

근적외선 분광분석법을 이용한 낙엽송 목분의 함수율 예측 모델 개발¹

장 윤 성² · 양 상 윤² · 정 현 우² · 강 규 영³ · 최 준 원^{4,5} · 최 인 규^{2,6} · 여 환 명^{2,6,†}

Development of Moisture Content Prediction Model for *Larix kaempferi* Sawdust Using Near Infrared Spectroscopy¹

Yoon-Seong Chang² · Sang-Yun Yang² · Hyunwoo Chung² · Kyu-Young Kang³ ·
Joon-Weon Choi^{4,5} · In-Gyu Choi^{2,6} · Hwanmyeong Yeo^{2,6,†}

요 약

저장 또는 운송단계에서 목분에 포함된 수분의 부적절한 조절은 생물학적 열화로 인한 품질하락 및 손실을 야기할 수 있기 때문에 목분의 함수율은 정확하게 측정되어야 하고 적절하게 조절되어야 한다. 본 연구에서는 근적외선(파장 대역: 1000-2400 nm) 분광분석법을 적용하여 낙엽송(*Larix kaempferi*) 목분의 함수율을 측정하고자 하였다. 각 상대습도(25℃, RH 30~99%) 단계별로 조습된 목분의 근적외선 반사스펙트럼을 측정하고, 적정 수학적 전처리(smoothing, standard normal variate)와 부분최소자승법을 적용하여 예측모델을 개발하였다. 도출된 함수율 예측모델은 높은 신뢰도를 보였다($R^2 = 0.94$, RMSEP = 1.544). 본 연구에서 개발된 근적외선 분광분석법을 통하여 비파괴적이면서 정확하고 신속한 목분 함수율의 측정과 효율적인 목재이용을 견인할 수 있으리라 기대된다.

ABSTRACT

The moisture content of sawdust must be measured accurately and controlled appropriately during storage and transportation because biological degradation could be caused by improper moisture. In this study, to measure the

¹ Date Received January 13, 2015, Date Accepted February 26, 2015

² 서울대학교 농업생명과학대학 산림과학부. Department Forest Science, College of Agriculture and Life Sciences, Seoul National University, Seoul 151-921, Korea

³ 동국대학교 바이오시스템대학 바이오환경과학과. Department of Biological and Environmental Science, College of Life Science and Biotechnology, Dongguk University, Seoul 100-715, Korea

⁴ 서울대학교 국제농업기술대학원. Graduate School of International Agricultural Technology, Seoul National University, Pyeongchang 232-916, Korea

⁵ 서울대학교 그린바이오과학기술연구원. Institute of Green-Bio Science and Technology, Seoul National University, Pyeongchang 232-916, Korea

⁶ 서울대학교 농업생명과학연구원. Research Institute of Agriculture and Life Science, Seoul National University, Seoul 151-921, Korea

[†] 교신저자(Corresponding author) : 여환명(e-mail: hyeo@snu.ac.kr)

moisture contents of *Larix kaempferi* sawdust, the near-infrared reflectance spectra (Wavelength 1000-2400 nm) of sawdust were used as detection parameter. After acquiring the NIR reflection spectrum of specimens which were humidified at each relative humidity condition (25℃, RH 30~99%), moisture content prediction model was developed using mathematical preprocessings (e.g. smoothing, standard normal variate) and partial least squares (PLS) analysis with the acquired spectrum data. High reliability of the MC regression model with NIR spectroscopy was verified by cross validation test ($R^2 = 0.94$, RMSEP = 1.544).

The results of this study show that NIR spectroscopy could be used as a convenient and accurate method for the nondestructive determination of moisture content of sawdust, which could lead to optimize wood utilization.

Keywords : near infrared spectroscopy, sawdust, *Larix kaempferi*, moisture content, partial least squares regression

1. 서 론

화석연료의 무분별한 사용으로 인해 발생하는 지구온난화가 심각한 문제로 대두됨에 따라 이를 대체하기 위한 에너지원 및 물질을 찾기 위한 연구가 진행되고 있다. 특히 풍부한 자원량과 친환경적인 측면에서 목질계 바이오매스의 활용이 대두되고 있다.

우리나라의 경우 간벌재를 포함한 소경목 및 폐목질계 자원이 인력투입 및 비용 등 여러 가지 이유로 인하여 효율적으로 이용되지 못하고 있는 실정이다. 이러한 자원들을 효율적으로 이용하는 방법들을 제시하는 것은 목재산업의 원료난 해소, 산림자원의 보호 및 환경파괴 억제를 위해 매우 중요하다. 목질계 바이오매스는 낮은 에너지 밀도, 높은 생산비용 뿐만 아니라 재내 존재하는 수분의 부적절한 관리로 인하여 원료의 저장과 보관시 손실이 발생하는 문제점을 가지고 있다. 원료에 포함된 수분량을 알기위해 시편을 파괴하여 측정하거나 신속하게 측정하지 못함에 따라 대상 가공재료의 가치를 상실케하는 경우가 빈번히 발생하고 있다.

이를 해결하기 위하여 본 연구에서는 근적외선 분광분석법을 적용하여 목분의 함수율 예측모델을 개발하고자 하였다. 근적외선은 780 nm~2500 nm 대역의 파장을 갖는 전자기파로 물 분자의 진동에너지 해당 파장의 에너지 준위를 가져 수분변화 측정에 용이하며, 상대적으로 낮은 에너지를 이용하므로 비파괴적이고도 신속한 측정이 가능한 장점을 갖는다(Eom 2010). 근적외선 신호는 스펙트럼으로 기록되며 수소결합을 가지는 -CH, -NH, -OH 작용기의 분

자진동에 의해 생성되는 빛의 흡광도에 따라 생성된다. 이 작용기의 분자 진동은 배음대와 결합대로 나타난다. 특히 물분자의 -OH기 진동영역인 1450 nm, 1910 nm 대역에서 수분의 변화에 따라 근적외선 스펙트럼이 민감하게 변화한다고 알려져 있다. 하지만 다른 분광분석법인 IR이나 Raman에 비해 화학적인 정보가 부족하여 일차적인 방법이 아니며 검량선 작성에 많은 샘플이 필요하다는 단점이 있다. 또한 근적외선 영역에서는 흡수대들의 중첩으로 인하여 원스펙트럼을 그대로 이용하기에는 어려움이 있으므로 다변량 회귀분석법이 이용된다. 이러한 특성과 방법을 조합하여 재료의 물리적 특성을 평가하는데 널리 사용되고 있다(Schimleck 2004; Tsuchikawa 2007).

특히 목재의 수분, 회분, 발열량, 구성성분 등을 측정하기 위한 연구가 꾸준히 진행되고 있다(Lundqvist and Thygesen 2000; Gierlinger *et al.* 2002; Lestander and Rhen 2005; Alves *et al.* 2006; Lestander *et al.* 2009; Yang *et al.* 2013). 하지만 기존의 연구는 판재와 같은 솔리드 형태만을 대상으로 수행되었으며, 상대적으로 목분에 대한 연구는 미미하였다. 또한 다변량 통계분석시 독립변수인 스펙트럼을 수학적으로 변형시키면 수분예측모델의 신뢰성을 증대시킬 수 있다. 수학적 변형 방법으로 평활화, 미분, 산란 보정 등이 개발되어 있는 바 이들을 본 연구에 적용하였다. 가루 형태의 고체 샘플의 스펙트럼은 샘플 표면의 거칠기, 입도의 크기로 인해 빛의 산란이 발생하게 되는데 이를 극복하기 위한 스펙트럼 전처리에 관한 고찰(Martens and Jensen 1982; Martens *et al.* 1983; Kim *et al.* 2007)도 본 연

Table 1. Environmental condition for humidifying specimen and EMC of wood

	Relative Humidity (%) at 25℃								
	0	30	45	60	70	80	90	95	99
Equilibrium Moisture Content of <i>Larix kaempferi</i> (%)	0	7.54 (0.32)	9.07 (0.22)	11.47 (0.48)	13.18 (0.40)	14.98 (0.40)	19.55 (0.58)	22.69 (0.98)	26.32 (0.78)

※ parenthesis: standard deviation

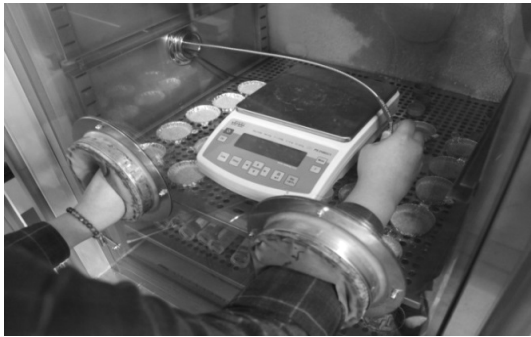


Fig. 1. Measurement of specimen's weight and NIR spectrum in thermohygrostat.

구결과의 분석에 사용하였다.

2. 재료 및 방법

2.1. 공시재료

2.1.1. 시료 준비

경기도 관악수목원에 조림된 35년생 낙엽송(*Larix kaempferi*)을 벌목한 후 목재파쇄기(P RCS-3300ED, 품림이엔지, 화성)로 파쇄하여 칩형태로 제조한 후 그늘에서 1주일간 천연 건조하였다. 건조된 시료는 분쇄기(Cutting Mill pulverisette 15, FRITSCH GmbH, Germany)를 이용하여 30-40 mesh 크기의 목분으로 제조하여 실험에 사용하였다.

2.1.2. 조습조건

준비된 시료를 알루미늄 접시에 5 g씩 정량하여 총 10개를 준비하였다. 시료를 전건시킨 이후 이를 항온항습기를 이용하여 온도 25℃ 상대습도 30%부

터 시작하여 상대습도를 올려가며 조습하였다. 각 조건별로 평형상태에 도달한 후 무게를 측정하였다. 상대습도 조건과 평형함수율은 Table 1과 같다.

2.2. 실험방법

평형함수율에 도달한 시편은 근적외선 분광분석기(NIRQUEST 256-2.5, Ocean Optics)를 이용하여 목분으로부터 반사되는 근적외선 스펙트럼(파장범위: 870~2500 nm)을 측정하였다. 외부환경에 따른 시편의 함수율 변이를 최소화하기 위하여 근적외선 반사율 측정은 항온항습기 내에서 수행하였고, 각 시료 내 임의의 세 지점을 선정하여 반사 스펙트럼을 3회 측정한 후, 평균값을 이용하였다. 측정된 반사 스펙트럼은 양 말단의 잡음을 제거하기 위해 측정파장의 최저한계와 최고한계 근처에서의 반사율 스펙트럼은 노이즈로 처리하여 1000 nm - 2400 nm 대역의 반사율 스펙트럼을 분석 대상으로 선택하였다. 근적외선 흡수스펙트럼은 피크들이 넓고 중첩되어 있으며, 시료의 밀도, 온도, 입자크기 등의 차이로 인한 산란(Scatter)에 의해 기준선(Baseline)의 변화가 발생한다. 이러한 기준선의 변화는 NIR 스펙트럼 분석시 많은 오차를 유발하므로 근적외선 스펙트럼과 목분의 함수율 간 회귀분석을 수행하기 전에 수학적 전처리가 필요하다. 기준치 설정 처리를 통하여 스펙트럼에 포함되어 있는 노이즈 및 작용기의 흡광에 의해 생기는 흡광 밴드 영역의 예기치 못한 이동을 제거하였다. 스펙트럼의 산란효과와 보정은 스펙트럼의 변화를 줄여 검량선을 안정되게 하므로 정량, 정성 분석에서 필수적인 도구로 사용된다. 전처리

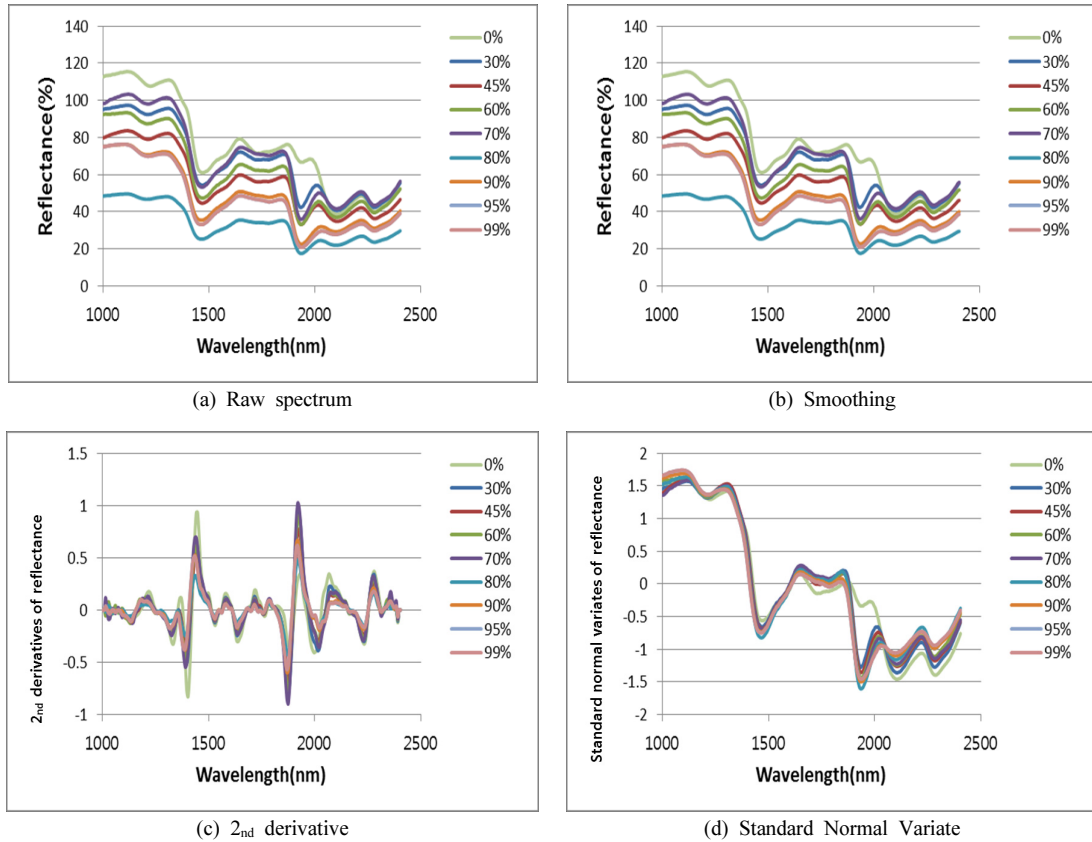


Fig. 2. Mathematical preprocessing for enhancing the precision of the regression model.

방법으로는 기준치 설정(Baseline), 미분(Derivative), 정규화(Normalize), 평활화(Smoothing), 산란보정(Standard Normal Variate, SNV), MC (Mean Centering), MSC (Multiplicative Scatter Correction), OSC (orthogonal signal correction), VS (variance scaling) 등이 있는데, 이 중에서 함수율 예측 모델의 정확도를 높일 수 있는 전처리 방법을 탐색하기 위하여 반사 스펙트럼에 통계프로그램(The Unscrambler v9.7)을 이용하여 평활화(3점 이동평균, Smoothing), SNV (Standard Normal Variate), Norris 2차미분(Norris gap 2_{nd} derivative)의 전처리를 순차적으로 조합하여 적용하였다.

$$\text{Smoothing : } x_i = \frac{x_{i-1} + x_i + x_{i+1}}{3}$$

Standard Normal Variate (SNV) :

$$x_i = (x_i - \text{mean}(x_i)) / \text{stdev}(x_i)$$

여기서,

$$x_i = \text{reflectance}, i = \text{wavelength}$$

전처리 후, 부분최소자승법(Partial Least Squares, PLS)을 적용하여 회귀분석을 실시하였다. 이를 통하여 함수율 추정 모델을 개발하였고, 모델을 통해 예측된 함수율은 전진법으로 측정한 실제 함수율과 교차 비교검증하였다.

Table 2. Reliability of moisture content prediction models which were developed by partial least squares analysis with different mathematical preprocessings

Preprocessing	Reliability	PC1	PC2	PC3	PC4	PC5
raw	R ²	0.077	0.648	0.914	0.934	0.946
	RMSEP	6.122	3.773	1.869	1.635	1.473
raw + smoothing	R ²	0.095	0.66	0.919	0.943	0.952
	RMSEP	6.16	3.799	1.837	1.548	1.43
raw + smoothing + 2 _{nd} derivatives	R ²	0.802	0.907	0.938	0.947	0.95
	RMSEP	2.838	1.92	1.559	1.431	1.399
raw + smoothing + SNV	R ²	0.796	0.898	0.94	0.946	0.949
	RMSEP	2.867	2.022	1.544	1.461	1.424

3. 결과 및 고찰

근적외선 분광분석을 통하여 얻은 반사 스펙트럼과 목분의 함수율과의 회귀분석을 수행하기 위하여 전처리로서 평활화, 미분, 산란보정을 실시하였다. 각각의 조합으로 전처리를 수행하여 그중 허용오차와 상관계수를 평가하여 최적의 전처리 방법을 선정하였다.

수학적 전처리 후 반사 스펙트럼에 대하여 부분최소자승법으로 회귀분석을 실시하였다. 회귀분석 모델은 다음의 식과 같다.

$$MC = b_0 + b_1x_1 + \cdots + b_ix_i$$

MC = moisture content (%)

x_i = reflectance at i_{th} wavelength

b_i = regression coefficient at i_{th} wavelength

Table 2는 회귀모델에 사용된 수학적 전처리 방법과 회귀모델이 포함하는 주성분(Principal Component, PC) 개수에 따른 결정계수(R²)와 평균제곱근오차(Root Mean Square Error of Prediction, RMSEP)를 나타낸 표이다.

주성분분석은 해석하고자 하는 다차원의 데이터에 포함된 정보의 손실을 가능한 한 적게 하면서 다차원의 데이터를 2차원 혹은 3차원의 데이터로 축약하는 수법이다. 데이터를 한 개의 축에 사상시켰을 때

그 분산이 최대가 되는 축부터 차례로 놓아 새로운 좌표계로 선형변환한다. 이렇게 변환된 벡터들을 주성분(PC: Principal component)이라 한다. 즉, 주성분분석은 복잡한 데이터를 단순화하기 위한 다변량 통계기법이다. 이러한 주성분분석은 분산이 작은 주성분들을 제거하여 데이터의 차원을 축소하고, 데이터에 포함되어 있던 잡음을 제거한다.

이때 주성분 수와 주성분 해석이 중요한 의미를 갖는다. 변수를 축약시키기 위해서 가능한 적은 개수의 주성분을 이용할 필요가 있다. 주성분 개수를 정하는 기준으로 이용되는 것이 고유치의 기여율이다. 기여율은 주성분이 원 데이터를 어느 정도 반영하고 있는가를 검토하기 위한 것으로, 주성분의 고유치를 나타내는 정보가 모든 정보 중에서 어느 정도 비율을 차지하고 있는가를 나타낸 것이다. 즉, 잔차를 줄이는 것이 중요하다. 일반적으로 주성분을 몇 개까지 채택할 것인가 하는 기준에 대해서는 정해진 바 없으나, 누적기여율(explained calibration variance)이 90~95% 이상이라는 기준이 자주 사용된다(Roh 2005).

Fig. 3에서 보듯이, 최적모델로 제안된 raw + smoothing + SNV 전처리를 적용한 함수율 예측모델은 주성분을 3개를 이용하였을 때 누적기여율이 94%가 되어, 이를 최적의 주성분개수로 정의하였다. 다른 전처리 방법 또한 동일한 방법으로 주성분 개수를 제시하였다.

부분최소자승법에 의해 개발된 회귀모델은 주성분

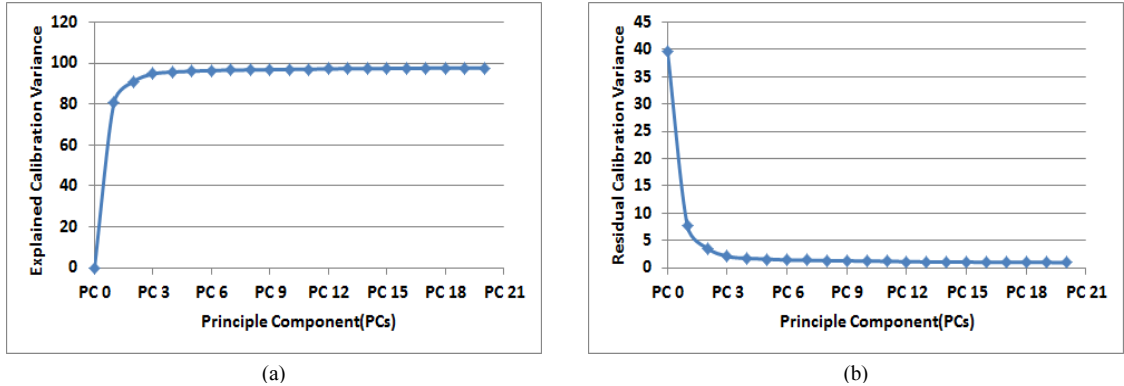


Fig. 3. Explained Calibration Variance (a) and Residual Calibration Variance (b) of the moisture content prediction model (raw + smoothing + SNV).

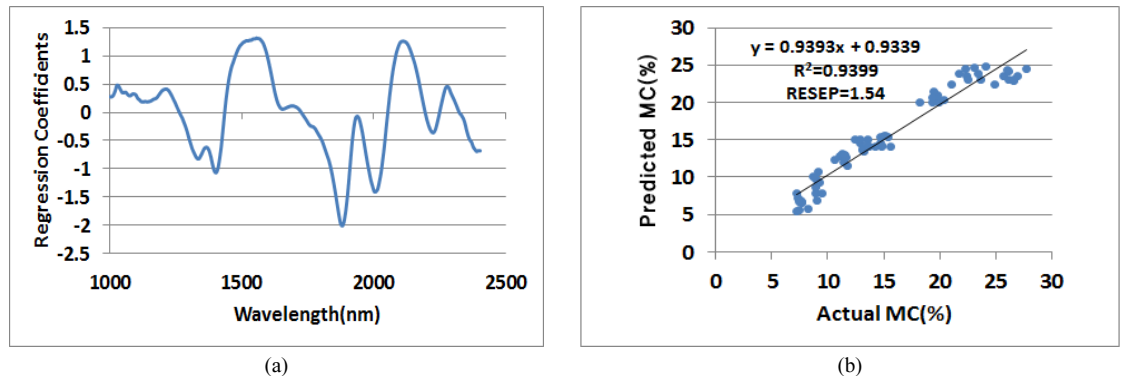


Fig. 4. Regression coefficients (a) and Cross validation results of moisture content prediction model (b).

의 개수가 늘어날수록 회귀모델의 신뢰도는 높아지지만 다른 표본에 대한 예측가능성은 낮아지므로, 주성분의 개수가 작을수록 다른 시료에서의 함수율 예측 가능성이 높아진다. smoothing과 SNV를 순차적으로 적용한 전처리 방법에서 가장 적은 주성분에서 높은 신뢰도를 보였다. 교차검증(cross validation)을 통한 낙엽송 함수율 모델의 R^2 은 0.94, RMSEP는 1.544로 결정되었다(Fig. 4).

4. 결 론

본 연구에서 수행한 낙엽송 목분 함수율 예측모델의 경우, 수학적 전처리로 평활화 후 SNV를 수행하

였을 때 주성분의 개수가 가장 낮으면서 높은 결정계수와 낮은 평균제곱근오차를 보였다. 일반적으로 분말형태의 고체 샘플의 근적외선 반사율 스펙트럼은 샘플 표면의 거칠기, 입도의 크기로 인해 빛의 산란이 발생하게 된다. 이러한 측정 오차는 SNV와 같은 수학적 전처리를 통하여 줄어들며 예측의 정확도가 증가하였다. 따라서, 다른 수종의 목분 함수율 예측 모델을 개발할 때에도 본 연구에서 개발한 방법을 이용하여 신뢰도 높은 모델을 개발할 수 있을 것으로 기대된다.

사 사

본 연구는 산림청 임업특정연구(기획연구과제) 국산 소경목의 바이오리파이너리화 기술 개발(과제번호: S111314L010120)의 연구과제지원에 의하여 이루어진 것임.

REFERENCES

- Alves, A., Schwanninger, M., Pereira, H., Rodrigues, J. 2006. Calibration of NIR to assess lignin composition (H/G ratio) in maritime pine wood using analytical pyrolysis as the reference method. *Holzforschung* 60: 29-31.
- Eom, C.D., Han, Y., Chang, Y.S., Park, J.H., Choi, J.W., Choi, I.G., Yeo, H. 2010. Evaluation of surface moisture content of *Liriodendron tulipifera* wood in the hygroscopic range using NIR spectroscopy. *Journal of The Korean Wood Science Technology* 38(6): 526-531.
- Gierlinger, N., Schwanninger, M., Hinterstoisser, B., Wimmer, R. 2002. Rapid determination of heartwood extractives in *Larix* sp by means of Fourier transform near infrared spectroscopy. *Journal of Near Infrared Spectroscopy* 10: 203-214.
- Kim, D.W., Lee, J.M., Kim, J.S. Kim, Kim, H.J. 2007. The technology for on-line measurement of coal properties by using near-Infrared. *Korean Chemical Engineering Research* 45(6): 596-603.
- Lestander, T.A., Rhen, C. 2005. Multivariate NIR spectroscopy models for moisture, ash and calorific content in biofuels using biorthogonal partial least squares regression. *Analyst* 130: 1182-1189.
- Lestander, T.A., Johnsson, B., Grothage, M. 2009. NIR techniques create added values for the pellet and biofuel industry. *Bioresource Technology* 100: 1589-1594.
- Lundqvist, S.O., Thygesen, L.G. 2000. NIR measurement of moisture content in wood under unstable temperature conditions. *Journal of Near Infrared Spectroscopy* 8: 183-189.
- Martens, H., Jensen, S.A. 1982. Partial Least Squares Regression: A New Two-stage NIR Calibration Method. *Proceedings of 7th world cereal and bread congress*, 607-647.
- Martens, H., Vangen, O., Snadberg, E. 1983. Multivariate Calibration of an X-ray Computer Tomograph by Smoothed PLS Regression. *Proceedings of Nordic symposium on appl.*, 235-258.
- Roh, H.J. 2005. The theory and practice of multivariate analysis. Hyung-sul publishing company p. 679.
- Schimleck, L., Workman, J. 2004. Analysis of Timber and Paper. *Agronomy* 44: 635-646.
- Tsuchikawa, S. 2007. A Review of Recent Near Infrared Research for Wood and Paper. *Applied Spectroscopy Reviews* 42: 43-71.
- Yang, S.Y., Han, Y., Chang, Y.S., Kim, K.M., Choi, I.G., Yeo, H. 2013. Moisture content prediction below and above fiber saturation point by partial least squares regression analysis on near infrared absorption spectra of Korean pine. *Wood and Fiber Science* 45(4): 415-422.