

# 主成分分析法及其在啤酒风味评价分析中的应用

邵威平<sup>1</sup>, 李 红<sup>2</sup>, 张五九<sup>2</sup>

(1.甘肃农业大学食品科学与工程系, 甘肃 兰州 730070; 2.中国食品发酵工业研究院, 北京 100027)

**摘 要:** 用较少的综合指标概括存在于大量观测数据中的各类信息, 综合指标之间彼此不相关, 各指标代表的信息不重叠的分析方法称为主成分分析。应用主成分分析法可实现对不同品牌啤酒风味差异性的评价、同一品牌啤酒风味一致性的评价、同一品牌不同生产厂之间一致性的评价和同一生产厂啤酒一致性的评价。该方法可消除各变量之间的共线性, 减少变量的个数, 结果直观; 可以对啤酒样品风味的差异性、一致性与均一性进行分析比较。(孙悟)

**关键词:** 啤酒; 主成分分析; 啤酒风味; 评价

中图分类号: TS262.5; TS261.7; O657 文献标识码: B 文章编号: 1001- 9286(2007) 11- 0107- 04

## Main Components Analysis Method & Its Application in the Evaluation of Beer Flavor

SHAO Wei-ping<sup>1</sup>, LI Hong<sup>2</sup> and ZHANG Wu-jiu<sup>2</sup>

(1.Department of Food Sciences, Gansu Agricultural University, Lanzhou, Gansu 730070; 2.China National Research Institute of Food and Fermentation Industry, Beijing 100027, China)

**Abstract:** The use of less composite indicators to generalize varieties of information in large amount of measurement data (no correlations among composite indicators and no information overlapping of each composite indicator) was called main components analysis. It could be used in evaluating the discrepancy of the flavor of different brands beer, the consistency of the flavor of the same brand beer, the consistency of the flavor of beer of the same brand but produced in different manufacturers, and the consistency of the flavor of beer produced in the same manufacturer. Main components analysis method could eliminate the colinear among all the variate and reduce variate quantity. It could be used in evaluating the discrepancy and the consistency of beer flavor.

**Key words:** beer; main components analysis; beer flavor; evaluation

在科学研究中, 常常需要对反映事物属性的多个变量进行大量的观测, 收集大量数据。多变量大样本无疑会为科学研究提供丰富信息, 但同时也给数据处理带来了困难。特别是某些变量之间可能存在相关性和非相关性, 这意味着表面上看来彼此不同的观测数据并不能从各个侧面反映事物的不同属性, 而恰恰是事物同一种属性的不同表现。由于这种相关性, 使得观测数据所反映出的事物本质, 并没有观测数据本身多。如何从大量的观测数据中挤去泡沫成分, 获取事物的本质属性, 这就是主成分分析的目的。通过主成分分析, 用较少的综合指标概括存在于大量观测数据中的各类信息, 而综合指标之间彼此不相关, 各指标代表的信息不重叠, 我们将这种分析方法称为主成分分析; 代表特类信息的综合指标称为因子或主成分。

啤酒是个多指标风味食品, 为了全面了解啤酒的风味, 啤酒企业开发了大量的检测方法用于分析啤酒的指标, 但是面对大量的指标数据, 大多数企业又感到茫然, 不知道如何利用这些大量的数据, 由上面的介绍可知, 在这种情况下, 主成分分析法能够派上用场。近年来, 科研人员为了获得对啤酒风味更好的理解, 多元统计技术的使用越来越多。这主要有以下两方面的原因: 在啤酒领域里, 几乎没有一个问题能够使用单变量(单指标)就能反映事物的属性, 例如啤酒的好坏、一致性, 不能通过双乙酰一个指标说明问题; 另一个重要的原因就是, 近年来大量数学统计软件的不断出现和个人电脑的普及促进了多元统计分析技术的应用。多元统计技术在啤酒风味研究中的一个重要任务就是找出啤酒风格和啤酒理化指标(风味成分指标也属于理化指标)之间的

收稿日期: 2007- 06- 30

相关性。例如可以用多元统计技术来找出啤酒的风味指标和啤酒风味的关系或不同啤酒的风味差异性。

经常使用的多元统计技术有聚类分析、判别分析、主成分分析和回归分析等。其中主成分分析能够用于多指标产品,主成分分析可以按照事物的相似性区分产品,结果可用一维、二维或三维平面坐标图表示,特别直观。使用主成分分析法可以研究隐藏在不同变量背后的关系,而且根据这些变量能够获得主成分的背景解释。

鉴于主成分分析在啤酒风味质量应用中的强大作用,本文简单介绍主成分分析的基本原理及其在啤酒一致性监控中的应用,以引起我国啤酒同行的广泛关注。

## 1 材料与方法

### 1.1 仪器

HP 6890 毛细管气相色谱仪(美国安捷伦公司),FID 检测器,HP 7694E 顶空自动进样器,HP 气相色谱化学工作站。

### 1.2 分析方法

#### 1.2.1 样品制备

啤酒于 5℃ 冷藏,量取 5 mL 酒液于 20 mL 顶空瓶中,添加 2.0 g/L 正丁醇溶液 0.10 mL,加密封垫及铝盖密封,振荡混匀以供顶空气相色谱测定。

#### 1.2.2 色谱条件

毛细管色谱柱(DB-WAXETR 30 m × 0.53 mm i.d.,膜厚 1.0 μm);柱温:起始温度为 35℃,以 10℃/min 程序升温至 150℃,再以 20℃/min 升温到 180℃,并继续恒温 5 min;进样口温度 150℃;检测器温度 200℃;载气为高纯氮气,流速为 5 mL/min;氢气 30 mL/min;空气 400 mL/min;采用分流进样,分流比为 1:1。

## 2 主成分分析的基本原理

### 2.1 主成分分析法在啤酒研究中的应用的必要性

这里通过一个例子说明,主成分分析在啤酒研究中的必要性。假如有 6 个啤酒样品,分别标为 A-F,每个啤酒样品用 3 个指标来描述。这些指标可以是仪器的分析数据、感官分析数据或两者都用。为了便于讨论,假设这 3 个指标分别为苦味值(BU)、DMS 和酒精浓度。为了解这 6 个样品两两之间的相似性,便于将这 6 个样品进行分类,可以把这 6 个样品画在三维空间中,见图 1。显然在这个简单的例子中,这 6 个样品倾向于形成两类,即分别是 A-C 和 D-F。通过所测的指标可以解释这种分类,例如,第一组(A-C)有较高的苦味值和较低的酒精浓度。这个例子中只涉及到 6 个样品和 3 个指标。但是实际上,样品数量和指标数量都会很大,例如,有 20 个指标,这时,样品不能在 20 维的坐标系中画出。为了解决多指标的样品的比较问题,可以使用主成分分析法。

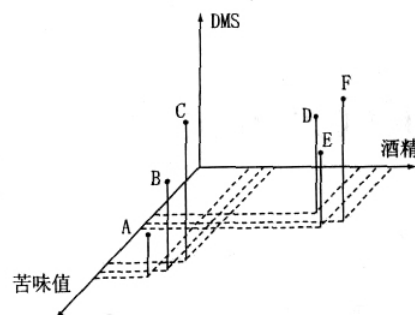


图 1 啤酒的三维坐标图

### 2.2 主成分分析法的基本原理

主成分分析的第一步是将所有的指标数据进行标准化,标准化的一般方法为:  $(x_{ij} - x_j \text{mean}) / \delta_j$ , 这里  $x_{ij}$  是样品  $j$  的第  $i$  个指标,  $x_j \text{mean}$  和  $\delta_j$  是第  $j$  个指标的平均值和标准偏差,通过标准化后,每个变量的平均值变成 0,标准偏差为 1。标准化的好处是可以消除不同指标间的量纲差异和数量级间的差异。

第二步求出指标间的相关矩阵,通过相关矩阵,可以确定具有高度相关性的指标,这些指标间的协方差可以通过另一个变量替代,这个变量叫作第一成分。去掉第一成分后,计算残留相关阵,通过残留相关阵,第二组高度相关的变量也可以发现,它们的协方差可以用第二成分替代,第二成分和第一成分是正交的。第二成分对原始数据的贡献去除后,可以提取第三成分。此过程一直继续,直到原始数据的所有方差都被提取后结束。结果是原数据转化成了同样数量的新变量,但是,这些新变量之间是正交的。

因此,每个样品的原始变量的标准化数据就被转换成一系列成分的计算值。每一个样品,原始数据能够表达成新成分的线性组合值,例如一个有 9 个指标的数据集就可转换成:

$$V_1 = L_{1,1}C_1 + L_{1,2}C_2 + \dots + L_{1,9}C_9$$

$$V_2 = L_{2,1}C_1 + L_{2,2}C_2 + \dots + L_{2,9}C_9$$

$$\dots$$

$$V_9 = L_{9,1}C_1 + L_{9,2}C_2 + \dots + L_{9,9}C_9$$

$V_1, V_2, \dots, V_9$  是原始数据的标准化值。 $L_{1,1}, L_{1,2}, \dots, L_{2,1}, L_{2,2}, \dots, L_{9,9}$  是原变量与新成分之间的相关程度的指标,一般将其称为因子荷载。

通过计算机的主成分程序生成对方差的贡献率。一般而言,原数据的总方差总是高度集中在前几个成分中。因此,在这个分析中,可以基于可以接受的最低方差贡献率,来选择几个数目较少的主成分。最终,可以用选择的几个主成分来重新计算所用的样品。重新计算的值叫做主成分得分。

因为原始数据阵的方差通常集中在前几个主成分中(一般为 2 或 3 个),因此样品的一系列标准化因子得

分可以在二维的平面坐标中画出, 这样就能够根据样品的相似性来分类样品。另外, 还可以根据因子荷载对这种分类做出某种解释。

### 3 主成分分析法在啤酒质量一致性评价中的应用

#### 3.1 主成分分析法在不同品牌啤酒风味差异性评价中的应用

啤酒是含酒精的饮料酒, 啤酒的风味是人们选择啤酒的主要影响因素。显然啤酒不同于同浓度的酒精水溶液, 主要是因为啤酒除了含有酒精外还含有数以百计的微量成分, 例如醛、醇及酯类等。对于啤酒生产企业来说, 把自己的啤酒和竞争啤酒的风味进行比较非常重要, 这样可以了解自己的啤酒和竞品的差异, 分析竞争啤酒受市场欢迎的原因, 以改进自己的产品, 或者找出自己啤酒的风格特点, 走差异化竞争之路。为了完成此工作, 啤酒企业可以把自己的啤酒和竞争啤酒进行对比品评, 这是一种非常好的方法, 但是此方法很难从本质上找到与竞品的差异, 很难形成指导生产的定性定量措施。为了解决此问题, 啤酒企业可以对啤酒的风味成分进行分析, 理论上讲, 分析的成分越多, 获得的信息量越大, 但是, 很难从总体上进行对比分析, 这时, 可以通过主成分分析法, 提取主要的综合成分, 然后在平面坐标系中画图进行比较。

图 2 是我国市场上主要啤酒的风味物质经主成分分析后的前两个主成分的平面坐标。分析的风味成分有乙醛、乙酸乙酯、异丁酯、乙酸异戊酯、异戊醇及己酸乙酯。分析的时间跨度为半年, 这些数据通过主成分分析法后, 提取前两个主成分, 这两个主成分可以反映全部信息的 83.1%, 提取较为完全, 这说明这两个主成分替代原始的 6 个风味成分反映的样品信息。百威啤酒、喜力啤酒和青岛啤酒是我国啤酒市场上的 3 种知名品牌, 同时这 3 种啤酒的质量也是得到人们的认可的。

从图 2 可看出, 尽管百威啤酒、喜力啤酒和青岛啤酒随着时间的变化每种啤酒的风味成分的含量有所波动, 但是, 每种啤酒还是各自成一团, 自成一类, 三者的中心犹如一个三角形的 3 个顶点, 三者组成一个风味三角形。从图 2 还可看出, 南方某品牌的啤酒有独自成型的特点, 即其不同于青岛啤酒、也不同喜力啤酒和百威啤酒的风格, 实际上通过感官品尝也可以得到此结论。

主成分分析法采用的分类是可以通过对主成分的分析做出解释的, 图 3 是前两个主成分的因子荷载图。

从图 3 可以看出, 主成分 1 主要由乙酸乙酯、乙酸异戊酯和己酸乙酯决定, 这些酯含量高, 主成分 1 就越大, 即主成分 1 代表了啤酒的酯香, 酯香越浓, 主成分 1 就越大。主成分 2 主要由乙醛、异丁醇和异戊醇决定, 这些成分能够代表啤酒的“酒劲”的大小, 这些成分含量越

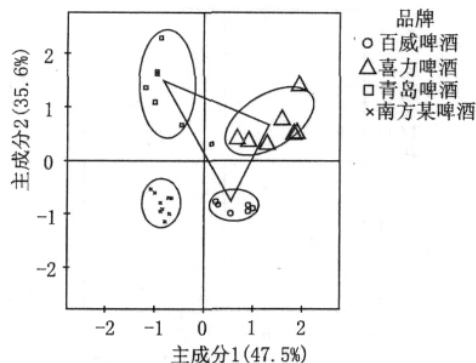


图 2 我国市场上不同品牌啤酒的主成分得分图

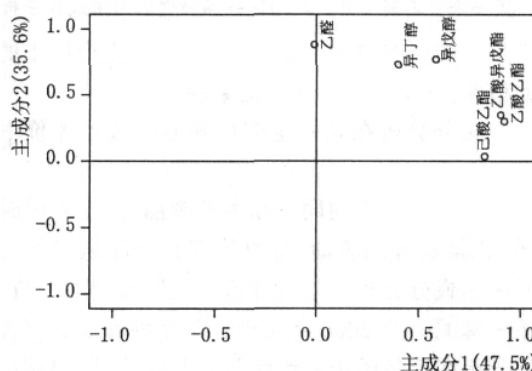


图 3 不同品牌啤酒的主成分的荷载

高, 主成分 2 就越大, 即啤酒的酒味就越重。结合这种解释, 就可以对图 2 中的分类做出分析, 其中百威啤酒是酒味适中和酯香相对较浓的“浓香型”啤酒, 喜力啤酒是酒味和酯香均较浓的“浓醇型”啤酒, 青岛啤酒是酒味较重, 而酯香较弱的“醇型”啤酒, 而某品牌的啤酒则是酒味和酯香均弱的“淡型”啤酒。

#### 3.2 主成分分析法在同一品牌啤酒风味一致性评价中的应用

##### 3.2.1 主成分分析法在同一品牌不同生产厂之间一致性评价中的应用

近十几年来, 我国啤酒行业发展非常快, 啤酒企业的规模越来越大, 很多啤酒企业已经走出啤酒的“原产地”到异地建厂, 进一步扩大企业的规模。对于一些啤酒企业来说, 新建厂面对的消费群体和建厂前面对的消费群体较为一致, 这时就要求新建厂生产的啤酒要与原厂生产的啤酒风格一致, 以免生产厂在切换时, 消费者不认可的情况发生。图 4 是同一企业的 3 个不同生产厂之间的同一品种啤酒的主成分分析图。

从图 4 可以看出, 总的来说, 3 个生产厂生产的啤酒还是比较一致的, 因为 3 个厂生产的同一品种的啤酒的波动范围较小。从图 4 还可以看出, 生产厂 1 因为生产的历史长, 生产较稳定, 因此其波动较小(图中的圆圈); 生产厂 2 和生产厂 3 的稳定性就稍差一点, 这是由于这两个厂都是新厂, 有个磨合的过程。同时, 生产厂 2

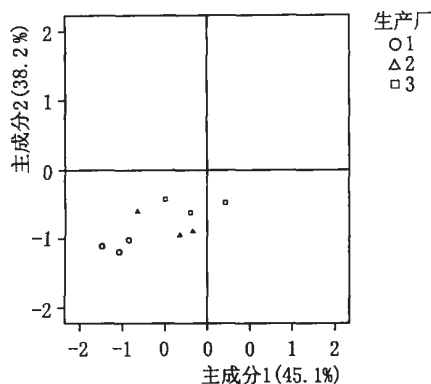


图 4 同一企业不同生产厂之间同一品种啤酒的主成分分析图  
和生产厂 1 的风味较为一致, 生产厂 3 和生产厂 1 的一致性就稍差, 其中生产厂 3 是最新的厂。

### 3.2.2 主成分分析在同一生产厂啤酒一致性评价中的应用

同一生产厂生产的同一品种的啤酒, 由于不同时间的水质、原辅料等的波动, 最终体现在产品风味的波动上。同一主成分分析也可以评价产品随时间的一致性。现以某一啤酒企业 2006 年生产的某品种啤酒为例说明主成分分析在产品风味一致性评价中的应用。要评价啤酒风味的一致性, 啤酒企业首先要测定啤酒的风味指标, 目前通过顶空-毛细管技术能测定大约 10 种的风味物质, 分别为乙醛、DMS、甲酸乙酯、乙酸乙酯、乙酸异丁酯、正丙醇、异丁醇、乙酸异戊酯、异戊醇和己酸乙酯。以前的一些统计技术例如统计过程控制 (SPC) 的控制图等只能说明某一指标的波动情况, 而不能从总体上反映产品的波动性, 因为有些指标的波动, 不会引起产品风格的波动, 而主成分分析法, 是从总体上说明产品的波动性, 比控制图更能说明产品的波动性。

图 5 是某啤酒企业 2006 年一年生产的某品种的啤酒的 10 种风味指标的前两个主成分的平面坐标图, 这两个主成分可反映产品约 60 % 的信息。图 5 中的第

一个小椭圆是 95 % 的置信区, 即在这个椭圆外的点占 5 %, 通过对该椭圆外的点进行跟进分析可以发现波动的原因, 并在以后的生产过程中加以避免, 以提高产品的一致性。

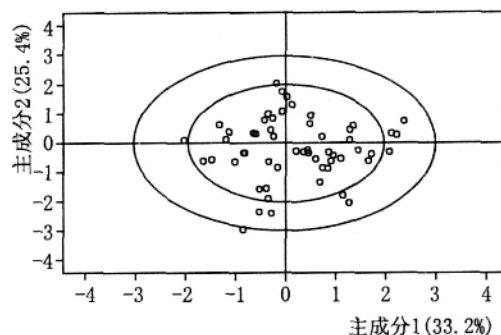


图 5 不同时间的同一品种啤酒的主成分得分图

## 4 结论

4.1 主成分分析法, 可以消除各变量之间的共线性, 减少变量的个数, 利于后续的分析。

4.2 使用主成分分析可以按照事物的相似性区分产品, 结果可用一维、二维或三维平面坐标图标示, 特别直观。

4.3 将样品的数据通过主成分分析进行浓缩, 然后通过平面坐标可以实现从总体上对样品进行一致性的分析, 一般的统计技术只能对某一指标进行评价。

4.4 静态顶空进样高效毛细管气相色谱分析啤酒香味组分技术结合, 主成分分析技术可以有效地应用于评价不同品牌啤酒风味的差异性、同一啤酒的风味一致性与均一性。

### 参考文献:

- [1] 吴有炜. 试验设计与数据处理[M]. 苏州: 苏州大学出版社, 2002.
- [2] 费荣昌. 试验设计与数据处理[M]. 无锡: 无锡轻工大学, 1997.

(上接第 106 页)

低, 方法检出限低, 测定结果的精密度好, 相比微波消解法, 无论是可靠性还是准确度都要高出许多, 灰化法具有良好的适应性和适用性, 能有效解决微波消解法存在的缺陷, 该法方法检出限 (ng/g): 砷 3、铅 2、铜 0.05、锌 0.2、镉 0.02, RSD 0.83 % ~ 2.54 %, 加标回收率 93.5 % ~ 108.2 %。方法可靠值得推荐。本法适合于固形物含量高的酒类产品中的微量元素的分析与测定。

### 参考文献:

- [1] 郭健雄. 食用酒精重金属检验新方法的研究 [J]. 酿酒科技, 2006, (9): 91-93.

- [2] 吕国良. 火焰原子吸收光谱法连续测定黄酒中的金属离子[J]. 酿酒科技, 2006, (7): 89-90.
- [3] 陈桐, 杨玲玲. 微波消解 ICP-AES 测定补肾填精胶囊中铅和砷[J]. 贵州工业大学学报(自然科学版), 2007, (2): 6-9.
- [4] 黄捷玲, 梁志华, 老倩群, 等. 程序升温马福炉灰化法对食品中铅、砷、铜检测预处理的研究[J]. 职业与健康, 2006, (10): 1568-1569.
- [5] 李志东, 李娜, 张洪林, 等. 啤酒酵母吸附重金属离子铬的研究[J]. 酿酒科技, 2006, (6): 85-88.
- [6] 杜鹃. 胶束增敏光度法测定啤酒中微量铁[J]. 酿酒科技, 2006, (5): 98-99.