

## 주성분 분석을 이용한 홍삼의 내부품질과 자기공명특성 분석

### Analysis of Internal Quality and Magnetic Resonance Characteristics of Red Ginseng Using PCA

임종국	김철수	김성민
정회원	정회원	정회원
J. G. Lim	C. S. Kim	S. M. Kim

#### ABSTRACT

Ten MHz pulsed NMR spectrometer was used to measure the magnetic resonance characteristics of Korean red ginseng. The difference in the internal structures of good and bad red ginsengs was examined by their NMR characteristics. Average values of  $T_1$  and free induction decay(FID) ratios of undergrade Korean red ginseng were the highest among the three groups categorized as normal, medium and under grades Korean red ginseng and average values of  $T_2$  and  $T_2^*$  of them were the lowest among the three groups. Principal component analysis(PCA) was used to observe the contribution of measured NMR values to the grade of Korean red ginseng. The measured  $T_1$ ,  $T_2$ ,  $T_2^*$  and FID ratio of 79 Korean red ginsengs classified as normal grade, medium grade and under grade were examined using PCA analysis. Cumulative variance of PC1 through PC3 occupied more than 90% of total variance at first and second NMR measurement. Plots of PC scores for the most important PCs showed that normal red ginseng samples were distributed around the left region of PC1 axis and most of the undergrade red ginseng samples were scattered around the right region of PC1 axis.

**Keywords** : Nuclear magnetic resonance, Free induction decay, Principal component analysis, Internal structure, Korean red ginseng.

#### 1. 서 론

장기간 저장을 목적으로 제조되는 홍삼은 그 효능이나 약효에 있어서 이미 여러 방면의 연구 결과로서 입증되어 있으며, 그 수요 또한 근래에 들어서 증가하고 있는 추세이다. 이에 보다 나은 양질의 홍삼 제품을 생산하기 위해서는 내부 품질을 저하시키는 내백, 생내백, 내공 등의 인자들의 정확한 선별 과정이 선행되어야 할 것이다. 홍삼의 내부 품질에 관한 연구로는 Do 등(1985)이 불량홍

삼(내백삼)의 생화학적 및 조직학적 특성을 분석하였으며, Yoon 등(1992)은 재배조건이 홍삼의 내공 발생에 미치는 영향에 대해 연구하였다. 최근에는 Jang 등(1998)이 비파괴적인 품질 검사 방법 중의 하나인 핵 자기 공명(nuclear magnetic resonance, NMR)장치를 이용하여 홍삼의 NMR 측정인자와 용적밀도의 상관성을 구명하였다. 또한, 홍삼의 내부 품질에 따른 등급간의 차이를 규명하기 위해 다변량 분석법중의 하나인 주성분분석(principal component analysis, PCA)을 이용하여 분석에

This Study was supported by Technology Development Program for Agriculture and Forestry, Ministry of Agriculture and Forestry, Republic of Korea. The corresponding author is S. M. Kim, Assistant Professor, Division of Bioresource Systems Engineering, Chonbuk National University, Chonju 561-756, Korea.

적용하였다. PCA에 의한 패턴 인식법은 다양한 농산물의 NMR 측정 데이터에 응용되고 있다 (Belton 등, 1998). 따라서 본 연구에서는 측정된 NMR 특성 인자들과 내부 품질과의 연관성을 도출하고 PCA를 이용하여 홍삼 등급간의 차이를 제시하고자 하였다.

## 2. 재료 및 방법

### 가. 홍삼 시료

본 실험에 사용된 시료는 부여 고려인삼장에서 제조하고 홍삼 선별 전문가에 의해서 분류된 세 등급의 홍삼을 사용하였다. 분류 기준은 체형과 같은 외형적인 기준보다는 내백, 내공 등의 내부 조직을 기준으로 선별되었다. 각각 세 등급으로 분류된 홍삼은 정상 홍삼(normal red ginseng)이 30편, 중간 홍삼(medium red ginseng)이 10편, 불량 홍삼(undergrade red ginseng)이 39편으로 총 79편을 사용하였다. 또한 그림 1에서 보는 바와 같이, 두 차례의 NMR 실험을 수행하였는데, 1차 NMR 실험에서는 뇌두를 제거한 후 측정(이하, 1차 측정) 하였으며, 2차 NMR 실험은 뇌두가 제거된 몸통으로부터 약 10~15mm 제거한 후 측정(이하, 2차 측정)을 하였다. 이렇게 홍삼을 절단하여 실험에 이용한 것은 인력에 의한 검사에 있어서 실제 검사 부위 위치와 NMR 장치에 있어서 자장의 균일성이 높게 나타나는 hot spot의 위치를 일치시켜 검사하고자 하는 부위의 정확한 자기 공명 신호를 찾기 위해서였다.

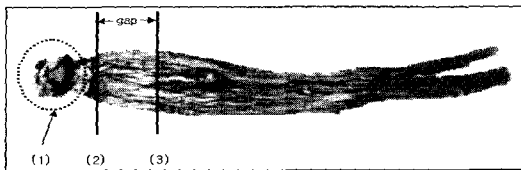


Fig. 1 (1) Rhizome cutting, gap = 10~15mm.  
(2) 1st NMR measurement.  
(3) 2nd NMR measurement.

### 나. NMR 장비

실험은 10 MHz Pulsed NMR system(NMS 110, Bruker, Germany)을 사용하였다. 표 1과 그림 2는

사용된 장비에 대한 주요 사양과 외관을 나타냈으며, 중심 자장은 0.23 tesla인 영구자석이 장착되어 있으며 사용된 sample tube는 직경 40 mm 관을 사용하였다.

Table 1 Specifications of NMR equipment

10MHz Pulsed NMR equipment	
Company	Bruker, Germany
Pulse	10 MHz
Model	NMS110
Magnet	permanent magnet
Pulse resolution	50 ns
Tube size	$\phi = 40 \text{ mm}, 50 \text{ mm}$

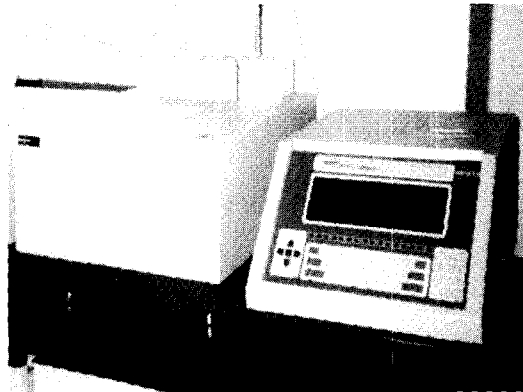


Fig. 2 Outline of NMR system.

### 다. Pulse sequences

1차 및 2차 NMR 실험서  $T_1$ ,  $T_2$ ,  $T_2^*$ 를 측정하기 위하여 사용된 pulse sequence는 동일한 변수를 설정, 측정하였다. 각각의 실험에 있어서 자기 공명 신호의 신뢰성을 높이고 자장의 불균일성 및 시료 형태의 불규칙성을 감안하여 홍삼을 sample tube에 삽입한 후  $0^\circ$ ,  $120^\circ$ ,  $240^\circ$  회전시키면서 측정하였다. 홍삼 시료에 대한  $T_1$ 값을 측정하기 위해 IR(inversion recovery) pulse sequence를 사용하였으며,  $T_2$ 값을 측정하기 위하여 CPMG(Carr Purcell Meiboom Gill) pulse sequence를 사용하였다.  $T_2^*$ 값 측정에 사용한 FID(free induction decay) 신호 획득 간격은 0.03msec로 하였고, 데이터 획득 포인트 수는 80으로 하였다.

라. FID ratio

계산된 FID ratio 값은 그림 3과 같이, 각 홍삼 시료의  $T_2^*$  값에 임의의 시간(a)을 곱하여 이것을 다시 최대 FID 신호 값으로 나눈 비율 값을 이용하였다. 이때 a는 0.6에서 6.3까지 0.3 간격으로 하였으며, 본 연구에서는 a값이 2.4일 때의 값을 이용한 FID ratio 값을 사용하였다. 여기서 FID ratio를 도입한 이유는 실험에 사용한 홍삼의 크기는 모두 다르고, 그렇기 때문에 동일한 내부 조직 상태를 가지는 시료라 할 지라도 크기에 의한 FID

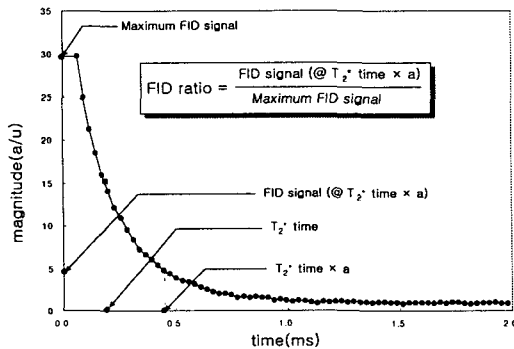


Fig. 3 Calculation method of FID ratio.

신호의 차이가 발생하기 때문이고, 이 같은 신호의 차이를 상쇄시키기 위해서이다.

마. 주성분 분석

주성분 분석이란 차원 축소를 통하여 저차원 상에서 변수의 관계를 규명하는 다변량 분석 기법이다. 주성분 분석법을 이용하여 NMR 측정 인자들인  $T_1$ ,  $T_2$ ,  $T_2^*$  및 FID ratio를 측정변수로 하고 정상, 중간 및 불량량의 79편의 홍삼 시료를 관측 대상으로 하여 홍삼의 내부 품질과 주성분(principal component, PC)과의 연관성을 도출하고자 하였으며, 이러한 분석은 상용 프로그래밍(MATLAB, version 5.3, Mathworks, USA) 소프트웨어를 이용하였다.

3. 결과 및 고찰

가. 홍삼 등급별 자기공명 특성

NMR 데이터의 기본적인 분석으로서 각각의 등급에 해당하는 NMR 측정 인자의 평균 및 표준 편차의 값을 표 2와 표 3에 나타내었다. 표 2는 1차 측

Table 2 NMR parameters of red ginsengs (1st measurement)

Grade	Parameters	$T_1$ (msec)			$T_2$ (msec)			$T_2^*$ (msec)			FID ratio		
		1st	2nd	3rd	1st	2nd	3rd	1st	2nd	3rd	1st	2nd	3rd
Normal red ginsengs (30 samples)	Mean	17.903	17.811	17.644	0.354	0.354	0.355	0.207	0.202	0.208	0.151	0.150	0.150
	Std. dev.	3.950	4.009	3.994	0.047	0.052	0.049	0.018	0.016	0.019	0.008	0.008	0.008
	Mean	17.786			0.355			0.206			0.150		
	Std. dev.	3.983			0.049			0.016			0.008		
Medium red ginsengs (10 samples)	Mean	18.920	18.756	18.594	0.301	0.301	0.307	0.181	0.185	0.184	0.160	0.161	0.160
	Std. dev.	6.308	6.403	6.447	0.014	0.027	0.015	0.018	0.017	0.017	0.011	0.010	0.011
	Mean	18.757			0.303			0.184			0.161		
	Std. dev.	6.384			0.018			0.015			0.010		
Undergrade red ginsengs (39 samples)	Mean	26.686	26.057	25.651	0.287	0.301	0.298	0.168	0.163	0.169	0.179	0.180	0.178
	Std. dev.	7.024	6.921	7.014	0.040	0.060	0.045	0.031	0.027	0.030	0.022	0.021	0.020
	Mean	26.131			0.295			0.167			0.179		
	Std. dev.	6.970			0.039			0.029			0.021		

정 후 NMR 인자들인  $T_1$ ,  $T_2$ ,  $T_2^*$  및 FID ratio 값을 나타낸 것이고, 표 3은 2차 측정후의 NMR 인자들을 나타내었다.

그림 4에서와 같이,  $T_1$ 값의 경우 내부 품질이 양호하지 않은 홍삼일수록 그 값이 증가하는 경향이 있었으며, 각각의 등급에 해당하는 홍삼의 평균 및 표준편차는 표 2와 표 3에서 보는 바와 같이 정상 홍삼의 경우  $17.786 \pm 3.983$ msec(1차 측정) 및  $18.807 \pm 4.099$ msec(2차 측정)이었으며, 중간 홍삼의 경우  $18.757 \pm 6.384$ msec(1차 측정) 및  $20.178 \pm 6.644$ msec(2차 측정) 수준으로 1차보다는 2차 측정에서 다소 증가하는 경향을 나타내었다. 그러나 불량 홍삼의 경우에 있어서는  $26.131 \pm 6.970$ msec(1차 측정)에서  $25.798 \pm 6.608$ msec(2차 측정)로 감소하는 경향을 나타내었다. FID ratio는 표 2, 표 3 및 그림 5에서와 같이, 정상 홍삼 :  $0.150 \pm 0.008$ msec(1차 측정),  $0.154 \pm 0.009$ msec(2차 측정) < 중간 홍삼 :  $0.161 \pm 0.010$ msec(1차 측정),  $0.164 \pm 0.010$ msec(2차 측정) < 불량 홍삼 :  $0.179 \pm 0.021$ msec(1차 측정),  $0.180 \pm 0.021$ msec(2차 측정)로 1차 보다 2차 측정에 있어서 각 등급의 홍삼에 대한 평균값이 증가하는 경향을 나타냈다. 그림 6과 그림 7에서 보는 바와 같이  $T_2$ 와

$T_2^*$ 의 값은 내부 품질이 저하될수록 1차 측정에서보다 2차 측정에서 낮게 나타났다.  $T_2^*$ 의 경우, 정상 홍삼은 1차 측정에 있어서  $0.206 \pm 0.016$  msec에서 2차 측정에 있어서는  $0.193$  msec가 낮은  $0.193 \pm 0.016$  msec로 측정되었으며, 중간 홍삼은  $0.184 \pm 0.015$  msec(1차 측정) 및  $0.173 \pm 0.016$  msec(2차 측정)이며, 불량 홍삼은  $0.167 \pm 0.029$  msec(1차 측정) 및  $0.156 \pm 0.027$  msec(2차 측정)으로 나타났다.

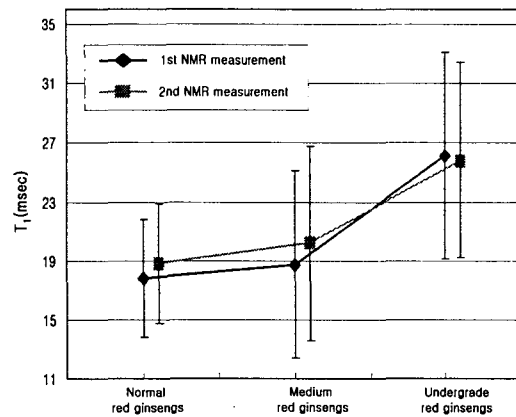


Fig. 4  $T_1$  values of red ginsengs.

Table 3 NMR parameters of red ginsengs (2nd measurement)

Grade	Parameters	$T_1$ (msec)			$T_2$ (msec)			$T_2^*$ (msec)			FID ratio		
		1st	2nd	3rd	1st	2nd	3rd	1st	2nd	3rd	1st	2nd	3rd
Normal red ginsengs (30 samples)	Mean	19.006	18.884	18.752	0.292	0.296	0.299	0.200	0.190	0.189	0.154	0.155	0.154
	Std. dev.	4.075	4.119	4.115	0.023	0.021	0.020	0.018	0.018	0.019	0.008	0.010	0.009
	Mean	18.807			0.296			0.193			0.154		
	Std. dev.	4.099			0.020			0.016			0.009		
Medium red ginsengs (10 samples)	Mean	20.520	20.171	19.843	0.257	0.261	0.265	0.170	0.174	0.176	0.165	0.164	0.163
	Std. dev.	6.629	6.723	6.588	0.014	0.014	0.020	0.017	0.015	0.01	0.010	0.012	0.010
	Mean	20.178			0.261			0.173			0.164		
	Std. dev.	6.644			0.014			0.016			0.010		
Undergrade red ginsengs (39 samples)	Mean	26.233	25.739	25.422	0.253	0.260	0.259	0.157	0.153	0.158	0.180	0.179	0.180
	Std. dev.	6.690	6.523	6.628	0.036	0.043	0.030	0.029	0.025	0.029	0.022	0.021	0.022
	Mean	25.798			0.257			0.156			0.180		
	Std. dev.	6.608			0.033			0.027			0.021		

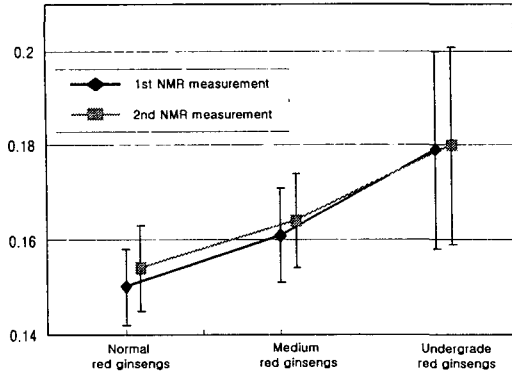


Fig. 5 FID ratio of red ginsengs.

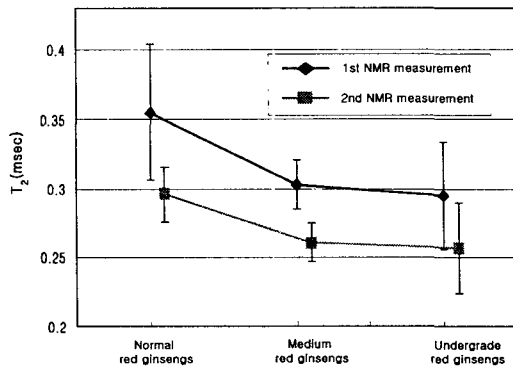


Fig. 6 T<sub>2</sub> values of red ginsengs.

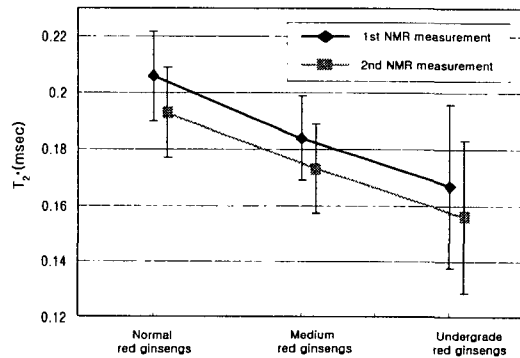


Fig. 7 T<sub>2</sub><sup>\*</sup> values of red ginsengs.

#### 나. 주성분 분석

정상, 중간 및 불량량의 세 등급으로 분류된 홍삼에 대해서 주성분 분석을 이용하여 각 홍삼 시료에 대한 등급을 파악하기 위해서 주성분 분석을 실시하였다. 주성분 분석에 있어서 입력변수로는

T<sub>1</sub>, T<sub>2</sub>, T<sub>2</sub><sup>\*</sup> 및 FID ratio를 3회 반복 계산된 값 모두 총 12개를 변수로 설정하였다. 관측 대상으로서는 실험에 사용했던 총 79개의 홍삼을 이용하였다.

표 4와 표 5는 1차 및 2차 NMR 측정에 있어서 주성분 분석의 고유치, 분산 및 분산 누적을 나타내고 있다. 본 주성분 분석에 있어서 1차 NMR 측정에는 PC1~PC3가 전체 분산 누적율의 93.84%를 점유하고 있으므로, 이 세 개의 PC가 홍삼의 내부 품질과 관련하여 NMR 측정인자와의 관계를 설명하는 데 가장 유의성이 높은 변수로 판단된다. 2차 NMR 측정에 있어서도 PC1~PC3까지의 분산 누적율이 93.76%로서 전체 분산의 대부분을 차지하고 있기에 홍삼의 내부 품질과 측정 변수와의 관계를 설명하는데 적합하다고 판단된다. 그림 8과 그림 9는 각각 1차 및 2차 NMR 실험에 있어서 주성분 분석에 사용된 12개의 측정 변수와 PC1의 상관관계를 나타낸 것이다. 각각의 그래프에서 관찰할 수 있듯이 x축에는 분석에 사용된 12개의 변수들이 순서대로 나열되어 있으며, y축에는 가장 기여도가 높은 PC1을 기준으로 하여 각 변수들의 분포 상태에 따른 상관성을 파악하였다. 그림 8과 그림 9는 서로 비슷한 경향을 나타냈는데, y축의 PC1의 0을 기준으로 하여 양의 영역에는 T<sub>1</sub>과 FID ratio가 분포 되어있으며, 음의 영역에는 T<sub>2</sub>와 T<sub>2</sub><sup>\*</sup>가 분포되어 있음을 관찰할 수 있다. 즉, 앞에서 선행된 그래프 분석과 같은 결과로서 홍삼 등급이 저하될수록 T<sub>1</sub>과 FID ratio는 증가하는 정의 상관관계를 나타내며, T<sub>2</sub>와 T<sub>2</sub><sup>\*</sup>는 홍삼 등급이 저하될수록 같이 감소하는 부의 상관관계를 나타내는 것을 관찰할 수 있다.

그림 10과 그림 11은 1차 NMR 측정에서 얻은 인자들을 측정 변수로 하고 79개의 홍삼 시료를 관측 대상으로 하여 주성분 분석을 실시한 것이다. x축은 분산이 가장 높은 PC1을 기준으로 하였으며, y축은 각각 PC2와 PC3을 도시하여 그 경향을 관찰하였다. 각각의 scores plot에서 보듯이 PC1의 분산이 약 65% 이상으로 홍삼의 등급별 분포 추이에 있어서 높은 신뢰성을 가질 수 있으며, 그림 10과 그림 11의 PC1의 0을 중심으로 하여 좌측의 (-)영역에는 정상 홍삼이 분포되어 있으며 중간 등급은 PC1 축의 중앙에 불량등급은 PC1 축의 우측에 분포되어 있었다. 전체적인 홍삼 등급의 변화에서 파악되듯이 PC1의 0을 기준으로 하여

Table 4 Eigen-value PCA of 1st NMR measurement

Principal component	Eigen-Value (auto-scaled)	Variance (%)	Cumulative variance(%)
1	7.86e+000	65.51	65.51
2	2.22e+000	18.48	83.99
3	1.18e+000	9.85	93.84
4	2.49e-001	2.07	95.91
5	1.76e-001	1.47	97.38
6	1.05e-001	0.87	98.25
7	9.49e-002	0.79	99.04
8	7.43e-002	0.62	99.66
9	2.30e-002	0.19	99.85
10	1.27e-002	0.11	99.96
11	3.82e-003	0.03	99.99
12	1.28e-003	0.01	100.00

Table 5 Eigen-value PCA of 2nd NMR measurement

Principal component	Eigen-Value (auto-scaled)	Variance (%)	Cumulative variance(%)
1	7.66e+000	63.80	63.80
2	2.03e+000	16.88	80.68
3	1.57e+000	13.08	93.76
4	2.41e-001	2.01	95.77
5	1.74e-001	1.45	97.22
6	1.39e-001	1.16	98.38
7	8.54e-002	0.71	99.09
8	6.43e-002	0.54	99.63
9	2.77e-002	0.23	99.85
10	1.44e-002	0.12	99.97
11	1.76e-003	0.01	99.99
12	1.30e-003	0.01	100.00

좌측인 (-)영역에서 우측의 (+)영역으로 이동할수록 홍삼의 내부 품질이 하락하는 홍삼이 분포되어 있다고 볼 수 있다. 그림 12와 그림 13은 2차 NMR 측정 인자들을 대상으로 하여 주성분 분석을 실시한 것이다. 1차 NMR 측정과 거의 유사한 결과를 보임을 관찰할 수 있으며 특히, 정상 홍삼

의 경우 그 분포도가 1차에 비해서는 한 영역에 군집화되어 있음을 알 수 있다. 이는 2차 NMR 측정에 있어서 뇌두 하단부에서 10~15mm 정도 제거한 후 측정된 홍삼의 부위가 실제 검사 부위와 거의 일치하는 부분으로 NMR 측정값은 신뢰할 수 있는 결과를 얻었다고 판단된다.

주성분 분석을 이용한 홍삼의 내부품질과 자기공명특성 분석

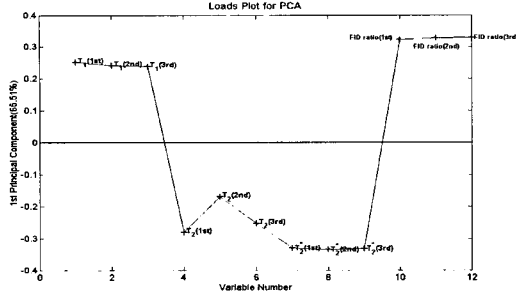


Fig. 8 Loads plot of 1st NMR measurement.

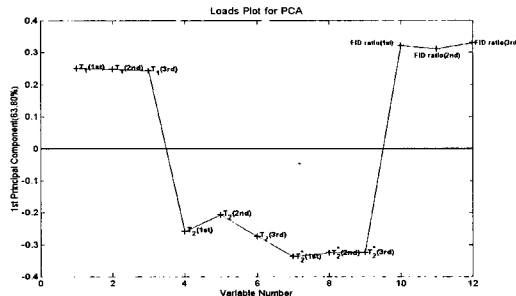


Fig. 9 Loads plot of 2nd NMR measurement.

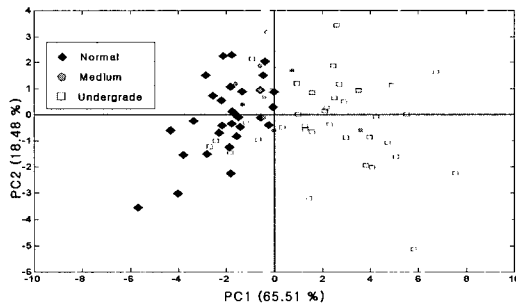


Fig. 10 Scores plot of 1st NMR measurement (PC1 & PC2).

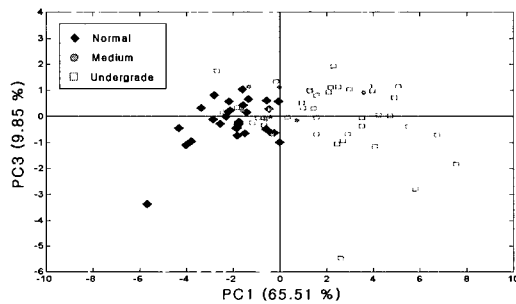


Fig. 11 Scores plot of 1st NMR measurement (PC1 & PC3).

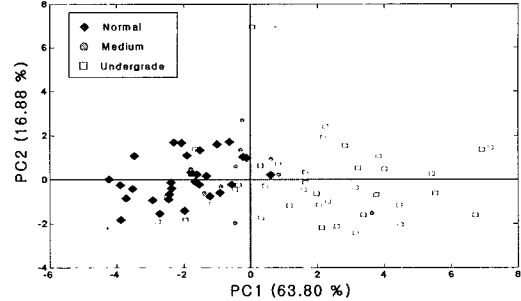


Fig. 12 Scores plot of 2nd NMR measurement (PC1 & PC2).

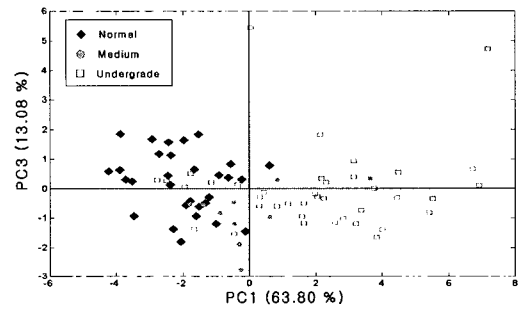


Fig. 13 Scores plot of 2nd NMR measurement (PC1 & PC3).

4. 요약 및 결론

선별 전문가에 의해서 세 등급으로 분류된 79편의 홍삼 시료에 대하여 10 MHz pulsed NMR장치를 이용하여 자기 공명 특성 인자들을 측정하여 내부 품질과의 연관성을 도출하였다. 두 차례에 걸쳐 실험을 실시하였으며, 각각 3회 반복으로 수행하였다. 1차 및 2차 NMR 측정에 있어서, 획득된 자기 공명 특성 인자들로서는  $T_1$ ,  $T_2$ ,  $T_2^*$  및 FID ratio 값들이 측정 및 계산되었다.  $T_1$  값 및 FID ratio 계산 값의 경우 1차와 2차의 실험에 있어서 전체 그룹간의 평균값의 크기가 일반적으로 불량>중간>정상 홍삼의 순으로 나타났으며,  $T_2$  및  $T_2^*$  값의 경우 정상>중간>불량 홍삼의 순으로 나타났다.

주성분 분석을 위한 측정 변수로는 획득된  $T_1$ ,  $T_2$ ,  $T_2^*$  및 FID ratio 값을 이용하였으며 관측 대상은 정상, 중간 및 불량으로 분류된 79편의 홍삼으로 하였다. 1차 및 2차 NMR 측정의 주성분 분석 결과에 있어서 PC1~PC3의 분산이 각각 전체 분산의 90% 이상을 점유하고 있었다. 주성분 분석의

socre plot을 이용하여 홍삼 시료에 대해 그 분포 경향을 관찰하여 본 결과, PC1의 0을 기준으로 하였을 경우에 좌측의 음의 영역에는 정상홍삼 그룹이 분포하고 있었으며 우측의 양의 영역으로 갈수록 불량 홍삼이 분포하는 것으로 나타났다.

### 참 고 문 헌

1. Belton, P. S., I. J. Colquhoun, E. K. Kemsley, I. Delgadillo, P. Roma, M. J. Dennis, M. Sharman, E. Holmes, J. K. Nicholson and M. Spraul. 1998. Application of chemometrics to the <sup>1</sup>H NMR spectra of apple juices : discrimination between apple varieties. *Food Chemistry*. 61(1/2): 207-213.
2. Do, J. H., S. D. Kim and H. S. Sung. 1985. Biochemical and Histological Characteristics of Inferior Red Ginseng. *Korean J. Ginseng Sci.* 9(2): 256-263.
3. Jang, G. C. and R. Ruan. 1998. Determination of Bulk Density and Internal Structure of Red Ginseng Root Using NMR. *Korean J. Ginseng Sci.* 22(2): 96-101.
4. Yoon, J. H., J. J. Kim and H. Park. 1992. Relation between Cultural Condition and Occurrence of Internal Cavity in Red Ginseng. *Korean Society of Soil Science & Fertilizer.* 25(2): 175-180.