市販焼酎への主成分分析法の適用

大森大陸・秋山裕一

(協和醸造工業株式会社)

昭和59年9月20日受理

Results of Principal Component Analysis

Analysis of Commercial Shōchū Obtained from the Market (Part 2)

Tairiku OOMORI and Hiroichi AKIYAMA

(Kyowahakko Kogyo Co. Ltd., 1-6-1 Otemachi, Chiyoda-ku, Tokyo 100)

Principal Component Analysis with chemical data was applied to Commercial Shōchū Samples Korui, Otsurui and Blended Shōchū bought from the market.

The results are as follows;

1. First Principal Component has relation to the content of overall flavour compounds.
2. Each of the Shōchū Groups is generally classified on X-Y plot diagram. "Mugi" group of the Otsurui Shōchū situated near "Soba" group.

Blended Shōchū group is divided into two parts; one is characteristic of Korui and another of Otsurui.

緒 言

前報¹⁾では市場から収集した91点の焼酎サンプルの化学分析、官能検査の結果の概要を報告した。そこでは各焼酎サンプルの化学分析値、官能評点の最大値、最小値、平均値を示したのみであった。多数のサンプルの多項目にわたるデータ群の特徴をより少ない因子(または主成分)に要約して解析する方法としては多変量統計解析法が優れており、前報で得られた個々のサンプルのデータを一括して主成分分析法を適用して解析したところ、各種類の焼酎の特性をよく説明できたと考えられたので、本報ではこれらの結果について報告する。

実 験 方 法

1. 供試データ

前報¹⁾で報告した91点の甲類、乙類、甲乙混和焼酎から得られた化学分析値をデータとして用いた。

2. 使用変数

主成分分析法を適用するに当たって使用した変数は官能検査を除いたつぎに示す15成分の分析値である。

No. 1, エタノール 10, *i*-アミルアルコール

市販焼酎の解析(第2報)

2. pH	13. アルコール類合計※
3. 酸度	(以下 Alcs. と略す)
4. 蔗糖	14. メタノール/Alcs.
5. アセトアルデヒド	15. <i>n</i> -プロパノール/Alcs.
6. 酢酸エチル	16. <i>i</i> -ブタノール/Alcs.
7. メタノール	17. <i>i</i> -アミルアルコール/
8. <i>n</i> -プロパノール	Alcs.
9. <i>i</i> -ブタノール	

※ アルコール類合計 (Alcs.) = メタノール + *n*-プロパノール + *i*-ブタノール + *i*-アミルアルコール

3. 数値計算

日本電気(株)製 ACOS450 を用いてプログラムパッケージ "STAT PACK" により、相関行列を求め、これを用いてハウスホルダー法により固有値、固有ベクトルを求め、さらに主成分得点を算出した。

結果および考察

1. 相関行列

相関行列の結果を第1表に示す。

この表から明らかとなっており、pH および メタノール/Alcs. は多くの成分と負相関であり、とくにメタノール

第1表 相関行列

VARIABLE	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	13	14	15	16	17
1. エタノール	1.00000	1.00000	1.00000	1.00000	1.00000	1.00000	1.00000	1.00000	1.00000	1.00000	1.00000	1.00000	1.00000	1.00000	1.00000
2. pH	-0.31999**	1.00000	1.00000	1.00000	1.00000	1.00000	1.00000	1.00000	1.00000	1.00000	1.00000	1.00000	1.00000	1.00000	1.00000
3. 酸度	0.19889	-0.82678**	1.00000	1.00000	1.00000	1.00000	1.00000	1.00000	1.00000	1.00000	1.00000	1.00000	1.00000	1.00000	1.00000
4. 蔗糖	0.12936	-0.38315**	0.31883**	1.00000	1.00000	1.00000	1.00000	1.00000	1.00000	1.00000	1.00000	1.00000	1.00000	1.00000	1.00000
5. アセトアルデヒド	0.33597**	-0.85918**	0.82455**	0.37003**	1.00000	1.00000	1.00000	1.00000	1.00000	1.00000	1.00000	1.00000	1.00000	1.00000	1.00000
6. 酢酸エチル	0.35016**	-0.88606**	0.82258**	0.37003**	0.91771**	1.00000	1.00000	1.00000	1.00000	1.00000	1.00000	1.00000	1.00000	1.00000	1.00000
7. メタノール	0.13227	-0.57053**	0.62130**	-0.09785**	0.74656**	0.62167**	1.00000	1.00000	1.00000	1.00000	1.00000	1.00000	1.00000	1.00000	1.00000
8. n-プロパノール	0.42786**	-0.69815**	0.52465**	0.38647**	0.74656**	0.84016**	0.39134**	1.00000	1.00000	1.00000	1.00000	1.00000	1.00000	1.00000	1.00000
9. i-ブタノール	0.38508**	-0.83804**	0.71798**	0.38647**	0.84016**	0.94577**	0.58085**	0.98236**	1.00000	1.00000	1.00000	1.00000	1.00000	1.00000	1.00000
10. i-アミルアルコール	0.37559**	-0.78514**	0.65361**	0.50754**	0.94577**	0.90906**	0.48199**	0.99277**	0.98236**	1.00000	1.00000	1.00000	1.00000	1.00000	1.00000
13. アルコール類(以下Alcs.※)	0.37643**	-0.81237**	0.69847**	0.39635**	0.81056**	0.93409**	0.63728**	0.93594**	0.99277**	0.98236**	1.00000	1.00000	1.00000	1.00000	1.00000
14. メタノール/Alcs.	-0.10431	0.24286*	-0.11217	-0.24448*	-0.20859**	-0.24580*	0.07294	-0.31240**	-0.28571**	-0.31750**	-0.26163*	1.00000	1.00000	1.00000	1.00000
15. n-プロパノール/Alcs.	0.31092**	-0.48382**	0.31241**	0.33834*	0.50877**	0.58987**	0.14419	0.74779**	0.67228**	0.69121**	0.65636**	-0.43333**	1.00000	1.00000	1.00000
16. i-ブタノール/Alcs.	0.22823*	-0.40949**	0.29207**	0.26165*	0.39909**	0.41530**	0.14725	0.40169**	0.44531**	0.43651**	0.41691**	-0.45005**	0.50886**	1.00000	1.00000
17. i-アミルアルコール/Alcs.	0.04387	-0.06236**	-0.01208	0.11324	0.01475	0.02281	-0.11559	0.03771	0.03398	0.06750	0.02342	-0.61734	0.06376**	0.16624	1.00000

※：アルコール類=メタノール+n-プロパノール+i-ブタノール+i-アミルアルコール

*：相関(危険率5%) r (89, 0.05) = 0.206

**：相関(危険率1%) r (89, 0.01) = 0.269

第2表 固 有 値

Component No.	固 有 値
1	8.386256
2	1.968563
3	1.109734
4	0.923010
5	0.768674
6	0.662222

第3表 累積寄与率

Component No.	累積寄与率
1	0.559084
2	0.690321
3	0.764304
4	0.825838
5	0.877082
6	0.921231

第4表 固 有 ベ ク ト ル

Component No.	1	2	3
VARIABLE			
1. エタノール	0.14403	-0.05980	0.34345
2. pH	-0.30627	-0.08896	0.16398
3. 酸度	0.26909	0.21260	-0.28773
4. 蔗糖	0.15754	-0.22761	0.27574
5. アセトアルデヒド	0.31398	0.12908	-0.13215
6. 酢酸エチル	0.33265	0.09743	-0.06926
7. メタノール	0.20174	0.38601	-0.37606
8. n-プロパノール	0.31193	-0.05759	0.23043
9. i-ブタノール	0.33951	0.02966	0.05977
10. i-アミルアルコール	0.33084	-0.03164	0.12212
13. アルコール類*	0.33526	0.05790	0.04234
14. メタノール/No.13*	-0.11893	0.56112	0.28710
15. n-プロパノール/No.13*	0.23954	-0.24707	0.32071
16. i-ブタノール/No.13*	0.17774	-0.29533	-0.00052
17. i-アミルアルコール/No.13*	0.02716	-0.49465	-0.52344

* 第1表脚注参照

第5表 因子負荷量

Component No.	1	2	3
VARIABLE			
1. エタノール	0.41711	-0.08389	0.36180
2. pH	-0.88694	-0.12481	0.17274
3. 酸度	0.77925	0.29829	-0.30311
4. 蔗糖	0.45621	-0.31935	0.29047
5. アセトアルデヒド	0.90926	0.18110	-0.13921
6. 酢酸エチル	0.96333	0.13670	-0.07296
7. メタノール	0.58422	0.54159	-0.39616
8. n-プロパノール	0.90332	-0.08080	0.24274
9. i-ブタノール	0.98319	0.04162	0.06296
10. i-アミルアルコール	0.95809	-0.04440	0.12865
13. アルコール類*	0.97087	0.08124	0.04461
14. メタノール/No.13*	-0.34440	0.78728	0.30244
15. n-プロパノール/No.13*	0.69370	-0.34666	0.33785
16. i-ブタノール/No.13*	0.51473	-0.41436	-0.00054
17. i-アミルアルコール/No.13*	0.07866	-0.69403	-0.55142

* 第1表脚注参照

ル/Alcs. は他のアルコール類/Alcs. とはすべて負相関である。アセトアルデヒド、酢酸エチル、i-ブタノール、i-アミルアルコールは他の成分と比較的正相関が強いが、i-アミルアルコール/Alcs. はメタノール/Alcs. と負相関であるほかは他の成分と無相関である。

2. 固 有 値

固有値は第2表に示すとおりで、1.0 を超える固有値は第3主成分までである。したがってパラツキを拡大するという意味から第3主成分までに注目した。

3. 累積寄与率

累積寄与率は第3表に示すとおりで、第1主成分でデータ全体のバラツキの55.9%を説明しており、第3主成分までで76.4%を説明している。

4. 固有ベクトルおよび因子負荷量

第4表に第3主成分までの固有ベクトル、第5表に因子負荷量を示した。

これらの表から明らかとなっており、第1主成分は酸度、pH および一般的に低沸点揮発性成分に関しており、総合的な香味成分の多少を表している。第2主成分はメタノール、*i*-アミルアルコール含有量に関した軸である。第3主成分にはきわだった特徴はないが、強いていえば *i*-アミルアルコール/Alcs. に関係している。

5. 主成分得点

個々のサンプルの基準化した変数に固有ベクトルを乗じて合計して得た第1～第3主成分得点を X-Y プロット図として第1図～第3図に示した。

第1図はX軸に第1主成分得点、Y軸に第2主成分得点をプロットしたものである。さきに因子負荷量の項で述べたとおり、第1主成分軸は総合的な香味成分含有量の多少を表しており、成分の少ない甲類は得点が小さく、成分の多い乙類は得点が高い。甲乙混和焼酎は甲類と乙類との間の得点を有するが、甲類に近い製品と乙類に近い製品に分けられることが認められた。

第2主成分軸はメタノール、*i*-アミルアルコールに関係した軸で、20°、25°甲類の1部および25°乙類“いも”は特異的に高い得点を示している。“いも”はサツマイモ組織の骨格成分として繊維質成分のほかにペクチンが他の穀類に比べて多く存在しており、ペクチンはそ

が分子構成が(α-1-4) Poly galacturonic acid-Poly Methanol Ester となっている関係で、加水分解されるとメタノールが生成するもので、メタノールが比較的多くなることは周知の事実である。

以上のとおり、2次元平面上に主成分得点を X-Y プロットすることにより、甲類と乙類の識別が容易になり、かつ25°乙類の中では原料別の大略の分けができ、ことに“いも”が特異的な位置を占めていることが認められた。第1図からさらに35°甲類が20°、25°甲類と25°乙類の間に位置していることが認められた。こ

第2図 第1, 第3主成分得点
COMPONENT SCORE (Added Variables on Alcs. Ratios,
Without Sensory Test)

第1図 第1, 第2主成分得点
COMPONENT SCORE (Added Variables on Alcs. Ratios,
Without Sensory Test)

第3図 第2, 第3主成分得点
COMPONENT SCORE (Added Variables on Alcs. Ratios,
Without Sensore Test)

こに用いた 35° 甲類はニュータイプであり、アルコール度数が高いうえ、在来タイプよりも多くの香味成分を含んでいるが、その量は乙類よりも少ないために、ここに位置したものである。35° 乙類は 1 点のみで前報¹⁾の第 2 表の分析値から推測できると考えるが、今回用いた 91 点のサンプルの中では総合的には最も多くの香味成分を含有しているところから、第 1 主成分得点が最も高いことも理解できる。

第 2 図は X 軸に第 1 主成分得点、Y 軸に第 3 主成分得点をプロットしたものである。X 軸が第 1 図と同じであるので、図形はよく似ているが、第 3 主成分の因子負荷量に大きな特徴がないので第 3 主成分得点のバラツキが小さくなった。

第 3 図は X 軸に第 2 主成分得点、Y 軸に第 3 主成分得点をプロットしたものである。両軸とも前 2 図ですでに使用したものであるが、25° 乙類“いも”と 20°、25° 甲類の 1 部に区別できるサンプルがあるほかは一見して区分はできない。しかし 35° 乙類はこの図においても特異な位置を占めている。

第 2 表の固有値、第 3 表の累積寄与率から明らかとなり、サンプル間のバラツキを説明するうえでは第 1 主成分が最も優れているのであり、ついで第 2 主成分が優れている。このことから各主成分得点を X-Y プロットして平面上で各サンプルの特性を見ようとする場合、第 1 図が最も適していることが明らかである。すなわち第 2 主成分までで全体のバラツキの 69.0% は説明できることが示された。

以上にみたとおり、一見して特徴をつかみ難い多項目にわたる分析値もこれらを多次元のデータ群とみなして主成分分析法を導入することにより、大筋での特性をつかみ得たと考えられる。多次元のデータを低次元に縮約してその特性を見ようとする多変量統計解析法の特長がじゅうぶんに発揮されたと考えられる。

筆者らは変数に官能評点を加えた主成分分析も行なってみたが、同一種類群内のまとまりは本報よりもゆるくなった。その理由は官能評点のバラツキにあるが、より訓練されたパネラーだけによる官能評点ならばまとまりはもっと良くなったものと考えられる。

また筆者らは pH および官能評点以外の香味成分含有量をアルコール 20° にすべて換算して主成分分析法を適用してみたが本質的には本報と類似した特徴の X-Y プロット図が得られたが、35° 乙類は 25° 乙類“そば”の中へ、35° 甲類は 20°、25° 甲類の中に組み込まれた。すなわちふつうの飲酒時のように一定濃度に和水分した場合には 35° 乙類あるいは 35° 甲類としての固有の特性が失われるとみられるような結果が得られた。このことから

各製品群の特性を知るためにはいわゆる生(き)のままのデータを用いる方が適していると考えられた。

なお、現実の姿を正確に見るだけでなく、この方法のさらに積極的な活用法としては、未知サンプルの特性把握あるいは新製品開発における品質設計への応用が考えられる。

要 約

前報¹⁾で報告した市販の甲類、乙類、甲乙混和焼酎合計 91 サンプルの化学分析値を変数として主成分分析法を行ない、つぎの諸点を明らかにした。

1. 第 1 主成分は総合的な香味成分含有量に関する軸で、含有成分量に応じて甲類から乙類まで連続的に主成分得点変動していた。第 2 主成分は主としてメタノール、*i*-アミルアルコールに關した軸であった。
2. 第 1 主成分の固有値は 8.39、寄与率は 55.9%、第 2 主成分の固有値は 1.97、累積寄与率は 69.0%、第 3 主成分の固有値は 1.11、累積寄与率は 76.4% であった。
3. 各主成分得点を二次元平面の中に X-Y プロットした図から、各製品群が特有の位置を占めており、大略の区分分けができることを示した。すなわち、
 - (1) 20°、25° 甲類は 25° 乙類と区分できた。
 - (2) 25° 乙類は原料別に製品特性を形成しているが、“むぎ”と“そば”はかなり近縁な位置を占め“いも”はこれらとは明らかに異なった位置にあった。
 - (3) 25° 混和焼酎は甲類に近いサンプルと乙類に近いサンプルとに二極分化していた。

多変量統計解析法を示唆していただいた国税庁醸造試験所前所長佐藤信先生、具体的なご教示をいただいた同所第 6 研究室長西谷尚道先生およびコンピュータ操作を担当された当社システム部に深謝します。

なお前報と本報の概要は昭和 59 年度の日本醸酵学会大会において発表した。

参 考 文 献

- 1) 大森大陸，秋山裕一：醸協 80 (6) 415 (1985)
他に多変量統計解析法の参考書として
 - (1) 田中 豊，脇本和昌：「多変量統計解析法」現代数学社 昭和 58 年
 - (2) 奥野忠一，久米 均，芳賀敏郎，吉澤 正：「多変量解析法」日科技連 昭和 58 年
 - (3) 杉山高一：「多変量データ解析入門」朝倉書店 昭和 58 年