

분광분석법을 이용한 단립 쌀의 함수율 및 단백질 함량 예측모델 개발

Development of Prediction Model for Moisture and Protein Content of Single Kernel Rice using Spectroscopy

김재민*	최창현*	민봉기**	김종훈***
정희원	정희원	정희원	정희원
J. M. Kim	C. H. Choi	B. K. Min	J. H. Kim

ABSTRACT

The objectives of this study were to develop models to predict the contents of moisture and protein of single kernel of brown rice based on visible/NIR (near-infrared) spectroscopic technique. The reflectance spectra of rice were obtained in the range of the wavelength 400 to 2,500 nm with 2 nm intervals. Multiple linear regression(MLR) and partial least squares (PLS) were used to develop the models.

The MLR model using the first derivative spectra(10 nm of gap) with Standard Normal Variate and Detrending (SNV and Drt.) preprocessing showed the best results to predict moisture content of the single kernel brown rice. To predict the protein content of a single kernel of brown rice, the PLS model used the raw spectra with multiplicative scatter correction(MSC) preprocessing over the wavelength of 1,100~1,500 nm.

주요용어(Key Words): 근적외선(Near-Infrared), 현미(Brown Rice), 함수율 (Moisture Content), 단백질 (Protein), 다중회귀분석 (Multiple linear regression), 부분최소자승법(Partial least squares)

1. 서 론

분광분석법은 시료 내·외부의 상태에 따른 광학적 특성을 분석하여 품질을 비파괴적으로 평가하는 방법이다. 근적외선 영역에서는 수분에 의한 흡수가 아주 미약하여 전수검사가 가능하며, 유기물을 구성하는 C-H, N-H, O-H 등의 관능기가 나타내는 정보가

근적외선 영역에서 압축되어 나타나므로 농산물의 물리화학적 특성 정보를 동시에 얻을 수 있다. 또한 분광분석법은 시료의 상태를 표현할 수 있는 특정 파장이 결정되면 다른 비파괴검사법에 비하여 품질 평가 시스템을 구성하기 쉽고, 분석시 숙련된 기술이 필요 없으며, 결과의 해석이 간편할 뿐만 아니라 저 비용으로 측정 시스템을 구성할 수 있는 장점

* 성균관대학교 생물기전공학과

** 특허청

*** 한국식품개발연구원

이 있다.

20℃의 순수한 물의 근적외선 흡수 스펙트럼은 760nm, 970nm, 1,190nm, 1,450nm, 1,940nm의 5개의 파장인 것으로 알려져 있다. 이들 파장은 O-H stretch의 1차, 2차, 3차 배음대와 O-H 밴드(bend)의 결합대에 해당된다(Osborne 등, 1986). 그러나 이런 파장들을 이용하여 다중회귀 분석법으로 함수를 측정할 때 필요한 파장을 찾아보면 이들 파장에서만 특정 피크가 나타나는 것은 아니다. 대부분의 경우, 시료 내부에 존재하는 다른 성분들에 의하여 피크가 좌우로 이동되기도 하며, 오차를 보정하기 위하여 수분과 관계가 없는 다른 파장을 함수를 측정할 때 필요한 파장으로 사용하기도 한다. 이것은 필터형 근적외선 분광분석기를 이용하여 함수를 예측 모델을 개발한 Hart 등(1962), 문 등(1994) 및 한 등(1996)의 결과에서 확인할 수 있다. Li 등(1995)은 이러한 영향을 제거하기 위하여 전체 또는 일부 파장 영역의 스펙트럼을 이용하여 예측 모델을 개발하는 것이 모델의 정밀도를 향상시킬 수 있다고 하였다. 반사 스펙트럼 외에도 Finney 등(1978)은 투과 스펙트럼을 이용하여 다중회귀 분석법으로 함수를 예측 모델을 개발하여 곡물의 수분을 측정할 수 있음을 밝혔다.

근적외선 분광분석법을 이용한 단백질 함량 예측에 관한 연구는 보리, 밀, 콩 등 다양한 곡물에 대하여 수행되었다. 단백질 함량에 이용되는 파장은 N-H 결합대인 2,100~2,200nm 영역이며, 특히 밀의 경우 단백질과 가장 상관이 높은 파장은 2,180nm로 알려져 있다(Osborne 등, 1986). Iwamoto 등(1986), Batten 등(1991)과 국내에서는 문 등(1994)과 한 등(1996)이 분말시료의 밀과 쌀에 함유된 단백질 함량의 예측 모델을 개발하였다. 특히, Williams 등

(1983)은 근적외선 분광분석기를 이용하므로써 복잡하고, 많은 시간이 소요되는 이화학적 실험법을 대체할 수 있을 것이라고 하였다. Delwiche 등(1996)은 산물 상태에서 밀의 반사 스펙트럼을 측정하여 단백질 함량을 분석하였다. 위의 연구 결과들에서와 같이 단백질 함량 측정 모델은 근적외선 영역에서 반사 스펙트럼을 이용하여 개발하는 것이 좋은 결과를 얻을 수 있는 것으로 보고되고 있다. 또한, 분말 및 산물시료에 관한 연구는 많이 수행되었으나, 단립 시료의 단백질 함량 예측 모델을 개발한 보고는 Delwiche(1995)가 740~1,139nm의 파장영역에서 근적외선 투과 스펙트럼을 이용하여 모델을 개발한 것 외에는 없었다. 그러므로 품종개량과 단립의 선별시스템을 개발하기 위해서는 단립시료의 특성을 분석하여 성분을 예측할 수 있는 모델이 개발되어야 한다.

따라서, 본 연구는 단립 현미의 분광반사 특성을 이용하여 함수율과 단백질 함량을 예측할 수 있는 모델을 개발하기 위하여 수행되었다.

2. 재료 및 방법

가. 공시재료

함수율 및 단백질 함량 측정에는 생산지역과 지역별 주 생산품종을 고려하여 1996년 10월~11월에 생산된 동진벼(전북), 충청벼(충북), 일품벼(경기)의 3 품종을 이용하였다. 동진벼는 영·호남 지역, 충청벼는 경기·충청 지역, 일품벼는 중부전역에 걸쳐 생산되고 있다. 모델의 개발 및 검증에 이용된 시료의 수와 함수율, 단백질 함량은 표 1과 같다. 시료는

Table 1 Calibration and validation sample sets of each constituent

Constituents	Calibration Set				Validation Set			
	No. of samples	Max.	Min.	Mean	No. of samples	Max.	Min.	Mean
Moisture(%)	310	21.60	11.41	16.58	157	23.69	11.59	16.64
Protein(%)	309	14.75	6.17	9.63	154	15.66	6.45	9.61

각 품종 및 생산지별로 분류하여 진공포장용 비닐팩에 5kg씩 밀봉한 후 저온저장고에 보관하였으며, 곡물의 저장온도는 4℃(±1℃)로 설정하였다. 스펙트럼 및 성분 측정을 위하여 저온저장고의 시료를 비닐팩에 넣은 상태로 상온에서 24시간 동안 노출시켜 곡물의 온도를 상온에 도달하도록 하였다.

나. 실험방법

(1) 스펙트럼

스펙트럼 측정을 위하여 근적외선 분광분석기(NIRSystems, Model 6500, Silver Spring, USA)를 이용하였다. 본 실험에서는 400~2,500nm의 파장영역에서 2nm 간격으로 스펙트럼을 측정하였으며, 근적외선 분광분석기의 구동을 위하여 전용 프로그램인 NSAS(NIRSystems, Silver Spring, USA)를 이용하였다. 단립 시료의 스펙트럼은 근적외선 분광분석기에 수평시료장치(Horizontal Setup Module)를 부착하여 반사 스펙트럼을 측정하였다. 시료에 광선을 32회 주사(scan)하여 측정 후 평균한 스펙트럼은 흡광도(log(1/R))로 변환시켜 컴퓨터 파일로 저장하였다. 또한 시료의 위치를 일정하게 유지하기 위하여 시료대를 제작하여 수평시료장치에 부착하였다.

(2) 함수율 측정

저온저장고에 보관중인 동진, 일품, 추청의 3품종 벼를 비닐팩에 밀봉된 상태로 상온에서 24시간 노출하여 곡온이 상온에 도달하도록 한 후 고무 롤러형 제현기를 사용하여 제현하였다. 제현된 현미 중에서 광학식 품질판정기(RS-2000, Kett Ltd., Japan)와 육안검정으로 정립을 선별하였으며, 선별된 현미는 각 품종별로 100g씩 6개의 시료군으로 분리하여 함수율 범위가 10~21%가 되도록 조정하였다. 저함수율의 현미는 시료를 상온에서 건조시키고, 고함수율의 현미는 항온항습기에서 흡습시켰으며, 항온항습기의 운용조건은 온도가 25℃, 상대습도를 85%로 하였다. 건조 및 흡습과정중 1시간 간격으로 단립 수분계(CR-800E, Shizuoka Seiki, Japan)를 이용하여 50립의 현미 함수율을 측정하였으며, 평균함수율이

목적 함수율에 도달된 현미는 비닐팩에 밀봉하여 저온저장고에 보관하여 실험을 수행하였다. 밀봉상태로 저장된 현미는 데시케이터에서 24시간동안 방치시켜 곡온이 상온에 도달하도록 하였다. 그리고 동할립 판정기(DC-50, Shizuoka Seiki, Japan)를 이용하여 동할립을 제거하여 완전립 현미의 반사 스펙트럼을 측정하였다.

스펙트럼 측정이 완료된 시료는 함수율 및 단백질 측정에 이용되었다. 단립 시료의 무게를 측정 후 135℃의 공기오븐에 시료를 24시간 건조시켰다(135도법). 건조된 시료를 데시케이터에서 1시간 동안 방냉하여 건조 후 시료의 무게를 측정하였다. 일반적으로 표준함수율은 105도법으로 표시하므로 식 (1)을 이용하여 함수율을 환산하였다(岩尾俊男, 1987).

$$M_r(105) = 100 - 1.0122\{100 - M_r(135)\} \dots\dots (1)$$

여기서,

$M_r(105)$: wet-basis moisture content of 105℃ method

$M_r(135)$: wet-basis moisture content of 135℃ method

(3) 단백질 함량 측정

단립 시료의 단백질 함량은 함수율 측정이 끝난 건조된 시료를 대상으로 자동질소분석기(Auto Nitrogen Analyzer, NA-1500, Italy)를 이용하여 측정하였다. 자동질소분석기는 시료를 연소시킨 후 발생하는 기체로부터 질소의 함량을 측정하며, 무게 0.5~100 mg인 자연 상태 시료의 질소 함량을 분석할 수 있고, 측정범위는 0.01~100%이다.

먼저, 표준물질을 이용하여 기준을 설정한 후 임의 시료의 질소 함량을 측정하였다. 본 실험에서는 기기의 표준 사양에 준하여 표준물질로서 BBOT(Fison Ins., Italy, 2,5-Bis-(5-tert-butyl-benzoxazol-2-yl)-thiophen; C₂₆H₂₆N₂O₂S)를 이용하였으며, 매 실험 시작시 3~4 μg 범위에서 6개의 BBOT를 이용하여 검량식을 설정하였다. 또한 실험횟수의 증가로 인한 시스템의 오동작과 기준값의 변동을 보정하기 위하여 10회 측정 후 BBOT로서 기준을 보정하였다. 시

료의 단백질 함량은 A.O.A.C.(American Association of Official Analytical Chemistry)의 기준에 따라 자동 질소분석기에서 측정되는 질소 함량에 상수 5.95를 곱하여 환산하였다.

다. 모델 개발

스펙트럼을 이용한 예측 모델을 개발하기 위하여 전체 스펙트럼의 65%를 교정부로, 35%를 검증부로 분류하였다. 스펙트럼을 각 성분의 크기 순서로 정렬한 후 순차적으로 교정부와 검증부로 분류하였으며, 교정부와 검증부의 화학성분이 유사한 크기와 범위의 분포를 갖도록 조정하였다. 교정부의 스펙트럼은 모델의 개발단계에서 반복하여 사용되었으며, 검증부는 예측 모델의 최종평가에 1회 사용되었다.

각 성분의 예측 모델은 다중회귀 분석법(Multiple Linear Regression; MLR), 부분최소사승법(Partial Least Squares; PLS)을 이용하여 개발하였다. 다중회귀 모델의 개발을 위해서 NEWISI 4.0(NIRSystems, Silver Spring, USA)을, PLS 모델은 상용 프로그램인 GRAMS/32(Galactic Industries, Salem, USA)를 사용하였다.

각 모델의 예측성능은 교정부 오차(Standard Error of Calibration, SEC), 검증부 오차(Standard Error of Prediction, SEP), 편차(bias)를 이용하여 분석하였다. 그리고, 모델의 성능은 검증부 오차(SEP)를 검증부의 화학분석값의 평균값(mean)으로 나눈 모델의 오차변위(SEP/mean)를 이용하여 분석하였다.

각 모델을 개발하기 위해서 원시 스펙트럼, 분할 간격(gap) 및 평활화 간격을 변화시킨 1차 및 2차 미분 스펙트럼을 사용하였다. 반사 스펙트럼은 시료 입자의 비선형성으로 인하여 흡광도의 차이가 발생한다. 흡광도의 차이는 빛의 산란(scattering)으로 발생하며, 산란은 스펙트럼 곡선의 변화를 가져온다. 따라서 본 연구에서는 전처리 방법으로서 다분산 보정(Multiplicative Scatter Correction; MSC)과 표준 정규화(Standard Normal Variate and Detrending; SNV & Dtr.)를 이용하였다.

다중회귀 모델은 변수증감법(stepwise method)을

이용하여 개발하였으며, 예비분석 결과와 문 등(1994) 등의 연구 결과를 참고하여 최대 6개의 파장을 선택할 수 있도록 설정하였다. 최적 모델은 교정부의 결정계수(R^2)가 높고, 교정부 오차가 낮으며, 최소의 파장으로 구성된 모델로 결정하였다.

PLS 모델은 교차검증(cross validation)을 이용하여 개발하였으며, 팩터의 수와 PRESS(Prediction Residual Error Sum of Squares)값을 참조하고 결정계수와 교정부 오차를 비교하여 선정하였다. 팩터의 수가 증가하면 PRESS값은 감소하나 팩터의 수가 너무 많으면 검증시 예측능력이 떨어지므로, F비를 활용한 F-검증을 수행하고 F-검증의 확률이 0.75미만이 되는 팩터의 수를 모델의 최적 팩터의 수로 결정하였다. 최적의 PLS 모델은 먼저 결정계수가 높은 모델을 선정하였으며, 결정계수가 유사한 값을 나타낼 때에는 교정부 오차가 낮은 모델로 선정하였다. 결정계수와 교정부 오차가 유사한 값을 가지는 경우에는 팩터의 수가 작은 것을 최적 모델로 결정하였다. 이때, 결정계수는 높으나 교정부 오차가 큰 모델은 제외하였다. PLS 모델 개발에 사용된 교정부 오차는 SECV (Standard Error of Cross Validation)를 이용하였다.

4. 결과 및 고찰

가. 단립 현미의 함수율 측정 모델 개발

근적외선 분광분석법으로 단립 현미의 함수율을 측정하기 위하여 다중회귀 모델과 PLS 모델을 개발하였다. 모델의 개발 결과, 다중회귀 모델은 1,100~1,400nm, PLS 모델은 1,100~1,500nm의 파장에서 검증부의 결정계수가 높고, 검증부 오차 및 편차가 낮게 나타났다. 동진 102개, 일품 103개, 추청 105개(총 310개)의 스펙트럼을 혼합하여 수학적 처리별로 단립 현미의 함수율 측정용 다중회귀 모델 및 PLS 모델을 개발하였으며, 각 품종별 검증부를 이용하여 모델의 적합성을 검증하였다. 모델의 검증에는 동진 52개, 일품 52개, 추청 53개의 스펙트럼이 이용되었다.

단립 현미의 함수율 예측을 위한 다중회귀 모델의 개발 결과, 원시, 1차 및 2차 미분 스펙트럼을 이용한 모델 모두 수학적 처리와 전처리에 상관없이 교정부의 결정계수는 0.988 이상, 교정부 오차는 0.270% 이하로서 우수한 결과를 보여 주었다. 특히 표준 정규화로 전처리한 1차 미분 스펙트럼을 이용한 모델은 품종에 상관없이 검증부의 최소 결정계수가 0.987로 높고, 최대 검증부 오차가 0.189%로 낮으며, 모델의 오차변위가 1.18% 이하로 가장 우수하였다 (표 2). 1차 미분 스펙트럼을 이용한 모델은 1,166 nm · 1,174nm · 1,262nm · 1,300nm · 1,364nm · 1,388 nm의 6개 파장이 사용되었으며, 개발된 회귀식은 식 (2)와 같다.

$$\begin{aligned} \text{Moisture content}(\%) = & \\ & 14.975 - 19.262W_{1388} - 163.749W_{1300} + 81.093W_{1262} \\ & + 97.891W_{1174} + 35.703W_{1364} - 66.252W_{1166} \dots \dots (2) \end{aligned}$$

여기서, $W_{\lambda} = \text{dlog}(1/R(\lambda))$

1,100~1,400nm의 파장 영역에서 순수한 물의 근적외선 흡수 스펙트럼은 1,190nm이므로 식 (2)에서는 1,174nm가 수분에 의한 흡수 파장이며, 기타 다른 파장은 오차에 대한 보정효과를 주는 것으로 판단된다. 단립 현미의 함수율 측정용 모델로 분할간격 10nm로 1차 미분 스펙트럼을 이용한 다중회귀 모델(식 (2))로 선정하여 추청 샘플의 함수율을 예측한 결과와 실측치의 관계는 그림 1과 같다.

PLS 모델은 수학적 처리에 관계없이 전처리로서 다분산 보정을 하면 함수율의 측정성능이 우수할 것

으로 판단되었으며, 모델들의 검증 결과는 최소 결정계수가 0.988, 최대 검증부 오차가 0.225%로 나타났다.

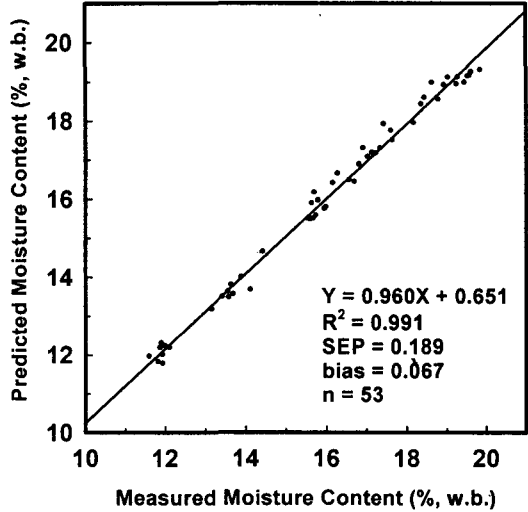


Fig. 1 Comparison of measured and predicted values of moisture contents of Chucheong using MLR model (Model conditions: 1st derivative, 6 wavelengths).

다중회귀 모델과 PLS 모델 개발에 이용된 1,100~1,500nm의 파장영역에서 순수한 물의 근적외선 흡수 스펙트럼은 1,190nm이나 혼합물의 수분에 의한 흡수파장은 알려진 것이 없으며, 이 영역은 C-H밴드의 2차 배음대이다. 그러나 이 파장영역이 함수율 예측에 유의한 파장영역으로 선정된 것은 단립 시료 스펙트럼의 고유한 특성으로 판단된다. 분말 및 산

Table 2 Validation results of MLR models for the moisture content of single kernel brown rices

Varieties	n	R ²	SEP	bias	SEP / mean (%)
Dongjin	52	0.987	0.148	-0.060	0.91
Ilpum	52	0.992	0.137	-0.026	0.83
Chucheong	53	0.991	0.189	0.007	1.18

* Model conditions : 1st derivative(gap = 4nm), Standard Normal Variate and Detrending

물 시료를 이용한 스펙트럼과 단립 시료를 이용한 스펙트럼을 비교하면 흡광도의 절대적인 크기뿐만 아니라 각 성분에 의한 빛의 흡수파장이 좌우로 이동(shift)되어 다른 위치에서 정점이 나타나는 것으로 판단되었다.

위에서 개발된 다중회귀 모델과 PLS 모델은 우리나라에서 생산되는 기타 단립종의 벼에 적용하여도 우수하게 함수율을 측정할 것으로 판단된다. 특히 미곡종합처리장에서 함수율을 측정할 때, 최대 허용 오차가 ±0.5%임을 감안하면 단립 현미의 함수율 측정용 다중회귀 모델 및 PLS 모델은 적용성이 아주 높은 것으로 판단되었다.

나. 현미의 단백질 함량 측정 모델 개발

단립 현미의 단백질 함량 예측을 위하여 다중회귀 모델과 PLS 모델을 개발하였다. 모델 개발에는 모두 309개(동진 101개, 일품 103개, 추청 105개)의 스펙트럼을 이용하였으며, 모델의 검증에는 동진 51개, 일품 52개, 추청 51개의 스펙트럼이 이용되었다.

단립 현미의 단백질 함량 예측용 다중회귀 모델은 1,100~2,000nm의 파장영역에서 분할간격 10nm로 2차 미분한 스펙트럼을 표준 정규화로 전처리 한 모델이 가장 우수한 예측 성능을 보여주었으며, 개발된 모델의 회귀식은 식 (3)과 같다.

$$\begin{aligned} \text{Protein content}(\%) = & 15.828 - 68.972W_{138} + 241.535W_{1256} - 196.404W_{1182} \\ & + 82.505W_{1350} - 74.769W_{1684} + 86.646W_{1196} \dots\dots \quad (3) \end{aligned}$$

여기서, $W_{\lambda} = d^2 \log(1/R(\lambda))$

단백질 함량 예측용 다중회귀 모델에 이용된 파장은 모두 C-H밴드의 1차 및 2차 배음대이다. Osborne 등(1986)에 의하면 산물 시료의 N-H밴드에 의한 흡수대는 1,400~1,600nm와 1,900~2,100nm으로 보고되고 있다. 쌀 분말 시료를 이용하여 단백질 함량 예측 모델을 개발한 Iwamoto 등(1986)은 스펙트럼을 1차 미분하여 1,298nm · 1,668nm · 1,766nm · 2,468

nm의 파장을 선정하였다. 식 (3)은 2차 미분 스펙트럼을 이용하여 개발된 모델이므로 Iwamoto 등의 결과와 일치하는 파장은 없으나 1,256nm와 1,684nm가 유사한 영역에 포함되어 있는 것으로 생각된다. 함수율 측정용 모델과 같이, 단립 시료의 스펙트럼의 피크는 좌우로 이동되어 나타나므로 분말 시료나 산물 시료의 모델에 사용된 스펙트럼과 단순 비교하기는 어렵다.

위의 결과와 같이, 단립 현미의 단백질 함량 측정용 다중회귀 모델은 1,100~2,000nm의 파장영역에서 분할간격 10nm로 2차 미분한 스펙트럼을 표준 정규화로 전처리 하면 모델의 최대 오차변위가 5.97% 이하로 나타나 모델의 안정성 및 적용성이 높은 것으로 판단되었다. 또한, 다중회귀 모델은 기타 단립종에 적용하여도 양호한 결과를 얻을 수 있을 것으로 판단된다.

단립 현미의 단백질 함량 예측용 PLS 모델을 개발하기 위하여 다중회귀 모델 개발에 사용하였던 방법과 동일한 방법의 수학적 처리와 전처리를 실시하였다. 예비 분석 결과, 단백질 함량 측정용 PLS 모델 개발에 유용한 파장영역은 1,100~1,500nm였다. 따라서, 이 결과를 참고하여 원시 스펙트럼, 1차 미분 스펙트럼 및 2차 미분 스펙트럼을 이용하여 모델을 개발하였으며, 모델 개발에는 동진, 일품, 추청의 단립 현미를 이용하였다.

수학적 처리별 모델에서는 1차 미분 스펙트럼을 이용한 모델이 가장 우수하였으며, 팩터의 수는 다분산 보정으로 전처리한 모델이 12로 나타났고 나머지는 팩터의 수가 13으로 나타났다. 결정계수는 표준 정규화로 전처리한 모델이 0.938로서 가장 높게 나타났으며, 교정부 오차도 표준 정규화로 전처리한 모델이 0.409%로서 가장 낮게 나타났다. 따라서, 단백질 함량 측정용 PLS 모델은 1차 미분 스펙트럼을 표준 정규화로 전처리한 모델을 선택하였으며, 이 모델을 이용하여 각 품종별로 검증한 결과는 표 3과 같다.

표 3에서와 같이 1,100~1,500nm의 파장을 이용하여 분할간격 4nm로 1차 미분하여 표준 정규화로 전처리한 PLS 모델은 동진, 일품, 추청 등 3개 품종의

Table 3 Validation results of PLS models for protein content of single kernel brown rices

Varieties	n	R ²	SEP ^a	bias	SEP / mean (%)
Dongjin	51	0.857	0.463	0.014	4.42
Ilpum	52	0.887	0.479	-0.151	4.55
Chucheong	51	0.837	0.412	-0.184	5.22

* Model conditions: 1st derivative(gap = 4nm), Standard Normal Variate and Detrending

검증결과가 다중회귀 모델 및 다른 PLS 모델보다 우수하였다. 표 3에서와 같이 개발된 PLS 모델은 최소 결정계수가 0.837, 최대 검증부 오차가 0.479%로 나타났으며, 오차변위도 5.22% 이내로서 예측 정밀도가 우수하였다. 그림 2는 개발된 PLS 모델로 일품의 단립 현미를 이용하여 단백질 함량을 측정된 값과 실측치의 관계를 나타낸다. 따라서, PLS 모델은 우리 나라에서 생산되는 다른 품종의 현미에도 적용성이 높은 것으로 판단되었다.

4. 요약 및 결론

본 연구는 분광분석법을 이용하여 단립 현미의 품질인자인 함수율 및 단백질 함량을 측정할 수 있는 모델을 개발하기 위하여 수행되었다. 시료의 스펙트럼은 400~2,500nm의 파장 영역에서 근적외선 분광분석기를 이용하여 측정하였다.

측정된 스펙트럼은 교정부와 검증부로 분리하였으며, 교정부는 모델 개발에, 검증부는 모델의 검증에 각각 사용되었다. 예측 모델은 다중 회귀분석법과 부분최소자승법(PLS)을 이용하여 개발하였다. 본 연구의 결과를 요약하면 다음과 같다.

1. 단립 현미의 함수율은 1,100~1,400nm영역의 스펙트럼을 이용한 다중회귀 모델과 1,100~1,500nm 영역의 스펙트럼을 이용한 PLS 모델에 의한 예측이 가장 우수하였다. 다중회귀 모델은 1,166nm · 1,174nm · 1,262nm · 1,300nm · 1,364nm · 1,388nm의 6개 파장을 사용하여 분할간격 10nm로 1차 미분한 스펙트럼을 표준 정규화로 전처리한 모델이 우수하였다. 모델 개발에 이용한 세 품종(동진, 추청, 일품)으로 검증한 결과, 검증부의 R²는 0.987이상, SEP는 0.189% 이하로 나타났다. PLS 모델은 수학적 처리에 관계없이 전처리로서 다분산 보정을 한 모델이 우수한 예측 성능을 보여주었다.

2. 1,100~2,000nm의 파장영역에서 개발된 단백질 함량 예측용 다중회귀 모델은 분할간격 10nm로 2차 미분한 모델이 우수한 결과를 보여 주었다. 1,100~1,500nm의 파장영역을 이용하여 다분산 보정을 한 PLS 모델은 수학적 처리에 관계없이 예측 결과가

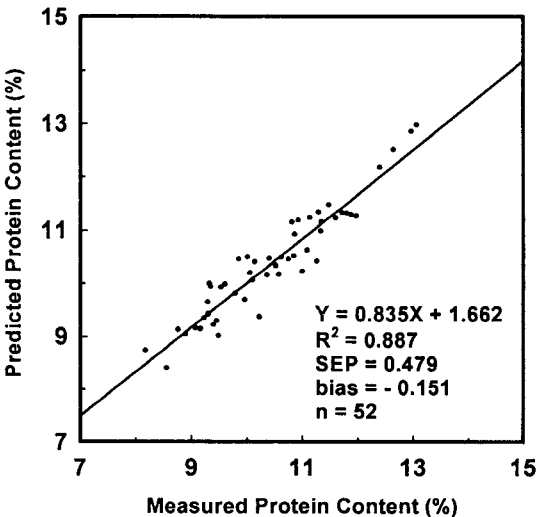


Fig. 2 Comparison of measured and predicted values of protein contents of Ilpum by PLS model(Model conditions: 1st derivative, 1,100~1,500nm, 13 factors).

우수하였다. 특히, 모델 개발에 이용한 세 품종(동진, 일품, 추청)으로 검증한 결과, PLS 모델은 검증부의 R²가 0.837 이상, SEP가 0.479% 이하로 나타났다.

3. 따라서, 본 연구에서 개발된 함수율 및 단백질 측정용 다중회귀 모델 및 PLS 모델은 검증부의 검증 결과가 우수하였으며, 우리 나라에서 생산되는 다른 품종의 현미에도 적용성이 높은 것으로 판단되었다.

참 고 문 헌

1. 문성식, 이경희, 조래광. 1994. 한국산 쌀의 품질 측정에 있어서 근적외분광분석법의 응용. 한국식품과학회지 26(6):718-725.
2. 한충수, M. Y. Natsuga. 1996. 근적외선 분광분석계를 이용한 국내산 쌀의 성분예측모델 개발 (I) - 현미와 백미의 성분예측모델 -. 한국농업기계학회지 21(2):198-210.
3. 岩尾俊男. 1987. 農産物の測定と計測方法の基準化に関する総合的研究(3). 農業機械學會.
4. Batten, G. D., A. B. Blackeney, M. G. Holmes, R. J. Henry, A. C. McCaffery, P. E. Bacon, and D. P. Heenan. 1991. Rapid Determination of Shoot Nitrogen Status in Rice Using Near Infrared Reflectance Spectroscopy. J. Sci. Food Agric. 54 (1):191-197.
5. Delwiche, S. R. 1995. Single Wheat Kernel Analysis by Near-Infrared Transmittance: Protein Content. Cereal Chemistry 72(1):11-16.
6. Delwiche, S. R., K. S. Mckenzie, and B. D. Webb. 1996. Quality Characteristics in Rice by Near-Infrared Reflectance Analysis of Whole-Grain Milled Samples. Cereal Chemistry 73(2):257-263.
7. Finney, E. E., and K. H. Norris. 1978. Determination of Moisture in Corn Kernels by Near-Infrared Transmittance Measurements. Transactions of the ASAE 21(3):581-584.
8. Hart, J. R., K. H. Norris, and C. Golumbic. 1962. Determination of the Moisture Content of Seeds by Near-Infrared Spectrophotometry of their Methanol Extracts. Cereal Chemistry 39(2):94-99.
9. Iwamoto, M., T. Suzuki, N. kongseeree, J. Uozumi, and O. Inatsu. 1986. Analysis of Protein and Amino Acid Contents in Rice Flour by Near-Infrared Spectroscopy. 日本食品工業學會誌. 33 (12):848-853.
10. Li, W. S., and J. T. Shaw. 1995. Determination of Chemical Compositions of Rough Rice by a Visible-Near-Infrared Spectroscopy. Food Processing Automation IV. Proceedings of the FPAC IV Conference. p. 288-302.
11. Osborne, B. G., and T. Fearn. 1986. Near Infrared Spectroscopy in Food Analysis. John Wiley & Sons, INC., New York.
12. Williams, P. C., K. H. Norris, C. W. Gehrke, and K. Bernstein. 1983. Comparison of Near-Infrared Methods for Measuring Protein and Moisture in Wheat. Cereal Foods World 28(2):149-152.