

자 료

**근적외선 분광분석법 (Near Infra Red Spectroscopy)의
농업 분야 적용**

조 규 채*
K. C. Cho

1. 서 론

급속한 산업의 발전은 우리의 생활을 여러모로 바꾸어 왔다. 그 중에서 특히 자연에 의존하는 농업 분야는 이러한 산업의 발달에 힘입어 날로 기계화 및 정보화되고 있는 실정이다. 따라서 현대사회에서는 과거와 달리 다양한 형태의 도구들이 등장하여 이것을 이용함으로써 발전 속도가 더욱 가속화되고 있는 추세이며, 그 활용 여부가 우리 모두의 중요한 경쟁력으로 자리하고 있다. 농업분야에서의 도구들은 생산성 향상에 기여하는 농업관련 기계에 초점을 맞추어 왔으나, 이제는 농산물의 품질에도 상당히 중요성이 인식되어 그것을 측정 및 분석하는 다양한 방법과 도구들이 등장하고 있는 실정이다. 그 중에서도 특히 농산물의 품질을 신속하게 판별하려는 여러 가지 시도는 괄목할만한 발전을 해왔으며, 그 응용분야도 날로 확산되고 있는 추세이다. 농산물은 공산품과 달리 상당히 불균일한 산물이며, 때문에 가급적 다수의 시료를 측정하여 결과

를 사용하지 않으면 신뢰도가 떨어져 측정 가치를 잃게 된다. 그래서 시료를 파괴하지 않고 짧은 시간 내에 전수검사를 수행할 수 있는 분석 및 측정방법을 연구 발전시켜 왔다. 이 중에서 빛을 이용하여 분석을 행하는 분광학(Spectroscopy) 중에서 근적외선(Near Infra Red)을 이용한 형태에 대해 알아보기로 한다.

2. 근적외선 분석법 원리

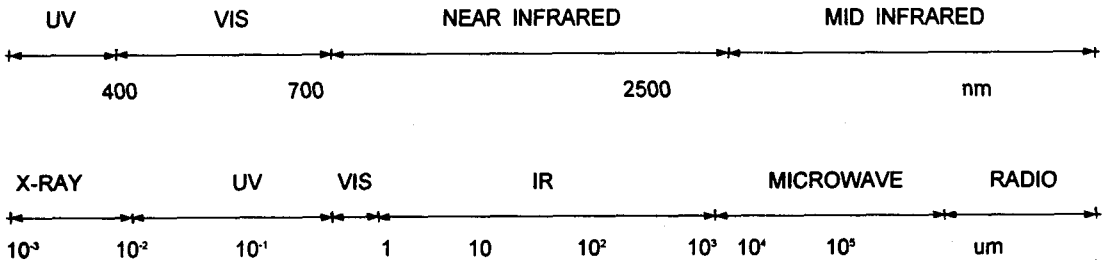
빛은 전자기복사선(Electromagnetic Radiation)이며 파동과 파장의 형태로서 이것의 길이에 따라 진동수(Frequency) 또는 파장(Wavelength) 이라 칭하며 낮은 대역의 라디오파(Radio wave)부터 마이크로파(Microwave), 적외선(Infrared: IR), 가시선(Visible: VIS), 자외선(Ultraviolet: UV), X-선(X-ray) 등의 순서로 높아지며, 각각의 파장에 따라 물질이 대응되는 형태가 틀리며, 이중 분광학적으로 이용되어지는 영역은 표 1과 같다.

Table 1 Various type of Molecular Spectroscopy

전 자 기 파	파 장	분 자 준 위	분 광 법
라 디 오 파	$10^3 \sim 10^{-1}$ m	자전(spin)	NMR
마 이 크 로 파	$10^{-1} \sim 10^{-3}$ m	회전(rotation)	Microwave
적 외 선	$10^{-3} \sim 10^{-6}$ m	진동(vibration)	IR
가 시 선	$10^{-6} \sim 10^{-7}$ m	외각전자(outer electron)	VIS
자 외 선	$10^{-7} \sim 10^{-9}$ m	외각전자(outer electron)	UV
X - 선	$10^{-9} \sim 10^{-10}$ m	내각전자(inner electron)	X-ray

* 두리테크

Table 2 Electromagnetic Spectrum



전자기파가 물질에 작용하면 표 1과 같이 분자준위의 운동이 분자의 형태에 따라 규칙적인 운동으로 바뀌므로 이를 측정함으로써 물질을 분석할 수 있게 된다.

적외선 중에서도 자세하게는 근적외선(Near Infra Red: NIR), 중적외선(Mid Infra Red: MIR) 및 원적외선(Far Infra Red: FIR)으로 분류되며(표 2), 모두 흡수에 의한 물질의 분자 진동운동에 의한 에너지 변화를 측정하여 분석할 수 있다.

가. 근적외선 분석법의 필요성

농산물의 생산 및 저장 유통 소비에 이르는 전 과정에서의 품질측정은 종래에는 색, 경도, 윤택, 외형 및 방향 등 주로 외관 검사로 농산물의 질을 평가할 수 있는 전문가에 의해 이루어져 왔다. 그러나 점차 품질의 평가를 주관적인 시험보다는 객관적이며 과학적인 검사로 대처하려는 경향에 따라 학자들은 표준화된 평가가 가능한 방법, 자동화되고 기계화된 평가방법을 모색하게 되었다. 근적외선 분광법(Near Infra Red Spectroscopy: NIRS)은 1960년대 초 미국 농무성의 Karl Norris에 의해 농업분야에서 처음으로 실용화된 후에 많은 응용범위를 확대하여 농업, 식품 및 사료분야 뿐만 아니라 현재는 화학, 생화학, 화장품, 의학, 석유화학, 제약, 고분자, 계지 및 섬유분야까지 널리 보급되어 활발히 사용되고 있다. 근적외선 분광분석법은 정량 및 정성 분석에 모두 사용할 수 있는데, 우선 정량 분석은 비어의 법칙을 사용하여 측정시료의 투과도 및 반사도를 가지고 선

형방정식을 얻어 사용하는데, 기지의 시료를 수집 선택하여 시료에 조사된 빛의 산란효과를 보정한 후, 회귀분석을 실시 검량선을 유도해 내고 이를 검증 후에 적용하게 된다. 분석범위는 화학량 뿐만 아니라 일반적인 물리량도 측정할 수 있다.

나. 특 징

근적외선은 가시광선과 Mid-IR 사이의 빛으로 700에서 2,500nm(14,000-4,000cm⁻¹) 사이에 존재하고 있다. 가시선 및 자외선의 흡수는 주로 외곽전자에 의해 일어나는데 반해, 적외선의 흡수는 분자진동에 의해서 일어나는 것이 큰 차이점이며, 결국 가시광선보다는 흡수도가 높고 IR 보다는 흡수도가 낮다는 특징이 있다. 근적외선에서 흡수는 주로 IR에서 유래되는 -CH, -NH, -OH 등 작용기의 분자진동 에너지의 결합대(combination band)와 1차에서 4차 배음대(1st~4th overtone band)로 나타난다. 보통 1,950~2,500nm 사이에 결합대가, 그리고 700~1,950nm 사이에 배음대가 관찰된다. 근적외선(NIR) 대역은 주로 시료의 정량 분석에 중적외선(IR) 대역은 주로 정성 분석에 사용되고 있다.

근적외선 분석법의 최대장점은 전처리가 필요없다는 것이다. 적외선 분석법에서 필요한 KBr 용기 사용, 시료의 묽힘, 용해 등이 필요치 않으며 시료를 있는 그대로 분석할 수 있다. 근적외선의 흡광 에너지는 적외선에서 유래되는 작용기의 분자 진동에너지가 연속적인 형태로서 나타나는데 적외선에 비해 그 흡광도의 크기가 10~1,000배 정도로 아주 작기

때문에 시료를 증적외선과 같이 전처리(펠렛, 박편 등)할 필요없이 있는 그대로 측정할 수 있는 편리함이 있고, 또한 고수분을 함유한 시료도 바로 측정할 수 있다.

일반적인 적외선 피크(Peak)는 근적외선 대역 피크보다 좁고 날카롭기 때문에 파장식별에 용이하며 넓은 범위를 측정하도록 고안되었으며, IR은 전통적으로 구조해석(정성)에 주로 사용되었다. 그러므로 IR에서는 정성 분석을 주로 하고 있으며, 반면에 근적외선은 정량 분석을 주로 하므로 NIR은 흡광도의 고분해능을 중요시 하는 기기라고 할 수 있다.

3. 근적외선 분석기기 구성 및 측정 방식

가. 근적외선 분석기기 구성

근적외선 분석기는 일반 분광 광도계와 전반적으로 동일한 구조로 되어 있다. 즉 분광 분석기는 일반적으로 빛을 내는 광원과 그 백색광을 필요한 파장으로 분리시키는 단색화장치(프리즘 또는 회절발 파장 선택기), 단색화된 빛을 측정시료에 조사 시키도록 시료를 담은 용기(석영 큐벳, 각종 셀, 컵 등)와 시료에서 나오는 광량을 측정하기 위한 검출기(광다이오드, 광전자 증배관 등)로 구성되어 있다. 그러

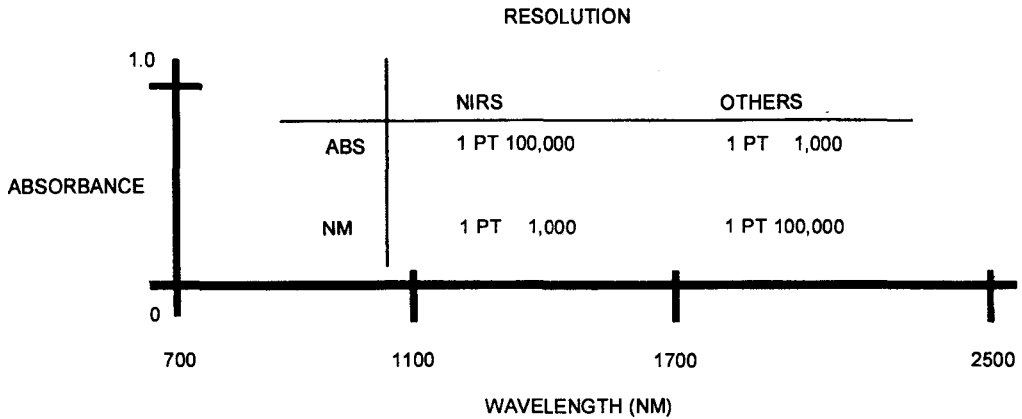


Fig. 1 Comparison between Near Infra Red Spectrophotometer vs Other Instruments.

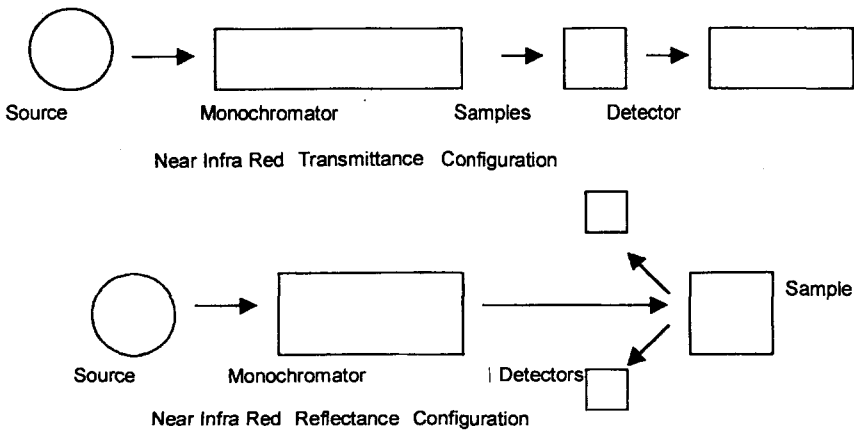


Fig. 2 Basic Instrument Configuration.

나 각각의 장치는 일반 분광 광도계와 달리 근적외선 분석에 적합하게 설계되어 있다. 예를 들어 검출기는 PbS (황화납) 소자로 되어 근적외선에 민감한 반응을 내고 있으며 시료를 파괴없이 측정해야 하므로 다양한 형태의 시료장치 등의 발달이 그것이다.

나. 근적외선 분석기기 특징

근적외선 분석기는 정량 및 정성 분석을 할 수 있으며, 정량 분석은 주로 적외선에 비해 작은 에너지 변위를 얻을 수 있는 결합 및 배음대이므로 시료를 전처리 하지 않고 측정할 수 있으나, 상대적으로 아주 작은 에너지를 측정해야만 하는 것이 근적외선 분석 장비의 특성이다. 즉 다른 분광법과 달리 흡광도를 1,000배 이상 정밀하게 측정하여야만 근적외선의 분석을 수행할 수 있다. 기존의 가시 자외선 장비(UV-VIS Spectrophotometer)도 근적외선(NIR) 영역까지 측정할 수 있는 장비도 있으나, 정밀한 흡광도를 측정하기 어려워 근적외선 장비로써 흡족하게 활용되지 못하고 있는 실정이다. 근적외선 분석기를 활용하는 데 있어서 파장범위, 광원, 광학구조 및 검출기 등을 고려해야 한다.

다. 측정 방법 및 시료형태

빛을 시료에 조사시키는 방법이 매우 다양하나 크게 투과법(Transmission)과 반사법 (Reflectance)으로 나누고 있으며, 이러한 측정방법으로 다양한 광학구

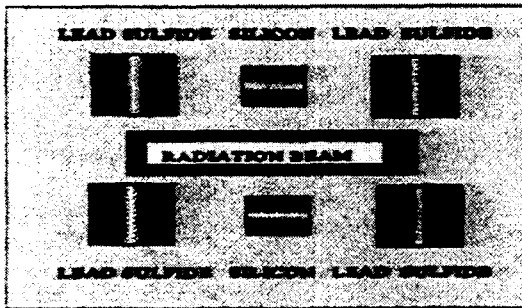


Fig. 3 Optical Structure of Combination Silicon and Lead Sulfide Detectors.

조와 검출기가 사용되고 있다. 반사법 측정의 설계로는 4개의 황화납검출기(PbS)와 2개의 실리콘 검출기(Si)로 구성되어 있는 구조이며(그림 3), 광원에서 최대의 에너지를 시료에 조사하여 조사된 빛을 최대한 수집하기 위해서는 시료면과의 각도를 90도로 빛을 입사 시키고 45도로 검출을 하게 되어 최적의 반사에너지를 측정할 수 있다.

NIR 분석에서는 시료를 있는 그대로 측정 분석하기 때문에 시료의 형태가 매우 중요하고 나아가서는 시료의 채취에서 오차가 NIR의 분석 정확도를 좌우할 수 있다. 따라서 시료의 형태를 가급적 변형하지 않고 있는 그대로 분석하는 것이 가장 중요하다. 어떠한 시료든 일단 동일시료를 반복적으로 스펙트럼을 얻어보아 전혀 변하지 않은, 즉 재현성 있는 스펙트럼을 얻는 것이 가장 중요한 일이다. 이때 측정시료의 형태에 따라 각각 알맞은 측정방법, 시료 장치, 측정대역을 선정하여야 한다.

1) 반사법(Reflectance Measurement)

가) 미세립 측정(Fine Particle)

전통적인 반사측정은 미세하게 분쇄한 시료를 측정하는 방법이다. 입사된 빛은 시료에 조사되어 수 밀리미터를 통과 확산되어 검출기에 도달한다(그림 4). 이때 흡광도를 얻을 수 있으며 표면에서 직접 반

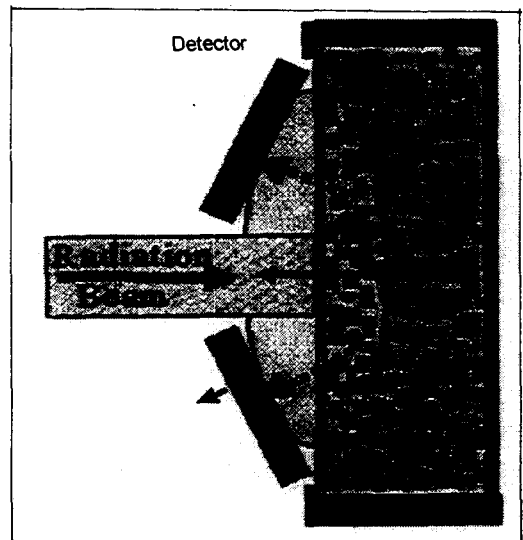


Fig. 4 Fine Particles for Reflectance.

사된 빛은 표면 반사효과로서 아무런 정보도 얻을 수 없다. 얻어진 흡광도는 입도와 채워진 밀도에 따라 달라지며 입도가 커질수록 흡광도가 증가한다. 표면 반사효과는 아무런 정보도 없지만 흡광도에 반비례하는 효과를 가져와 흡광도를 감소시키는 인자로 작용한다.

나) 대립 측정(Large Particle)

입도가 큰 시료를 측정하게 되면 조사된 빛이 시료를 많이 투과하게 되므로 흡광도가 증가하게 되는데(그림 5) 이것을 다중산란 현상(Multiplicative Scatter Effect)이라 하며, 흡광도가 1.5 이상이 되면 떠돌이 빛 (Stray Light) 때문에 비선형적이 된다. 이러한 비선형성은 1,900nm 이상에서 급속하게 증가되며 선형 방정식을 사용하는 검량식을 적용하기 어렵게 된다.

다) 투과 반사측정(Transflectance)

액상이나 반고체 상태의 시료를 반사 검출기로 측정하는 방법으로 경로길이 그림 6에서 보는 바와 같이 투과되고 다시 확산 반사되어 나오기 때문에 일반적으로 투과보다 2배이상 길어져 실제 측정시 아주 정밀하고 정확하게 작은 경로 길이를 유지해야 정량 분석에 적용할 수 있다. 일반적으로 경로 길이가 작을수록 분리도가 높은 스펙트럼을 얻을 수 있

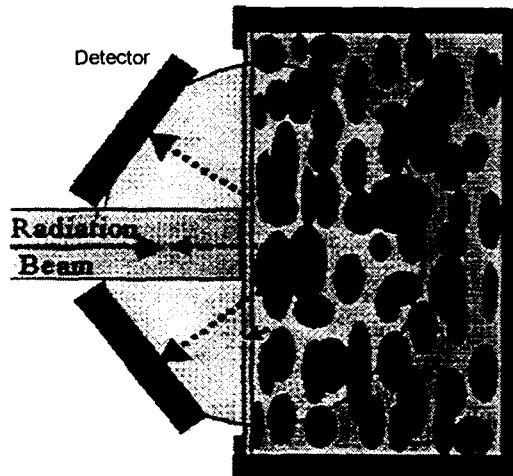


Fig. 5 Large Particles for Reflectance.

으므로 투과 반사법은 정확도 및 재현성이 투과법보다 현저하게 뒤떨어진다.

라) 직접 반사 측정(Direct Light Reflectance)

일반적인 분광법은 단색화된 빛을 시료에 조사하는데 반해 이 방법은 단색화되지 않은 빛을 직접 시료에 조사시키는 방법으로써 입도가 아주 큰 시료나 이송중인 시료를 측정하는데 외부의 빛이 전혀 문제를 야기시키지 않는 방법으로 조사되어 방사된 빛을 단색화하여 측정하는 방법이다(그림 7).

2) 투과법(Transmission Measurement)

투과법 측정에서 중요한 요소는 첫째로 시료의 투명도 및 밀도이며, 둘째는 시료의 흡광도, 세째는 산

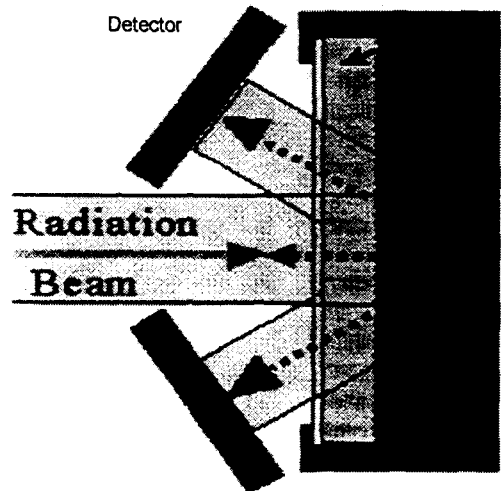


Fig. 6 Liquid and paste for Transflectance.

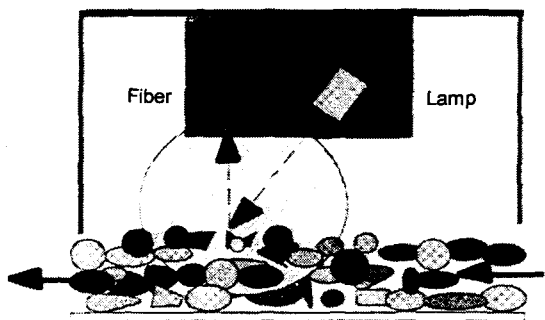


Fig. 7 Direct light reflectance large particles.

란과 표면 반사가 반사측정에 비해 반대 급부로 작용하고 있다는 사실이다. 일반적으로 투과 측정시 2.0 흡광도까지는 선형적이며, 검출기의 이득을 자동으로 조정하는 최신 모델은 3.5 흡광도까지 선형적으로 측정이 가능하다. 투과 측정시는 1,900nm 이상에서 3.0 흡광도를 넘어서는 시료 측정시는 그 이하의 파장을 사용하는 것이 좋다.

가) 액상 및 반고체 시료

투과법은 광원으로부터 단색화된 빛을 시료에 투과하여 검출기에 도달한 빛 즉, 흡광도를 측정하는 것인데(그림 8), 이때 시료용기의 두께 즉, 경로길이(Pathlength)가 흡광도를 다르게 하는 주 인자이므로 투과도 측정의 성패는 Pathlength를 정확히 시료에 맞추는 것에 좌우된다. 더욱이 시료에 확산을 시킬 수 있는 입자들이 존재할 경우 빛이 산란 및 표면반사를 일으키게 되어 매우 틀린 스펙트럼이 얻어지게 된다.

나) 광 파이버를 이용한 투과 측정(Fiber Optic Measurement)

광 파이버를 사용하여 파이프에서 직접 흡광도를 측정하는 방법으로써 시료용기 없이 빛을 직접 현장에 조사하여 방사된 빛을 측정하며(그림 9), 이때 경로 길이가 앞서 본 투과법과 마찬가지로 상당히 중요

한 의미를 가지며, 경로 길이가 크게 되면 흡광도가 커져 시료의 정보 및 좋은 분리도를 얻을 수 없으며, 너무 작거나 투과를 방해하는 입자들이 존재할 경우 충분한 시료를 측정할 수가 없게 된다.

다) 대립 투과 측정(Large Particle Transmission)

850nm에서 1,050nm 사이의 3차 배음대는 OH, CH, NH 등 관능기 피크의 경로길이(Pathlength)는 6~10cm 정도로 커진다. 이를 이용하여 대립을 투과법으로 측정 할 수 있다(그림 10). 이때 Pathlength를 아주 신중하게 결정해야 한다.

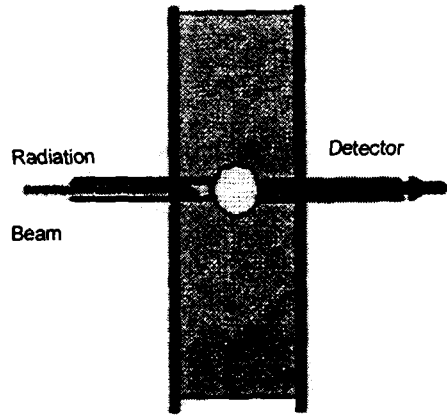


Fig. 9 Fiber optic probes in a On-Line.

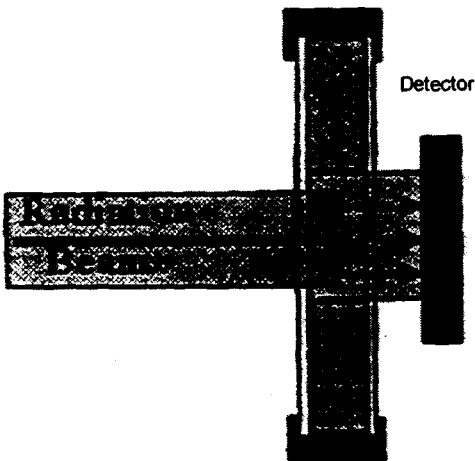


Fig. 8 Liquids and paste for Transmission.

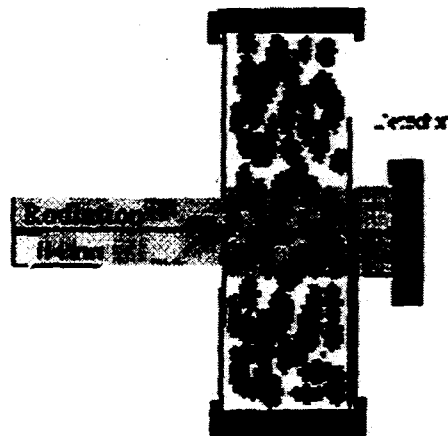


Fig. 10 Large particle for Transmission.

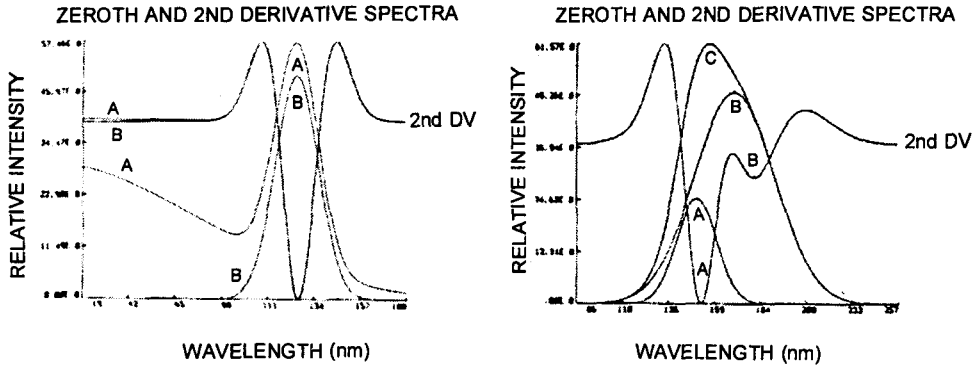


Fig. 11 Example of Derivative spectra.

마. 정량 및 정성 분석을 위한 데이터 처리

1) 산란 보정 및 수처리(Scatter Correction & Math Treatment)

산란 보정 및 수처리 목적은 일반적으로 시료에 조사된 빛의 산란효과를 일차적으로 보정을 해주며, 회귀분석의 변수를 줄이고, 검량선을 안정하게 하는 필수적인 도구로서 시료를 전처리 해주는 효과와 크로마토그래피의 컬럼처럼 분리해 주는 효과를 발휘할 수 있다.

근적외선 흡수스펙트럼의 특징은 앞에서 언급한 바와 같이 Peak들이 넓고 중첩되어 있으며, 또한 시료의 밀도, 온도, 입자크기 등의 차이로 인한 산란차에 의해 바탕선(Baseline)의 변화가 발생하게 된다. 이런 변화는 분석시 많은 오차를 유발하는데, 이러한 문제들은 수처리법을 통해 위와 같은 변화를 보정해주고, 회귀분석시 변화를 줄이며, 검량선을 안정하게 하여, 정량 및 정성 분석의 필수적인 도구로 사용되고 있다.

산란 보정은 SNV, Detrend, MSC 등이, 수처리 방법은 Derivative, Smooth, Kubelka-Munk 등 여러 가지가 있으며, 경우에 따라 달리 사용할 수 있다.

이는 앞에 언급했던 바와 같이 원치 않는 단기변동 및 중첩으로부터 스펙트럼을 분리, 제거해 내는데 아주 유용한 도구로서 사용할 수 있다. 근적외선의 흡광 스펙트럼 해석은 주로 SNV & Detrend와 미분법을 혼합하여 적용하는데, 여기에는 1차, 2차, 3

차 및 4차 미분법을 사용하며, 이것은 바탕선의 변동 및 흡광도의 방해요인으로 인한 오차를 극소화하는데 최적의 방법이다.

2) 정량 분석 및 다변량 분석

근적외선에서는 흡광도의 변위가 화학적, 물리적 성질의 변위에 비해 극히 미약하기 때문에 다양한 다변량(Multi-Variant) 회귀분석법이 사용되고 있다. 주로 사용되는 방법은 다중선형회귀법(Multiple Linear Regression, MLR), 주성분분석법(Principal Component Analysis; PCA), 부분최소제곱법(Partial Least Squares; PLS) 등이 사용된다. 다중선형회귀법은 보통 시료의 구성이 단순할 때 유용하며 측정성분이 독특한 흡수봉우리가 있을 때 장점이 있다. 이때 여러 파장의 흡광도의 변위가 원하는 측정성분의 변위에 비례하도록 검량선을 만든다. 주성분분석법이나 부분최소제곱법은 흡수대들의 중첩으로 스펙트럼이 복잡하고 분석이 어려운 경우 많이 사용된다. 이 방법은 스펙트럼으로부터 측정성분과 관련이 있는 인자(Factor)들을 도출하여, 그 인자들을 기본으로 성분변화를 검량하는 방법으로 여러 파장의 변위를 다중 변형법을 이용하여 측정성분의 변위를 찾아낼 수 있다. 이 외에 최근에는 인공신경회로망(Artificial Neural Network; ANN)을 이용한 방법도 등장하여 사용되고 있다.

주성분분석이란 많은 변량으로부터 2개 또는 3개의 주성분을 산출하는 것으로서, 측정변량의 데이터

를 보다 작은 수의 상호관계가 전혀 없는 새로운 변량의 데이터로 전환하는 통계 처리방법으로 새로운 변량은 측정 변량의 데이터가 갖는 정보를 최대한 수용한다. 즉, 주성분분석은 변량을 하나하나씩 독립적으로 파악하는 것이 아니라 종합적으로 파악하려는 거시적 방법이며, 남은 변량의 값을 될 수 있는 한 정보의 손실없이, 하나 또는 소수개의 총괄적인 지표인 주성분으로 축소해서 해석하려는 통계학적 기법인 것이다. 주성분분석의 목적은 측정된 데이터의 변수를 보다 더 적은 변수로 줄여주고, 시료나 변량을 단순한 좌표상에 도식화하여 시료와 시료간의 관계, 변량 상호간의 관계, 시료와 변량간의 관계를 설정하는데 도움을 준다. 그러므로 주성분분석은 복잡한 데이터를 좌표상에 나타내어 보편적 특성으로부터 벗어난 특이한 시료를 찾아내는 데도 유용하게 이용할 수 있다.

요인 분석이 변량의 측정 데이터 전체보다는 공통부분을 몇 개의 내재 요인으로 설명하는 반면 주성분분석은 측정된 변량으로부터 가상의 내재변량을 위한 통계적 모델을 설정하지 않고 측정 변량의 데이터를 주성분으로 하여금 최대한 설명하도록 하는데 중점을 둔다. 이의 이용 예를 들면, 환경조건이 바뀔때의 시료의 품질변화를 사전에 측정, 분석하여 실제의 가공 단계에서 조절하는데 NIR의 주성분분석을 이용한다면 인력, 재료 등의 낭비를 훨씬 줄일 수 있을 것이다.

3) 정성 분석

근적외선에서 정성 평가법은 적외선과는 달리 시료의 전처리 없이 손쉽게 정성 평가가 가능하므로 기존 IR을 사용 정성 평가를 하는데, 주로 시료 전처리에 소요되는 많은 시간과 비용을 최대한 절감할 수 있으며, 또한 수 초내의 빠른 정성 평가를 함으로써, 제품 혹은 연구에 최대의 Feedback을 할 수 있기 때문에 그 유용성은 광범위하다.

프로그램에서 정성 방법은 스펙트럼 대조법의 상관도 및 거리로 측정할 수 있는데, 이것은 IR에서 널리 잘 활용되고 있는 방법으로 벡터(Vector) 합성을 통한 스펙트럼 대조법을 손쉽게 사용할 수 있고, 또

한 주성분을 분석(Principal Component Analysis)하고 그 거리를 이용하여 정성 평가할 수 있으며, 관능기의 특성이나 피크, 기지 시료와 미지 시료의 스펙트럼 비교 분석 혹은 화학적, 수학적인 스펙트럼의 분리 등으로 확인분석을 하고 있다. 정성 분석은 성분이 이미 알려진 기지시료의 스펙트럼과 미지시료의 스펙트럼을 대조하여 분석하는 분석 방법이다.

그림 12에서 보는 바와 같이 보통 기지시료 X와 미지시료 Y를 가지고 벡터합성을 통해 스펙트럼의 상관도를 구해보면, 1번과 같은 경우 X와 Y는 단지 흡광도만 차이 나고 동일한 형태가 나타나므로 상관도는 1이 되고, 5와 같은 경우는 동일하나 반전되어 있으므로 -1의 상관도를 나타나는 것을 알 수 있다.

정성 분석에서 파장 또는 기본요소 A 와 B..X를 시료의 스펙트럼으로 부터 얻어낸 후, 기지시료(Known)와 미지시료(Unknown)의 파장 또는 기본요소 A, B..X의 거리를 가지고 성분을 정성할 수 있다.

4. 근적외선 분석법의 적용 및 현황

일반적인 NIR응용은 곡류나 기타 가공과정에 따라 조성이 다양해지는 시료의 단백질, 섬유질 또는 탄수화물 등의 함량 측정에 이용된다. 켈달법이 시료의 분해에만 걸리는 시간이 몇 시간 단위인데 반하여, NIR분석법으로 연속적인 모니터링을 할 경우 몇초 단위의 시간만이 소요되므로 보다 빠르고 정확한 결과를 얻을 수 있다.

화학적 조성의 패턴에 기초하여 재료의 산지를 알아내는 방법과 외관과 성분에 근거해 시료의 산지를 추적하는 방법에 대한 연구가 적용되고 있는데, NIR에 의해 나타난 패턴에 맞추어 붐으로써 어떤 시료의 기원을 밝히는 방법이 연구되고 있다. 예를 들면, 오렌지 주스의 품질관리시 NIR 분석으로 모델을 세운 후, 서로 다른 군의 오렌지 주스의 패턴을 비교해 보아 각각 그 생산지역이 다름을 알아낼 수 있다고 보고되어 있으며, 나아가 화학적 조성을 이용하여 서로 다른 국가에서 생산된 과일인지의 여부까지도 추적해 낼 수 있다는 연구도 보고되었다. 비슷한

분석 기법으로 원료의 재배지역을 구분할 수 있다는 연구도 있다.

농업관련 산업에서 중요한 과제는 기기분석 기술을 관능평가에 적용하는 일이다. 종래에는 주로 관능 평가 요원에 의존했으나 이들의 유지에는 경비가 많이 들며, '기계'가 아닌 '사람'이라는 한계로 완전한 객관성을 보장할 수 없으므로 때로는 일정치 않은 결론을 내릴 수도 있는 단점이 있다. 그러나, 품질관리에 대한 관능 평가 요원들의 주관적인 판단을 어느 정도 기계를 이용한 자료로 대체할 수 있으며, 이들 데이터는 관능평가시의 파라미터에 대해 높은 상관성을 가지고 있다. 예를 들면, 맛, 냄새 등

은 시료내의 단백질, 무기질, 방향성분 및 탄수화물 등과 관련이 있는데, 이 성분들은 기기 분석적인 방법으로 프로필을 작성해 볼 수 있으며, 또한 NIR 분석법으로 얻은 정보와도 상관관계가 있는 것으로 알려졌다. 그 결과 얻어지는 회귀모델은 미지 시료의 특성을 예측하는 데에 반복적인 적용이 가능하다.

무한 경쟁시대, 정보화시대를 맞이하여 경쟁이 심화되고 있는 상황 속에서 새로운 기술의 개발속도는 성패를 결정하는 중요한 요소로 떠오르고 있다. 신속하고 정확한 분석은 업무의 능률을 배가할 뿐만 아니라, 비용절감, 생산량 증대에도 크게 기여할 것이다. 이런 관점에서 근적외선 분광법은 기존의 많

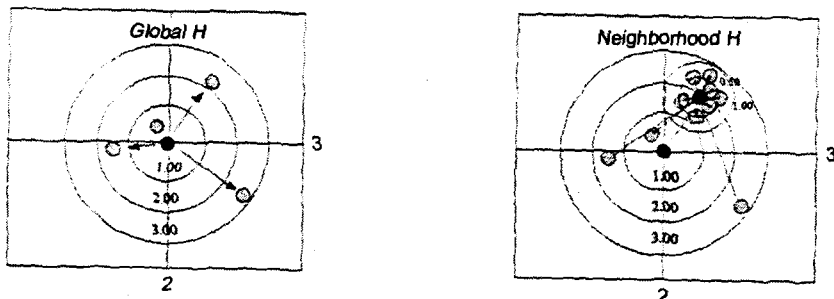
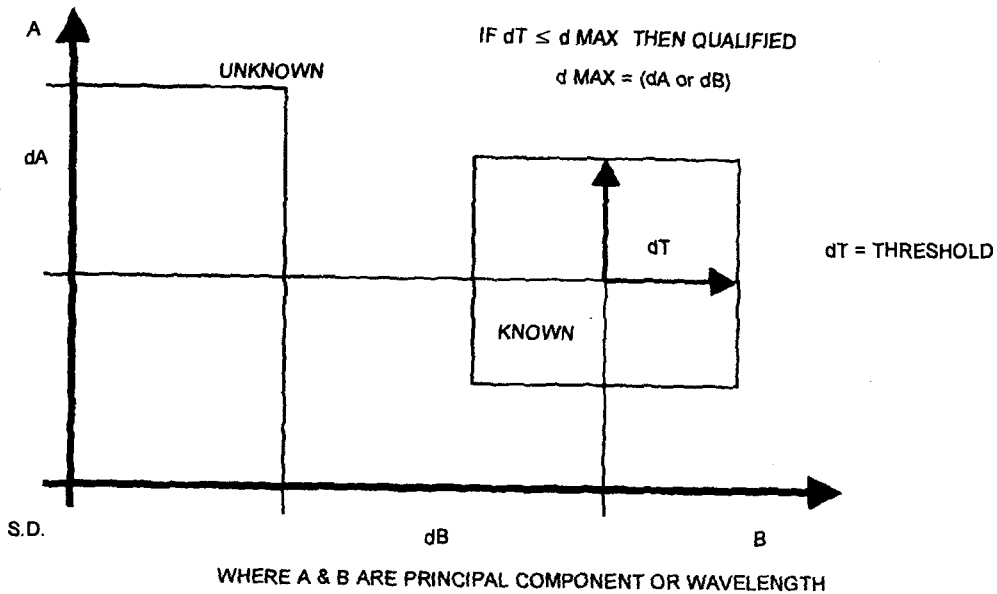


Fig. 12 Identify and Clustering Algorithm.

은 분석법의 문제를 모두 해결해 줄 것이며 그 이용도는 더욱 더 첨단화되고 다양해질 것으로 기대된다.

참 고 문 헌

1. Jerome J. Workman, Jr., and Donald A. Burns. 1992. Commercial NIR Instrumentation. "Handbook of Near-Infrared Analysis". Marcel Dekker, Inc., New York, U.S.A., p. 37.
2. Norris, K. H., and P. C. Williams. 1984. Optimization of mathematical treatments of raw near-infrared signal in the measurement of protein in hard red spring wheat. I. Influence of particle size. *Cereal Chem.*, 61, 158.
3. Lanza, E. 1983. Determination of moisture, protein, fat, and calories in raw pork and beef by near infrared spectroscopy. *J. Food Sci.*, 48, 71.
4. Windham, W. R., C. S. Gaines, and R. G. Leffler. 1993. Effect of wheat moisture content on hardness scores determined by near-infrared reflectance and on hardness score standardization. *Cereal Chem.*, 70, 662.
5. Williams, P. C., and K. H. Norris. 1990. Qualitative applications of near-infrared reflectance spectroscopy in "Near-Infrared Technology in The Agricultural and Food Industries". American Association of Cereal Chemists, Inc., Minnetonka, U.S.A., p. 241.
6. Burns, D. A., and E. W. Ciurczak. 1992. Application of NIR spectroscopy to agricultural products in "Handbook of Near-Infrared Analysis". Marcel Dekker, Inc., New York, U.S.A., p. 395.
7. Barnes, R. J., M. S. Dhanoa, and S. J. Lister. 1989. Correction to the description of standard normal variate(SNV) and de-trend(DT) transformation in practical spectroscopy with applications in food and beverage analysis. *Appl. Spectrosc.*, 43, 772.
8. Shenk, J. W., and M. O. Westerhaus. 1991. Population structuring of near infrared spectra and modified partial least square regression. *Crop. Science*, 31, 1548.
9. Martens, H., and T. Naes. 1989. Multivariate calibration by data compression. In *Near-Infrared Technology in the Agricultural and Food Industries*, P. Williams, and K. H. Norris, (ed.), American Association of Cereal Chemists, Inc., St. Paul, p. 57.
10. Scotter, C. N. G., and A. Legrand. 1994. NIR qualitative analysis-a new philosophy with special reference to rapid NIR screening for fruit juice authenticity. *Food Science Technology Today*, 8(3):167-171.
11. Evans, D. G., C. N. G. Scotter, L. Z. Day, and M. N. Hall. 1993. Determination of the authenticity of orange juice by discrimination analysis of near-infrared spectra. *J. Near Infrared Spectrosc.*, 1, 33-44.
12. Scotter, C. N. G., and M. N. Voyiagis. 1994. Oil discrimination by canonical variate analysis of near-infrared reflectance spectra. In *Food authentication by spectroscopic techniques* (M. Lee, and C. N. G. Scotter, eds), FLAIR/QUEST Coordination Group of Commission of the European Communities, pp. 21-23.
13. Murray, I., and I. A. Cowe, et al. 1992. Making light work : Advances in NIR spectroscopy. P. 1-638, 1st ed., I. Murray and I. A. Cowe Ed., VCH Publishers, New York, U.S.A.
14. Osborne, B. G., and T. Fearn. 1986. Near infrared spectroscopy in food analysis. P. 1-182, 1st ed., B.G. Osborne and T. Fearn Ed., Longman Scientific & Technical, Harlow Essex, U.K.
15. Shenk, J. S. Public software. P. 18-21. 1989. In: *Near infrared reflectance spectroscopy (NIRS): Analysis of forage quality*. Agric. Handbook No. 643. G. C. Marten, J. S. Shenk and F. E. Barton, II (ed.) Agric. Res. Serv., USDA, Washington, DC.
16. Windham, W. R., D. R. Mertens, and F. E. Barton,

- II. 1989. Protocol for NIRS calibration: Sample selection and equation development and validation. P. 96-103. In: Handbook No. 643. G. C. Marten, J. S. Shenk and F. E. Barton, II (eds.) Agric. Res. Serv., USDA, Washington, DC.
17. 김영봉. 1996. 식품성분 분석을 위한 근적외선 (NIR)의 이용(II) 식품기술 제9권 제2호 P. 3-17.
18. 김용옥, 정한주, 박순옥, 김기환. 1995. 근적외선 분광법을 이용한 버어리 토스트엽의 화학성분 분석 J. Horear Society of Tobacco Science Vol. 17, No. 2, 177-183.
19. 노봉수, 이동선. 1996. 주성분 분석을 이용한 신 제품 개발. 식품과학과 산업 29권 4호 P. 2-13.
20. 김병주, 박의호, 서형수. 보리종실 성분 분석을 위한 근적외분광광도계의 활용 방법 Korean J. Crop. Sci. 40(6):716-722.