

## 근적외선 스펙트럼을 이용한 고춧가루의 캡사이신 함량 예측 모델 개발 - 입자의 영향

모창연 · 강석원\* · 이강진 · 임종국 · 조병관<sup>1</sup> · 이현동  
농촌진흥청 국립농업과학원 농업공학부, <sup>1</sup>충남대학교 바이오시스템기계공학부

### Development of Prediction Model for Capsaicinoids Content in Red-Pepper Powder Using Near-Infrared Spectroscopy - Particle Size Effect

Changyeun Mo, Sukwon Kang\*, Kangjin Lee, Jong-Guk Lim,  
Byoung-Kwan Cho<sup>1</sup>, and Hyun-Dong Lee

National Academy of Agricultural Science, RDA

<sup>1</sup>Department of Biosystems Machinery Engineering, Chungnam National University

#### Abstract

In this research, the near-infrared absorption from 1,100-2,300 nm was used to measure the content of capsaicinoids in the red-pepper powder by using the Acousto-optic tunable filters (AOTF) spectrometer with sample plate and sample rotating unit. Non-spicy red-pepper samples from one location (Younggwang-gun, Korea) were mixed with spicy one (var. Chungyang) to make samples separated by particle size (below 0.425 mm, 0.425-0.71 mm, and 0.71-1.4 mm). The Partial Least Squares Regression (PLSR) model to predict the capsaicinoid content on particle sizes was developed with measured spectra by AOTF spectrometer and used to analyze the amount of capsaicinoids by HPLC. The PLSR Model of red-pepper powder of below 0.425 mm, 0.425-0.71 mm, and 0.71-1.4 mm with cross validation had  $R_v^2 = 0.948-0.979$  and Standard Error of Prediction (SEP) = 6.56-7.94 mg%. The prediction error of smaller particle size of red-pepper powder was low. The best PLSR model was found in pretreatment of Range Normalization, Standard Normal Variate, and 1st Derivatives of red-pepper powder of below 1.4 mm with cross validation, having  $R_v^2 = 0.959$  and SEP = 8.82 mg%.

**Key words:** Red-pepper powder, Capsaicinoids content, NIRS, one location, PLSR

## 서 론

고추는 동일한 품종이라도 재배 지역의 일조량, 강수량, 토양 특성 등에 따라 매운 맛을 내는 캡사이신(capsaicinoids)의 함량이 다르나 이를 정량할 수 있는 방법이 없어 김치나 고추장 등의 고추가공식품에서 매운 정도의 규격화가 어려워 때로 소비자의 불만을 야기시키는 원인이 되어 왔다.

현재 고추의 캡사이신 함량은 가스크로마토그래피(Gas Chromatography, GC)나 액체크로마토그래피(High Performance Liquid Chromatography, HPLC)등을 이용하여 측정하고 있으며, 이 방법은 정확도는 높지만 시간과 비용이 많이 소요된다. 분석시간을 단축시키기 위하여 HPLC의 column을 개선

하거나 고추장의 전처리 방법을 개선하여 소요시간을 단축시키거나 전처리가 필요 없는 전자코나 탄소나노튜브를 이용한 전류전압법 등에 의한 연구가 시도되고 있다(Barbero et al, 2008; Ha et al. 2008; Korel et al., 2002; Kachosnagi et al., 2008).

근적외선 분광법은 농산물의 외관 및 내부 품질을 화학적인 전처리 없이 비파괴적으로 신속하게 측정할 수 있는 방법으로서 복숭아, 사과, 단감 등 과일의 가용성 고형물 함량(soluble solid contents)이나 산함량을 판정하기 위하여 연구되어 왔으며, 일부는 이미 실용화에 이르러 사용되고 있다(Kawano et al., 1993; Lee et al., 1998; Son et al., 2009; Noh et al., 1997).

근적외선 분광법을 이용하여 고추 관련 제품의 품질을 측정하기 위하여 고춧가루의 함수율이나 캡사이신 함량 측정에 관한 연구가 수행되었다(Cho et al., 1990; Lee et al., 2005). 그런데 태좌는 종자가 붙어있는 부분이며 고춧가루에서 차지하는 비율이 약 3%정도지만 캡사이신 함량이 가장 높아서 태좌가 고춧가루 중 어디에 얼마만큼 분포되어

Corresponding author: Sukwon Kang, Researcher, National Academy of Agricultural Science, Suwon-city, Gyeonggi-do 441-100, Korea  
Tel: +82-31-290-1903; Fax: +82-31-290-1900

E-mail: skang@korea.kr

Received October 15, 2010; revised February 16, 2011; accepted February 17, 2011

있느냐에 따라 매우 정도가 달라지는데 기존의 고춧가루의 캡사이신 함량 측정에 관한 연구에서는 고춧가루를 정지시킨 상태로 스펙트럼 측정함으로써 태좌의 분포가 달라짐에 따른 영향을 고려하지 못하였다(Shin et al, 1991).

본 연구에서는 태좌의 분포 정도에 따라 매우 정도가 달라지는 영향을 제거하도록 고춧가루를 이송시키면서 근적외선 흡수 스펙트럼 측정할 수 있는 시스템을 제작하였다. 이를 이용하여 동일지역(영광군)에서 생산된 맵지 않은 일반 품종의 고춧가루와 우리나라에서 아주 맵은 고추로 알려진 청양 품종의 고춧가루를 혼합하여 만든 시료에 대하여 고춧가루 입자의 크기별로 캡사이신 함량을 예측할 수 있는 부분최소제곱회귀(Partial Least Squares Regression, PLSR) 모델을 개발하였다. 고춧가루의 입도별로 캡사이신 함량 예측성을 향상시키기 위한 최적의 스펙트럼 전처리 조건을 구명하였으며, 고춧가루의 입도가 캡사이신 함량 예측에 미치는 영향을 구명하였다.

### 재료 및 방법

동일지역에서 생산된 두 품종의 고춧가루를 혼합하여 시료를 만들었고 이 시료들에 대하여 각각 입도를 3수준으로 조절하였다. 고춧가루의 근적외선 흡광도를 측정하기 위해 제작한 시험 장치를 사용하여 고춧가루의 스펙트럼을 측정하였고, 이 고춧가루에 대하여 HPLC를 이용하여 캡사이신 함량을 측정하였다. 측정된 스펙트럼을 다양한 전처리를 적용한 후 각각의 처리별로 캡사이신 함량 예측용 PLSR 모델을 개발하였다. 교차검증법(Cross Validation)으로 개발한 PLSR 모델을 검증하였다(Fig. 1).

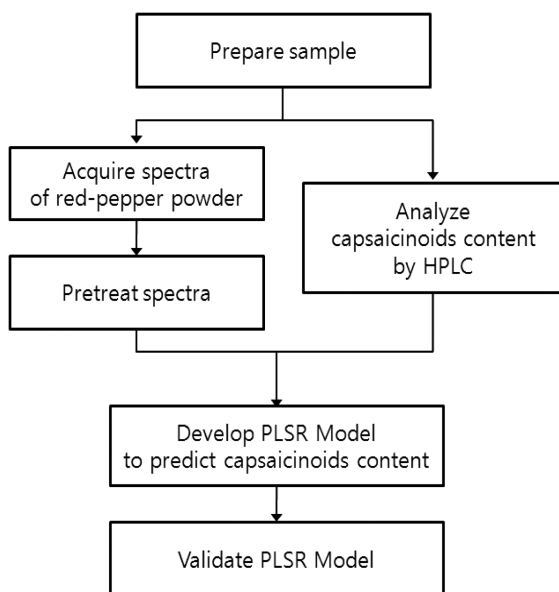


Fig. 1. Flowchart of experimental procedure.

### 재료

전남 영광군에서 2008 년에 생산된 맵지 않은 품종의 일반 고춧가루와 우리나라에서 아주 맵은 고추로 알려진 청양 품종의 고춧가루를 각기 0-100%까지 10%단위로 서로 혼합하여 11 수준(일반 고춧가루 : 청양 고춧가루 = 0:100, 10:90, 20:80, ... , 90:10, 100:0)의 고춧가루 시료를 조제하였다. 이를 이용하여 시중에서 판매되고 있는 고춧가루 입도에 따라 김장용, 조미용, 고추장용 등과 같이 3수준의 입도로 구분하였다. 이때 각각의 고춧가루 시료의 입자 크기는 표준망체(Chunggye Industrial MFG, Gunpo, Korea)를 이용하여 0.425 mm이하 (I), 0.425-0.71 mm (II), 그리고 0.71-1.4 mm (III)의 3수준으로 맞추었으며, 총 33 개의 공시재료를 조제하였다.

### 고춧가루 스펙트럼 측정 장치 및 스펙트럼 획득

고춧가루의 근적외선 흡광도를 측정하기 위하여 Fig. 2에 나타난 바와 같이 근적외선 흡광도 측정용 AOTF-NIR Spectrometer(Brimrose co., Luminar 2030, Sparks, Maryland, USA), 고춧가루를 담은 시료 용기와 시료용기를 회전시키는 시료 회전장치로 구성된 시험 장치를 제작하였다.

근적외선 흡광도는 고춧가루의 입도나 밀도 등에 의해서도 영향을 받지만, 표면의 울퉁불퉁한 상태에 따라 서로 영향을 받을 수 있으므로 이를 최소화하기 위하여 고춧가루를 시료용기에 담을 때 표면을 최대한 균일하게 하였다. 고추의 가식부는 과피, 종자, 태좌로 이루어져 있고, 이들 중 태좌는 양이 가장 적지만 캡사이신 함량이 가장 높기 때문에 태좌가 섞인 위치에 따라 매우 맛의 정도가 크게 달라진다(Shin et al., 1991). 따라서 시료용기에 담긴 고춧가루에서 태좌가 고르게 섞이지 않았을 수도 있기 때문에 이에 대한

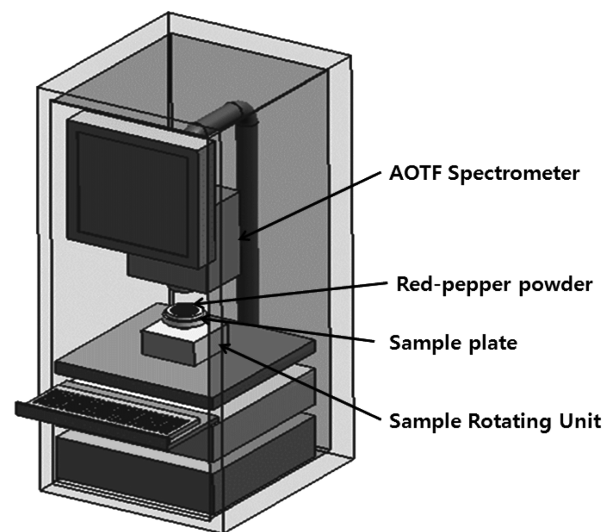


Fig. 2. System for detecting capsaicinoids content of red pepper powder using NIRS.

영향을 최소화하기 위하여 고춧가루 시료를 담은 용기를 회전하면서 측정하였고, 안정적인 스펙트럼을 얻기 위하여 50번 측정 후 평균하여 이용하였다. 고춧가루를 담은 용기(직경 95 mm, 깊이 4.5 mm)를 4.4 rpm으로 회전시키면서 고춧가루 표면에 근적외선을 조사함과 동시에 반사 스펙트럼은 1100 nm에서 2300 nm까지 2 nm 간격으로 측정하였고 이를 이용하여 근적외선 흡광도를 환산하였다.

동일지역 (영광군)에서 생산된 두 종류의 고춧가루로 혼합하여 만들어진 33 개의 시료는 냉장기에 밀폐용기에 담아 보관하였으며, 하루에 3 시간 간격으로 3 회에 걸쳐 근적외선 흡광도를 측정하였다. 시험시에는 냉장 밀폐 보관한 고춧가루를 꺼내어 스펙트럼을 1 회 측정 후 다시 밀폐용기에 담았으며, 약 3 시간이 경과한 후 밀폐용기를 흔든 후 다시 고춧가루를 꺼내어 두 번째 측정을 하였으며, 세 번째도 두 번째와 동일한 방법으로 측정하였다. 총 3 일 동안 반복하여 고춧가루의 스펙트럼을 측정하여 297 개의 데이터를 얻었으며, 이 중 1 회 측정시 획득한 33 개의 스펙트럼에서 광포화가 발생하여 분석에서는 이를 제외하고 총 264 개의 데이터를 사용하였다.

### Capsaicinoids 분석

고춧가루시료의 캡사이신 함량 분석은 ASTA 방법에 준하여 측정하였다(ASTA, 1997). 고춧가루 1 g를 정량하여 가압식 밀폐용기에 넣은 후 Ethanol(95%) 25 mL를 가하여 60°C로 2 시간 30 분 동안 가열하여 캡사이신을 추출하였다. 추출액은 GHP Acrodisc Syringe filter(PALL, P/N 6054563-1, USA)로 여과하고, 여과액 20 µL를 고성능액체 크로마토그래피(High-Performance Liquid Chromatography, Younglin, Anyang, Korea)에 주입하여 정량하였다. 이때 사용한 Column은 Unison UK-C18(Imtakt, USA)을 이용하였고, 이동상은 Methanol : 0.1% Phosphoric acid = 65 : 35로 조제하였다. HPLC 분석조건은 이동상의 유속은 1.0 mL/min로 하고, UV 검출기를 사용하여 280 nm 파장에서 분석하였다. 검량식 작성에 사용된 표준물질은 capsaicin (Sigma, M-2028, USA)과 dihydrocapsaicin(Sigma, M-1022, USA)을 사용하였다.

### 고춧가루 캡사이신 함량 예측 모델 개발

스펙트럼 측정 전에 고춧가루를 흔들어서 혼합한 후 스펙트럼 측정용 시료를 채취하여 매번 측정용 시료를 동일하지 않도록 하였다. 고춧가루 입도에 따라 0.425 mm이하 (Case I), 0.425-0.71 mm(Case II), 0.71-1.4 mm(Case III), 그리고 이들을 통합한 시료 1.4 mm이하 (CaseIV)등 4종에 대하여 캡사이신 함량 판정 모델 개발을 위해 Case I, Case II, Case III는 88개, Case IV는 264개의 데이터를 사용하였다.

근적외선 흡광도를 이용하여 고춧가루의 캡사이신 함량을

예측하기 위하여 부분최소제곱회귀법(PLSR)을 이용한 모델을 개발하였다. PLSR은 스펙트럼 데이터를 고유벡터와 스코어벡터로 분해하면서 농도정보를 이용하며 고농도의 스펙트럼은 저농도의 스펙트럼보다 큰 가중치를 가지게 하는 기법으로 여기서는 고춧가루의 캡사이신(capsaicinoids) 함량을 농도정보로 이용한다.

예측모델의 개발에 앞서 고춧가루의 입자 크기에 따라 발생하는 빛의 산란이나 광원의 잡음 등을 제거하기 위하여 전체 스펙트럼의 평균값으로 스펙트럼을 보정하는 평균 정규화(Mean Normalization), 전체 스펙트럼 중 최대값으로 스펙트럼을 보정하는 최대값 정규화(Maximum Normalization), 전체 스펙트럼 중 최대값과 최소값의 차로 스펙트럼을 보정하는 범위 정규화(Range Normalization), 스펙트럼을 미분하여 보정하는 1 차 미분(1st Derivatives)과, 2 차 미분(2nd Derivatives), 전체 스펙트럼의 표준 편차로 스펙트럼을 정규화하여 보정하는 SNV(Standard Normal Variate), 이상적인 스펙트럼을 기준으로 스펙트럼을 보정해주는 MSC(Multiplicative Scattering Correction), 스펙트럼의 최소값을 동일하게 보정하는 Baseline, 스펙트럼의 잡음을 제거되도록 완만하게 보정하는 평활화(Smoothing) 등의 전처리 기법을 이용하였다. 이 기법들로 스펙트럼을 전처리하여 사용하였으며 이 스펙트럼을 이용하여 캡사이신 함량 예측용 PLSR 모델을 개발하였다. PLSR 모델의 정확도는 교차검증법을 적용하여 판단하였다. 스펙트럼 전처리 중 가장 적절한 것을 선정하기 위하여 교차검증으로 검증한 결정계수( $R_v^2$ , Determination Coefficient of Validation), 예측표준오차(SEP, Standard Error of Prediction), 최적요인수(F, Number of Factors) 등을 비교하였다. 모델 개발은 입도별로 수행되었다. 캡사이신 함량 예측을 위한 PLSR 모델은 통계소프트웨어인 Unscrambler v9.2(Camo., Norway)를 이용하여 개발하였다.

## 결과 및 고찰

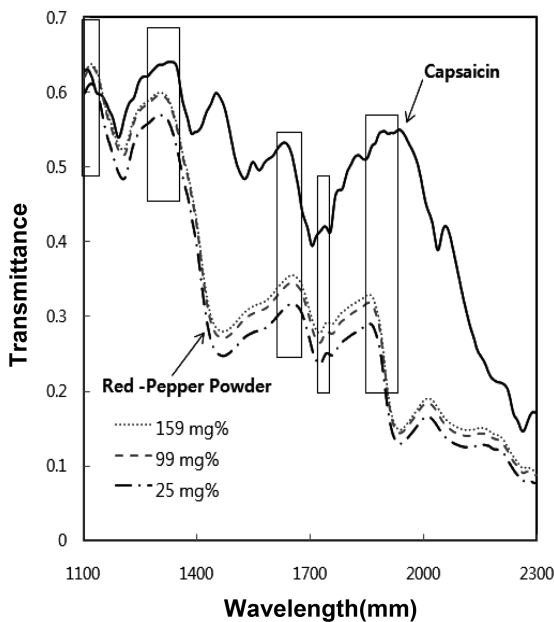
### 고춧가루의 입도별 capsaicinoids 함량

시험에 사용된 고춧가루의 capsaicin과 dihydrocapsaicin의 함량 분석 결과는 Table 1에 나타난 바와 같다. 캡사이신 함량 예측모델 개발용 시료의 capsaicinoids 함량은 0.71-1.4 mm의 가장 굵은 입도에서 17.5-128.66 mg% 로 가장 낮게 나타낸 반면 고추장용으로 사용되는 고춧가루로서 입자의 크기가 0.425 mm이하인 가장 고운 경우에 26.02-168.97 mg%로 가장 높게 나타났다. 즉 고춧가루의 입자 크기가 작을수록 캡사이신 함량이 증가하였는데, 이는 캡사이신을 가장 많이 함유하는 태좌가 건조 후에 쉽게 부서져 작은 입자의 고춧가루에 많이 포함되기 때문인 것으로 판단된다.

**Table 1.** Capsaicinoids content in red pepper powder by HPLC

Sample	Mixture rate of red-pepper powder (non-spicy : spicy)	Capsaicinoids (mg%)		
		Case I*	Case II*	Case III*
1	0:100	26.02	25.34	17.50
2	10:90	41.15	39.52	27.47
3	20:80	58.12	55.40	43.34
4	30:70	78.25	74.27	54.66
5	40:60	83.67	79.31	59.41
6	50:50	104.80	99.14	69.77
7	60:40	112.58	106.42	84.80
8	70:30	122.77	115.96	93.55
9	80:20	143.88	135.72	109.38
10	90:10	155.08	146.29	112.57
11	100:0	168.97	159.24	128.66

\* Particle size - Case I : < 0.425 mm, Case II : 0.425-0.71 mm, Case III : 0.71-1.4 mm



**Fig. 3.** Spectra of red-pepper powder and capsaicin powder.

근적외선 스펙트럼 흡광도의 측정

1100-2300 nm 대역의 근적외선을 이용하여 고춧가루의 캡사이신 예측 가능성을 확인하기 위하여 순수 캡사이신 분말과 동일입도(0.425-0.71 mm)에서 캡사이신 함량이 다른 3종(25 mg%, 99 mg%, 159 mg%)의 고춧가루에 대하여 스펙트럼을 측정된 결과는 Fig. 3에 나타낸 바와 같았다. 캡사이신 분말의 스펙트럼 피크는 1100-1120 nm, 1320-1350 nm, 1510-1530 nm, 1620-1640 nm, 1725-1745 nm, 1850-1890 nm, 1930-1950 nm 등의 대역에서 나타났는데, 이는 고춧가루에서도 거의 유사한 영역에서 나타나 고춧가루에서도 이를 반영하고 있음을 알 수 있었다. 또한 캡사이신 함량이 증가함에 따라 고춧가루의 스펙트럼 피크 값도 증가하는 경향을 보여 1100-2300 nm 대역의 근적외선 흡광도를 이용하

여 고춧가루의 캡사이신 함량을 예측할 수 있을 것으로 판단되었다.

고춧가루 캡사이신 함량 예측모델 개발

1100-2300 nm의 파장대역에서 전파장에 대한 흡광도를 여러 종류의 전처리를 하고 이를 10 nm 간격으로 추출한 총 121 개의 파장을 이용하여 동일지역에서 생산된 맵지 않은 일반 품종의 고춧가루와 아주 매운 청양 품종의 고춧가루가 혼합된 고춧가루를 입도별로 0.425 mm이하(Case I), 0.425-0.71 mm(Case II), 0.71-1.4 mm(Case III), 1.4 mm이하(Case IV)로 나눈 후 각각의 흡광도를 이용하여 캡사이신 함량을 예측하기 위한 PLSR 모델의 개발결과는 다음과 같다. 여기서 입도별로 캡사이신 함량 예측성능을 향상시키기 위한 최적의 스펙트럼 전처리 조건도 구명하였다. Table 2는 서로 다른 입도별 고춧가루의 스펙트럼에 대하여 다양한 전처리를 적용한 후 각각의 처리별로 캡사이신 함량 예측용 PLSR 모델을 개발한 결과를 나타낸다.

(1) Case I (0.425 mm 이하)

0.425 mm이하의 입도를 가진 고춧가루에 대하여 측정된 88개의 스펙트럼을 다양한 전처리를 적용한 후 각각의 처리별로 캡사이신 함량 예측용 PLSR 모델을 개발하였다. 그 결과 영역 정규화와 1차 미분의 2가지를 순차적으로 전처리한 스펙트럼에 대하여 가장 우수한 결과를 보였으며, 이때 최적요인수는 7개이었다(Fig. 4). Fig. 4에 나타낸 바와 같이 이 PLSR 모델의  $R_c^2$ 는 0.988, 검량표준오차(Standard Error of Calibration, SEC)는 5.00 mg%로 나타났으며, 이 예측모델을 교차검증법으로 검증한 결과에서는  $R_v^2$ 가 0.979, SEP가 6.56 mg%, bias가 -0.0092 mg%로 나타나 예측성능이 양호하였다.

전처리 횟수가 증가하면 처리속도도 느려지므로 예측모델의 처리속도 향상을 위해 전처리를 1가지만 적용한 경우 중 가장 우수한 결과를 나타낸 PLSR 모델은 평균 정규

Table 2. Comparison of PLSR models with pretreatment

	X <sup>1)</sup>	Normalization			SNV	MSC	BL <sup>4)</sup>	SM <sup>5)</sup>	1st D	2nd D	ND <sup>6)</sup>	NSD <sup>7)</sup>	
		Mean	Max <sup>2)</sup>	R <sup>3)</sup>									
I	R <sub>C</sub> <sup>2</sup>	0.964	0.986	0.985	0.986	0.984	0.981	0.956	0.965	0.945	0.945	0.988	0.986
	SEC	8.51	5.36	5.52	5.24	5.66	6.11	9.45	8.40	10.53	10.53	5.00	5.28
	R <sub>V</sub> <sup>2</sup>	0.935	0.973	0.971	0.973	0.971	0.967	0.926	0.945	0.921	0.921	0.979	0.977
	SEP	11.43	7.33	7.58	7.39	7.68	8.11	12.23	10.57	12.65	12.65	6.56	6.75
	F <sup>8)</sup>	9	7	8	8	7	7	8	9	7	7	7	7
II	R <sub>C</sub> <sup>2</sup>	0.973	0.979	0.982	0.982	0.983	0.980	0.973	0.976	0.971	0.964	0.980	0.982
	SEC	6.85	6.13	5.59	5.62	5.52	5.89	6.93	6.51	7.20	7.92	5.93	5.63
	R <sub>V</sub> <sup>2</sup>	0.956	0.964	0.969	0.967	0.971	0.968	0.956	0.958	0.955	0.952	0.969	0.973
	SEP	8.85	7.94	7.41	7.65	7.14	7.55	8.81	8.57	8.87	9.22	7.39	6.99
	F <sup>8)</sup>	8	7	7	7	7	7	8	8	6	6	6	6
III	R <sub>C</sub> <sup>2</sup>	0.952	0.959	0.965	0.962	0.960	0.959	0.944	0.949	0.957	0.954	0.960	0.958
	SEC	7.61	7.06	6.55	6.75	6.97	7.02	8.24	7.83	7.22	7.42	6.96	7.09
	R <sub>V</sub> <sup>2</sup>	0.930	0.940	0.948	0.945	0.943	0.943	0.922	0.928	0.933	0.934	0.946	0.946
	SEP	9.20	8.54	7.94	8.22	8.28	8.26	9.69	9.34	8.99	8.91	8.06	8.04
	F <sup>8)</sup>	8	7	8	8	7	7	7	8	6	5	5	5
IV	R <sub>C</sub> <sup>2</sup>	0.935	0.930	0.957	0.954	0.936	0.926	0.938	0.932	0.938	0.932	0.963	0.964
	SEC	10.76	11.67	8.70	9.03	10.65	11.44	10.46	11.02	10.52	10.96	8.13	7.98
	R <sub>V</sub> <sup>2</sup>	0.926	0.920	0.948	0.944	0.927	0.916	0.926	0.923	0.927	0.922	0.955	0.956
	SEP	11.54	11.97	9.66	9.98	11.46	12.23	11.49	11.74	11.41	11.81	9.00	8.82
	F <sup>8)</sup>	10	9	11	11	8	8	11	10	9	10	9	9

<sup>1)</sup> X : Non-Pretreatment, <sup>2)</sup> Max.: Maxium, <sup>3)</sup> R : Range, <sup>4)</sup> BL : Baseline, <sup>5)</sup> SM : smoothing with 18 nm gap, <sup>6)</sup> ND : Range Normalization+1st Derivatives, <sup>7)</sup> NSD : Range Normalization+ SNV+ 1st Derivatives <sup>8)</sup> F : Number of Factors

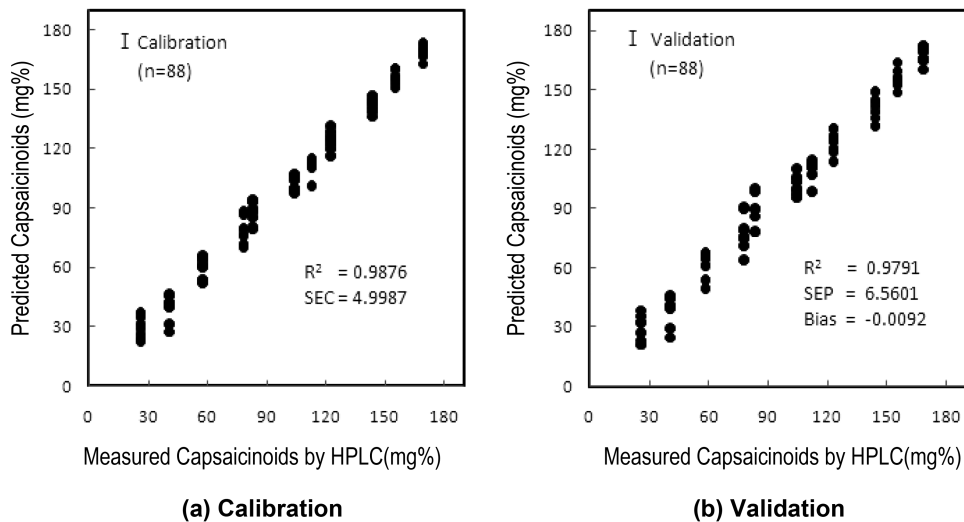


Fig. 4. Calibration and Validation using PLSR model for red pepper powder of below 0.425 mm.

화 전처리를 한 경우로서 최적요인수는 7 개이었고 R<sub>C</sub><sup>2</sup>가 0.985, SEC가 5.36 mg%로 나타났다. 이 예측모델을 교차검증 방법으로 검증한 결과 이때 R<sub>V</sub><sup>2</sup>가 0.973, SEP가 7.33 mg%로 나타났다(Table 2).

#### (2) Case II(0.425-0.71 mm)

0.425-0.71 mm의 입도를 가진 고춧가루에 대하여 측정 한 88 개의 스펙트럼을 (1)에서와 같이 다양한 전처리를 적용

한 후 캡사이신 함량 예측용 PLSR 모델을 개발하였다. 그 결과 영역 정규화, SNV와 1 차 미분 등을 모두 전처리한 PLSR 모델에서 가장 우수한 결과를 나타내었으며, 이때 최적요인수는 6 개이었다(Fig. 5). Fig. 5에 나타낸 바와 같이 R<sub>C</sub><sup>2</sup>는 0.982, SEC는 5.63 mg%로 나타났으며, 교차검증의 결과 R<sub>V</sub><sup>2</sup>가 0.973, SEP가 6.99 mg%, Bias가 -0.0888 mg%로 나타나 예측성능이 양호함을 알 수 있었다. 참고로 1 차 미

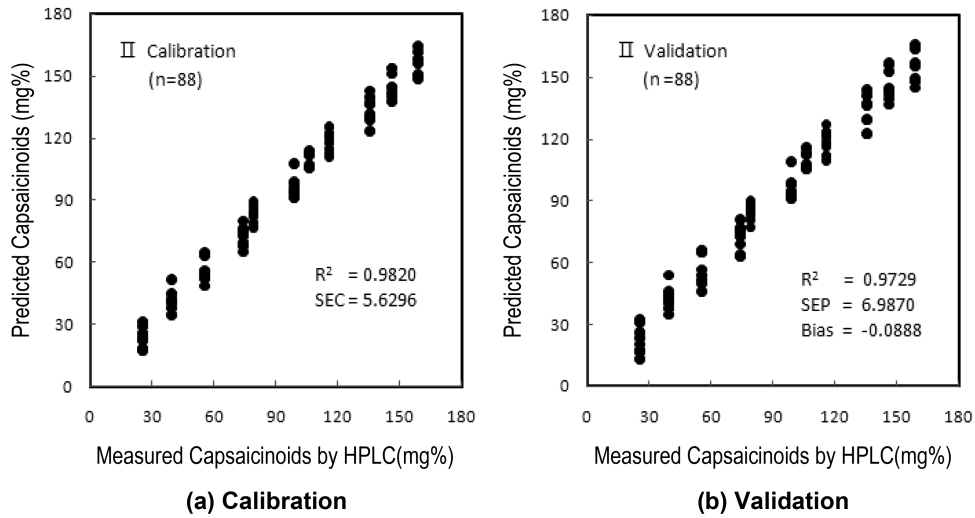


Fig. 5. Calibration and Validation using PLSR model for red pepper powder of 0.425-0.71 mm.

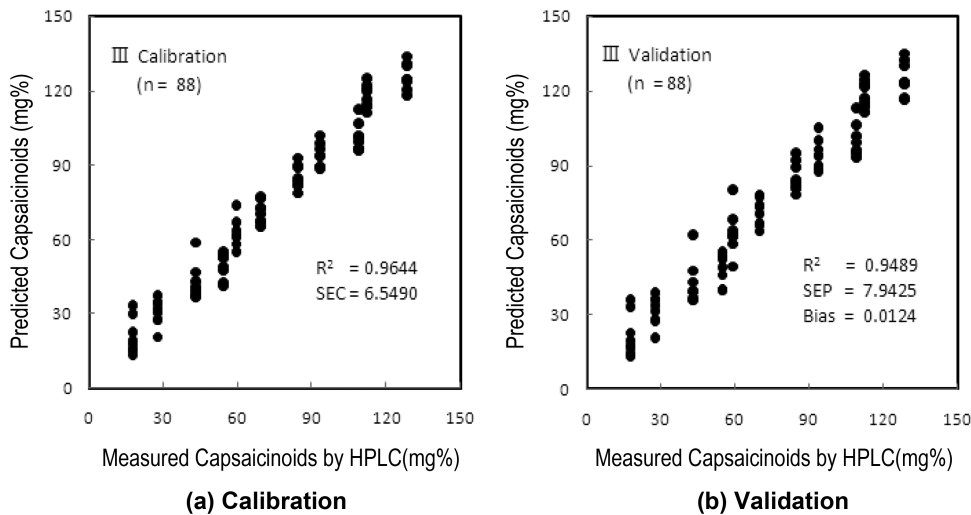


Fig. 6. Calibration and Validation using PLSR model for red pepper powder of 0.71-1.4 mm.

분 전처리에서는 Savitzky-Golay법을 사용했으며 간격을 38 nm로 하였다.

예측모델의 처리속도 향상을 위해 1 가지의 전처리를 적용한 경우 중 가장 우수한 결과를 나타낸 것은 SNV 전처리한 것으로 최적요인수는 7 개에서  $R_c^2$ 는 0.983, SEC는 5.52 mg%로 나타났으며, 이를 교차검증법으로 검증했을 때  $R_v^2$ 는 0.971, SEP는 7.14 mg% 로 나타나 상기 3 가지 전처리를 적용한 것과 예측성능의 차이가 크지 않음을 알 수 있었다.

### (3) Case III(0.71-1.4 mm)

0.71-1.4 mm의 입도를 가진 고춧가루에 대하여 측정된 88개의 스펙트럼을 (1)에서 같이 다양한 전처리를 적용한 후 캡사이신 함량 예측용 PLSR 모델을 개발하였다. 그 결

과 최대값 정규화 전처리를 한 PLSR 모델에서 가장 우수한 결과를 나타내었으며, 이때 최적요인수는 8 개이었다 (Fig. 6). Fig. 6에 나타낸 바와 같이  $R_c^2$ 가 0.965, SEC가 6.55 mg%로 나타났으며, 이 예측 모델을 교차검증법으로 검증한 결과에서도  $R_v^2$  0.948, SEP 7.94 mg%, Bias 0.0124 mg%로 나타나 예측성능이 양호하였다.

또한 SNV, MSC, 영역 정규화, 영역정규화 + 1차 미분, 영역정규화 + SNV + 1차 미분 등의 다른 전처리에서도 교차검증을 한 결과 SEP가 8.06-8.28 mg% 이하로 최적의 전처리 결과보다 낮았지만 차이가 크지 않았다.

### (4) Case IV(1.4 mm이하) : 전체 고춧가루

입도가 서로 다른 3가지의 경우(Case I, II, III)를 통합한 1.4 mm 이하의 전체 시료(Case IV)에 대하여 측정된

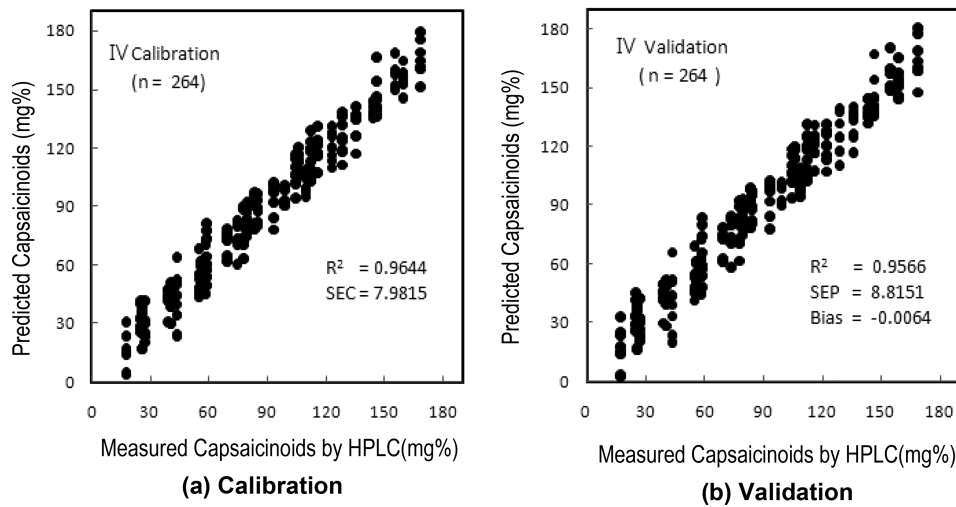


Fig. 7. Calibration and Validation using PLSR model for red pepper powder of below 1.4 mm.

264 개의 스펙트럼에 대하여 다양한 전처리 후 고춧가루의 캡사이신 함량을 예측하기 위한 PLSR 모델을 개발하였다. 그 결과 영역 정규화, SNV와 1 차 미분 3 가지 전처리를 순차적으로 적용하고, 최적요인수를 9 개로 한 경우에 가장 우수한 결과를 나타내었다. 그 결과는 Fig. 7에서 나타낸 바와 같이  $R_c^2$ 가 0.964, SEC가 7.98 mg%이었으며, 이 예측 모델을 교차검증법으로 검증했을 경우의  $R_v^2$ 와 SEP는 각기 0.956, 8.82 mg%로 예측성능이 양호한 것으로 판단되었다.

예측모델의 처리속도 향상을 위해 1 가지의 전처리를 적용한 경우, 영역 정규화가 최적으로 나타났으며, 이때 최적요인수는 11 개로써 PLSR 모델의  $R_c^2$ 는 0.957, SEC 8.70 mg%로 나타났다. 이 예측모델을 교차검증법으로 검증한 결과의  $R_v^2$ 와 SEP는 각기 0.948, 9.66 mg%로 개별적인 입도의 고춧가루를 이용하여 개발된 PLSR 모델보다는 떨어지지만 비교적 양호한 것으로 판단되었다.

#### 고춧가루 입도별 예측 모델의 결과 비교

Table 2에서 나타낸 바와 같이 스펙트럼 전처리를 1 가지만 적용하여 예측모델을 개발한 경우에 서로 다른 3 가지 입도(Case I, II, III) 각각에서는 정규화나 SNV, MSC 등의 전처리를 하면 예측성능이 개선되었지만, 이 3 가지 입도를 통합한 전체 입도(Case IV)에서는 최대값 정규화와 영역 정규화를 적용한 경우에만 예측 성능이 향상되었다. 또한 1 차 미분과 다른 전처리를 동시에 적용하여 예측모델의 예측성능이 향상되었다.

## 요 약

본 연구에서는 고춧가루의 매운맛을 내는 주성분인 캡사

이신 함량을 신속하게 측정할 수 있도록 근적외선 흡광도를 측정할 수 있는 시스템을 구성하였다. 이를 이용하여 동일지역(영광군)에서 생산된 맵지 않은 일반 품종의 고춧가루와 우리나라에서 아주 매운 고추로 알려진 청양 품종의 고춧가루를 혼합하여 만들어진 시료에 대하여 입자의 크기별로 캡사이신 함량을 예측할 수 있는 PLSR 모델을 개발하였다. 고춧가루 입도별로 캡사이신 함량의 예측성능을 향상시키기 위한 스펙트럼 전처리 조건을 구명하였으며, 입도가 캡사이신의 함량 예측에 미치는 영향을 구명하였다. 그 결과를 요약하면 다음과 같다.

(1) 고춧가루의 근적외선 흡광도 측정 시스템은 1100-2300 nm 대역에서의 근적외선 흡광도 측정용 AOTF-NIR Spectrometer, 여러 부위의 흡광도를 측정하기 위하여 제작된 시료 회전판, 시료 회전판을 회전시키는 모터, 회전판의 속도를 조절하는 속도조절장치와, 시료 용기 등으로 구성되었다.

(2) 1100-2300 nm의 대역에서 고춧가루와 순수 캡사이신 분말의 스펙트럼을 측정한 결과 고춧가루의 스펙트럼 피크들과 캡사이신의 스펙트럼 피크가 유사한 대역에서 나타나, 근적외선 분광법을 이용하여 고춧가루의 캡사이신 함량 예측이 가능한 것으로 판단되었다.

(3) 고춧가루 입도별(0.425 mm이하, 0.425-0.71 mm, 0.71-1.4 mm)로 획득한 근적외선 흡광도에 대하여 전처리를 달리하여 개발한 캡사이신 함량 예측용 PLSR 모델을 교차검증한 결과 결정계수( $R_v^2$ )는 0.948-0.979, 예측오차(SEP)는 6.56-7.94 mg% 범위에서 나타났으며, 입도가 작을수록 예측성능이 우수하였다.

(4) 3 가지 입도를 통합한 고춧가루(입도 1.4 mm이하)에 대하여 캡사이신 함량 예측모델 개발을 위한 최적의 스펙트럼 전처리 조건은 영역 정규화, SNV와 1 차 미분 3 가

지를 순차적으로 적용하는 것이었으며, 이를 이용하여 PLSR 예측모델을 개발하여 교차검증으로 검증할 때 결정 계수( $R_v^2$ )는 0.959, 예측오차(SEP)는 8.82 mg%로 나타났다.

(5) 입도가 구분된 고춧가루에는 입도별 예측모델을 적용하고, 입도가 구분되지 않은 고춧가루는 통합 입도 예측모델에 적용함으로써 캡사이신 함량의 예측정확도를 향상시킬 수 있을 것으로 판단되었다.

### 참고문헌

- ASTA. 1997. Official analytical method of the american spice trade association. 4th Edition Method 21.3, American Spice Trade Association, Englewood Cliffs, NJ, USA.
- Barbero GF, Liapid A, Palma M, Barroso CG. 2008. Fast determination of capsaicinoids from peppers by high-performance liquid chromatography using a reversed phase monolithic column. *Food Chem.* 107: 1276-1282
- Cho RK, Hong JH, Kim HK, Park MH. 1990. Rapid quality evaluation of dried red pepper by near-infrared spectroscopy. *Korean J. Food Sci. Technol.* 22: 675-680.
- Ha JH, Han KJ, Kim KJ, Jeong SW. 2008. Gas chromatography analysis of capsaicin in gochujang. *J. AOAC Int.* 91: 387-391.
- Kachosangi RT, Wildgoose GG, Compton RG. 2008. Carbon nanotube-based electrochemical sensors for quantifying the 'heat' of chilli peppers: the adsorptive stripping voltammetric determination of capsaicin. *Analyst.* 133: 888-895.
- Kawano S, Fujiwara T, Iwamoto M. 1993. Nondestructive determination of sugar content in satsuma mandarin using near infrared (NIR) transmittance. *J. Jpn. Soc. Hort. Sci.* 62: 465-470.
- Korel F, Bagdatlioglu N, Balaban MO, Hisil Y. 2002. Ground red peppers: capsaicinoids content, scoville scores, and discrimination by an electronic nose. *J. Agric. Food Chem.* 50: 3257-3261.
- Lee KJ, Hruschka WR, Abbott JA, Noh SH, Park BS. 1998. Predicting the soluble solids of apples by near infrared spectroscopy (II)-PLS and ANN models. *J. Korean Soc. Agric. Mach.* 23: 571-582.
- Lee SM, Kim SU, Park JB, Hwang IK. 2005. Prediction of chemical compositions for on-line quality measurement of red pepper powder using near infrared reflectance spectroscopy (NIRS). *Food Sci. Biotechnol.* 14: 280-285.
- Noh SH, Kim WK, Lee JH. 1997. Nondestructive Measurement of sugar-acid contents in fruits using spectral reflectance. *J. Korean Soc. Agric. Mach.* 22: 247-255.
- Shin HH, Lee SR. 1991. Quality attributes of korean red pepper according to cultivars and growing areas. *Korean J. Food Sci. Technol.* 23: 296-300.
- Son JR, Lee KJ, Kang S, Kim G, Yang GM, Mo CY, Seo Y. 2009. Development of prediction models for nondestructive measurement of sugar content in sweet persimmon. *J. Biosyst. Eng.* 34: 197-203.
- Todd PH, Beninger MG, Biftu T. 1977. Determination of pungency due to capsicum by gas-liquid chromatography. *J. Food Sci.* 42: 660-668.