

근적외선을 이용한 사과의 당도예측 (II)[†]

— 부분최소제곱 및 인공신경회로망 모델 —

Predicting the Soluble Solids of Apples by Near Infrared Spectroscopy (II)

— PLS and ANN Models —

이 강 진*

W. R. Hruschka**

J. A. Abbott**

노 상 하***

B. S. Park**

정회원

정회원

K. J. Lee

S. H. Noh

ABSTRACT

The PLS(Partial Least Square) and ANN(Artificial Neural Network) were introduced to develop the soluble solids content prediction model of apples which is followed by making a subsequent selection of photosensor. For the optimal PLS model, number of factors needed for spectrum analysis were increased until the convergence of prediction residual error sum of squares. Analysis has shown that even part of the overall wavelength with no pretreatment may turn out better performing. The best PLS model was found in the 800 to 1,100nm wavelength region without pretreatment of second derivation, having $R^2=0.9236$, bias=-0.0198bx, SEP=0.2527bx for unknown samples. On the other hand, for the ANN model the second derivation led to higher performance. On partial range of 800 to 1,100nm wavelength region, prediction model with second derivation for unknown samples reached $R^2=0.9177$, SEP=0.2903bx in contrast to $R^2=0.7507$, SEP=0.4622bx without pretreatment.

주요용어(Key Words): 가용성고형물(soluble solids content), 부분최소제곱(partial least square), 인공신경회로망(artificial neural network), 포토센서(photosensor)

1. 서 론

사과의 당도를 비파괴적으로 측정하기 위하여 근적외선 스펙트럼을 측정하고 5개 및 7개의 유의파장

을 이용한 다중회귀모델을 개발하여 당도판정장치 개발에 필요한 기초자료로 제시한 바 있다(근적외선을 이용한 사과의 당도예측(I), 이하 본보 I). 본 연구에서는 당도판정장치를 개발함에 있어서

[†] 이 연구는 농촌진흥청 농업기계화연구소와 미국 농무성 농업연구청(USDA, ARS) 사이에 수행되고 있는 한미 국제공동연구과제인 "비파괴 과실품질판정기술 개발(Non-destructive evaluation in fruits)"의 일환으로 수행된 것임.

* 농촌진흥청 농업기계화연구소

** U. S. A., USDA, ARS, NRI, Instrumentation & Sensing Laboratory

*** 서울대학교 생물자원공학부 농업기계전공

최근에 다양하고 저렴하게 보급되기 시작한 광다이오드레이저를 적용할 경우에 더 많은 파장을 이용할 수 있어서 파장 선택에 제한이 따르는 필터와 광다이오드를 이용할 경우보다 모델 적용에 대한 재현성이 높은 반면, 구조를 간단하게 할 수 있다. 따라서, 다중회귀분석(Multiple Linear Regression)에 비해 보다 많은 파장을 모델개발에 이용할 수 있게 하기 위하여 부분최소제곱 회귀법(Partial Least Square Regression, 이하 PLS)과 인공신경회로망 기법(Artificial Neural Network, 이하 ANN)을 이용하여 당도판정에 유의한 파장을 구명하고 모델을 개발하고자 하였다.

본 연구의 구체적 목적은 다음과 같다.

1. 근적외선 분광특성을 이용하여 사과의 당도를 비파괴적으로 측정할 수 있는 PLS 및 ANN 당도 예측 모델을 개발한다.
2. 개발된 모델을 미지시료에 대해 검증한다.
3. 상기의 두 가지 기법으로 개발된 모델들의 성능을 비교하여 이미 제시된 다중회귀모델과 더불어 사과의 당도판정장치 개발에 필요한 광센서의 선정 기준을 제시한다.

2. 재료 및 방법

본 연구에서는 본보 I 과 동일한 시료, 실험장치 및 실험결과를 토대로 하였다. 따라서, 1996년 9월에 Philadelphia에서 수확된 사과(gala)의 근적외선 스펙트럼, 당도 및 기타 물성을 분석자료로 하였다.

근적외선 스펙트럼은 분광광도계(Model 6500, NIRSystems, USA)를 사용하여 400~2,498nm 범위에서 2nm 간격으로 측정하였으나, 광섬유 모듈의 특성과 잡음 등을 고려하여 분석시에는 1,800nm 이상의 파장은 제외하였다. 실험에 사용된 근적외선 스펙트럼 측정장치는 본보 I 의 그림 1 및 2에서 나타난 바와 같다. 한편, 당도는 굴절당도계(PR-1, ATAGO, Japan)를 사용하여 측정하였다.

빛의 반사는 사과의 적도부위에서 이루어졌고, 사과 1개당 2 부위씩 총 400개의 시료에 대해 800개의 데이터를 얻었다. 당도 판정 모델 개발을 위해서는 한 쪽 부위에서 측정된 400개의 데이터를 사용하였고, 검증을 위한 미지시료로는 반대편에서 측정된 200개의 데이터를 사용하였다.

최적의 파장을 선정하고 그에 따른 당도예측모델을 개발하기 위하여 PLS 및 ANN 기법을 적용하였으며 각각의 분석기법으로 분석할 때의 파장대역 및 전처리 구분은 표 1과 같다.

즉, 파장대역 및 전처리 여부에 따라 4가지 경우로 나누어 각각의 당도예측모델을 개발하였다. 파장대역별 두 경우로 나눈 것은 일반적으로 당도와 관련이 없는 것으로 알려진 가시광선 영역(800nm 이하)을 제외하고, 기기의 특성상 1,100nm 이하에서 사용되는 광섬유와 1,100nm 이상에서 사용되는 광섬유로 구분되기 때문에 모델을 개발할 때 이러한 기기의 특성을 고려한 것이다.

Case II와 Case IV에서 반사스펙트럼을 2차미분하여 분석에 사용한 이유는 스펙트럼 측정시 기준선

Table 1 Selected wavelength and pretreatment for NIR analysis

Case	Wavelength range	Input data	No. of wavelength	Analysis interval
I	400~1,800nm	$\log(1/R)$	176	8nm
II		$d^2\log(1/R)_{\Delta\lambda=30nm}$	176	
III	800~1,100nm	$\log(1/R)$	38	
IV		$d^2\log(1/R)_{\Delta\lambda=30nm}$	38	

* d^2 : 2nd derivative, R : reflectance

이동에 의한 기계적인 오차를 줄이고, 두 가지 이상의 성분이 중첩되어 있을 경우 이를 각각의 성분으로 분리하는 효과가 있기 때문이다. 이 때 미분간격 ($\Delta \lambda$)은 30nm였고, 분석에 사용된 모든 파장은 8nm 간격으로 선정하여 입력데이터로 사용하였다.

PLS 회귀법을 이용한 당도예측모델은 Galactic사 (U.S.A.)의 Grams/32 소프트웨어를, 인공신경회로망을 이용한 당도예측모델은 Neural Ware사(U.S.A.)의 NeuralWorks Professional II/PLUS 소프트웨어를 이용하여 각각 분석하였다.

가. PLS 모델의 조건

PLS 회귀법은 스펙트럼 행렬을 고유벡터 집합과 스코어로 분해하는데 이 때 농도정보를 이용하므로써 고농도의 스펙트럼은 저농도의 스펙트럼보다 큰 가중치를 가지게 된다.

스펙트럼 분석에 필요한 요인수를 증가시키면서 PRESS(Prediction Residual Error Sum of Squares)의 변화를 관찰하여 그 값이 수렴될 때의 요인수를 최적의 요인수로 보고, 이를 이용한 모델을 미지시료의 예측에 적용하였다. 또한 시료에 따라 프로브의 접촉면적이 달라질 수 있으므로 시료간의 분산효과를 줄이기 위하여 모든 스펙트럼은 다분산보정 (Multiplicative Scatter Correction, MSC)하였다.

PRESS는 식 (1)로 정의된다.

$$PRESS = \sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2 \dots\dots\dots (1)$$

여기서, n : 시료의 수

y : PLS 회귀분석에 의한 예측값(bx)

\bar{y} : 실험에 의한 측정값(bx)

나. ANN모델의 조건

스펙트럼의 정량 분석에 있어서 인공신경회로망은 다양한 성분에 의한 흡광도의 중첩이 발생하여 분석이 어렵거나 무기물 등 직접적으로 흡광도에 기인하지 않는 성분의 측정에 유용하다. 또한 광다이오드 어레이센서와 같은 연속적인 파장의 흡광도를 동시에 측정할 수 있는 시스템에 응용할 수 있는 장점이 있다.

본 연구에서는 일반화된 역전파 알고리즘을 사용하여 제곱오차평균(Root Mean Square Error, RMSE)이 수렴될 때까지 학습을 수행하였다. 신경회로망의 구조는 하나의 은닉층을 두었으며, 입력층은 흡광도, 출력층은 당도로 하였다. 학습에 사용된 전달함수는 시그모이드 함수 ($f(x) = \frac{1}{1+e^{-x}}$)였으며, 학습률 (learning rate)과 모우멘텀(momentum)은 각각 0.5, 0.4로 하였다. 인공신경회로망을 이용한 모델의 개발에서 사용된 조건은 표 2와 같다.

3. 결과 및 고찰

모델개발에 사용된 시료 400개와 검증에 사용된 시료 200개의 물성(당도, 무게, 경도)은 본보 I의 표 2를 참고하기 바란다.

Table 2 Conditions of ANN modeling

Case	Wavelength range	Input layer		Hidden layer	Output layer	Transfer function
		data	no. of nodes			
I	400~1,800nm	log(1/R)	177	13	1	Sigmoidal activation function $f(x) = \frac{1}{1 + e^{-x}}$
II		d ² log(1/R)	177	7		
III	800~1,100nm	log(1/R)	39	13		
IV		d ² log(1/R)	39	7		

가. Case I

400nm~1,800nm의 파장대역에서 전 파장에 대한 흡광도를 전처리 없이 8nm 간격으로 추출한 총 176개의 파장에 대한 흡광도를 독립변수로 하여 PLS 및 ANN 당도예측모델을 개발하였다.

(1) PLS 모델

스펙트럼 분석에 필요한 요인수를 증가시키면서 동시에 PRESS의 변화를 관찰하여 그 값이 수렴될 때의 요인수를 최적의 요인수로 선정하여 모델을 개발한 다음 미지시료를 예측하였다. Case I의 경우, 최적의 요인수는 그림 1에서 보는 바와 같이 20개로 하였을 때 가장 양호한 결과를 얻을 수 있었다.

여기서, 총 20개의 요인을 적용하여 PLS 모델을 개발한 결과 그림 2(a)에서 보는 바와 같이 결정계수가 0.861, SEC는 0.346bx로 나타났으며, 개발된 모델을 이용하여 미지시료의 당도를 예측한 결과는 그림 2(b)에서 보는 바와 같이 결정계수는 0.886, bias는 -0.017bx, SEP는 0.310bx로 나타났다.

(2) ANN 모델

입력층의 유니트는 총 176개의 흡수스펙트럼과

옵셋을 보정하기 위한 bias 노드로 하였으며, 은닉층의 유니트는 12개의 옵셋보정용 bias 노드 1개, 출력층은 1개(당도)로 하여 RMSE가 0.0420에서 수렴되는 3,400,000번의 학습결과, 결정계수가 0.82이고 SEC가 0.56bx인 ANN 모델을 개발하였다. 이 ANN 모델을 이용하여 미지시료를 예측한 결과 그림 3(b)에서 보는 바와 같이 결정계수 0.824, bias -0.035bx, SEP 0.491bx로 정확도가 낮았다.

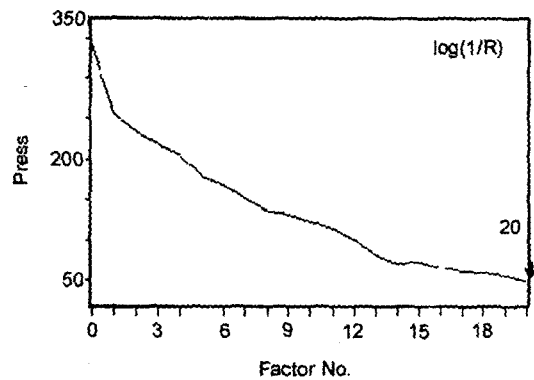
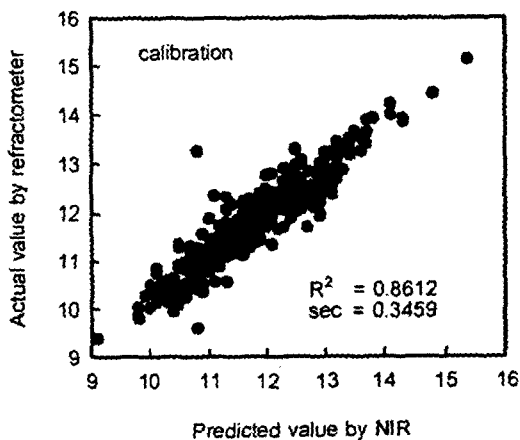
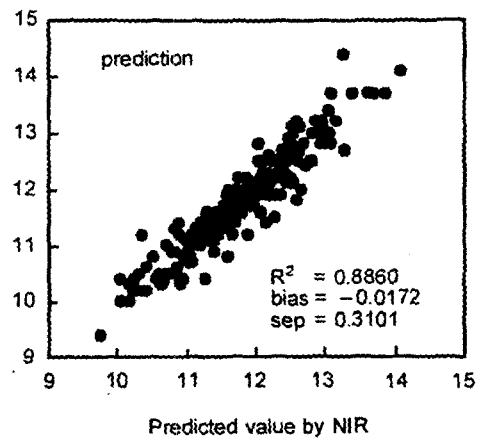


Fig. 1 Determination of optimal no. of factor in PLS regression between NIR spectrum and soluble solids content (case I).



(a) calibration



(b) prediction

Fig. 2 Calibration and prediction using PLS model in the 400 to 1,800nm wavelength region.

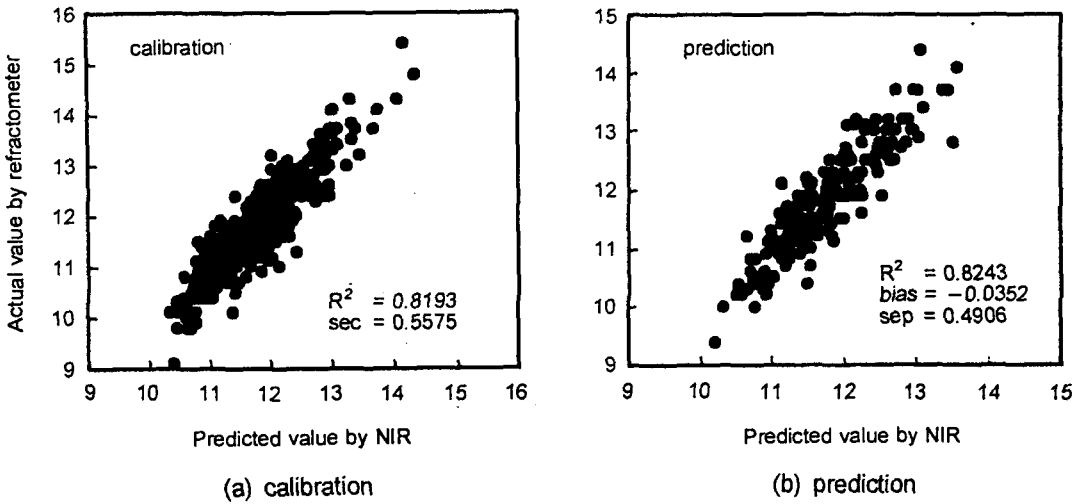


Fig. 3 Calibration and prediction using ANN model in the 400 to 1,800nm wavelength region.

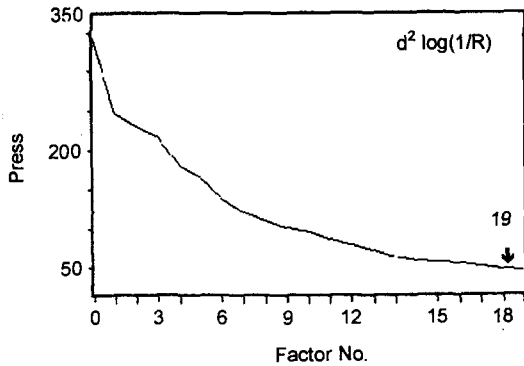


Fig. 4 Determination of optimal no. of factor in PLS regression between NIR spectrum and soluble solids content (case II).

나. Case II

400nm~1,800nm의 파장대역에서 전파장에 대한 흡광도를 미분간격 30nm로 2차 미분하고, 이를 다시 8nm 간격으로 추출한 총 176개의 파장에 대한 2차 미분의 흡광도를 독립변수로 하고, 당도를 종속변수로 한 경우의 PLS 및 ANN 당도예측모델이다.

(1) PLS 모델

스펙트럼 분석에 필요한 요인수를 증가시키면서 PRESS의 변화를 관찰하여 그 값이 수렴될 때의 요인수를 최적의 요인수로 선정하여 모델을 개발한 다음 미지시료의 당도를 예측하였다. Case II의 경우, 최적의 요인수는 그림 4에서 보는 바와 같이 19개로 하였을 때 가장 양호한 PLS 모델을 개발할 수 있었다. 그러나, 흡광도를 2차 미분처리해서 입력데이터로 할 경우 MLR 모델이나 ANN 모델에서는 당도모델 개발에 필요한 파장수가 줄어들거나, 결정계수의 값과 SEC가 아주 양호해지지만 PLS 모델에서는 최적요인수를 줄일 수는 없었다.

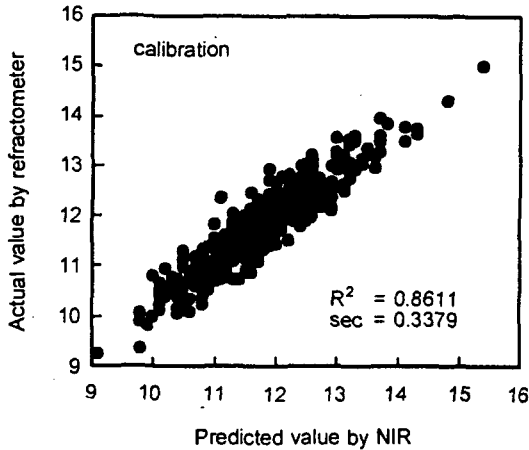
총 176개의 파장 중에서 19개의 요인을 선택하여 PLS 모델을 개발한 결과, 그림 5(a)에서 보는 바와 같이 결정계수가 0.861이고 SEC가 0.338bx로 나타났으며, 이 모델을 이용하여 미지시료의 당도를 예측한 결과는 그림 5(b)에서 보는 바와 같이 결정계수는 0.834, bias는 -0.021bx, SEP는 0.373bx로 나타났다.

(1) ANN 모델

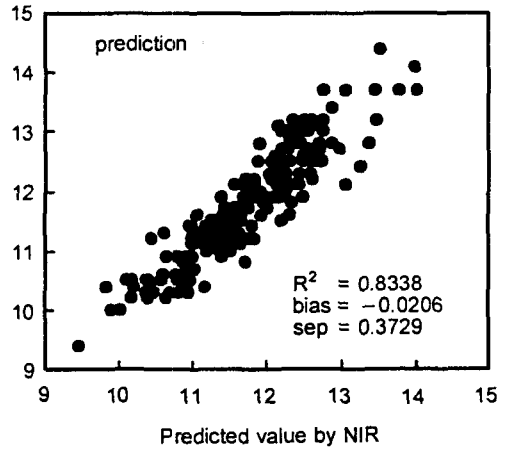
입력층의 유니트는 총 176개의 흡수스펙트럼과

오프셋을 보정하기 위한 Bias 노드로 하였으며, 은닉층의 유니트는 12개와 오프셋보정용 Bias 노드 1개, 출력층은 1개(당도)로 한 신경회로망을 구성하여 학습을 수행하였으며, 그 결과 50,000번의 학습 후 RMSE가 0.0253에서 수렴되어 그림 6(a)과 같이 결정계수가

0.912, SEC 0.369bx인 ANN 모델을 개발할 수 있었다. 개발된 모델을 이용하여 미지시료의 당도를 예측했을 때의 결정계수는 0.887, bias -0.027 bx, SEP은 0.309bx로 그림 6(b)와 같이 나타났다.

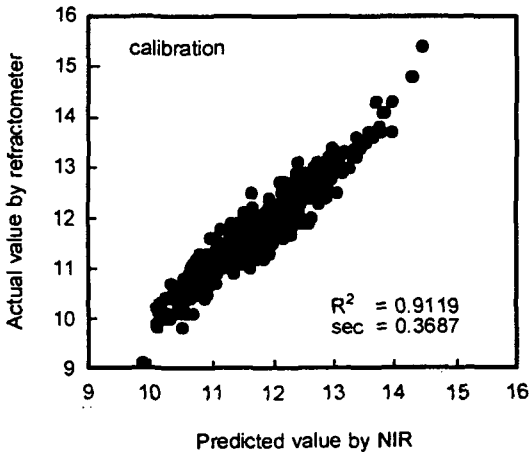


(a) calibration

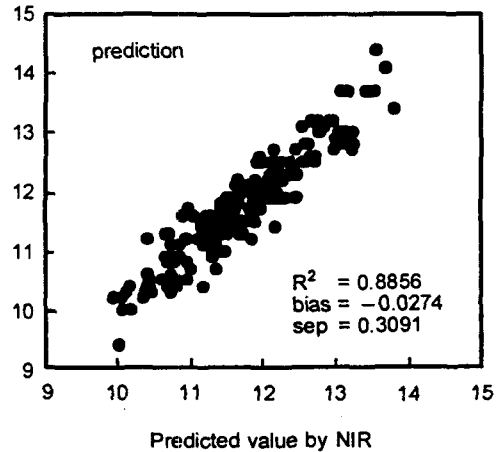


(b) prediction

Fig. 5 Calibration and prediction using 2nd derivative PLS model in the 400 to 1,800nm wavelength region.



(a) calibration



(b) prediction

Fig. 6 Calibration and prediction using 2nd derivative ANN model in the 400 to 1,800nm wavelength region.

다. Case III

800nm~1,100nm의 파장대역에서 전파장에 대한 흡광도를 8nm 간격으로 추출한 총 38개의 파장에 대한 흡광도를 독립변수로 PLS 및 ANN 모델을 개발한 경우이다.

(1) PLS 모델

스펙트럼 분석에 필요한 요인수를 증가시키면서 동시에 PRESS의 변화를 관찰하여 그 값이 수렴될 때의 요인수를 최적의 요인수로 선정하여 모델을 개발한 다음, 개발된 모델을 이용하여 미지시료를 예측하였다. Case III의 경우, 최적의 요인수는 그림 7에서 보는 바와 같이 8개로 하였을 때 가장 양호한 결과를 얻을 수 있었다.

여기서, 총 8개의 요인을 적용하여 PLS 모델을 개발한 결과, 그림 8(a)과 같이 결정계수는 0.938, SEC는 0.230bx로 아주 우수하였으며, 이 모델을 이용하여 미지시료의 당도를 예측한 결과 그림 8(b)에서 보는 바와 같이 결정계수가 0.924, bias는 -0.02bx, SEP는 0.253bx로 나타났는데, 이는 매우 우수한 결과로서 800nm~1,100nm의 일부 파장대역만을 전처

리를 하지 않고 이용하더라도 사과와 당도를 잘 예측할 수 있음을 의미한다.

(2) ANN 모델

입력층의 유니트는 총 38개의 흡수스펙트럼과 음셋을 보정하기 위한 bias 노드로 구성하였으며, 은닉층의 유니트는 bias 노드를 포함한 7개, 출력층은

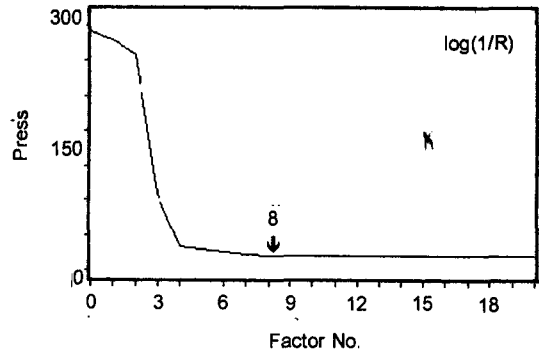
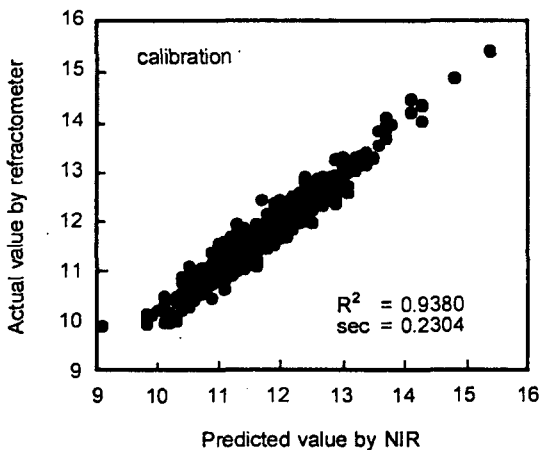
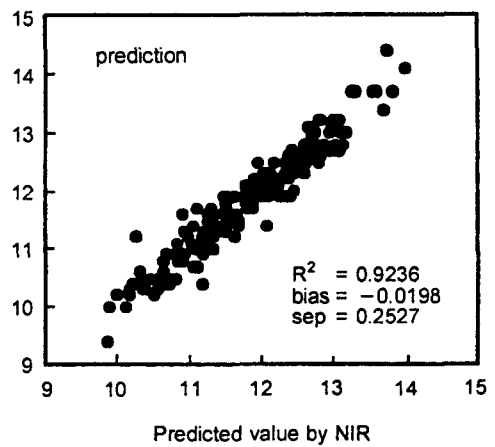


Fig. 7 Determination of optimal no. of factor in PLS regression between NIR spectrum and soluble solids content (case III).



(a) calibration



(b) prediction

Fig. 8 Calibration and prediction using 2nd derivative PLS model in the 800 to 1,100nm wavelength region.

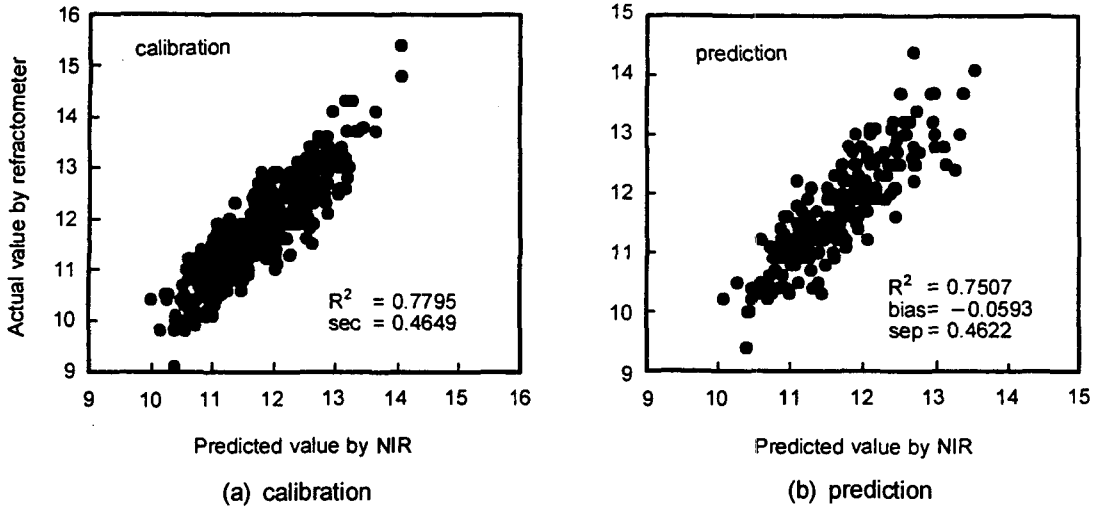


Fig. 9 Calibration and prediction using ANN model in the 800 to 1,100nm wavelength region.

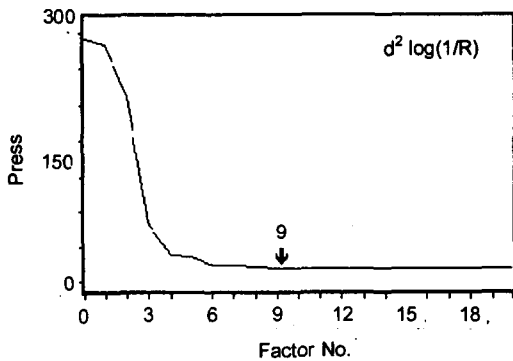


Fig. 10 Determination of optimal no. of factor in PLS regression between NIR spectrum and soluble solids content(case IV).

1개(당도)로 한 인공신경회로망을 구성하여 RMSE가 수렴할 때까지 학습을 수행하였다. 그 결과 1,000,000번의 학습에서 RMSE가 0.0390으로 수렴하여 그림 9(a)와 같이 결정계수가 0.78, SEC는 0.465bx인 ANN 모델을 개발할 수 있었으나, 모든 범위의 파장을 입력층으로 한 Case I, Case II에서 개발된 ANN 모델보다 정확도가 떨어졌으며, 또한 이

모델을 이용하여 미지시료를 예측한 결과에서도 그림 9(b)에서 보는 바와 같이 결정계수가 0.751, bias -0.059bx, SEP 0.462bx로서 정확도가 낮아 사과와 당도를 예측하기에는 미흡한 것으로 판단되었다.

라. Case IV

800nm~1,100nm의 파장대역에서 전파장에 대한 흡광도를 간격 30nm로 2차 미분하고, 이를 다시 8nm 간격으로 추출한 총 38개의 파장에 대해 2차 미분의 흡광도를 독립변수로 하고, 당도를 종속변수로 한 경우의 PLS 및 ANN 당도예측모델이다.

(1) PLS 모델

스펙트럼 분석에 필요한 요인수를 증가시키면서 동시에 PRESS의 변화를 관찰하여 그 값이 수렴될 때의 요인수를 최적의 요인수로 선정하여 모델을 개발한 다음, 미지시료의 당도를 예측하였다. Case IV의 경우, 최적의 요인수는 그림 10에서 보는 바와 같이 9개로 하였을 때 가장 양호한 결과를 얻을 수 있었다.

이 결과를 이용하여 사과와 당도예측을 위한 PLS 모델을 개발한 결과 그림 11(a)에서 보는 바와 같이

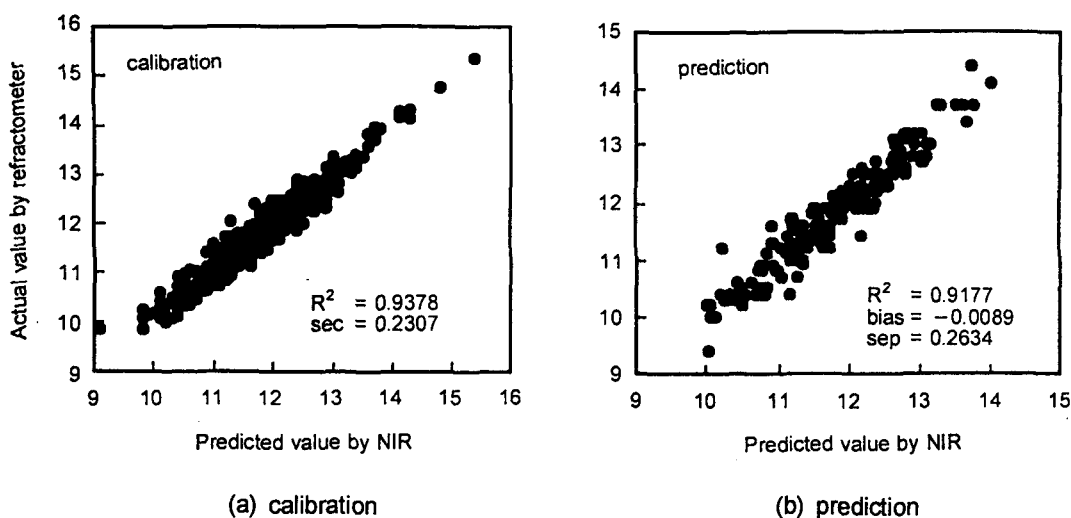


Fig. 11 Calibration and prediction using 2nd derivative PLS model in the 800 to 1,800nm wavelength region.

결정계수가 0.938이고, SEC가 0.231bx로 나타났으며, 개발된 모델을 이용하여 미지시료의 당도를 예측한 결과는 그림 11(b)에서와 같이 결정계수가 0.918, bias는 $-0.009bx$, SEP는 0.263bx로 나타났다.

PLS 회귀분석의 결과, 400nm부터 1,800nm까지의 전파장을 이용하여 분석한 것보다 파장의 일부를 선택하여 분석한 경우가 훨씬 결과가 양호하였으며, 2차미분의 파장전처리를 한 경우와 파장 전처리를 하지 않은 경우를 비교해 볼 때, 대체적으로 파장 전처리를 하지 않은 경우가 더 양호한 결과를 보였다.

하나의 2차미분 스펙트럼을 얻기 위해서는 좌우의 다른 스펙트럼을 이용해야 하므로, PLS를 이용한 모델의 개발에 있어서는 원래의 스펙트럼을 전처리 없이 이용하는 것이 나은 결과를 얻을 수 있으리라 판단되었다.

(2) ANN 모델

입력층의 유니트는 총 38개의 흡수스펙트럼과 음셋을 보정하기 위한 bias 노드로 구성하였으며, 은닉층의 유니트는 bias 노드를 포함한 7개, 출력층은 1개(당도)로 한 인공신경회로망을 구성하여 48,000번의 학습을 수행한 결과 RMSE가 0.0277에서 수렴되

어 그림 12(a)와 같이 결정계수가 0.935, SEC는 0.235bx인 ANN 모델을 개발할 수 있었다. 개발된 이 모델은 2차 미분의 전처리를 하지 않은 파장의 흡광도를 입력층으로 한 Case I, Case III에서의 ANN 모델보다 정확도가 급격히 상승하였으며, 또한 이 모델을 이용하여 미지시료를 예측한 결과에서도 그림 12(b)에서 보는 바와 같이 결정계수 0.899, bias $-0.027bx$, SEP 0.290bx로서 정확도가 크게 향상되었다. 인공신경망을 이용한 당도예측 모델의 개발에 있어 입력층인 흡수스펙트럼을 전처리하지 않은 경우보다 2차미분을 한 경우가 모두 우수한 결과를 보였는데, 이는 다른 연구결과에서도 나타나는 동일한 결과였다.

마. 각 모델의 결과 비교

분석에 필요한 파장대역과 전처리를 달리한 4가지의 경우에 있어서 부분최소제곱회귀법과 인공신경망을 이용하여 당도예측모델을 개발한 결과를 정리하면 표 3과 같다. 4가지 경우에서 PLS 모델과 ANN 모델은 전파장 대역에서 보다 800nm에서 1,100nm까지의 일부 파장대역을 입력으로 한 case

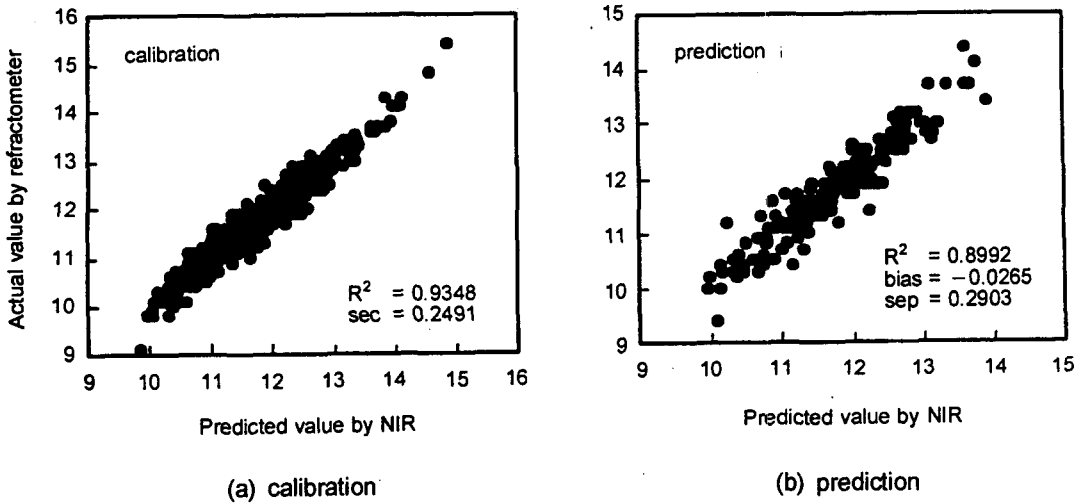


Fig. 12 Calibration and prediction using 2nd derivative ANN model in the 800 to 1,100nm wavelength region.

Table 3 Comparison of PLS and ANN models

Case			I	II	III	IV
Wavelength range			400~1,800nm		800~1,100nm	
Pretreatment			log(1/R)	d ² log(1/R)	log(1/R)	d ² log(1/R)
No of input data			177	177	39	39
Conditions of model	PLS	No of optimal factor	20	19	8	9
	ANN	Output layer	1	1	1	1
		Hidden layer	13	13	7	7
Input layer		177	177	39	39	
Calibrations model	R ²	PLS	0.8612	0.8611	0.9380	0.9378
		ANN	0.8193	0.9119	0.7795	0.9348
	SEC(bx)	PLS	0.3459	0.3379	0.2304	0.2307
		ANN	0.5575	0.3687	0.4649	0.2491
Prediction model	R ²	PLS	0.8860	0.8338	0.9236	0.9177
		ANN	0.8243	0.8856	0.7507	0.8992
	bias(bs)	PLS	0.0172	-0.0206	-0.0198	-0.0089
		ANN	-0.0352	-0.0274	-0.0593	-0.0265
	SEP(bx)	PLS	0.3101	0.3729	0.2527	0.2634
		ANN	0.4906	0.3091	0.4622	0.2903

III, case IV의 모델개발 결과가 미지시료에 대한 예측결과에서도 SEP가 0.3bx 이하로서 가장 양호하였다.

각각의 경우에 있어서 가장 우수한 예측결과를 나타낸 모델은 모델개발시와 마찬가지로 800nm에서 1,100nm까지의 일부 파장대역을 입력으로 한 case III, case IV에서 개발된 모델로서 PLS 모델의 경우 미지 시료에 대한 예측결과 SEP가 0.2527bx, 0.2634 bx로 나타나 예측성능이 아주 우수함을 보여주었다. 예측에 있어서 ANN 모델보다는 PLS 모델이 약간 나은 결과를 나타냈으며, 그 중에서도 case III의 PLS 모델은 적정 요인수도 8개로서 적으며 파장 전처리도 필요하지 않은 경우로서 가장 우수한 성능을 나타냈다.

모든 경우에 있어서 ANN 모델은 2차미분 전처리 한 경우가 미분처리를 하지 않은 경우보다 우수한 결과를 보였는데 이는 다른 연구자들의 결과에서도 나타나는 동일한 결과였다.

ANN 모델과 PLS 모델은 특성상 어느 일정 구간의 파장대역에 대한 시료의 흡광도를 측정할 수 있도록 개발된 모델로서, 위의 분석 결과로 볼 때 800nm에서 1,100nm의 파장대역에서 감도가 우수한 실리콘 광다이오드어레이(Si photodiode-array)를 이용하여 당도를 판정할 수 있는 시스템을 제작할 경우보다 저렴한 시스템을 구성할 수 있으리라 판단된다.

4. 요약 및 결론

사과의 비파괴 당도판정장치 개발에 필요한 광센서를 선정하기 위하여 부분 최소제곱회귀법(PLS)과 인공신경망기법(ANN)을 이용하여 당도예측 모델을 개발하였으며, 그 결과를 요약하면 다음과 같다.

1) 부분 최소제곱회귀법을 이용한 당도예측 모델 개발은 스펙트럼 분석에 필요한 요인수를 증가시키면서 동시에 PRESS의 변화를 관찰하여 그 값이 수렴될 때의 요인수를 최적의 요인수로 선정하여 PLS

모델을 개발한 다음, 개발된 모델을 이용하여 미지 시료를 예측하였다. 분석결과, 전체 파장보다는 파장의 일부를 선택하여 전처리를 하지 않아도 모델의 당도예측 정확도를 향상시킬 수 있음이 판명되었으며, 800~1,100nm 범위의 파장대역과 2차미분 전처리를 하지 않고 개발된 PLS 모델을 이용하여 미지 시료의 당도를 예측했을 때 결정계수는 0.9236, 이 때의 bias와 SEP는 각각 -0.0198bx와 0.2527bx로서 개발된 모델 중 가장 우수한 결과를 나타내었다.

2) 신경회로망을 이용한 사과 의 당도예측 모델개발은 2차미분 전처리를 해야만 정확도를 향상시킬 수 있을 것으로 판단되었다. 800에서 1,100nm까지 범위의 일부 파장대역에서 전처리를 하지 않은 모델로 미지 시료의 당도를 예측했을 때 결정계수와 SEP는 각각 0.7507, 0.4622bx로 나타났지만, 2차미분 데이터를 이용할 경우 결정계수와 SEP는 각각 0.9177, 0.2903bx로서 정확도가 매우 향상되는 결과를 나타내어 인공신경망에 의한 스펙트럼분석에는 2차미분 전처리를 하는 것이 좋을 것으로 판단되었다.

3) 본보 I에서 개발된 다중회귀모델을 이용한 당도판정장치를 구성하기 위해서는 분광 및 광검출부에 필터와 광다이오드가 각각 7개씩 필요하므로 구조는 다소 복잡하지만 장치의 가격이 저렴하고 2차미분 전처리를 하지 않은 데이터를 그대로 이용할 수 있으며, 2차미분 전처리를 하지 않은 데이터를 이용한 PLS 모델을 이용할 경우 다중회귀모델을 이용하는 장치에 비해 비싸지만 800nm에서 1,100nm까지의 파장대역에서 감도가 좋은 광다이오드어레이를 이용할 수 있으므로 장치의 구조가 간단해지고 재현성과 정밀도를 향상시킬 수 있을 것으로 판단되었다.

참 고 문 헌

1. 김형욱. 1995. 근적외선 분광분석법에 의한 과실의 비파괴 당도 측정. 서울대학교 석사학위논문.

2. 노상하, 김우기, 이종환. 1997. 분광반사특성을 이용한 주요 과실의 비파괴 당·산도 측정. 한국농업기계학회지 22(2):247-255.
3. 한충수, 연광선, 藥科 二郎. 1998. 근적외선 분석계를 이용한 국내산 쌀의 성분예측모델개발(II) - 생벼를 이용한 현미·백미의 단백질 함량과 현미수율 예측 -. 한국농업기계학회지 23(3):253-258.
4. 河野澄夫ら. 1989. 近赤外分光分析法による温州ミカンの糖度, 酸度の非破壊計測. 園藝學會誌 58 (別 2):604-605.
5. 天間毅ら. 1990. 近赤外分光法によるリンゴ糖度の測定. 第6回 非破壊計測シンポジウム. 98-102.
6. David, C. S. 1992. Near Infrared Analysis of Soluble Solids in Peaches. ASAE paper No. 92-7056.
7. Kawano, S., H. Watanabe, and M. Iwamoto. 1992. Determination of sugar content in intact peaches by near infrared spectroscopy with fiber optics in interactance mode. J. Jpn. Soc. Hort. Sci. 61(2):445-451.