

일반적으로 NIRS 스펙트럼은 시료의 형태에 관계없이 측정할 수 있으나, 그 흡수대가 겹치거나 측정하는 물질의 화학적 성분, 입자의 크기 및 밀도 같은 물리적 영향에 의해 바탕선의 변화가 일어나는데 이러한 오차를 줄이고 겹쳐 있는 파장을 분리하기 위해 미분법을 통한 수처리를 한다(Ahn, 2012). 그러나 본 연구에서는 미분법을 사용하지 않고, 오차를 줄이기 위해 MSC(Multiplicative scattering correction) 방법을 사용하여 수처리를 수행하였다. MSC 방법은 주로 고체 시료를 측정하였을 경우에 사용되는 수처리 방법으로, 시료의 비균일성 때문에 빛의 산란(scattering)으로 스펙트럼에 많은 변화가 일어나게 되어 재현성이 떨어지는 것을 보정해주는 방법이다(Blanco, 2002).

나. 국산 인삼과 중국산 인삼의 판별 검량식 작성

NIRS의 검량식 작성에는 여러 가지 회귀분석법이 가능하나 본 시험에서는 MSC(Multiplicative scattering correction) 처리한 스펙트럼으로 PLS 회귀분석법을 사용하여 검량식이 작성되었다. PLS 회귀분석법은 교차 검증(cross validation)을 이용하여 NIRS의 전체 파장과 Lab data와의 상관을 유도하는 과정에서 최적의 factor를 선정하여 overfitting을 방지하고 정확도를 높여주기 때문에 스펙트럼에 나타나는 기준선 변화, 산란, 중첩 등의 영향을 최소화하여 비교적 R² 값이 높은 검량식을 유도할 수 있다. Table 6은 PLS 회귀분석법으로 도출된 검량식 결과이다. 국산 인삼 로딩 값(loading value)을 '100'으로 하고, 중국산 인삼 로딩 값(loading value)을 '1'로 설정한 다음, MSC(Multiplicative scattering correction) 처리한 스펙트럼을 PLS 회귀분석법을 적용하여 국산과 중국산 인삼을 분석하였다.

Table 6. Calibration PLS model for raw ginseng.

Parameter		Value
R ²		0.9071
RMSEEE(Root mean square error of estimation)		15.4
Loading value	Korea	100
	China	1
NIRS value	Korea	57~132
	China	-22~38

다. 회귀분석을 이용한 인삼 원산지 판별 예측 모델 도출

수득한 스펙트럼 값에 대한 회귀분석을 수행하기 전에, 오차를 줄이기 위해 MSC (Multiplicative scattering correction) 방법을 사용하여 수처리를 수행하였다. Tango의 분석용 소프트웨어인 OPUS Ver 7.0(Bruker Optics, Ettlingen, 독일)을 이용하여, 국내산 인삼의 로딩 값(loading value)을 '100'으로 하고, 중국산 인삼의 로딩 값(loading value)을 '1'로 설정한 다음, MSC (Multiplicative scattering correction)방법으로 수행하였다. 처리된 인삼 스펙트럼 수치를 부분최소사승법(Partial least square; PLS)을 이용하여 회귀분석을 하여 검량식을 작성하였고, Fig. 4와 같은 검량식을 도출하였다.