

ICP-MS 및 통계 모델링을 사용한 원소 프로파일링에 의한 쌀 원산지 판별

Agilent 7900 ICP-MS 및 Agilent Mass Profiler Professional 소프트웨어를 사용해 쌀의 지리적 원산지를
식별합니다



저자

Fei Xu¹, Fanzhou Kong¹,
Hong Peng¹, Guangtao Zhang¹,
Shuofei Dong²

1. 마르스 글로벌 식품 안전 센터,
중국, 베이징
2. 애질런트 테크놀로지스, 중국,
베이징

서론

중국은 세계 최대의 쌀 생산국이며, 세계 인구의 거의 절반은 쌀을 주식으로 삼고 있습니다. 쌀에 대한 전세계적 수요가 엄청나기 때문에, 보다 높은 가치를 지닌 쌀의 품종을 통해 경제적 이득을 취하려는 이들이 불순물 혼입 또는 거짓 표기 등을 저지르는 경우가 발생합니다. 중국의 쌀 가격은 재배지에 따라 달라지기 때문에 생산자들은 지리적 표시(GI)를 사용해 시장에서 자신들의 생산물을 차별화합니다. 원산지를 이용해 홍보되는 쌀은 생산되는 양보다 수요가 더 높기 때문에 혼입의 위험성에 더 많이 노출되어 있습니다. 식품 사기의 방법으로는 낮은 등급의 제품과 진품의 혼합, 낮은 등급 제품으로의 완전 대체, 부정확한 제품 표기 등이 있습니다. 쌀의 지리적 원산지를 밝히는 것은 농부, 소매상, 소비자에게 모두 중요한 일이며, 각 그룹은 모두 식품 사기로 경제적인 손실을 입을 수 있습니다(7). 식품 원산지와 진위를 확인하는 것은 또한 식품 안전과 규제 준수 차원에서도 중요한 일입니다. 식품 공급자, 생산자, 소매상이 오염되거나 부정확한 표기의 제품을 유통하는 것으로 밝혀지면 관련자들은 벌금을 물거나 기소될 수 있습니다.

식품 작물 및 가공 식품의 원소 조성은 식물 종, 토양 종류, 환경적 요인, 관개나 비료 사용 등을 포함한 농업 방식에 따라 달라집니다. 식품 내 다양한 종류의 원소 분석은 주로 마이크로웨이브를 이용한 시료의 산 분해 후 ICP-MS를 사용하여 수행됩니다(2-4).

이러한 분석의 결과는 각 시료의 “원소 팅거프린팅(Elemental fingerprinting)”을 제공하며, 원소 팅거프린팅은 시료의 지리적 원산지를 대표합니다. 이 정보는 원산지 식별 연구에서 유용하며, 차와 향신료를 포함한 여러 식품 분석에 활용되어 왔습니다(5, 6).

Agilent ICP-MS 시스템은 Octopole Reaction System(ORS⁴) 충돌/반응 셀(CRC)을 포함하고 있으며, 이는 헬륨(He) 충돌 모드를 사용해 모든 일반 동중원소 중첩을 제거하는 데 최적화되어 있습니다. 헬륨 모드는 여러 원소에 대해 동일한 셀 설정을 사용할 수 있도록 하여, 식품 진위 판별 연구에 필요한 고품질 데이터 세트를 제공합니다. Agilent ICP-MS 데이터는 MS 데이터의 대규모 세트를 처리하도록 설계된 계량분석화학적 소프트웨어 패키지인 Agilent Mass Profiler Professional(MPP)과 호환됩니다. MPP에는 데이터 분류화 방법의 선택이 포함되어 있으므로, 분석자는 미지 성분의 속성(예: 시료 원산지)을 예측할 수 있는 강력한 모델을 구축할 수 있습니다.

이 연구에서는 Agilent 7900 ICP-MS를 이용해 지리적 원산지가 알려진 90개 쌀 시료의 미량 원소 데이터를 얻었습니다. 그런 다음 MPP 소프트웨어를 사용하여 대용량 시료 데이터 세트를 처리했습니다. 일단 각 시료의 출처가 주성분 분석(PCA)을 사용하여 구별될 수 있다고 판단되면 MPP 소프트웨어로 다른 분류 예측 알고리즘을 사용하여 예측 모델을 구축하였습니다. 그 후 예측 모델을 사용해 24개의 ‘미지’ 테스트 시료 원산지를 밝혀냈습니다.

실험

기기

Agilent SPS 4 자동 시료 주입기가 설치된 Agilent 7900 ICP-MS가 모든 측정에 사용되었습니다. 7900에는 glass concentric nebulizer, 석영 더블 패스 스프레이 챔버, 2.5mm 주입기 석영 토치, Ni 인터페이스 콘, ORS⁴ 셀 등이 포함되어 있습니다. 기기는 Agilent ICP-MS MassHunter 소프트웨어를 사용해 제어하였으며, 데이터 분석은 MPP 소프트웨어를 사용해 수행했습니다. 여기에서 서술된 기능은 MPP 버전 15.0 이상에서 이용 가능합니다. 일반적인 기기 작동 파라미터는 표 1에 기재되어 있습니다.

표 1. Agilent 7900 ICP-MS 작동 조건

파라미터	설정
RF 전력(W)	1550
샘플링 깊이(mm)	8
분무 가스(L/분)	1.16
렌즈 조정	자동 조정
He 유속(mL/분)	5
KED(V)	5

검량 표준물질

24종 원소에 대한 검량 표준물질은 애질런트 표준물질 용액을 5% (v/v) 질산(HNO₃) 용액으로 희석하여 준비했습니다. 표준물질에는 다원소 검량 표준물질-2A(부품 번호 8500-6940), 다원소 검량 표준물질-4(p/n 8500-6942), 환경 검량 표준물질(p/n 5183-4688) 등이 포함되어 있습니다. 료듐(Rh) 내부 표준물질(ISTD) 용액은 단일 원소 Rh 표준물질(p/n 5190-8509)을 사용하여 제조했습니다. 수은(Hg)을 제외한 검량 표준물질은 분석 24시간 전 이내에 사전 혼합되었습니다. Hg는 사용 직전에 혼합물에 첨가했습니다.

시약, 표준물질, 시료

질산(69%)은 Merck Millipore(독일, 다큐슈타트)에서 구입했습니다. 탈이온수(DIW, 18.2MΩ·cm)는 Milli-Q 시스템(미국, 메사추세츠, 밀리포어)에서 얻었습니다.

쌀가루 표준 참조물질(SRM) 1568b는 National Institute of Standards and Technology(NIST, 미국, 메릴랜드, 게이더스버그)에서 구입했습니다. 원산지가 알려진 90가지 쌀 시료(GI 제품)는 중국의 5개 지역 내 쌀 정제 공장에서 직접 수집되었습니다. 각 지역별로 15개의 시료를 구하였으며, 예외적으로 라오닝에서는 2개 품종의 30개 시료를 수집했습니다. 원산지 지역은 다음과 같습니다. 헤이룽장성 우창시, 라오닝성 판진시(다른 종류의 시료 2개 로트), 장쑤성 서양현, 후베이성 징산시, 광시성 구이강시. 시료는 각각 HLJ, LN-1, LN-2, JS, HB, GX로 표기되었습니다.

시료 전처리

분해물 용기를 포함한 모든 실험실 재료는 30% (v/v) HNO₃ 용액에 24시간 동안 담궈진 후, 사용 전 DIW로 3회 행굼 처리되었습니다. 대략 0.5g의 쌀 시료를 폴리테트라플루오로에틸렌(PTFE) 분해물 용기에 담고 6mL의 HNO₃와 혼합했습니다. 시료를 밤새 흡후드에 두어 사전 분해되도록 하였습니다. 그 후 시료를 마이크로웨이브 오븐에 넣고(오스트리아, 안톤 파) 표 2에 기재된 가열 프로그램에서 산 분해가 진행되도록 했습니다.

분해 후 용액을 실온에서 식히고 50mL의 DIW로 희석했습니다. 쌀 시료의 모든 시료군에서 NIST-1568b SRM을 분석하여 분해 방법을 확인하였습니다.

표 2. 일반적인 마이크로웨이브 분해 파라미터

단계	시간(분)	온도(°C)
승온	15	실온에서 180까지
유지	20	180
냉각	대략 45	180에서 실온까지

결과 및 토의

검출 한계(DL)와 백그라운드 등가 농도(BEC)

24종 원소에 대한 ICP-MS MassHunter 검량으로 계산한 일반적인 7900 ICP-MS DL과 BEC는 표 3과 같습니다.

표 3. 이 연구에서 측정된 24종 원소의 DL 및 BEC

원소	DL ($\mu\text{g/L}$)	BEC ($\mu\text{g/L}$)	원소	DL ($\mu\text{g/L}$)	BEC ($\mu\text{g/L}$)
11B	0.33	0.064	60Ni	0.012	0.047
23 Na	0.091	1.03	63Cu	0.0011	0.016
24Mg	0.092	0.075	66Zn	0.018	0.18
27Al	0.37	0.47	75As	0.0020	0.0020
39K	0.39	11.90	78Se	0.048	0.019
44Ca	0.030	0.137	85Rb	0.00001	0.0009
47Ti	0.0064	0.0021	88Sr	0.0015	0.0006
51V	0.0015	0.0007	95Mo	0.0011	0.0019
52Cr	0.0021	0.014	111Cd	0.0039	0.0049
55Mn	0.0037	0.0042	137Ba	0.0033	0.0069
56Fe	0.022	0.13	201Hg	0.0001	0.0009
59Co	0.0005	0.0062	208Pb	0.0097	0.12

SRM 회수율

NIST-1568b 쌀가루 SRM은 각 시료군에 대해 2~3회 분석하여 이 방법의 정확성과 정밀성을 확인했습니다. 4개 시료군의 결과는 표 4에 나타나 있습니다. Hg를 제외한 모든 원소의 평균 농도는 인증 농도(80~120% 회수율)와 유사하게 나타났습니다. Hg의 낮은 회수율은 아마도 5~8% HNO_3 내 Hg의 저농도 불안정성으로 인한 것으로 보입니다(7).

Hg 회수율은 시료 분해 및 안정화에 사용된 산 혼합물에 HCl를 첨가해 현저하게 향상시킬 수 있을 것으로 보입니다. HCl은 Hg와 같은 화학적으로 불안정한 원소가 용액 내에서 잘 유지되도록 합니다. 분석 과정에서 형성된 모든 CI 기반 동중원소 중첩은 Agilent ICP-MS 시스템에서 표준 He(헬륨) 셀 모드를 사용하여 쉽게 제어할 수 있습니다(8).

표 4. NIST-1568b 쌀가루 SRM의 인증 원소에 대한 회수율 및 재현성 데이터(n=10)

원소	인증 농도, $\mu\text{g/g}$	평균 측정 농도, $\mu\text{g/g}$	표준 편차, $\mu\text{g/g}$	평균 회수율, %
24Mg	559 \pm 10	540	27	97
27Al	4.21 \pm 0.34	4.11	0.15	98
39K	1282 \pm 11	1276	62	100
44Ca	118.4 \pm 3.1	114.3	8.3	97
55Mn	19.2 \pm 1.8	18.3	1.0	95
56Fe	7.42 \pm 0.44	7.30	0.30	98
59Co*	0.0177 \pm 0.0005	0.0170	0.0010	96
63Cu	2.35 \pm 0.16	2.29	0.15	98
66Zn	19.42 \pm 0.26	17.73	1.81	91
75As	0.285 \pm 0.014	0.269	0.020	94
78Se	0.365 \pm 0.029	0.351	0.026	96
85Rb	6.198 \pm 0.026	5.352	0.211	86
95Mo	1.451 \pm 0.048	1.405	0.110	97
111Cd	0.0224 \pm 0.0013	0.0197	0.0022	88
201Hg	0.00591 \pm 0.00036	0.00395	0.00127	67
208Pb*	0.008 \pm 0.003	0.009	0.001	116

*참조 값: 완전히 확인된 값이 아니라, 인증값 대신 사용 가능

ISTD 안정성

Rh는 Sc나 Ga 같은 다른 잠재적 ISTD 원소와 다르게 쌀 시료에 존재할 것으로 예상되지 않았기 때문에 ISTD로 사용되었습니다. Rh 표준 용액(1mg/L)은 티 커넥터를 사용해 시료와 혼합했습니다. 모든 쌀 시료의 절반에 해당하는 분석 시퀀스를 10시간에 걸쳐 반복적으로 분석했습니다. 모든 ISTD 회수율은 $\pm 20\%$ 한계 이내였으며, 이는 표 1에 빨간 점선으로 나타나 있습니다. 이 결과는 7900 ICP-MS가 긴 시간 동안 식품 분해물을 분석해야 하는 진위 판별 연구에서 견고성과 높은 매트릭스 내성을 가진다는 점을 보여주었습니다.



그림 1. Agilent 7900 ICP-MS를 사용하여 10시간 이상 수행된 시료 분석의 ISTD 회수율

MPP 소프트웨어를 사용한 데이터 마이닝

다원소 데이터 시료군 파일(90개 쌀 시료, 24종 원소)을 결합해 MPP 계량분석화학 소프트웨어로 가져와 통계 분석을 수행했습니다. 이 소프트웨어에는 t-테스트, 분산 분석(ANOVA), 모델 구축 알고리즘, 상관관계 및 클러스터링 분석, R 알고리즘을 위한 확장된 기능 등을 갖추고 있습니다. 시료 그룹 간 현저한 차이가 있는지 알아보기 위해 PCA(무감독 기법)를 수행했습니다. PCA 기법은 화합물이 그룹의 분리에 미치는 상대적 기여도를 평가합니다. 3차원(3D)-PCA 점수는 표 2에 나와 있습니다.

첫 3차원인 PC1, PC2, PC3에서 총 65%의 분산 비율이 캡쳐되었습니다(그림 2). 5개 지역에서 유래한 90개 쌀 시료에 대한 합당한 수준의 분리는 24종 원소를 사용하여 수행했습니다. HB, GX, LN-1의 시료는 다른 시료와 분명하게 분리되었으며, LN-2 및 HUJ의 시료에서는 일부 중첩 현상이 나타났습니다. MPP 소프트웨어에서 생성된 PCA 로딩 플롯에 따르면 PC1에서는 주로 B, Na, Zn, Cd, PC2에서는 Al, Fe, Mn, PC3에서는 Na, Cu, Se, Rb로 인한 차이가 나타났습니다. 이 결과는 지역 예측 모델 수립을 위한 원소 농도 데이터 사용의 적합성을 보여주었으며, 미지의 쌀 시료에 대해 원산지를 예측할 수 있음을 보였습니다.

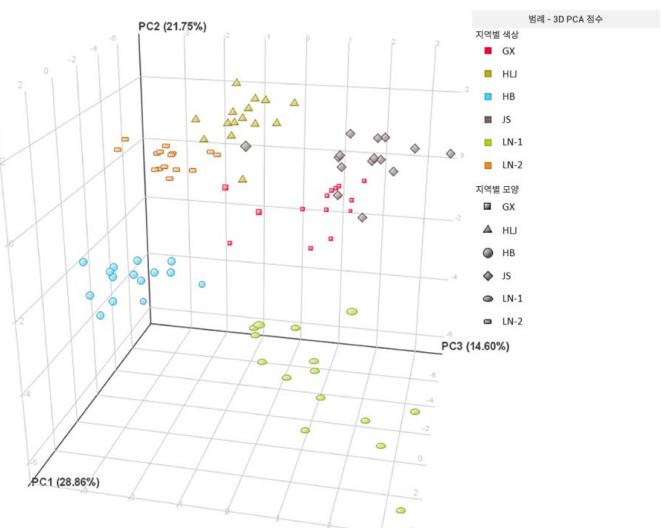


그림 2. 5개 지역에서 생산된 90개 쌀 시료의 3D-PCA 점수(랴오닝산 2개 품종 포함). 플롯의 축은 PCA 결과의 상위 3개 성분을 나타냅니다.

분류 예측 분석

분류 예측 분석은 새로운 미지 시료를 편향 없이 예전에 결정된 그룹에 배정할 수 있도록 하는 유용한 기법입니다. 이 기법은 와인 및 맥주와 같은 복잡한 시료의 품질 관리에서 점점 더 유용한 도구가 되고 있습니다(9).

MPP에는 여러 가지 분류 예측 알고리즘이 포함되어 있습니다(그림 3). 선택 가능한 알고리즘에는 SIMCA(soft independent modeling of class analogy), LDA(linear discriminant analysis), PLSDA(Partial Least Squares Discriminant Analysis), Decision Tree, SVM(Support Vector Machine), Naïve Bayes, Neural Network 등이 있습니다. 분류 모델은 이들 분류 예측 알고리즘 중 어떤 것을 사용해도 구축이 가능합니다.

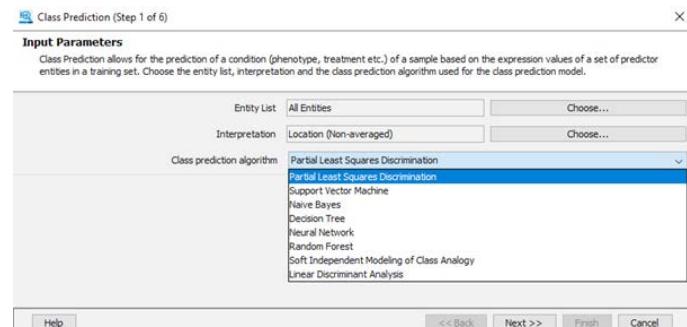


그림 3. 분류 예측 알고리즘의 옵션을 보여주는 Agilent MPP 소프트웨어 스크린

MPP 내의 예측 모델 구축

5개 지역에서 생산된 15개 쌀 시료 중 11개(2개 세트는 랴오닝산)를 임의로 선택하여 4개의 다른 분류 예측 알고리즘(PLSDA, SVM, LDA, SIMCA)을 사용해 예측 모델을 구축했습니다. 각 지역의 나머지 4개 쌀 시료(총 24개 시료)는 예측 모델의 정확성 테스트를 위한 ‘미지’ 시료로 사용되었습니다. MPP에서 예측 모델을 구축하기 위해 분석자는 소프트웨어가 불필요한 단계를 자동으로 건너뛰는 6단계 자동 워크플로우를 따릅니다.

예측 모델 테스트

PLSDA, SVM, LDA 모델을 사용해 얻은 원산지 예측 결과는 표 5에 나타나 있습니다. 모든 3개 예측 모델을 사용해 24개 시료의 원산지를 모두 정확하게 식별했습니다. 표 5의 높은 값(어두운 색으로 표시)은 훌륭한 일치 결과를 나타냅니다.

표 5. 24개 ‘미지’ 쌀 시료의 원산지 예측 결과 요약

시료 ID	실제 원산지	예측 모델					
		PLSDA		SVM		LDA	
		예측된 원산지	신뢰도 측정	예측된 원산지	신뢰도 측정	예측된 원산지	신뢰도 측정
GX-101	광시성 구이강시	광시성 구이강시	0.762	광시성 구이강시	0.742	광시성 구이강시	0.776
GX-102	광시성 구이강시	광시성 구이강시	0.476	광시성 구이강시	0.758	광시성 구이강시	0.658
GX-103	광시성 구이강시	광시성 구이강시	0.606	광시성 구이강시	0.804	광시성 구이강시	0.830
GX-104	광시성 구이강시	광시성 구이강시	0.769	광시성 구이강시	0.769	광시성 구이강시	0.865
HB-101	후베이성 징산시	후베이성 징산시	0.632	후베이성 징산시	0.774	후베이성 징산시	0.667
HB-102	후베이성 징산시	후베이성 징산시	0.739	후베이성 징산시	0.797	후베이성 징산시	0.760
HB-103	후베이성 징산시	후베이성 징산시	0.770	후베이성 징산시	0.727	후베이성 징산시	0.811
HB-104	후베이성 징산시	후베이성 징산시	0.531	후베이성 징산시	0.757	후베이성 징산시	0.850
HLJ-101	헤이룽장성 우창시	헤이룽장성 우창시	0.423	헤이룽장성 우창시	0.415	헤이룽장성 우창시	0.733
HLJ-102	헤이룽장성 우창시	헤이룽장성 우창시	0.651	헤이룽장성 우창시	0.731	헤이룽장성 우창시	0.901
HLJ-103	헤이룽장성 우창시	헤이룽장성 우창시	0.659	헤이룽장성 우창시	0.777	헤이룽장성 우창시	0.873
HLJ-104	헤이룽장성 우창시	헤이룽장성 우창시	0.635	헤이룽장성 우창시	0.724	헤이룽장성 우창시	0.802
JS-101	장쑤성 서양현	장쑤성 서양현	0.637	장쑤성 서양현	0.766	장쑤성 서양현	0.834
JS-102	장쑤성 서양현	장쑤성 서양현	0.494	장쑤성 서양현	0.625	장쑤성 서양현	0.866
JS-103	장쑤성 서양현	장쑤성 서양현	0.526	장쑤성 서양현	0.735	장쑤성 서양현	0.918
JS-104	장쑤성 서양현	장쑤성 서양현	0.562	장쑤성 서양현	0.824	장쑤성 서양현	0.914
LN1-101	랴오닝성 판진시-1	랴오닝성 판진시-1	0.576	랴오닝성 판진시-1	0.711	랴오닝성 판진시-1	0.881
LN1-102	랴오닝성 판진시-1	랴오닝성 판진시-1	0.738	랴오닝성 판진시-1	0.743	랴오닝성 판진시-1	0.893
LN1-103	랴오닝성 판진시-1	랴오닝성 판진시-1	0.546	랴오닝성 판진시-1	0.744	랴오닝성 판진시-1	0.450
LN1-104	랴오닝성 판진시-1	랴오닝성 판진시-1	0.594	랴오닝성 판진시-1	0.816	랴오닝성 판진시-1	0.838
LN2-101	랴오닝성 판진시-2	랴오닝성 판진시-2	0.769	랴오닝성 판진시-2	0.717	랴오닝성 판진시-2	0.832
LN2-102	랴오닝성 판진시-2	랴오닝성 판진시-2	0.593	랴오닝성 판진시-2	0.731	랴오닝성 판진시-2	0.774
LN2-103	랴오닝성 판진시-2	랴오닝성 판진시-2	0.763	랴오닝성 판진시-2	0.734	랴오닝성 판진시-2	0.863
LN2-104	랴오닝성 판진시-2	랴오닝성 판진시-2	0.535	랴오닝성 판진시-2	0.727	랴오닝성 판진시-2	0.745

SIMCA 모델을 사용해 얻은 동일 테스트 시료의 결과는 표 6에 나타나 있습니다. SIMCA 모델은 ‘거리’를 이용한 결과를 보여주며, 값이 낮을 수록 시료가 분류된 그룹에 속할 가능성이 더 높다는 것을 보여줍니다. SIMCA 모델은 1개의 쌀 시료(HLJ-101)를 제외한 모든 시료에 대해 원산지를 정확하게 예측했습니다. LN-2 그룹에서 유래했을 가능성이 가장 높은 것으로 예측된 HLJ-101은 PLSDA와 SVM 모델에서도 신뢰도가 낮았습니다(표 5). PCA 결과는 HLJ와 LN-2의 원소 프로파일링에 다수의 유사성이 있음을 보여주었습니다(그림 2).

표 6. SIMCA 모델로 예측한 24개의 ‘미지’ 쌀 시료 원산지 결과. 녹색: 정확한 예측, 갈색: 틀린 예측, 빨간색: 실제 원산지

시료 ID	실제 원산지	예측 알고리즘					
		SIMCA					
		거리 (광시성 구이강시)	거리 (헤이룽장성 우창시)	거리 (후베이성 징산시)	거리 (장쑤성 서양현)	거리 (랴오닝성 판진시-1)	거리 (랴오닝성 판진시-2)
GX-101	광시성 구이강시	0.857	8.050	2.901	8.363	7.635	3.254
GX-102	광시성 구이강시	0.203	9.422	4.627	7.672	8.797	4.865
GX-103	광시성 구이강시	0.221	11.803	2.816	8.288	8.953	3.522
GX-104	광시성 구이강시	0.195	8.879	3.965	7.573	8.219	3.801
HB-101	후베이성 징산시	3.759	11.049	0.255	9.807	6.379	4.664
HB-102	후베이성 징산시	5.279	10.986	0.527	10.328	5.746	5.411
HB-103	후베이성 징산시	5.179	10.519	0.343	9.809	5.585	5.048
HB-104	후베이성 징산시	4.126	10.093	0.367	9.026	5.288	4.650
HLJ-101	헤이룽장성 우창시	4.806	3.262	4.684	4.202	3.043	1.841
HLJ-102	헤이룽장성 우창시	7.328	0.370	6.634	2.685	3.246	1.511
HLJ-103	헤이룽장성 우창시	8.362	0.407	7.177	2.515	3.702	1.475
HLJ-104	헤이룽장성 우창시	8.740	0.630	7.133	2.351	3.012	1.895
JS-101	장쑤성 서양현	14.174	6.839	16.351	0.141	2.901	4.514
JS-102	장쑤성 서양현	12.018	6.895	14.477	0.647	2.830	4.234
JS-103	장쑤성 서양현	12.831	6.750	16.327	0.292	3.003	2.786
JS-104	장쑤성 서양현	12.003	7.809	17.050	0.146	4.089	3.750
LN1-101	랴오닝성 판진시-1	15.744	10.073	10.605	3.314	0.141	5.148
LN1-102	랴오닝성 판진시-1	18.586	8.118	12.548	3.465	0.302	6.626
LN1-103	랴오닝성 판진시-1	24.607	12.810	22.225	3.157	0.892	7.842
LN1-104	랴오닝성 판진시-1	17.242	12.822	12.874	5.091	0.193	6.848
LN2-101	랴오닝성 판진시-2	11.641	2.939	8.208	2.757	2.114	0.400
LN2-102	랴오닝성 판진시-2	11.823	2.944	9.358	3.014	2.573	0.266
LN2-103	랴오닝성 판진시-2	8.010	2.334	8.650	2.498	3.692	0.379
LN2-104	랴오닝성 판진시-2	9.582	3.681	9.425	2.805	3.444	0.570

결론

헬륨 충돌 모드에서 작동하는 ORS⁴ 셀을 갖춘 Agilent 7900 ICP-MS는 식품 진위 판별 연구에 필수적인 고품질, 견고성, 안정성을 갖춘 데이터를 생성하는 것으로 나타났습니다. 모든 분석물질에 대해 단일 셀 가스 모드를 사용하여 90개 쌀 시료 분해물 내에서 24종 원소를 검출할 수 있었습니다. 90개의 쌀 표본 중 66개의 데이터는 나머지 24개 시료의 원산지를 밝히기 위한 예측 모델을 구축하는 데 사용되었습니다.

대규모 데이터 세트 처리에는 Agilent MPP 통계 소프트웨어를 사용했습니다. PCA를 사용한 데이터 분석은 쌀의 원소 조성이 원산지에 의해 영향을 받는다는 점과, 5개 지역 간 차이가 비교적 뚜렷하게 드러남을 보여주었습니다.

4개의 예측 모델은 MPP 소프트웨어에서 간단한 절차를 통해 구축했습니다. 모델은 ICP-MS 데이터를 사용하여 트레이닝하고, '미지' 시료를 사용하여 테스트했습니다. 이 연구는 24개 '미지' 시료를 단일 예측 모델이 아닌 다중 예측 모델을 사용하여 정확하게 예측하는 것이 가능함을 보여주었습니다. 다중 모델 접근은 보다 정확한 예측 결과로 이어질 수 있으며, 시료의 원소 프로파일을 더 잘 이해할 수 있도록 합니다.

이 연구에서 서술된 원소 프로파일링은 쌀의 원산지 규명을 비롯해 높은 가치를 지닌 다른 식품에 대한 일반 진위 판별 분석에서도 잠재적 가능성을 가집니다.

참고 문헌

1. Dion M.A.M. Luykx, Saskia M. van Ruth, An overview of analytical methods for determining the geographical origin of food products, *Food Chemistry*, **2008**, 107, 897–911
2. Jenny Nelson, Elaine Hasty, Leanne Anderson, Macy Harris, 미국 FDA EAM 4.7 ICP-MS 분석법에 따른 식품 내 주요 원소 검출, 애질런트 발행물, [5994-2839KO](#)
3. Shuofei Dong, Jenny Nelson, Michiko Yamanaka, Routine Analysis of Fortified Foods using the Agilent 7800 ICP-MS, Agilent publication, [5994-0842EN](#)
4. Kazuhiro Sakai, Junichi Takahashi and Ed McCurdy, Application of the Agilent 7900 ICP-MS with Method Automation function for the routine determination of trace metallic components in food CRMs, Agilent publication, [5991-4556EN](#)
5. Jenny Nelson, Helene Hopfer, Authentication of Specialty Teas: An Application Note. *Food Qual. Safety*, **2018**, December, accessed February 2021, <https://www.foodqualityandsafety.com/article/specialty-tea-authentication/>
6. Jenny Nelson et al., Determining the metal content of the spices and identifying the country of origin, *Food Qual. Safety*, **2019**, May, accessed February 2021, <https://www.foodqualityandsafety.com/article/authentic-spices-identifying-country-origin/>
7. U.S. EPA. 2014. Method 6020B (SW-846): Inductively Coupled Plasma-Mass Spectrometry, Revision 2. Washington, DC. <https://www.epa.gov/sites/production/files/2015-12/documents/6020b.pdf>
8. Successful Low Level Mercury Analysis using Agilent ICP-MS, Agilent publication, [5990-7173EN](#)
9. Spiros A. Drivelos, Constantinos A Georgiou, Multi-element and multi-isotope-ratio analysis to determine the geographical origin of foods in the European Union, *Trends Anal. Chem.*, **2012**, 40, 38–51

www.agilent.com/chem

DE44425.119375

이 정보는 사전 고지 없이 변경될 수 있습니다.

© Agilent Technologies, Inc. 2021
2021년 9월 6일, 한국에서 인쇄
5994-4043KO

한국애질런트테크놀로지스㈜
대한민국 서울특별시 서초구 강남대로 369,
A+ 애셋타워 9층, 06621
전화: 82-80-004-5090 (고객지원센터)
팩스: 82-2-3452-2451
이메일: korea-inquiry_lsca@agilent.com

 **Agilent**
Trusted Answers