

## 不同香型白酒的聚类分析和主成分分析

钱 冲 廖永红\* 刘明艳 徐 瑾 刘 丽 于 莉

(北京工商大学食品学院 北京市食品风味化学重点实验室 食品质量与安全北京实验室 北京 100048)

**摘要** 采用气相色谱-质谱联用(GC-MS)直接进样的分析方法,对几种香型白酒的风味组分进行分析,共检测出 134 种微量成分;结合聚类分析(CA)和主成分分析(PCA)方法,对其主要风味物质进行研究。结果表明,聚类分析能区分不同香型的白酒,比较而言,虽然主成分分析的分类效果不如聚类分析,但能反映白酒风味组分与香型之间的关系。

**关键词** 白酒; 气相色谱-质谱联用; 风味物质; 香型; 聚类分析; 主成分分析

**文章编号** 1009-7848(2017)02-0243-13 **doi:** 10.16429/j.1009-7848.2017.02.032

不同的自然环境、微生物群系、生产原料和酿造工艺,决定白酒中风味物质种类、含量、组成的不同,从而形成了不同香型的白酒<sup>[1-3]</sup>。白酒中主要成分是乙醇和水,占到总量的 98%左右,而真正决定其品质和风格的微量成分却仅占 2%左右。我国白酒种类繁多,早在 1979 年第三届全国评酒会上,白酒就被初步划分为浓香、酱香、清香、米香和其它 5 种香型。经过 30 多年的发展,白酒香型在原有的基础上,又陆续出现了芝麻香型、特香型、凤香型等其它香型,到目前为止,已增加至 12 种<sup>[4-5]</sup>。

随着分析方法的改进,白酒中可检测到的微量成分估计超过 1 500 种,主要包括酯类、醇类、酸类、醛类、酮类、缩醛类、吡嗪类、呋喃类、芳香族和杂环化合物等物质。本研究通过气相色谱-质谱联用(gas chromatography-mass spectrometry, GC-MS)直接进样分析方法,对白酒中的风味物质进行定性、定量分析;同时结合聚类分析和主成分分析方法,将不同香型的白酒区分开来,从而深入了解白酒香型与风味物质之间的联系,对充分认识白酒香型的实质具有积极意义<sup>[6-9]</sup>。

### 1 材料与方法

#### 1.1 材料与试剂

1.1.1 试剂 乙酸丁酯(色谱级)、乙醇(色谱级),美国 sigma 公司。

1.1.2 样品 浓香型白酒 9 种编号:N1、N2、N3、N4、N5、N6、N7、N8、N9;清香型白酒 2 种编号:Q1、Q2;酱香型白酒 3 种编号:J1、J2、J3;芝麻香型白酒 1 种编号:Z1;特香型白酒 1 种编号:T1。J2 由某厂家直接提供,其它酒样均为市售白酒。

#### 1.2 仪器与设备

GC-MS QP2010 Plus 气相色谱-质谱联用仪,日本 Shimadzu 公司;CP-WAX 57CB 毛细管柱(50 m×0.25 mm×0.20 μm),美国 Agilent 公司。

#### 1.3 方法

1.3.1 待测酒样溶液制备 内标溶液配制:精确吸取 200 μL 乙酸丁酯标准品,用 60%乙醇溶解,定容 10 mL,配成质量浓度为 17 650.0 mg/L 的内标溶液。

酒样溶液制备:精确吸取 100 μL 内标溶液,用待测酒样溶解,定容 10 mL,配制成内标物质量浓度为 176.5 mg/L 的酒样溶液<sup>[10]</sup>。

1.3.2 色谱条件 GC 条件:起始柱温 35 ℃保持 2 min,以 4 ℃/min 升至 200 ℃,保持 5 min;载气为 He,总流量 19.0 mL/min,恒流量 3.0 mL/min,柱流量 1.0 mL/min;压力 90.7 kPa;进样口温度 220 ℃,进样量 0.5 μL,分流比 15:1。

MS 条件:电子轰击离子源;电子能量 70 eV;

收稿日期:2016-02-16

基金项目:国家“十二五”科技支撑计划项目

(2011BAD23B01,2012BAK17B11)

作者简介:钱冲,男,1989 年出生,硕士生

通讯作者:廖永红 E-mail: liaoyh@th.btbu.edu.cn

离子源温度 230 °C;接口温度 220 °C;定时 7.1~8.2 min 检测器关闭;激活电压 1.5 V,扫描频率 0.5 s/次;扫描范围  $m/z$ :30~500<sup>[10-11]</sup>。

1.3.3 数据统计分析 结合风味物质的保留时间和 NIST05.LIB、NIST05s.LIB 质谱库,对其进行定性分析。通过风味物质色谱峰的相对峰面积(风味物质和内标物色谱峰面积之比)对其进行定量分析。聚类分析和主成分分析采用 SPSS20 和 XLSTAT 2010 数据处理软件处理。

## 2 结果与分析

### 2.1 精密度分析

分析酒样之前,先进一空针(进样体积为 0 mL),进行空白分析,然后待测酒样连续进样分析 5 次,分别对风味物质的保留时间和色谱峰相对峰面积进行统计分析,计算其 RSD 值。结果:色谱峰保留时间的 RSD 值均小于 0.1%,相对峰面积的 RSD 值也都低于 5%,说明该分析方法的精密度良好,适宜白酒中风味物质的定性、定量分析<sup>[12]</sup>。

### 2.2 白酒中微量成分的检测

采用 GC-MS 分析,共检测出 134 种微量成分,包括 45 种酯类物质,24 种醇类物质,11 种酸类物质,15 种醛类物质,3 种酮类物质,35 种其它类物质。那些结构复杂,CAS 数据库中未搜索到中文名称、难以命名的化合物被归纳为其它类物质,包括呋喃类、吡嗪类以及某些缩醛类、酯类和醇类等物质<sup>[13-14]</sup>。

### 2.3 白酒的聚类分析

2.3.1 用于聚类分析风味物质的种类 从 134 种微量成分中,选取 55 种相似度较高,大多酒样共有或质量分数大于 0.5%的风味物质,排除质量分数较低,相似度不高,化学结构难以确定的风味组分所带来的不良影响。

酯类物质 17 种:己酸乙酯(F1)、甲酸异戊酯(F2)、乳酸乙酯(F3)、丁酸乙酯(F4)、乙酸乙酯(F5)、戊酸乙酯(F6)、甲酸丁酯(F7)、2,2-二乙氧基乙酸乙酯(F8)、庚酸乙酯(F9)、甲酸烯丙酯(F10)、辛酸乙酯(F11)、己酸异戊酯(F12)、胍基甲酸乙酯(F13)、棕榈酸乙酯(F14)、异戊酸乙酯(F15)、苯乙酸乙酯(F16)、丁二酸二乙酯(F17)。醇

类物质 15 种:正丙醇(F18)、活性戊醇(F19)、2-戊醇(F20)、异丁醇(F21)、2,3-丁二醇(F22)、甲醇(F23)、正己醇(F24)、正丁醇(F25)、2-丁醇(F26)、苯乙醇(F27)、异戊醇(F28)、(2R,3R)-(-)-2,3-丁二醇(F29)、丙二醇(F30)、3-呋喃甲醇(F31)、正戊醇(F32)。酸类物质 7 种:己酸(F33)、丁酸(F34)、乙酸(F35)、丙酸(F36)、正戊酸(F37)、3-甲基戊酸(F38)、辛酸(F39)。酮类物质 2 种:2-戊酮(F40)、3-羟基-2-丁酮(F41)。醛类物质 8 种:3-甲基丁醛(F42)、乙醛(F43)、糠醛(F44)、3-糠醛(F45)、异戊醛(F46)、2-甲基丁醛(F47)、异丁醛二乙缩醛(F48)、丁醛二乙缩醛(F49)。其它类物质 6 种:1,1-二乙氧基乙烷(F50)、1,1-二乙氧基-3-甲基丁烷(F51)、二乙氧基甲烷(F52)、2,3,5,6-四甲基吡嗪(F53)、甲酸乙烯基酯(F54)、2-羟基乙基己酸酯(F55)。

所选 55 种风味物质的质量分数总和除在浓香型白酒 N5 中稍低(97.16%)外,在其它白酒中都超过 98.00%,其中在浓香型白酒 N9 中高达 99.95%,表明这 55 种风味物质几乎反映白酒中风味组分的构成,有利于对不同香型白酒进行聚类分析。

2.3.2 不同香型白酒的聚类分析 表 2 显示表 1 中风味物质对应的质量浓度,将其用于聚类分析。图 1 表明:9 种浓香型白酒的分布比较集中,可归纳为一类;特香型白酒 T1 介于浓香型白酒 N8 和 N7 之间,说明其风味组分的构成与浓香型白酒十分相近。酱香型白酒 J2,清香型白酒 Q1、Q2,酱香型白酒 J1、J3,芝麻香型白酒 Z1 在树状图上可明显区别开来,说明聚类分析能区分不同香型的白酒。

表 3 显示,当酒样被分为 5 个类时,类 1 中含有浓香型白酒 N1~N9 和特香型白酒 T1,类 2 中含有清香型白酒 Q1 和 Q2,类 3 中含有酱香型白酒 J1 和 J3;酱香型白酒 J2 和芝麻香型白酒 Z1 被分为类 4 和类 5。当酒样被分为 4 个类时,Z1、J1、J3 被分为类 3,其它白酒的分类保持不变,说明芝麻香型白酒 Z1 与酱香型白酒 J1、J3 风味组分的构成有一定的相似性。当酒样被分为 3 个类时,J2、T1 和 N1~N9 被分为类 1,其它白酒的分类仍保持不变,说明酱香型白酒 J2 风味组分的构成较相近

表 1 用于聚类分析的风味物质的质量分数 (%)  
Table 1 Mass fraction of flavor components for cluster analysis (%)

	N1	N2	N3	N4	N5	N6	N7	N8	N9	Q1	Q2	J1	J2	J3	Z1	T1
F1	30.10	30.21	30.36	35.76	29.77	24.23	37.98	33.99	32.54	0.49	0.39	2.34	19.76	1.42	11.95	28.75
F2	7.06	1.65	3.04	2.72	4.82	3.93	3.21	3.88	1.56	8.17	12.89	5.27	3.07	6.25	8.38	4.39
F3	6.90	5.65	9.39	8.10	6.94	6.44	8.44	7.02	7.50	16.32	17.91	10.47	6.95	9.87	8.68	8.21
F4	4.24	5.98	5.35	5.20	3.44	5.23	4.72	5.42	4.04	0.36	0.07	2.07	2.71	1.78	4.51	3.92
F5	3.38	7.74	7.07	10.28	4.70	5.98	10.48	9.08	8.42	38.46	26.86	15.55	11.29	14.71	13.19	9.33
F6	2.10	1.59	1.05	1.60	2.59	1.70	1.35	1.09	0.26	0.00	0.00	2.20	2.04	0.39	0.43	1.45
F7	0.00	0.95	1.29	0.90	0.67	1.83	0.00	1.20	0.00	0.28	0.00	0.00	0.48	1.03	0.00	2.31
F8	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.56	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.04
F9	1.07	0.59	0.95	0.41	2.21	1.12	0.30	0.40	0.22	0.00	0.00	0.22	0.25	0.10	0.22	0.45
F10	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.71	0.00	0.00	0.03	0.00
F11	0.99	0.70	1.43	0.19	1.47	1.24	0.13	0.22	0.10	0.19	0.29	0.28	0.14	0.25	0.29	0.36
F12	0.50	0.09	0.20	0.06	0.56	0.18	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.04
F13	0.11	0.09	0.00	0.07	0.00	0.08	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.11	0.05	0.08	0.00	0.03
F14	0.29	0.08	0.62	0.00	0.70	0.57	0.00	0.11	0.10	0.00	0.19	1.32	0.43	0.41	0.00	0.15
F15	0.05	0.07	0.05	0.00	0.07	0.10	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.05	0.03	0.26	0.19	0.00
F16	0.10	0.05	0.03	0.00	0.17	0.09	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.08	0.05	0.22	0.06	0.00
F17	0.04	0.05	0.20	0.00	0.03	0.05	0.00	0.00	0.00	0.30	0.64	0.10	0.06	0.13	0.10	0.09
F18	3.71	1.16	2.33	0.75	2.09	2.14	2.21	3.44	1.87	3.94	4.15	13.01	5.14	11.46	7.51	4.04
F19	0.85	0.44	1.07	0.62	0.95	0.96	0.87	1.12	0.44	2.49	3.30	1.67	1.02	2.27	3.44	1.37
F20	2.09	0.00	0.00	0.00	1.25	0.94	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
F21	1.41	0.19	0.38	0.25	0.69	0.43	0.33	0.41	0.15	1.03	1.38	0.68	0.37	1.01	1.20	0.48
F22	0.00	0.17	0.00	0.06	0.00	0.00	0.12	0.00	0.18	0.15	0.20	0.39	0.21	0.58	0.00	0.27
F23	1.32	1.42	2.65	2.43	0.99	0.65	3.00	3.12	2.96	6.04	7.28	0.85	1.00	1.08	2.04	1.87
F24	0.97	0.88	1.08	0.16	1.10	1.46	0.72	0.45	0.25	0.10	0.22	0.57	0.19	0.39	0.42	1.25
F25	0.61	0.91	0.00	0.91	0.00	1.68	0.00	0.00	0.00	0.28	0.00	0.92	0.48	0.96	0.00	0.00
F26	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.21	0.00	1.22	0.00	0.69	0.00	0.00
F27	0.13	0.11	0.10	0.05	0.08	0.10	0.17	0.21	0.10	0.31	0.62	0.69	0.31	0.98	1.98	0.21

(续表 1)

	N1	N2	N3	N4	N5	N6	N7	N8	N9	Q1	Q2	J1	J2	J3	Z1	T1
F28	0.12	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	3.62	0.00	1.66	0.00	0.00	4.86	2.80	0.00	0.00	0.00
F29	0.12	0.32	0.15	0.00	0.16	0.19	0.18	0.17	0.00	0.38	0.64	0.93	0.49	1.37	0.50	0.33
F30	0.00	0.23	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.21	0.00	0.00	1.16	3.61	1.71	0.07	0.66
F31	0.10	0.09	0.00	0.00	0.10	0.06	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.33	0.00	0.36	0.23	0.10
F32	0.00	0.04	0.08	0.00	0.14	0.00	0.67	0.00	0.27	0.00	0.00	0.09	0.00	0.15	0.00	0.06
F33	11.55	18.77	16.38	16.47	11.91	16.97	8.98	16.03	24.74	0.70	0.70	0.97	9.30	0.72	5.14	10.83
F34	1.79	3.31	2.01	2.12	1.38	2.34	1.41	2.40	2.58	0.13	0.00	1.42	1.63	0.97	1.92	2.20
F35	0.95	4.16	3.25	4.06	1.84	2.73	5.81	4.53	6.57	10.26	19.10	10.56	6.67	9.60	9.57	6.99
F36	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.05	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.48	0.35	0.61	0.21	0.24
F37	0.46	0.61	0.35	0.41	0.65	0.63	0.21	0.32	0.50	0.00	0.00	0.84	0.51	0.14	0.27	0.66
F38	0.21	0.26	0.19	0.00	0.30	0.19	0.00	0.07	0.00	0.00	0.00	0.27	0.19	0.69	0.39	0.22
F39	0.19	0.00	0.34	0.00	0.21	0.42	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.08	0.09	0.09	0.04	0.18
F40	3.69	1.38	0.00	0.00	3.21	1.98	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
F41	0.20	0.55	0.05	0.06	0.20	0.22	0.10	0.29	0.14	0.25	0.15	0.81	0.48	1.35	0.14	0.39
F42	1.53	1.49	0.00	0.00	1.71	1.66	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	1.73	1.41	2.23	0.00	0.00
F43	1.29	0.77	0.56	0.67	1.25	1.07	0.65	0.66	0.52	0.88	2.09	1.43	1.23	2.25	1.47	0.88
F44	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.19	0.00	0.00	0.00	2.88	0.00
F45	0.84	0.90	0.25	0.15	0.89	0.87	0.29	0.39	0.26	0.84	0.18	2.40	1.93	4.83	0.00	0.87
F46	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	2.78	1.18
F47	0.00	0.00	0.00	0.00	0.65	0.55	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.64	0.52	0.79	0.00	0.00
F48	0.00	0.00	0.51	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.07	0.00	0.00	0.00	0.00
F49	0.00	0.00	0.42	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.63	0.68	0.86	0.67	0.00
F50	6.72	4.61	3.13	3.73	6.15	5.78	3.13	3.07	1.72	6.64	0.00	8.10	6.83	11.75	5.99	4.00
F51	0.34	0.20	0.10	0.03	0.60	0.45	0.03	0.04	0.00	0.10	0.09	0.00	0.31	0.70	0.62	0.10
F52	0.00	0.02	0.00	0.00	0.00	0.06	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	3.79	0.12	0.08	0.00
F53	0.00	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.10	0.00	0.74	0.00	0.00
F54	0.00	0.00	1.27	1.14	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.39	0.00	0.00	0.00	0.00
F55	0.32	0.13	0.49	0.12	0.52	0.52	0.09	0.10	0.07	0.45	0.32	0.24	0.15	0.29	1.11	0.20
总和	98.46	98.64	98.17	99.50	97.16	97.86	99.75	99.24	99.95	99.74	99.85	99.32	99.03	98.64	98.69	99.08

注:风味物质质量分数(%),是指白酒中某种风味物质的质量占所有微量成分质量总和的百分比。

表 2 用于聚类分析的风味物质质量浓度 (mg/L)

	Table 2 Mass concentration of flavor components for cluster analysis(mg/L)																			
	N1	N2	N3	N4	N5	N6	N7	N8	N9	Q1	Q2	J1	J2	J3	Z1	T1				
F1	1 910.5	1 647.3	1 651.5	1 904.3	2 296.5	1 783.0	1 681.4	1 422.2	1 261.5	11.3	8.8	134.8	1 363.4	84.2	657.6	1 556.2				
F2	448.3	89.8	165.2	144.7	371.7	289.6	142.2	162.6	60.3	190.4	292.8	303.9	211.8	370.3	461.0	237.4				
F3	438.1	308.1	510.9	431.4	535.5	473.8	373.6	294.0	290.8	380.6	406.7	603.4	479.5	585.5	477.5	444.6				
F4	268.9	326.0	291.2	277.0	265.4	384.8	209.0	226.9	156.7	8.5	1.7	119.4	187.3	105.7	247.9	212.0				
F5	214.6	422.0	384.5	547.6	362.6	440.0	464.0	379.9	326.6	896.6	610.0	896.3	778.9	872.3	725.8	504.9				
F6	133.0	86.7	56.9	85.2	200.0	125.3	59.9	45.5	10.2	0.0	0.0	126.7	141.0	23.1	23.6	78.3				
F7	0.0	51.7	69.9	48.2	52.0	134.4	0.0	50.2	0.0	6.5	0.0	0.0	33.1	61.1	0.0	124.9				
F8	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	24.9	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	2.0				
F9	68.0	32.1	51.6	22.0	170.5	82.7	13.4	16.6	8.7	0.0	0.0	12.6	17.1	6.2	11.9	24.3				
F10	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	40.8	0.0	0.0	1.9	0.0				
F11	62.8	38.1	77.9	10.3	113.7	91.5	5.8	9.2	4.0	4.4	6.7	16.3	9.7	15.1	16.2	19.5				
F12	31.7	4.9	10.8	3.2	43.4	13.4	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	2.0				
F13	6.7	4.8	0.0	3.6	0.0	5.6	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	6.4	3.7	4.5	0.0	1.7				
F14	18.6	4.4	33.8	0.0	54.1	41.9	0.0	4.8	3.8	0.0	4.2	76.3	29.4	24.1	0.0	7.9				
F15	3.1	4.0	2.8	0.0	5.6	7.2	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	3.0	2.3	15.3	10.3	0.0				
F16	6.6	2.6	1.7	0.0	12.7	6.5	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	4.6	3.6	13.1	3.5	0.0				
F17	2.4	2.5	11.0	0.0	2.2	3.3	0.0	0.0	0.0	7.0	14.5	5.5	4.3	7.5	5.4	4.8				
F18	235.5	63.3	126.7	39.7	161.6	157.8	97.9	144.1	72.7	91.7	94.3	749.7	354.7	679.3	413.2	218.8				
F19	53.7	24.1	58.4	32.8	73.0	70.5	38.3	46.8	17.0	58.0	74.9	96.2	70.4	134.5	189.4	74.4				
F20	132.8	0.0	0.0	0.0	96.2	68.9	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0				
F21	89.5	10.5	20.8	13.3	53.1	31.4	14.6	17.3	5.7	23.9	31.3	39.3	25.7	59.8	66.0	26.2				
F22	0.0	9.3	0.0	3.2	0.0	0.0	5.2	0.0	6.8	3.6	4.6	22.4	14.2	34.3	0.0	14.4				
F23	83.8	77.7	144.3	129.1	76.1	48.0	132.7	130.6	114.6	140.8	165.4	48.8	69.2	64.1	112.3	101.4				
F24	61.9	47.8	58.9	8.4	84.6	107.5	31.7	18.8	9.6	2.4	5.0	32.9	13.0	23.1	23.2	67.8				
F25	38.7	49.7	0.0	48.5	0.0	123.9	0.0	0.0	0.0	6.6	0.0	52.8	33.1	56.8	0.0	0.0				
F26	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	4.8	0.0	70.2	0.0	40.8	0.0	0.0				
F27	8.2	6.1	5.7	2.7	6.2	7.2	7.6	8.7	4.0	7.2	14.2	39.7	21.5	58.4	109.1	11.4				

(续表 2)

	N1	N2	N3	N4	N5	N6	N7	N8	N9	Q1	Q2	J1	J2	J3	Z1	T1
F28	7.7	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	160.2	0.0	64.3	0.0	0.0	280.2	193.5	0.0	0.0	0.0
F29	7.3	17.2	8.1	0.0	12.0	14.0	8.0	7.2	0.0	8.9	14.5	53.5	34.0	81.1	27.7	17.9
F30	0.0	12.3	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	8.2	0.0	0.0	66.8	249.3	101.2	3.8	35.6
F31	6.7	5.1	0.0	0.0	8.1	4.1	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	19.2	0.0	21.5	12.9	5.4
F32	0.0	2.4	4.5	0.0	10.8	0.0	29.6	0.0	10.5	0.0	0.0	5.4	0.0	8.7	0.0	3.5
F33	733.3	1023.6	890.8	877.1	919.1	1249.1	397.6	670.7	959.2	16.3	15.9	55.8	641.5	42.9	282.5	586.4
F34	113.4	180.4	109.1	113.1	106.8	172.4	62.6	100.3	100.2	3.1	0.0	81.9	112.7	57.6	105.5	119.0
F35	60.4	227.0	177.0	216.3	142.2	201.3	257.3	189.5	254.7	239.3	433.6	608.6	460.0	569.4	526.3	378.5
F36	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	3.3	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	27.5	24.1	35.9	11.4	13.2
F37	29.2	33.4	18.8	21.9	50.0	46.3	9.2	13.4	19.4	0.0	0.0	48.4	35.5	8.5	14.8	35.6
F38	13.5	14.2	10.1	0.0	23.1	14.2	0.0	2.9	0.0	0.0	0.0	15.7	13.1	40.9	21.2	11.7
F39	12.3	0.0	18.2	0.0	15.9	30.7	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	4.5	6.0	5.2	2.3	9.6
F40	234.2	75.2	0.0	0.0	247.4	145.7	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
F41	12.9	30.2	2.9	3.3	15.6	16.0	4.3	12.3	5.6	5.7	3.4	46.9	33.4	80.3	7.5	20.9
F42	97.0	81.1	0.0	0.0	131.9	122.1	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	99.9	97.4	132.5	0.0	0.0
F43	82.2	41.8	30.5	35.8	96.2	78.9	28.9	27.8	20.1	20.5	47.5	82.2	85.2	133.6	81.0	47.7
F44	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	4.2	0.0	0.0	0.0	158.3	0.0
F45	53.2	48.8	13.5	8.1	68.4	64.1	12.7	16.5	10.1	19.6	4.0	138.3	133.0	286.7	0.0	47.3
F46	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	152.8	63.7
F47	0.0	0.0	0.0	0.0	50.5	40.6	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	36.8	35.7	46.7	0.0	0.0
F48	0.0	0.0	27.5	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	4.0	0.0	0.0	0.0	0.0
F49	0.0	0.0	23.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	36.5	47.2	51.1	36.9	0.0
F50	426.2	251.2	170.1	198.6	474.5	425.3	138.4	128.5	66.8	154.8	0.0	466.9	471.1	697.0	329.5	216.3
F51	21.7	10.7	5.5	1.8	46.2	33.3	1.3	1.6	0.0	2.3	1.9	0.0	21.6	41.6	34.0	5.3
F52	0.0	1.3	0.0	0.0	0.0	4.2	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	261.6	7.4	4.4	0.0
F53	0.0	1.1	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	5.7	0.0	43.9	0.0	0.0
F54	0.0	0.0	69.3	60.5	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	22.8	0.0	0.0	0.0	0.0
F55	20.2	7.3	26.4	6.5	40.4	38.3	4.1	4.1	2.8	10.5	7.2	14.0	10.5	16.9	60.9	10.9
总和	6 248.6	5 378.0	5 339.9	5 298.4	7 495.8	7 202.2	4 416.1	4 152.7	3 874.9	2 325.4	2 267.3	5 723.5	6 833.1	5 849.4	5 429.5	5 363.4

注:风味物质质量浓度(mg/L),是指每升白酒中含有某种风味物质的质量。



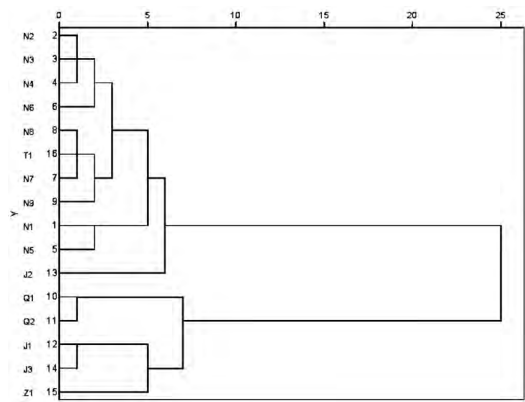


图 1 不同香型白酒的聚类分析树状图

Fig.1 Cluster analysis of different flavor types of liquor

于浓香型白酒<sup>[15-17]</sup>。

从风味物质构成的角度，表 2 中各风味物质的质量浓度：清香型白酒 Q1、Q2 中己酸乙酯、丁酸乙酯、己酸、丁酸的含量明显低于其它白酒；除 Q1、Q2 外，其它白酒中均有戊酸乙酯、庚酸乙酯、正戊酸检出，这些风味物质含量差异显著，是清香型白酒形成的关键。反之，除了 Q2 中未检出 1,1-二乙氧基乙烷外，在其它白酒中均有检出，且 Q1 中的含量为 154.8 mg/L，而聚类分析将 Q1 和 Q2 分作一类，说明 1,1-二乙氧基乙烷不是清香型白酒的关键风味物质。芝麻香型白酒 Z1 中己酸乙酯的含量适中，苯乙醇、糠醛、异戊醛的含量明显高于其它白酒，3-糠醛未检出，而该物质在其它白酒中均有检出，这是芝麻香型白酒形成的主要因素。酱香型白酒 J1、J3 中己酸乙酯和己酸的含量显著

低于浓香型白酒，而 J2 却与浓香型白酒很接近，这导致聚类分析将 J2 单独分作一类，且偏向于浓香型，这可能与其不是市售白酒，而是由厂家直接提供的特殊酒样有关。同样，特香型白酒 T1 中己酸乙酯和己酸的含量十分相近于浓香型白酒，这也是聚类分析不能将其与浓香型白酒分开的主要原因<sup>[18-20]</sup>。

2.4 白酒中风味物质的主成分分析

2.4.1 用于主成分分析的风味物质种类 在聚类分析所选 55 种风味物质基础上，继续筛选。选择大多数白酒共有，且主成分分析共同度较高的物质，在保证风味物质质量分数总和较高，足以反映白酒风味组分构成的前提下，尽可能提高主成分所能解释的原始风味组分信息。经综合考虑，选取 29 种风味物质。

酯类物质 9 种：己酸乙酯(F1)、甲酸异戊酯(F2)、乳酸乙酯(F3)、丁酸乙酯(F4)、乙酸乙酯(F5)、戊酸乙酯(F6)、庚酸乙酯(F9)、辛酸乙酯(F11)、棕榈酸乙酯(F14)。醇类物质 9 种：正丙醇(F18)、活性戊醇(F19)、异丁醇(F21)、2,3-丁二醇(F22)、甲醇(F23)、正己醇(F24)、苯乙醇(F27)、(2R,3R)-(-)-2,3-丁二醇(F29)、3-呋喃甲醇(F31)。酸类物质 6 种：己酸(F33)、丁酸(F34)、乙酸(F35)、正戊酸(F37)、3-甲基戊酸(F38)、辛酸(F39)。酮类物质 1 种：3-羟基-2-丁酮(F41)。醛类物质 2 种：乙醛(F43)、3-糠醛(F45)。其它类物质 2 种：1,1-二乙氧基乙烷(F50)、1,1-二乙氧基-3-甲基丁烷(F51)。

表 3 聚类分析群集成员

Table 3 Cluster members of cluster analysis

案例	5 群集	4 群集	3 群集	案例	5 群集	4 群集	3 群集
1;N1	1	1	1	9;N9	1	1	1
2;N2	1	1	1	10;Q1	2	2	2
3;N3	1	1	1	11;Q2	2	2	2
4;N4	1	1	1	12;J1	3	3	3
5;N5	1	1	1	13;J2	4	4	1
6;N6	1	1	1	14;J3	3	3	3
7;N7	1	1	1	15;Z1	5	3	3
8;N8	1	1	1	16;T1	1	1	1

表4 用于主成分分析风味物质质量分数的统计(%)

	N1	N2	N3	N4	N5	N6	N7	N8	N9	Q1	Q2	J1	J2	J3	Z1	T1
F1	30.10	30.21	30.36	35.76	29.77	24.23	37.98	33.99	32.54	0.49	0.39	2.34	19.76	1.42	11.95	28.75
F2	7.06	1.65	3.04	2.72	4.82	3.93	3.21	3.88	1.56	8.17	12.89	5.27	3.07	6.25	8.38	4.39
F3	6.90	5.65	9.39	8.10	6.94	6.44	8.44	7.02	7.50	16.32	17.91	10.47	6.95	9.87	8.68	8.21
F4	4.24	5.98	5.35	5.20	3.44	5.23	4.72	5.42	4.04	0.36	0.07	2.07	2.71	1.78	4.51	3.92
F5	3.38	7.74	7.07	10.28	4.70	5.98	10.48	9.08	8.42	38.46	26.86	15.55	11.29	14.71	13.19	9.33
F6	2.10	1.59	1.05	1.60	2.59	1.70	1.35	1.09	0.26	0.00	0.00	2.20	2.04	0.39	0.43	1.45
F9	1.07	0.59	0.95	0.41	2.21	1.12	0.30	0.40	0.22	0.00	0.00	0.22	0.25	0.10	0.22	0.45
F11	0.99	0.70	1.43	0.19	1.47	1.24	0.13	0.22	0.10	0.19	0.29	0.28	0.14	0.25	0.29	0.36
F14	0.29	0.08	0.62	0.00	0.70	0.57	0.00	0.11	0.10	0.00	0.19	1.32	0.43	0.41	0.00	0.15
F18	3.71	1.16	2.33	0.75	2.09	2.14	2.21	3.44	1.87	3.94	4.15	13.01	5.14	11.46	7.51	4.04
F19	0.85	0.44	1.07	0.62	0.95	0.96	0.87	1.12	0.44	2.49	3.30	1.67	1.02	2.27	3.44	1.37
F21	1.41	0.19	0.38	0.25	0.69	0.43	0.33	0.41	0.15	1.03	1.38	0.68	0.37	1.01	1.20	0.48
F22	0.00	0.17	0.00	0.06	0.00	0.00	0.12	0.00	0.18	0.15	0.20	0.39	0.21	0.58	0.00	0.27
F23	1.32	1.42	2.65	2.43	0.99	0.65	3.00	3.12	2.96	6.04	7.28	0.85	1.00	1.08	2.04	1.87
F24	0.97	0.88	1.08	0.16	1.10	1.46	0.72	0.45	0.25	0.10	0.22	0.57	0.19	0.39	0.42	1.25
F27	0.13	0.11	0.10	0.05	0.08	0.10	0.17	0.21	0.10	0.31	0.62	0.69	0.31	0.98	1.98	0.21
F29	0.12	0.32	0.15	0.00	0.16	0.19	0.18	0.17	0.00	0.38	0.64	0.93	0.49	1.37	0.50	0.33
F31	0.10	0.09	0.00	0.00	0.10	0.06	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.33	0.00	0.36	0.23	0.10
F33	11.55	18.77	16.38	16.47	11.91	16.97	8.98	16.03	24.74	0.70	0.70	0.97	9.30	0.72	5.14	10.83
F34	1.79	3.31	2.01	2.12	1.38	2.34	1.41	2.40	2.58	0.13	0.00	1.42	1.63	0.97	1.92	2.20
F35	0.95	4.16	3.25	4.06	1.84	2.73	5.81	4.53	6.57	10.26	19.10	10.56	6.67	9.60	9.57	6.99
F37	0.46	0.61	0.35	0.41	0.65	0.63	0.21	0.32	0.50	0.00	0.00	0.84	0.51	0.14	0.27	0.66
F38	0.21	0.26	0.19	0.00	0.30	0.19	0.00	0.07	0.00	0.00	0.00	0.27	0.19	0.69	0.39	0.22
F39	0.19	0.00	0.34	0.00	0.21	0.42	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.08	0.09	0.09	0.04	0.18
F41	0.20	0.55	0.05	0.06	0.20	0.22	0.10	0.29	0.14	0.25	0.15	0.81	0.48	1.35	0.14	0.39
F43	1.29	0.77	0.56	0.67	1.25	1.07	0.65	0.66	0.52	0.88	2.09	1.43	1.23	2.25	1.47	0.88
F45	0.84	0.90	0.25	0.15	0.89	0.87	0.29	0.39	0.26	0.84	0.18	2.40	1.93	4.83	0.00	0.87
F50	6.72	4.61	3.13	3.73	6.15	5.78	3.13	3.07	1.72	6.64	0.00	8.10	6.83	11.75	5.99	4.00
F51	0.34	0.20	0.10	0.03	0.60	0.45	0.03	0.04	0.00	0.10	0.09	0.00	0.31	0.70	0.62	0.10
总和	89.30	93.12	93.63	96.29	88.17	88.11	94.81	97.94	97.74	98.22	98.71	85.73	84.54	87.80	90.52	94.24



表 5 用于主成分分析风味物质质量浓度的统计 (mg/L)

	N1	N2	N3	N4	N5	N6	N7	N8	N9	Q1	Q2	J1	J2	J3	Z1	T1
F1	1 910.5	1 647.3	1 651.5	1 904.3	2 296.5	1 783.0	1 681.4	1 422.2	1 261.5	11.3	8.8	134.8	1 363.4	84.2	657.6	1 556.2
F2	448.3	89.8	165.2	144.7	371.7	289.6	142.2	162.6	60.3	190.4	292.8	303.9	211.8	370.3	461.0	237.4
F3	438.1	308.1	510.9	431.4	535.5	473.8	373.6	294.0	290.8	380.6	406.7	603.4	479.5	585.5	477.5	444.6
F4	268.9	326.0	291.2	277.0	265.4	384.8	209.0	226.9	156.7	8.5	1.7	119.4	187.3	105.7	247.9	212.0
F5	214.6	422.0	384.5	547.6	362.6	440.0	464.0	379.9	326.6	896.6	610.0	896.3	778.9	872.3	725.8	504.9
F6	133.0	86.7	56.9	85.2	200.0	125.3	59.9	45.5	10.2	0.0	0.0	126.7	141.0	23.1	23.6	78.3
F9	68.0	32.1	51.6	22.0	170.5	82.7	13.4	16.6	8.7	0.0	0.0	12.6	17.1	6.2	11.9	24.3
F11	62.8	38.1	77.9	10.3	113.7	91.5	5.8	9.2	4.0	4.4	6.7	16.3	9.7	15.1	16.2	19.5
F14	18.6	4.4	33.8	0.0	54.1	41.9	0.0	4.8	3.8	0.0	4.2	76.3	29.4	24.1	0.0	7.9
F18	235.5	63.3	126.7	39.7	161.6	157.8	97.9	144.1	72.7	91.7	94.3	749.7	354.7	679.3	413.2	218.8
F19	53.7	24.1	58.4	32.8	73.0	70.5	38.3	46.8	17.0	58.0	74.9	96.2	70.4	134.5	189.4	74.4
F21	89.5	10.5	20.8	13.3	53.1	31.4	14.6	17.3	5.7	23.9	31.3	39.3	25.7	59.8	66.0	26.2
F22	0.0	9.3	0.0	3.2	0.0	0.0	5.2	0.0	6.8	3.6	4.6	22.4	14.2	34.3	0.0	14.4
F23	83.8	77.7	144.3	129.1	76.1	48.0	132.7	130.6	114.6	140.8	165.4	48.8	69.2	64.1	112.3	101.4
F24	61.9	47.8	58.9	8.4	84.6	107.5	31.7	18.8	9.6	2.4	5.0	32.9	13.0	23.1	23.2	67.8
F27	8.2	6.1	5.7	2.7	6.2	7.2	7.6	8.7	4.0	7.2	14.2	39.7	21.5	58.4	109.1	11.4
F29	7.3	17.2	8.1	0.0	12.0	14.0	8.0	7.2	0.0	8.9	14.5	53.5	34.0	81.1	27.7	17.9
F31	6.7	5.1	0.0	0.0	8.1	4.1	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	19.2	0.0	21.5	12.9	5.4
F33	733.3	1023.6	890.8	877.1	919.1	1249.1	397.6	670.7	959.2	16.3	15.9	55.8	641.5	42.9	282.5	586.4
F34	113.4	180.4	109.1	113.1	106.8	172.4	62.6	100.3	100.2	3.1	0.0	81.9	112.7	57.6	105.5	119.0
F35	60.4	227.0	177.0	216.3	142.2	201.3	257.3	189.5	254.7	239.3	433.6	608.6	460.0	569.4	526.3	378.5
F37	29.2	33.4	18.8	21.9	50.0	46.3	9.2	13.4	19.4	0.0	0.0	48.4	35.5	8.5	14.8	35.6
F38	13.5	14.2	10.1	0.0	23.1	14.2	0.0	2.9	0.0	0.0	0.0	15.7	13.1	40.9	21.2	11.7
F39	12.3	0.0	18.2	0.0	15.9	30.7	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	4.5	6.0	5.2	2.3	9.6
F41	12.9	30.2	2.9	3.3	15.6	16.0	4.3	12.3	5.6	5.7	3.4	46.9	33.4	80.3	7.5	20.9
F43	82.2	41.8	30.5	35.8	96.2	78.9	28.9	27.8	20.1	20.5	47.5	82.2	85.2	133.6	81.0	47.7
F45	53.2	48.8	13.5	8.1	68.4	64.1	12.7	16.5	10.1	19.6	4.0	138.3	133.0	286.7	0.0	47.3
F50	426.2	251.2	170.1	198.6	474.5	425.3	138.4	128.5	66.8	154.8	0.0	466.9	471.1	697.0	329.5	216.3
F51	21.7	10.7	5.5	1.8	46.2	33.3	1.3	1.6	0.0	2.3	1.9	0.0	21.6	41.6	34.0	5.3
总和	5 667.5	5 077.1	5 093.0	5 127.9	6 802.6	6 484.8	4 197.4	4 098.3	3 789.1	2 290.0	2 241.4	4 940.6	5 833.6	5 206.3	4 980.0	5 101.0

用于主成分分析的 29 种风味物质质量分数总和,除酱香型白酒 J2 中稍低,为 84.54%外,其它白酒中均超过 85.00%,其中清香型白酒 Q2 最高为 98.71%,说明这 29 种风味物质,能较全面反映白酒风味组分的构成。

2.4.2 不同香型白酒的主成分分析 表 5 显示表 4 中风味物质对应的质量浓度,将其用于主成分分析。分析结果见表 6、表 7。提取了两个主成分,第 1 个主成分的特征值为 12.03,第 2 个主成分的

特征值为 8.94,能够解释原始风味组分的方差分别为 41.48%和 30.82%,前两个主成分可解释 72.30%的原始风味组分信息;除了甲酸异戊酯、棕榈酸乙酯、活性戊醇、异丁醇、苯乙醇、丁酸的共同度稍低些外,其它风味物质的共同度均超过了 0.600,说明大部分风味物质的信息能被主成分解释 60%以上,所提取的两个主成分能够较好地反映白酒风味组分的构成<sup>[21-23]</sup>。

表 6 主成分特征值及解释的总方差

Table 6 Eigenvalue and total variance of principal components analysis

成分	初始特征值			提取平方和载入		
	合计	方差的%	累积%	合计	方差的%	累积%
1	12.03	41.48	41.48	12.03	41.48	41.48
2	8.94	30.82	72.30	8.94	30.82	72.30
3	2.68	9.24	81.54			
4	1.58	5.44	86.98			
5	1.11	3.84	90.82			

表 7 用于主成分分析风味物质的共同度

Table 7 Communalities of flavor components of principal components analysis

风味物质	初始	提取	风味物质	初始	提取
己酸乙酯(F1)	1.000	0.828	苯乙醇(F27)	1.000	0.530
甲酸异戊酯(F2)	1.000	0.505	(2R,3R)-(-)-2,3-丁二醇(F29)	1.000	0.923
乳酸乙酯(F3)	1.000	0.705	3-呋喃甲醇(F31)	1.000	0.835
丁酸乙酯(F4)	1.000	0.703	己酸(F33)	1.000	0.818
乙酸乙酯(F5)	1.000	0.728	丁酸(F34)	1.000	0.570
戊酸乙酯(F6)	1.000	0.707	乙酸(F35)	1.000	0.786
庚酸乙酯(F9)	1.000	0.780	正戊酸(F37)	1.000	0.675
辛酸乙酯(F11)	1.000	0.811	3-甲基戊酸(F38)	1.000	0.850
棕榈酸乙酯(F14)	1.000	0.546	辛酸(F39)	1.000	0.665
正丙醇(F18)	1.000	0.889	3-羟基-2-丁酮(F41)	1.000	0.714
活性戊醇(F19)	1.000	0.599	乙醛 F43	1.000	0.910
异丁醇(F21)	1.000	0.449	3-糠醛(F45)	1.000	0.731
2,3-丁二醇(F22)	1.000	0.629	1,1-二乙氧基乙烷(F50)	1.000	0.905
甲醇(F23)	1.000	0.726	1,1-二乙氧基-3-甲基丁烷(F51)	1.000	0.648
正己醇(F24)	1.000	0.799			

主成分分析在白酒香型的分类方面,不如聚类分析效果好,这可能是因为聚类分析选择了 55 种风味物质,而主成分分析只选择了 29 种。图 3 表明清香型白酒 Q1、Q2 分布很集中,与其它白酒明显不同;其它白酒分布较为分散,特香型白酒 T1 很明显地靠近浓香型白酒;酱香型白酒 J2 与 J1、J3 虽分布在第 4 象限,但 J2 明显靠近浓香型白酒;芝麻香型白酒 Z1 和酱香白酒 J1、J2、J3 均分布在第 4 象限,风味组分构成较为相似,上述发现与聚类分析结果一致。

主成分分析表明白酒香型与风味物质之间的联系。图 2 表明除甲醇外,其它风味物质都集中分布在第一、第二、第四象限,甲醇显著区别于其它风味物质,这与其是白酒中一种有毒有害物质的理论相符<sup>[24]</sup>。己酸乙酯和己酸等物质的分布很集中,均对 PC2 有较大的正向影响。图 4 表明这类物质与浓香型白酒有很大相关性,这与己酸乙酯和己酸是浓香型白酒主体风味物质的理论相符。乙酸乙酯和乙酸等物质的分布也比较集中,而这类物质与清香型白酒 Q1、Q2 的分布不太相近。尽管如此,图 4 表明:除甲醇外,乙酸乙酯和乙酸与 Q1、Q2 是最为接近的,与清香型白酒的相关性最大,这与其是清香型白酒主体风味物质的理论相符。苯乙醇、2,3-丁二醇、活性戊醇、(2R,3R)-(-)-2,3-丁二醇、正丙醇、3-羟基-2-丁酮、3-糠醛、

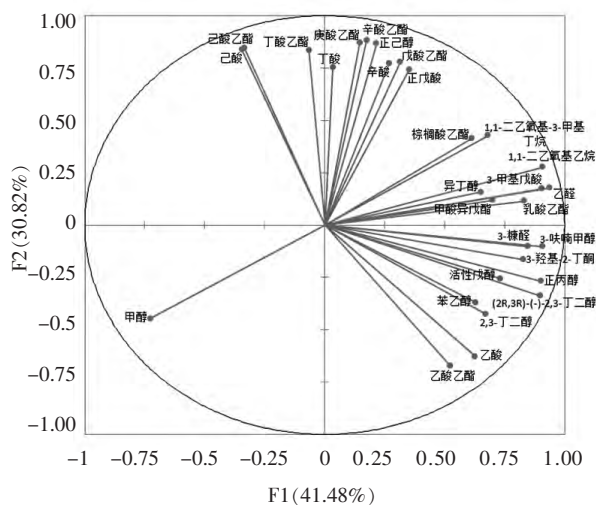


图 2 PCA 分析主成分载荷图 (轴 PC1 和 PC2: 72.30%)

Fig.2 Loading plot of principal components analysis (axes PC1 and PC2: 72.30%)

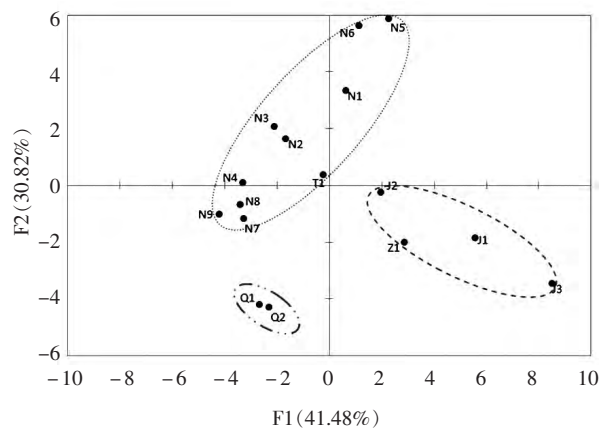


图 3 PCA 分析酒样得分图 (轴 F1 和 F2: 72.30%)

Fig.3 Score plot of principal components analysis (axes PC1 and PC2: 72.30%)

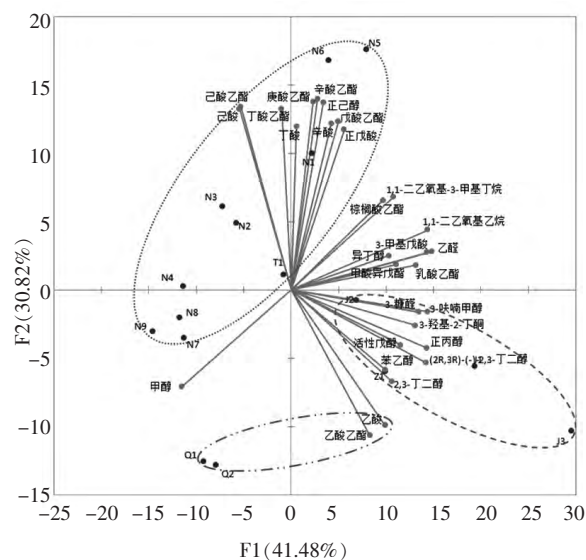


图 4 PCA 分析主成分载荷和酒样得分双重图 (轴 F1 和 F2: 72.30%)

Fig.4 Loading plot and score plot of principal components analysis (axes PC1 and PC2: 72.30%)

3-呋喃甲醇与酱香型和芝麻香型白酒的相关性较大,其中苯乙醇与芝麻香型白酒 Z1 的分布几乎重合,说明苯乙醇是芝麻香型白酒的关键风味物质<sup>[25-28]</sup>。

### 3 结论

采用 GC-MS 直接进样的分析方法共检测出

134种微量成分。从中选取55种进行聚类分析,质量分数总和最低为97.16%,最高为99.95%。选取29种进行主成分分析,质量分数总和最低为84.54%,最高为98.71%,这些风味物质均能较全面地反映白酒风味组分的构成。

聚类分析将不同香型的白酒分成5类:类1中含有浓香型白酒N1~N9和特香型白酒T1,类2中含有清香型白酒Q1和Q2;类3中含有酱香型白酒J1和J3;酱香型白酒J2和芝麻香型白酒Z1分别为类4和类5。J2区别于J1、J3被单独分作一类,可能与其不是市售白酒,而是厂家直接提供的特殊酒样有关。通过主成分分析提取的两个主成分,可解释酒样72.30%的原始风味组分信息,能反映风味组分与香型之间的联系;己酸乙酯、己酸

和乙酸乙酯、乙酸分别与浓香型和清香型白酒的相关性较大,这与其分别为浓香型和清香型白酒主体风味物质的理论相符;苯乙醇与芝麻香型白酒Z1的分布几乎重合,是芝麻香型白酒的关键风味物质。聚类分析和主成分分析均表明特香型白酒T1与浓香型白酒风味组分的构成最为相近,酱香型白酒J2偏向于浓香型,芝麻香型白酒Z1与酱香型白酒较为相近。

聚类分析和主成分分析所选取的风味物质均为大多酒样共有或质量分数较大的风味组分。白酒中主体风味物质的构成差异可能是决定白酒不同香型的实质;而那些仅少数白酒含有,质量分数较低的微量成分可能是决定同一香型白酒种类不同的关键。

#### 参 考 文 献

- [1] 邵长军,李刚,李亮国,等.白酒香型与香味成分探究[J].酿酒科技,2005,(8):92-93.
- [2] 赵爽,杨春霞,廖永红,等.白酒风味化合物及其风味微生物研究进展[J].酿酒科技,2012,(3):85-88.
- [3] 张国强,陶锐.试论白酒风味的成因[J].酿酒,2008,35(3):6-13.
- [4] 沈怡方.白酒风味质量形成的主要因素[J].酿酒科技,2005,(11):30-34.
- [5] 王传荣.白酒的香型及其风味特征研究[J].酿酒科技,2008,(9):49-52.
- [6] 黄艳梅,卢建春,李安军,等.采用气相色谱-质谱分析古井贡酒中的风味物质[J].酿酒科技,2006,(7):91-94.
- [7] FANWL, QIAN C. Characterization of aroma compounds of Chinese 'Wuliangye' and 'Jiannanchun' liquors by aroma extract dilution analysis[J]. J Agric Food Chem, 2006, 54(7): 2695-2704.
- [8] 赵爽,张毅斌,廖永红,等.酒酯微量挥发性成分的HS-SPME和GC-MS分析[J].食品科学,2013,34(4):118-124.
- [9] 田洪磊,张灏,田丰伟,等.GC-MS结合聚类分析和PCA分析用于新疆小白杏杏仁油质量控制研究[J].食品工业科技,2013,34(2):87-89.
- [10] 孙金旭,朱会霞.蛋白酶对酱香型白酒中杂油醇含量的影响研究[J].现代食品科技,2012,28(9):1146-1148.
- [11] JORGE AP, OSCAR Q. Analysis of volatile compounds of mango wine[J]. Food Chemistry, 2011, 125(4): 1141-1146.
- [12] 郑岩,汤庆莉,吴天祥,等.GC-MS法建立贵州茅台酒指纹图谱的研究[J].中国酿造,2008,(9):74-76.
- [13] 康文怀,徐岩.中国白酒风味分析及其影响机制的研究[J].北京工商大学学报:自然科学版,2012,30(3):53-58.
- [14] 徐岩,范文来,王海燕,等.风味分析定向中国白酒技术研究的进展[J].酿酒科技,2010,(11):73-78.
- [15] ZHU SK, LU X, JIK L, et al. Characterization of flavor compounds in Chinese liquor Moutai by comprehensive two-dimensional gas chromatography/time-of-flight mass spectrometry[J]. Analytica Chimica Acta, 2007, 597(2): 340-348.
- [16] CHENG PY, FAN WL, XU Y. Determination of Chinese liquors from different geographic origins by combination of mass spectrometry and chemometric technique[J]. Food Control, 2014, 35(1): 153-158.
- [17] XIAO Z B, YU D, NIU Y W, et al. Characterization of aroma compounds of Chinese famous liquors by gas chromatography-mass spectrometry and flash GC electronic-nose[J]. Journal of Chromatography B, 2014, (945/946): 92-100.

- [18] 范文来, 徐岩. 清香类型原酒共性与个性成分[J]. 酿酒, 2012, 39(2): 14–22.
- [19] 沈海月. 酱香型白酒香气物质研究[D]. 无锡: 江南大学, 2010.
- [20] 李习, 方尚玲, 刘超, 等. 酱香型白酒风味物质主体成分研究进展[J]. 酿酒, 2012, 39(3): 19–23.
- [21] 郭兆阳, 刘明, 钟其顶, 等. 主成分分析 OAV 值评价白酒风味组分的研究[J]. 食品工业, 2011, (7): 79–83.
- [22] JULIANE E W, VITOR M, MAURO Z, et al. Differentiation of wines according to grape variety using multivariate analysis of comprehensive two-dimensional gas chromatography with time-of-flight mass spectrometric detection data [J]. Food Chemistry, 2013, 141(4): 3897–3905.
- [23] 任东旭, 刘辉, 赵悦, 等. 电子鼻 PCA 分析方法对鸡汤品质分析研究[J]. 食品科技, 2013, 38(4): 296–301.
- [24] 元学奎, 王欣欣, 杨华. 毛细管色谱法测定白酒中的甲醇、乙酸乙酯、乳酸乙酯和正丙醇[J]. 食品科技, 2014, 39(2): 276–278.
- [25] LIANG H Y, CHEN J Y, HAN B Z, et al. Aromatic and sensorial profiles of young Cabernet Sauvignon wines fermented by different Chinese autochthonous *Saccharomyces cerevisiae* strains[J]. Food Research International, 2013, 51(2): 855–865.
- [26] ZHENGJ, LIANG R, WUC D[J]. Discrimination of different kinds of Luzhou-flavor raw liquors based on their volatile features[J]. Food Research International, 2014, (56): 77–84.
- [27] RODRIGUEZ-CAMPOS J, ESCALONA-BUENDIA H B, IOROZCO-AVILA, et al. Dynamics of volatile and non-volatile compounds in cocoa (*Theobroma cacao* L.) during fermentation and drying processes using principal components analysis[J]. 2011, 44(1): 250–258.
- [28] KALLITHRAKA S, ARVANITOYANNIS I S, KEFALAS P, et al. Instrumental and sensory analysis of Greek wines; implementation of principal component analysis (PCA) for classification according to geographical origin[J]. 2001, 73(4): 501–514.

### Cluster Analysis and Principal Components Analysis of Different Flavor Types of Liquor

Qian Chong Liao Yonghong\* Liu Mingyan Xu Jin Liu Li Yu Li

(School of Food and Chemical Engineering, Beijing Technology and Business University, Beijing Key Laboratory of Flavor Chemistry, Beijing Laboratory for Food Quality and Safety, Beijing 100048)

**Abstract** The flavor components of several different flavor types of liquor were analysed by the method of direct sample injection with gas chromatography-mass spectrometry (GC-MS). A total of 134 kinds of trace components were identified, and the main flavor components of them were studied by the methods of cluster analysis and principal components analysis. The results suggested that different flavor types of liquor could be classified well by cluster analysis. In contrast, the effect of classification by principal components analysis was not as good as cluster analysis, but the correlation between flavor types and flavor components could be effectively reflected by principal components analysis.

**Keywords** liquor; gas chromatography-mass spectrometry (GC-MS); flavor component; flavor type; cluster analysis (CA); principal components analysis (PCA)