배 중심 주위를 지나는 경로로 투과광-90°의 경로에 비해 그 경로 길이가 길어 투과 스펙트럼의 강도가 상대적으로 약하며 투과광90°의 경우는 배에 조사한 빛이 배의 중심 보다 배 당도를 대표하는 위치로서 굴절당도계의 배 당도 측정용 시료 채취 위치에 가까운 배 과육을 주로 통과한 결과로 판단된다.

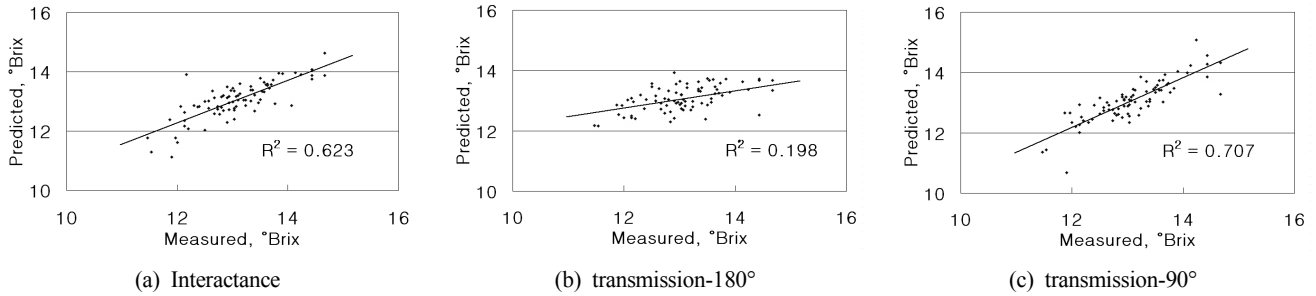


Fig. 9 Scatter plots of measured versus predicted SSC using MSC preprocessor for the spectral data collected by the 3 modes of the data acquisition method of the 2nd experiment.

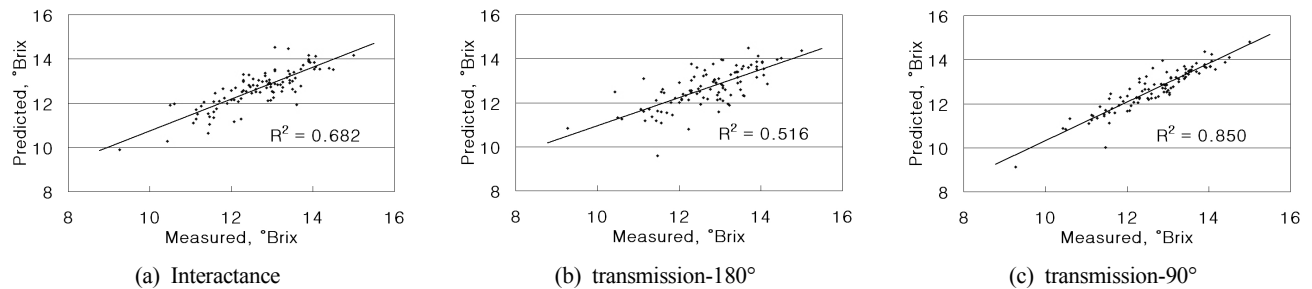


Fig. 10 Scatter plots of measured versus predicted SSC using MSC preprocessor for the spectral data collected by the 3 modes of the data acquisition method of the 3rd experiment.

투과광-90° 경로와 내부반사광 경로의 당도 예측성능을 비교하면 서로 비슷하거나 투과광-90° 경로가 내부반사광경로보다 약간 우수한 것으로 나타났는데, 이러한 결과도 위에서 설명한 것과 같은 방법으로 설명된다. 즉, 두 광경로 모두 과육을 통과하는 경로이나 내부반사광의 경로는 과육 표면에 국한됨에 반하여 투과광-90°의 경로는 좀 더 큰 영역의 과육을 통과함으로서 투과광-90° 경로가 내부반사광경로에 비해 당도 예측성능이 비슷하거나 약간 우수한 결과를 보인 것으로 판단된다.

이러한 실험 결과를 실제 배 선별장치에의 적용을 고려하면, 내부반사광 방법을 이용하는 선별장치는 그 측정위치를 자유롭게 선택할 수 있고 용량이 작은 광원을 사용할 수(본 연구의 기초실험에 의하면 배 분광자료 수집에 필요한 광원의 용량이 내부반사광 방법은 30 W 정도이고 투과광 방법의 경우는 300~330 W의 전력이 소요됨)있는 장점이 있으므로 이는 휴대형 장비에 효과적일 것으로 예상된다.

투과광-90° 방법은 휴대형 또는 연속식 in-line 선별장치에 적용 가능한 방법이다. 이를 적용한 휴대형 선별장치는 그림 4(b)와 같이 배의 적도선 주위에 빛을 조사하고 그 빛은 배 내부에서 90°도 꺾인 경로를 거쳐 수광부에 도달하도록 구성한다. 다만, 수광부의 입구는 탄력있는 재료로 제작하고 측정 시 이를 배에 밀착하여 외란광이 차단되도록 한다. 투과광-90° 방법을 연속식 in-line 선별장치에 적용하는 방법은 현재 이용되고 있는 분광분석 적용 in-line 선별장치와 유사하다. 이 경우 분광측정을 위한 빛은 수직으로 놓인 배의 적도선 주위를 조사하고 이 빛은 배 내부에서 90° 꺾인 경로를 거쳐 배 하부의 외란광이

차단된 공간에 놓인 수광부에 전달되도록 하는 방법이다.

4. 요약 및 결론

분광분석법을 이용하여 배의 당도를 비파괴적으로 예측하는데 있어 그 정확도를 높이고자, 내부반사광과 배 중심과 과육을 주로 통과하는 두 가지의 투과광(각각 투과광-180°와 투과광-90°로 명명) 경로로 배의 분광자료를 수집하고 분석하였다. 수집한 분광자료를 이용하는 당도 예측모형의 개발은 PLSR 방법을 사용하였는데, 예측모형 개발 시 예측의 정확도를 높이고자 다양한 전처리 기법을 적용하여 개발하였다. 이와 같은 실험은 생산지가 다른 시료로서 3회 수행하였으며 그 결과는 다음과 같다.

분광자료로부터 개발된 당도 예측모형의 예측성능은 분광자료의 전처리 영향이 크며, 3종의 광경로에 대한 3회의 실험 결과 우수한 당도 예측모형을 도출하는 전처리로 선별된 전처리는 MSC를 제외하고는 실험 재료와 광경로에 따라 일정한 경향 없이 상이한 것으로 나타났다.

각 광경로별로 MSC 전처리를 적용한 당도 예측모형의 RMSEP는 3회의 실험결과로부터 구한 결과, 내부반사광과 투과광-180°와 투과광-90° 광경로의 경우 각각 0.37~0.57°Brix, 0.65~0.72°Brix, 0.39~0.51°Brix로서 투과광-90° 방법과 내부반사광 방법이 예측성능이 비슷한 수준의 우수한 분광자료 수집방법으로 나타났다.

참 고 문 헌

1. Lee, K. J., K. H. Choi, T. H. Choi, J. Y. Son, D. S. Choi and G. Y. Kim. 2001. Internal quality measurement of citrus using NIR spectroscopy - The effect of different placement. Proceedings of the 2001 Summer Conference, Korean Society for Agricultural Machinery 6(2):261-266.
2. Lee, K. J., K. H. Choi, G. Y. Kim and D. S. Choi. 2002. Compensation of surface temperature effect in determination of sugar content of Shingo pears using NIR. Journal of Korean Society for Agricultural Machinery 27(2):117-124.
3. Lee, K. J., S. W. Kang and K. H. Choi, 2004. Nondestructive quality measurement of fruits and vegetables using Near-Infrared spectroscopy. Food Engineering Progress. 8(3):158-169.
4. Hwang, I. G., S. H. Noh, H. Y. Lee and S. B. Yang. 2000. Nondestructive determination of the soluble solids and acid contents of peachq using VIS/NIR real-time transmission spectra. Proceedings of the 2000 Winter Conference, Korean Society for Agricultural Machinery 5(1):457-463.
5. Bureau, Sylvie, David Ruiz, Maryse Reich, Barbara Gouble, Dominique Bertrand, Jean-Marc Audergon and Catherine M.G.C. Renard. 2009. Rapid and non-destructive analysis of apricot fruit quality using FT-near-infrared spectroscopy. Food Chemistry 113:1323-1328.
6. Esbensen, K. H. 2004. Multivariate Data Analysis-In Practice. CAMO Process AS.
7. Fu, X., Y. Zhou, Y. Ying, H. Lu, H. Xu. 2007. Discrimination of Pear Varieties Using Three Classification Methods Based on Near-Infrared Spectroscopy. American Society of Agricultural and Biological Engineers 50(4):1355-1361.
8. Fu, X., Yibin Ying, Huishan Lu and Huirong Xu. 2007. Comparison of diffuse reflectance and transmission mode of visible-near infrared spectroscopy for detecting brown heart of pear. Journal of Food Engineering 83:317-323.
9. He, Y., Yun Zhang, A. G. Pereira, A. H. Gómez and J. Wang. 2005. Nondestructive determination of Tomato Fruit Quality Characteristics using Vis/NIR Spectroscopy Technique. International Journal of Information Technology Vol. 11.
10. Kim, Y. T. and S. R. Suh. 2008. Development of prediction model to estimate the storage days of tomato using transmittance spectrum. Journal of Biosystems Engineering, Korean Society for Agricultural Machinery 33(5):309-316.
11. Kim, D. Y., B. Cho, C. Mo and Y. S. Kim. 2010. Study on prediction of internal quality of cherry tomato using Vis/NIR spectroscopy. Journal of Biosystems Engineering, Korean Society for Agricultural Machinery 35(6):450-457.
12. Lu, Renfu, Daniel E. Guyer, Randolph M. Beaudry. 2000. Determination of firmness and sugar content of apples using near-infrared diffuse reflectance. Journal of Texture Studies 31(2000) 615-630.
13. Lu, R., 2001. Predicting firmness and sugar content of sweet cherries using near-infrared diffuse reflectance spectroscopy. Transactions of the American Society of Agricultural Engineers 44(5):1265-1271.
14. Lu, Renfu and Benjamin B. Bailey. 2005. NIR Measurement of Apple Fruit Soluble Solids Content and Firmness as Affected by Postharvest Storage. American Society of Agricultural Engineers, Paper Number:056070.
15. Moghimi, Ali, M. H. Aghkhani, A. Sazgarnia and M. Sarmad. 2010. Vis/NIR spectroscopy and chemometrics for the prediction of soluble solids content and acidity (pH) of kiwifruit. Biosystems Engineering 106(2010):295-302.
16. Nicolaï, Bart M., Katrien Beullens, Els Bobelyn, Ann Peirs, Wouter Saey, Karen I. Theron and Jeroen Lammertyn. 2007. Nondestructive measurement of fruit and vegetable quality by means of NIR spectroscopy: A review. Postharvest Biology and Technology 46:99-118.
17. Ryu, D. S., S. H. Noh and H. Hwang. 2003. Nondestructive Internal Defects Evaluation for Pear Using NIR/VIS Transmittance Spectroscopy. Agricultural and Biosystems Engineering 4(1):1-7.
18. Schaare, P. N. and D. G. Fraser. 2000. Comparison of reflectance, interactance and transmission modes of visible-near infrared spectroscopy for measuring internal properties of kiwifruit (*Actinidia chinensis*). Postharvest Biology and Technology 20:175-184.
19. Sirisomboon, P., Munehiro Tanaka, Shuji Fujita and Takayuki Kojima. 2005. Evaluation of pectin constituents of Japanese pear by near infrared spectroscopy. Journal of Food Engineering 78:701-707.
20. Subedi, P. P., K. B. Walsh and G. Owens. 2007. Prediction of mango eating quality at harvest using short-wave near infrared spectrometry. Postharvest Biology and Technology 43:326-334.
21. Zude, Manuela, Bernd Herold, J-M. Roger, Veronique Bellon_Maurel and Sandra Landahl. 2006. Non-destructive tests on the prediction of apple fruit flesh firmness and soluble solids content on tree and in shelf life. Journal of Food Engineering 77:254-260.
22. Zude, Manuela, I. Birlouez-Aragon, P-J Paschold and D. N. Rutledge. 2007. Non-invasive spectrophotometric sensing of carrot quality from harvest to consumption. Postharvest Biology and Technology 45:30-37.