

가

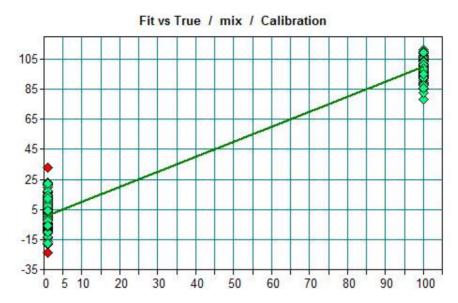


Fig. 4. Raw ginseng calibration modeling result

검량식 작성 후에는 다시 교차검증(cross validation)을 사용하여 내부검증을 하게 된다. 교차검증은 검량식 작서에 사용된 시료를 제외한 나머지 시료를 이용하여 도출된 검량식을 예측검증하는 방법으로 RMSECV와 slope 값으로 정확도를 검증한다. 이러한 검량식 작성에서 가장 어려운 결정중의 하나는 최적화된 factor(파장요인)의 수를 결정하는 일이다. 일반적으로 factor에 따른 R2, RMSECV 및 slpoe를 보면 factor의 수가 많아질수록 R2과 Slope가 좋아지나 반면에 RMSECV가 증가하므로 적절한 factor를 선택해야 over fitting이 일어나지 않도록정확한 검량식을 작성할 수 있다. Table 5. 에서 Factor가 9일 때, R2는 0.8701로서 우수한 검량식을 얻을 수 있었으며, 이 검량식을 cross validation한 결과 RMSECV는 17.7, slope는 0.89를 보여 검량식의 정확도가 높음을 알 수 있었다.

Table 7. Cross validation result of raw ginseng calibration.

Factor	$\mathbb{R}^2$	RMSECV	Bias	RPD	Offset	Slope
1	7.302	47.2	-0.105	1.04	51.936	0.094
2	42.82	37.1	-0.14	1.32	31.488	0.452
3	49.36	34.9	-0.189	1.41	28.727	0.501
4	65.94	28.6	-0.204	1.71	18.64	0.678
5	72.49	25.7	-0.191	1.91	15.027	0.741
6	81.5	21.1	0.0677	2.32	10.065	0.823
7	84.07	19.6	0.213	2.51	8.486	0.848
8	85.38	18.8	0.137	2.62	7.761	0.862
9	87.01	17.7	0.0864	2.77	6.46	0.886