

基于主成分分析法判别不同质量等级酱香型白酒

舒楠^{1,2}, 张福艳^{1,2,3}, 姜东明^{2,3}, 魏立男^{1,2}, 张翔^{1,2}, 周璐^{1,2}, 陈家好^{1,2*}

(1.湖南武陵酒有限公司, 湖南 常德 415000; 2.河北省固态发酵酿酒产业技术研究院, 河北 衡水 053000;
3.河北衡水老白干酒业股份有限公司, 河北 衡水 053000)

摘要:为实现酱香型白酒的数据化评价与区分,该研究以7种不同质量等级酱香型白酒(编号为J1~J7)为研究对象,对其进行感官评价,同时采用气相色谱(GC)法对其挥发性风味化合物进行检测,并基于检测结果对7种不同质量等级酱香型白酒进行主成分分析(PCA)。结果表明,从7种不同质量等级酱香型白酒中共检测定量出30种共有挥发性风味化合物,各挥发性风味化合物间具有较强的相关性。PCA结果显示,前4个主成分累计方差贡献率可达到98.998%,可反映原始变量的绝大部分信息;综合得分散点图能有效区分不同质量等级酱香型白酒,其中酒样J1与其他酒样存在较大差异,而酒样J6与酒样J7、酒样J4和酒样J5、酒样J2和酒样J3两两之间存在一定相似性,各酒样的综合评分结果为:J7>J6>J5>J4>J3>J2>J1,这与感官品评结果一致。综上,基于共有挥发性风味化合物对不同质量等级酱香型白酒样品进行主成分分析能够对其进行准确、快速区别和评价,为年份基酒、成品酒的鉴定提供理论支持。

关键词:质量等级;酱香型白酒;挥发性风味化合物;相关性分析;主成分分析

中图分类号:TS262.3

文章编号:0254-5071(2025)07-0148-07

doi:10.11882/j.issn.0254-5071.2025.07.021

引文格式:舒楠,张福艳,姜东明,等.基于主成分分析法判别不同质量等级酱香型白酒[J].中国酿造,2025,44(7):148-154.

Discrimination of different quality grades of sauce-flavor *Baijiu* based on principle component analysis

SHU Nan^{1,2}, ZHANG Fuyan^{1,2,3}, JIANG Dongming^{2,3}, WEI Linan^{1,2}, ZHANG Xiang^{1,2}, ZHOU Lu^{1,2}, CHEN Jiahao^{1,2*}

(1.Hunan Wuling Liquor Co., Ltd., Changde 415000, China; 2.Hebei Solid Fermentation and Brewing Industry Technology Research Institute, Hengshui 053000, China; 3.Hebei Hengshui Laobaigan Liquor Co., Ltd., Hengshui 053000, China)

Abstract: In order to realize the data evaluation and differentiation of sauce-flavor (Jiangxiangxing) *Baijiu*, using 7 different quality grades of sauce-flavor *Baijiu* (numbered as J1-J7) as the research objects. Sensory evaluation was carried out, and their volatile flavor compounds were detected by gas chromatography (GC). Based on the detection results, the seven different quality grades of sauce-flavor *Baijiu* were analyzed through principal component analysis (PCA). The results showed that a total of 30 common volatile flavor compounds were detected from 7 different quality grades of sauce-flavor *Baijiu* and there was strong correlation among them. The results of principal component analysis showed that the cumulative contribution rate of the first four principal components could reach 98.998%, which reflected most of the information of the original variable. The comprehensive score scatter plot could effectively distinguish different quality grades of sauce-flavor *Baijiu*. Sample J1 was different from other samples, while sample J6 and J7, J4 and J5, J2 and J3 were similar to each other respectively. The comprehensive score of each *Baijiu* sample was J7>J6>J5>J4>J3>J2>J1, which was generally consistent with the sensory evaluation. To sum up, the principal component analysis of common volatile flavor compounds could accurately and quickly distinguish and evaluate different quality grades of sauce-flavor *Baijiu*, and provide theoretical support for the identification of aging base *Baijiu* and finished *Baijiu*.

Key words: quality grades; sauce-flavor *Baijiu*; volatile flavor compound; correlation analysis; principle component analysis

酱香型白酒是中国四大基础香型白酒之一,其采用“12987”的传统酿造手法,以及高温制曲(60~65℃)、高温堆积(≥50℃)、高温发酵(40~45℃)、高温馏酒(37~45℃)、长期储存等独特发酵方法^[1-3],具有“酱香突出、优雅细腻、酒体醇厚、回味悠长”独特风味特征,挥发性风味物质含量丰富,深受国内外消费者青睐^[4]。武陵酒是中国三大酱香名酒之一、中国十七大名酒之一,1981年在全国白酒现场评比会上独占鳌头,1988年在第五届白酒国家质量评

比中蝉联桂冠,获得国家金质奖章^[5]。近年来武陵酒产能稳步向上迈进,市内及省内市场业绩显著,但不法分子的旧瓶装新酒、制售假冒伪劣酒、以次充好等行为也开始泛滥,基于感官评价建立准确、科学的白酒评判标准以打击酒类制假售假行为迫在眉睫。

主成分分析(principle component analysis, PCA)通过降低数据维数,将多指标简化为综合指标,解析出主要影响因素,可有效简化评价过程^[6]。近年来,主成分分析法已

收稿日期:2024-10-16

修回日期:2025-03-04

基金项目:湖南省重点领域研发项目(2020SK2142)

作者简介:舒楠(1998-),女,助理工程师,硕士,研究方向为白酒快速分析检测。

*通讯作者:陈家好(1970-),男,高级工程师,大专,研究方向为白酒酿造与品评技术。

被广泛应用于区分白酒香型、轮次、年份,JIANG X Y等^[7]基于由爱达荷大学的石墨热裂解沥青反应(graphite from the University of Idaho thermolyzed asphalt reaction, GUITAR)电极收集的陈酿白酒的电化学抗阻谱(electrochemical impedance spectrums, EIS)数据进行PCA,结果得到的PCA评分图显示出更明确的聚类轮廓,表明其具有作为家用陈年白酒分类的潜力;WU Y等^[8]对测得的散装白酒数据进行预处理后,采用PCA建立了掺假白酒定性定量检测模型,该模型准确率达到98.08%;QIN D等^[9]通过PCA和热图分析8个酱香型白酒空杯香气,筛选出L-乳酸、D-乳酸、十六酸乙酯、苯乙酸、乙酸、1,2-丙二醇、己酸共7种化合物为酱香型白酒空杯香气的潜在标记物;WANG X L等^[10]采用PCA分析了5种青稞酒中的萜类化合物和去甲异戊二烯类物质,结果显示PCA图能明显区分青稞新酒和老酒。以上研究体现了主成分分析用于区分不同年份、来源等白酒的可行性。

基于此,本研究以7个不同质量等级酱香型白酒(J1~J7)为研究对象,对其进行感官评价,同时采用气相色谱(gas chromatography, GC)法对酒样挥发性风味化合物进行检测,使用PCA对不同质量等级酱香型白酒共有的挥发性化合物含量进行降维处理,建立相关主成分和综合得分模型,旨在为不同质量等级酱香型白酒质量判别提供理论基础,促进酒类产业健康发展。

1 材料与方法

1.1 材料与试剂

1.1.1 酒样

7种不同质量等级酱香型白酒酒样(J1、J2、J3、J4、J5、J6、J7):取自湖南武陵酒有限公司(28.14 °N, 106.18 °E),酒精度均为53%vol。7个酒样分为低端(J1)、中端(J2、J3)、中高端(J4、J5)、高端(J6、J7)4个等级。

1.1.2 试剂

乙酸乙酯、乳酸乙酯、丁酸乙酯、己酸乙酯、戊酸乙酯、辛酸乙酯、苯乙酸乙酯、乙酸异戊酯、正丙醇、3-甲基丁醇、异丁醇、正丁醇、2-丁醇、 β -苯乙醇、正己醇、正戊醇、乙酸、丙酸、丁酸、异戊酸、戊酸、己酸、辛酸、乙醛、糠醛、异戊醛、异丁醛、正丙醛、乙缩醛、3-羟基-2-丁酮标准物质(纯度均>98.0%):上海阿拉丁生化科技股份有限公司;叔戊醇、乙酸正戊酯、2-乙基丁酸(纯度均>98%):上海麦克林生化科技股份有限公司。其他试剂均为国产分析纯。

1.2 仪器与设备

GC-2010气相色谱仪:日本岛津公司;ZB-WAX plus毛细管色谱柱(60 m×0.25 mm×0.25 mm):美国Phenomenex公司;IKA vortex3漩涡混合器:德国IKA公司。

1.3 方法

1.3.1 感官品评

由10位具有省级评委或一级白酒评酒师资格的品评人员组成感官品评小组,参考文献[10]的方法对酒样进行感官品评。

1.3.2 挥发性风味化合物的检测

样品前处理^[11]:吸取2 mL样品于10.0 mL容量瓶中,加入0.1 mL内标混合液(叔戊醇、乙酸正戊酯、2-乙基丁酸,质量浓度均为10 g/L),定容,混匀,采用气相色谱仪测定。

气相色谱条件^[11]:ZB-WAX plus毛细管色谱柱(60 m×0.25 mm×0.25 mm),进样口温度为250 °C,进样量为1.0 μ L,分流比为20:1。升温程序为初始温度35 °C,保持1 min,以3 °C/min升至70 °C,然后以3.5 °C/min升到180 °C,再以15 °C/min升到210 °C,保持5 min。载气流速为1.0 mL/min,氢火焰离子化检测器温度为250 °C。

定性和定量分析:根据保留时间进行定性,采用内标法进行相对定量^[12],每个样品重复3次。

1.3.3 主成分分析

采用SPSS 26.0软件,基于共有的挥发性风味物质对酱香型白酒样品(J1~J7)进行PCA,提取特征值>1.00的因子作为主成分,得到原始数据相关矩阵的特征值、方差贡献率、累计方差贡献率、成分矩阵、成分得分系数矩阵等,根据所得信息对不同质量等级酱香白酒样品进行综合评价,计算综合评价值F,其计算公式如下^[13]:

$$F = \sum [F_i \times W_i], i = 1, 2, \dots, n$$

式中:F值为酒样综合评价,分; F_i 为酒样第*i*个公因子的分值,分; W_i 为酒样第*i*个公因子的方差贡献率,%;*n*为公因子的个数。

1.3.4 数据分析

采用Excel 2020软件对数据进行整理,采用Origin 2024软件绘图,采用SPSS 26.0软件进行相关性分析和主成分分析。

2 结果与分析

2.1 不同质量等级酱香型白酒感官品评结果

不同质量等级酱香型白酒样品的感官品评结果见表1。由表1可知,7种等级酱香型白酒酒体感官品评结果得分为J7>J6>J5>J4>J3>J2>J1。

表1 7种酱香型白酒感官品评结果

Table 1 Sensory evaluation results of seven types of sauce-flavor Baijiu

样品	感官评价	得分/分
J1	酱香纯正,口感较柔和,欠协调,后味稍短	78.4
J2	酱香明显,口感醇和柔顺,回味长,空杯留香持久,酒体风格典型	81.5
J3	微黄透明,酱香突出,口感醇和、柔顺,回味悠长,空杯留香久,酒体风格典型	83.1
J4	微黄透明,酱香优雅,绵软顺滑,酒体醇厚,丰满,回味悠长,空杯留香好,酱香风格典型	88.9

续表		
样品	感官评价	得分/分
J5	微黄透明,酱香优雅,酒体醇厚丰满,细腻,回味悠长,空杯留香持久,酒体风格典型	91.2
J6	微黄透明,酱香优雅,陈香明显,酱味丰富细腻,酒体醇厚,回味悠长,空杯留香持久,酒体风格典型	94.8
J7	微黄透明,酱陈香突出,有焦香,层次丰富,细腻绵软,酒体丰满,回味悠长,空杯留香持久,酱香风格典型	98.9

2.2 不同质量等级酱香型白酒挥发性风味化合物检测结果

采用GC对7种不同质量等级酱香型白酒的挥发性风味成分进行分析,结果共定性定量出30种共有挥发性风味物质,包括酯类物质8种,醇类物质8种,酸类物质7种,醛类物质5种,其他类物质2种,具体结果见表2。由表2可知,在7种不同质量等级酱香型白酒中酯类物质含量均最高,其

次是酸类、醇类和醛类物质。

酯类物质是白酒中主要的呈香呈味物质^[14],可丰富酒体,延长后味,是多种香型白酒的主体香成分^[15-17]。由表2可知,7种酱香型白酒酒样中酯类物质的平均含量达到3 246.03 mg/L,其中酒样J7含量最高,达到3 385.80 mg/L,酒样J1含量最低,为3 156.90 mg/L。8种酯类物质中四大乙酯即乙酸乙酯(1 860.40~2 330.30 mg/L)、乳酸乙酯(816.60~979.20 mg/L)、丁酸乙酯(102.10~118.90 mg/L)、己酸乙酯(51.50~237.50 mg/L)含量明显高于其他酯类物质,占比达到86.68%,赋予酒体醇厚口感。一般而言,酯类物质含量与酒体品质呈正相关,WU J H等^[18]通过分析不同质量等级酱香型白酒基酒主要成分也得出类似结论。此外,酯类物质、醇类物质、醛类物质、酸类物质间还会相互转化,以影响白酒风味^[16]。

表2 7种酱香型白酒挥发性风味化合物成分含量检测结果
Table 2 Determination results of volatile flavor components contents in seven types of sauce-flavor Baijiu

种类	序号	化合物	含量/(mg·L ⁻¹)						
			J1	J2	J3	J4	J5	J6	J7
酯类	1	乙酸乙酯	1 860.40	2 023.40	2 034.90	2 078.10	2 153.60	2 248.20	2 330.30
	2	乳酸乙酯	930.10	979.20	925.00	939.10	943.50	816.60	831.70
	3	丁酸乙酯	107.60	102.10	103.70	105.80	108.40	116.30	118.90
	4	己酸乙酯	237.50	51.50	60.70	77.40	77.40	73.40	73.90
	5	戊酸乙酯	13.20	19.80	25.40	24.60	25.40	19.00	19.20
	6	辛酸乙酯	4.10	2.60	2.50	3.10	3.50	4.20	4.40
	7	苯乙酸乙酯	1.10	1.40	1.70	3.00	3.20	2.90	2.70
	8	乙酸异戊酯	2.90	2.70	3.80	3.80	4.00	4.60	4.70
		合计	3 156.90	3 182.70	3 157.70	3 234.90	3 319.00	3 285.20	3 385.80
	9	正丙醇	1 842.90	1 197.30	1 032.70	1 057.40	1 068.70	1 074.70	1 100.90
	10	3-甲基丁醇	103.30	211.80	276.40	323.30	326.80	338.50	317.60
	11	异丁醇	48.80	106.60	128.70	147.30	150.60	162.30	164.40
	12	正丁醇	54.50	65.20	77.30	83.60	83.70	90.90	93.10
	13	2-丁醇	29.50	42.20	38.00	33.70	35.00	44.00	41.20
	14	β-苯乙醇	10.30	15.30	15.60	20.40	20.20	21.10	18.60
	15	正己醇	9.30	14.40	14.30	17.40	17.50	17.10	18.50
醇类	16	正戊醇	4.20	5.20	6.60	7.20	7.30	7.10	7.20
		合计	2 102.80	1 658.00	1 589.60	1 690.30	1 709.80	1 755.70	1 761.50
	17	乙酸	1 494.90	1 759.50	1 874.70	1 997.80	2 008.70	1 972.30	1 989.80
	18	丙酸	46.70	78.80	74.00	84.90	85.80	90.50	98.10
	19	丁酸	53.80	78.20	69.40	71.90	74.00	74.90	78.40
	20	异戊酸	11.50	20.20	18.10	23.40	23.20	15.50	18.10
	21	戊酸	8.40	12.60	14.80	14.80	14.80	11.10	11.00
	22	己酸	94.40	44.20	33.70	40.10	39.80	38.20	36.10
酸类	23	辛酸	1.30	1.00	1.00	1.20	1.30	1.40	1.50
		合计	1 711.00	1 994.50	2 085.70	2 234.10	2 247.60	2 203.90	2 233.00
	24	乙醛	308.60	560.50	629.90	731.40	737.10	612.30	615.80
	25	糠醛	69.80	165.40	113.80	139.50	139.90	170.70	179.80
	26	异戊醛	24.00	41.70	42.70	47.40	48.40	61.90	73.30

		化合物	含量/(mg·L ⁻¹)						
种类	序号		J1	J2	J3	J4	J5	J6	J7
	27	异丁醛	8.30	14.60	12.20	14.10	14.70	15.60	17.20
	28	正丙醛	2.00	3.20	2.10	2.40	2.70	2.10	2.20
		合计	412.70	785.40	800.70	934.80	942.80	862.60	888.30
	29	乙缩醛	315.70	508.30	658.40	747.60	760.20	644.90	657.70
	30	3-羟基-2-丁酮	24.20	74.80	67.90	66.20	67.80	88.90	104.20
其他类		合计	339.90	583.10	726.30	813.80	828.00	733.80	761.90

醇类物质主要由酵母菌通过糖酵解途径产生^[9],与酯类物质共同构成白酒骨架化合物^[20],以高级醇类物质为多,其含量适当不仅能衬托出酯香,还可以使白酒口感丰满柔和、圆润醇厚,给人愉快舒适的感觉;含量过高,则有令人不愉快的异杂味,饮用后容易导致“上头”^[16]。由表2可知,7种酱香型白酒酒样中醇类物质的平均含量达到1 752.52 mg/L,其中酒样J1含量最高,达到2 102.80 mg/L。正丙醇(1 032.70~1 842.90 mg/L)和3-甲基丁醇(103.30~338.50 mg/L)在8种醇类物质中含量明显较高,占比达到73.27%,高级醇的种类结构及其含量比例共同影响白酒品质^[14]。

有机酸主要由酵母菌和乳酸菌在窖内发酵产生^[7],是形成酯的前体物质^[21],可以改善白酒风味,提高白酒中健康成分的含量^[16],酱香型白酒中酸类物质的含量明显高于其他香型,酸味独特,具有缓冲和协调作用^[22]。由表2可知,7种酱香型白酒酒样中有机酸的平均含量达到2 101.40 mg/L,仅次于酯类物质含量,其中酒样J5含量最高,达到2 247.60 mg/L,酒样J1含量最低,为1 711.00 mg/L。7种酸类物质中乙酸(1 494.90~2 008.70 mg/L)含量最高,占比达到77.91%,其可以与酒精反应产生酯,如乙酸乙酯,从而增加白酒风味,但乙酸浓度不宜过高,否则会产生强烈的刺激性,产生难闻的味道^[17]。

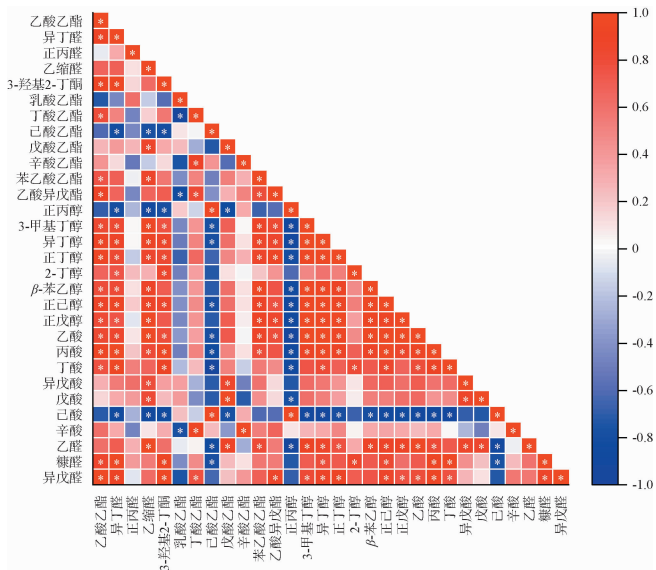
白酒的四大类呈香物质(酸、酯、醛、醇)中,醛类物质含量相对较低但香味较为强烈,能平衡和协调香气,有助于白酒放香^[23]。由表2可知,7种酱香型白酒酒样中醛类物质的平均含量为803.90 mg/L,其中,酒样J1含量最低,为412.70 mg/L,酒样J5含量最高,为942.80 mg/L。5种醛类物质中,乙醛含量(308.60~737.10 mg/L)最高,占比达到65.24%,糠醛(质量浓度69.80~179.80 mg/L)次之,是表达焦香的主要物质之一^[24]。

乙缩醛是由乙醛与乙醇缩合而成,赋予白酒清香柔和感^[25],其在酒样J1中含量最低,为315.70 mg/L,在酒样J5中含量最高,为760.20 mg/L。3-羟基-2-丁酮具有脂肪香味^[26],其在酒样J1中含量最低,为24.2 mg/L,在酒样J7中含量最高,为104.2 mg/L。有研究表明,3-羟基-2-丁酮的质量浓度随贮存时间的延长而增加,主要是由其前体物2,3-丁二醇通过氧化作用生成了3-羟基-2-丁酮^[27]。

综上,不同质量等级酱香型白酒挥发性风味化合物的含量和占比具有一定差异,通过直观的数据对比很难判定各酒样的等级优劣,因此有必要建立一套合理的评价体系。

2.3 共有挥发性风味化合物间的相关性分析

在进行PCA之前,需对所获数据进行适应性检验,常见的检验方法有巴莱特球形检验、KMO检验、φ检验、碎石图检验、相关系数矩阵的直观检验等^[28]。本研究使用相关系数矩阵的直观检验法对其适用性进行评价,结果见图1。由图1可知,大部分挥发性风味化合物间存在正相关或负相关关系,异戊醛、异丁醛、3-羟基-2-丁酮、乙酸乙酯、苯乙酸乙酯、乙酸异戊酯、3-甲基丁醇、异戊醇、正丁醇等物质与部分化合物呈显著正相关($P<0.05$),相关系数高达0.85以上;乳酸乙酯、己酸乙酯、正丙醇、己酸等物质与部分化合物间呈显著负相关($P<0.05$)。大多数挥发性化合物的相关系数绝对值 >0.3 ,表明各化合物间具有较强的相关性,即可通过主成分分析法进一步分析各不同质量等级酱香型白酒样品与挥发性化合物指标间的关系。



“*”表示显著相关($P<0.05$)。

图1 共有挥发性化合物间的相关性分析结果
Fig. 1 Correlation analysis results between common volatile components

2.4 基于共有挥发性风味化合物不同质量等级酱香型白酒主成分分析

基于30种挥发性风味化合物对7种不同质量等级酱香型白酒样品进行主成分分析,提取特征值>1的主成分,得到主成分的特征值、方差贡献率和累计方差贡献率,结果见表3。主成分方差贡献率越大,对酒样影响越大^[29]。由表3可知,4个主成分的特征值>1,累计方差贡献率高达98.998%,说明这4个主成分可以反映绝大部分原始信息,达到了降维的目的。因此,选取前4个主成分作为数据分析的有效成分。

表3 主成分的特征值和方差贡献率
Table 3 Eigenvalues and variance contribution rates of the principal components

主成分	特征值	方差贡献率/%	累计方差贡献率/%
1	19.520	65.067	65.067
2	6.458	21.526	86.593
3	2.590	8.632	95.225
4	1.132	3.773	98.998

前4个主成分的特征向量与载荷矩阵见表4。载荷值反映了各挥发性风味化合物与主成分间的相关系数,载荷值的绝对值越大,表明该挥发性化合物对主成分影响越大^[30],正数表示对主成分有正向影响,负数表示对主成分有负向影响。由表3及表4可知,主成分1(principal component 1,PC1)的方差贡献率为65.067%,与3-甲基丁醇、异丁醇、正丁醇、 β -苯乙醇、正己醇、正戊醇、乙酸、丙酸、异丁醛呈高度正相关,载荷值均>0.9,说明这些物质对主成分1所代表的挥发性化合物贡献最大;PC2的方差贡献率为21.526%,与丁酸乙酯、辛酸乙酯、辛酸呈正相关,载荷值均>0.8;PC3的方差贡献率为8.632%,与2-丁醇、正丙醛呈负相关,载荷值分别为-0.693、-0.527;PC4的方差贡献率为3.773%,与正丙醛呈正相关,载荷值为0.522。

前4个主成分的特征值均>1,且累计方差贡献率达到98.998%,通常认为累计方差贡献率>85%,即可描述整体水平并可提取主成分构建综合评价模型^[29],因此,提取前4个主成分代替30种挥发性风味化合物进行分析。

表4 主成分的载荷矩阵与特征向量
Table 4 Load matrix and eigenvector of principal components

变量	PC1		PC2		PC3		PC4	
	载荷值	特征向量	载荷值	特征向量	载荷值	特征向量	载荷值	特征向量
乙酸乙酯(X_1)	0.899	0.046	0.406	0.063	-0.114	-0.044	0.029	0.026
乳酸乙酯(X_2)	-0.454	-0.023	-0.843	-0.130	0.010	0.004	0.278	0.246
丁酸乙酯(X_3)	0.458	0.023	0.885	0.137	0.003	0.001	0.049	0.043
己酸乙酯(X_4)	-0.843	-0.043	0.418	0.065	0.295	0.114	0.168	0.148
戊酸乙酯(X_5)	0.631	0.032	-0.667	-0.103	0.349	0.135	-0.143	-0.127
辛酸乙酯(X_6)	0.048	0.002	0.953	0.148	0.125	0.048	0.264	0.234
苯乙酸乙酯(X_7)	0.841	0.043	0.133	0.021	0.411	0.159	0.288	0.254
乙酸异戊酯(X_8)	0.792	0.041	0.509	0.079	0.269	0.104	-0.190	-0.168
正丙醇(X_9)	-0.924	-0.047	0.327	0.051	0.024	0.009	0.195	0.172
3-甲基丁醇(X_{10})	0.973	0.050	-0.020	-0.003	0.202	0.078	-0.054	-0.048
异丁醇(X_{11})	0.993	0.051	0.065	0.010	0.079	0.031	-0.049	-0.044
正丁醇(X_{12})	0.949	0.049	0.254	0.039	0.166	0.064	-0.084	-0.074
2-丁醇(X_{13})	0.626	0.032	0.123	0.019	-0.693	-0.268	-0.273	-0.241
β -苯乙醇(X_{14})	0.935	0.048	0.001	0.000	0.182	0.070	0.142	0.125
正己醇(X_{15})	0.985	0.050	0.016	0.002	0.041	0.016	0.152	0.134
正戊醇(X_{16})	0.941	0.048	0.009	0.001	0.333	0.128	-0.062	-0.055
乙酸(X_{17})	0.978	0.050	-0.079	-0.012	0.191	0.074	0.012	0.011
丙酸(X_{18})	0.979	0.050	0.072	0.011	-0.158	-0.061	0.082	0.072
丁酸(X_{19})	0.871	0.045	-0.175	-0.027	-0.448	-0.173	0.095	0.084
异戊酸(X_{20})	0.632	0.032	-0.662	-0.102	0.144	0.055	0.355	0.314
戊酸(X_{21})	0.548	0.028	-0.777	-0.120	0.289	0.112	-0.090	-0.080
己酸(X_{22})	-0.919	-0.047	0.295	0.046	0.118	0.046	0.230	0.203
辛酸(X_{23})	0.282	0.014	0.876	0.136	0.209	0.081	0.322	0.284
乙醛(X_{24})	0.881	0.045	-0.404	-0.063	0.235	0.091	0.065	0.057
糠醛(X_{25})	0.841	0.043	0.097	0.015	-0.504	-0.194	0.148	0.131

变量	PC1		PC2		PC3		PC4	
	载荷值	特征向量	载荷值	特征向量	载荷值	特征向量	载荷值	特征向量
异戊醛(X_{26})	0.881	0.045	0.412	0.064	-0.175	-0.067	-0.029	-0.026
异丁醛(X_{27})	0.928	0.048	0.093	0.014	-0.319	-0.123	0.160	0.141
正丙醛(X_{28})	0.145	0.007	-0.641	-0.099	-0.527	-0.204	0.522	0.461
乙缩醛(X_{29})	0.899	0.046	-0.266	-0.041	0.346	0.134	-0.002	-0.002
3-羟基-2-丁酮(X_{30})	0.891	0.046	0.181	0.028	-0.383	-0.148	-0.103	-0.091

根据主成分的特征向量得到不同质量等级酱香型白酒样品挥发性风味化合物与前4个主成分的线性关系为:

$$\begin{aligned} F_1 &= 0.046X_1 - 0.023X_2 + 0.023X_3 - 0.043X_4 + 0.032X_5 + 0.002X_6 + \\ &\quad 0.043X_7 + 0.041X_8 - 0.047X_9 + 0.050X_{10} + \cdots + 0.028X_{21} - \\ &\quad 0.047X_{22} + 0.014X_{23} + 0.045X_{24} + 0.043X_{25} + 0.045X_{26} + \\ &\quad 0.048X_{27} + 0.007X_{28} + 0.046X_{29} + 0.046X_{30}; \\ F_2 &= 0.063X_1 - 0.130X_2 + 0.137X_3 + 0.065X_4 - 0.103X_5 + 0.148X_6 + \\ &\quad 0.021X_7 + 0.079X_8 + 0.051X_9 - 0.003X_{10} + \cdots - 0.120X_{21} + \\ &\quad 0.046X_{22} + 0.136X_{23} - 0.063X_{24} + 0.015X_{25} + 0.064X_{26} + \\ &\quad 0.014X_{27} - 0.099X_{28} - 0.041X_{29} + 0.028X_{30}; \\ F_3 &= -0.044X_1 + 0.004X_2 + 0.001X_3 + 0.114X_4 + 0.135X_5 + 0.048X_6 + \\ &\quad 0.159X_7 + 0.104X_8 + 0.009X_9 - 0.078X_{10} + \cdots + 0.112X_{21} + \\ &\quad 0.046X_{22} + 0.081X_{23} + 0.091X_{24} - 0.194X_{25} - 0.067X_{26} - \\ &\quad 0.123X_{27} - 0.204X_{28} - 0.134X_{29} - 0.148X_{30}; \\ F_4 &= 0.026X_1 + 0.246X_2 + 0.043X_3 + 0.148X_4 - 0.127X_5 + 0.234X_6 + \\ &\quad 0.254X_7 - 0.168X_8 + 0.172X_9 - 0.048X_{10} + \cdots - 0.080X_{21} + \\ &\quad 0.203X_{22} + 0.284X_{23} + 0.057X_{24} + 0.131X_{25} - 0.026X_{26} + \\ &\quad 0.141X_{27} + 0.461X_{28} - 0.002X_{29} - 0.091X_{30}; \end{aligned}$$

4个主成分从不同方面体现了不同质量等级酱香型白酒挥发性化合物水平,单独使用某一主成分无法对其质量作出综合性评价,因此,根据PCA结果,以每个主成分所对应的方差贡献率占所提取主成分总的方差贡献率之和的比例作为权重,得到不同质量等级酱香型白酒综合评价模型 $F=0.657\ 2F_1+0.217\ 4F_2+0.087\ 2F_3+0.038\ 1F_4$,计算各样品的综合得分,结果见表5,进一步以7种不同质量等级酱香型白酒PC1分值为横坐标,PC2分值为纵坐标作散点图,结果见图2。

表5 基于共有挥发性风味化合物7种酱香型白酒酒样主成分得分和综合得分
Table 5 Principle components score and comprehensive score of seven types of sauce-flavor Baijiu based on common volatile flavor compounds

样品	F_1	F_2	F_3	F_4	F	排名
J1	-2.060	0.802	0.424	0.269	-1.132	7
J2	-0.329	-1.064	-1.902	0.496	-0.594	6
J3	-0.085	-0.845	0.357	-1.968	-0.283	5
J4	0.410	-0.701	1.004	0.503	0.224	4
J5	0.534	-0.530	0.871	1.102	0.354	3
J6	0.676	1.094	-0.261	-0.561	0.638	2
J7	0.855	1.242	-0.492	0.160	0.795	1

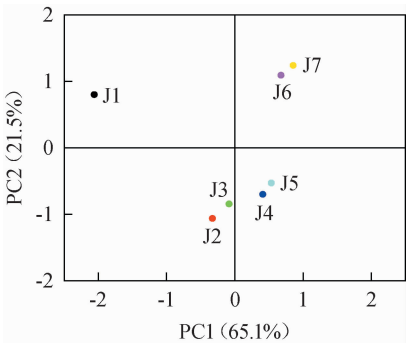


图2 基于共有挥发性风味化合物7种酱香型白酒的主成分分析散点图
Fig. 2 Principle components scatter plot of seven types of sauce-flavor Baijiu based on common volatile flavor compounds

由表5可知,酒样J7的PC1和PC2得分最高,分别为0.855、1.242;酒样J4的PC3得分最高,为1.004;酒样J5的PC4得分最高,为1.102。综合得分越高说明该酒样越好,综合排名第一位的是酒样J7,随后依次为酒样J6、J5、J4、J3、J2、J1,其综合得分分别为0.795、0.638、0.354、0.224、-0.283、-0.594、-1.132。与酒体感官评价结果相同,说明建立该模型有实际意义。

由图2可知,经主成分分析,不同酒样的区分效果较好,7种不同质量等级酒样的数据点分别集中于图的不同区域,酒样J7和酒样J6位于坐标轴第1象限,酒样J1位于第2象限,酒样J2和酒样J3位于第3象限,酒样J4和酒样J5位于第4象限,说明酒样J1与其他酒样存在较大差异,而酒样J6与酒样J7、酒样J4和酒样J5、酒样J2和酒样J3两两之间存在一定相似性,可能是由于位于同一象限的两种酒样所用的基础酒体相似度较高,酒样的挥发性风味化合物及含量相似度也较高。

3 结论

利用气相色谱法从7种不同质量等级酱香型白酒(J1~J7)中共检测定量出30种共有挥发性风味物质,包括酯类物质8种,醇类物质8种,酸类物质7种,醛类物质5种,其他物质2种,这些挥发性风味化合物间具有不同程度的相关性。经主成分分析提取了特征值>1的前4个主成分,累计方差贡献率达到了98.998%,可反映原始变量的绝大部分信息,综合得分散点图能有效区分不同质量等级酱香型白酒,其中酒样J1与其他酒样存在较大差异,而酒样J6与酒样J7、酒样J4和酒样J5、酒样J2和酒样J3两两之间存在

一定相似性,各酒样的综合评分结果为: $J7>J6>J5>J4>J3>J2>J1$,与感官品评结果一致。综上,通过对不同质量等级酱香型白酒的挥发性风味化合物含量进行主成分分析,可以有效判别其质量等级。本研究结果可为年份基酒、成品酒的鉴定提供理论支持。

参考文献:

- [1] DUAN J W, CHENG W, LV S L, et al. Characterization of key aroma compounds in soy sauce flavor *Baijiu* by molecular sensory science combined with aroma active compounds reverse verification method[J]. **Food Chem**, 2024, 443: 138487.
- [2] LI X, ZHANG B S, LI W X, et al. Unraveling the chemosensory characteristics dependence of sauce-flavor *Baijiu* on regionality using descriptive sensory analysis and quantitative targeted flavoromics[J]. **Food Chem**, 2023, 441: 138274.
- [3] NIU J, YANG S, SHEN Y, et al. What are the main factors that affect the flavor of sauce-aroma *Baijiu*[J]. **Foods**, 2022, 11(21): 3534.
- [4] 王金龙,尹延顺,田栋伟,等.不同质量等级酱香白酒中风味物质及差异性分析[J].中国酿造,2024,43(1):41-49.
- [5] 李长江,张洪远,赵新,等.武陵酒生产工艺创新剖析[J].酿酒科技,2009(1):89-91.
- [6] 王倩,童亚男,王丽丽,等.青海、西藏主栽青稞品种营养品质及其淀粉糊化特性[J].食品工业科技,2025,46(1):333-342.
- [7] JIANG X Y, XIE Y Q, WAN D J, et al. GUITAR-enhanced facile discrimination of aged Chinese *Baijiu* using electrochemical impedance spectroscopy[J]. **Anal Chim Acta**, 2019, 1059: 36-41.
- [8] WU Y, LI X, XU L, et al. Counterfeit detection of bulk *Baijiu* based on fluorescence hyperspectral technology and machine learning[J]. **J Food Meas Charact**, 2024, 18(4): 3032-3041.
- [9] QIN D, WU Z Y, SHEN Y, et al. Characterization of empty cup aroma in soy sauce aroma type *Baijiu* by vacuum assisted sorbent extraction[J]. **J Food Compos Anal**, 2023, 117: 105147.
- [10] WANG X L, ZHU L, SONG X B, et al. Characterization of terpenoids and norisoprenoids from base and retail Qingke *Baijiu* by GC×GC-TOFMS and multivariate statistical analysis[J]. **Food Science and Human Wellness**, 2023, 12(1): 192-199.
- [11] 孟镇,张媛媛,胡雯钦,等.湖南地区酱香型白酒酒酯细菌多样性及其与基酒风味物质相关性分析[J].中国酿造,2023,42(6):28-36.
- [12] 胡梓妍,刘伟,何双,等.基于HS-SPME-GC-MS法分析3种金橘的香气挥发性成分[J].食品科学,2021,42(16):176-184.
- [13] LI L, FAN M, XU Y, et al. Comparative analysis of volatile flavor compounds in strongly flavored *Baijiu* under two different pit cap sealing processes[J]. **Foods**, 2023, 12(13): 2579.
- [14] 郭雪峰,程玉鑫,黄永光,等.不同香型白酒感官风味及挥发性化合物结构特征[J].食品科学,2022,43(21):43-54.
- [15] 任璐,张亚芳,张永利.不同储存容器对凤香型基酒储存前期风味形成的探究[J].食品与发酵工业,2024,50(5):124-130.
- [16] 郭学武,范恩帝,马冰涛,等.中国白酒中微量成分研究进展[J].食品科学,2020,41(11):267-276.
- [17] WEI Y, ZOU W, SHEN C H, et al. Basic flavor types and component characteristics of Chinese traditional liquors: A review[J]. **J Food Sci**, 2020, 85: 4096-4107.
- [18] WU J H, CHEN R Y, LI X B, et al. Comprehensive identification of key compounds in different quality grades of soy sauce-aroma type *Baijiu* by HS-SPME-GC-MS coupled with electronic nose[J]. **Front Nutr**, 2023, 10: 1132527.
- [19] FAN W L, SHEN H Y, XU Y. Quantification of volatile compounds in Chinese soy sauce aroma type liquor by stir bar sorptive extraction and gas chromatography-mass spectrometry[J]. **J Sci Food Agr**, 2011, 91: 1187-1198.
- [20] CAI W C, WANG Y R, WANG W P, et al. Insights into the aroma profile of sauce-flavor *Baijiu* by GC-IMS combined with multivariate statistical analysis[J]. **J Anal Method Chem**, 2022 (1): 4614330.
- [21] REN T T, SU W, MU Y C, et al. Study on the correlation between microbial communities with physicochemical properties and flavor substances in the Xiasha round of cave-brewed sauce-flavor *Baijiu*[J]. **Front Microbiol**, 2023, 14: 1124817.
- [22] SONG Z W, DU H, ZHANG Y, et al. Unraveling core functional microbiota in traditional solid-state fermentation by high-throughput amplicons and metatranscriptomics sequencing[J]. **Front Microbiol**, 2017, 8: 1294.
- [23] ZHANG X J, MENG L J, LU Z M, et al. Identification of age-markers based on profiling of *Baijiu* volatiles over a two-year maturation period: case study of Lu-flavor *Baijiu*[J]. **Lebensm Wiss Technol**, 2021, 141: 110913.
- [24] GONG M, ZHOU Z, LIU S, et al. Formation pathways and precursors of furfural during Zhenjiang aromatic vinegar production[J]. **Food Chem**, 2021, 354: 129503.
- [25] 张晓婕,邱树毅,王晓丹,等.不同质量酱香型白酒的挥发性物质差异分析[J].中国食品学报,2022,22(10):340-351.
- [26] 唐平,山其木格,王丽,等.白酒风味化学研究方法 & 酱香型白酒风味化学研究进展[J].食品科学,2020,41(17):315-324.
- [27] 黄张君,张文华,曾运航,等.白酒贮存过程中主要成分间氢键相互作用的量子化学计算[J].食品科学,2021,42(12):45-51.
- [28] 王馨雨,王蓉蓉,王婷,等.不同品种百合内外鳞片游离氨基酸组成的主成分分析及聚类分析[J].食品科学,2020,41(12):211-220.
- [29] 葛帅,王蓉蓉,王颖瑞,等.湖南常见辣椒品种游离氨基酸主成分分析及综合评价[J].食品科学技术学报,2021,39(2):91-102.
- [30] 李文静,刘一心,陈明堃,等.14种海棠果实品质分析及综合评价[J].食品科学,2024,45(16):121-130.