

# Application News

## No. A447

### 光吸収分析 Spectrophotometric Analysis

## ビール類の分光分析と多変量解析を用いた分類

Spectroscopic Measurement and Multivariate Analysis to Classification for Various Kinds of Beer

アルコール飲料の中でビールは人気が高く消費量が多いものですが、昨今ではビールに似た風味を備えた発泡酒やノンアルコールビールなども発売され、市場は賑わいを見せています。ビール、発泡酒、ノンアルコールビールを“ビール類”と呼ぶことにすると、これらビール類では原料や成分に変化を加え、アルコール度数やカロリー等を調節したものが多数販売されています。分光分析の観点から見ると、成分の種類や量が異なるビール類はその違いを反映した特有の吸収スペクトルを示すと考えられますが、実際にどのような相違が見られるかを調べることはたいへん興味深いことと言えます。

今回、紫外可視近赤外分光光度計 UV-3600 を用いて様々なビール類を測定し、その吸収スペクトルの差異を確認しましたので紹介致します。また多変量解析を用いてビール類の分類を試みましたので合わせて報告致します。

M. Sugioka

### ■ 試料と測定結果

#### Sample and Instrument

UV-3600 を用いて市販のビール類 14 種（ビール 4 種、発泡酒 6 種、ノンアルコールビール 4 種）の吸収スペクトルを測定しました。超音波を 3 分間照射し脱気してから光路長 2 mm の石英セルを用い Air をブランクとして測定しました。測定結果を Fig. 1 に、分析条件を Table 1 に示します。さらに紫外域（230 ~ 400 nm）と近赤外域（1400 ~ 1500 nm と 1650 ~ 1750 nm）を拡大した図を Fig. 2 ~ Fig. 4 に示します。Fig. 3 の 1450 nm 付近の大きなピークは主に水の吸収によるものであり、Fig. 4 における 1695 nm 周辺のピークは主にエタノールの吸収によります。参考として水とエタノール（99.5 % 濃度）の吸収スペクトルを Fig. 5 に示します。矢印で示した 1450nm 付近のピークは Fig. 3 のピークに対応し、1695 nm 付近のピークは Fig. 4 のピークに対応していることがわかります。

今回のデータでは紫外域で信号が飽和しているため、全試料を純水で 5 倍に希釈し、紫外域（230 ~ 400 nm）の吸収スペクトルを再度測定しました。その結果を Fig. 6 に示します。250 ~ 300 nm に見えるピークは、主にビール類に含まれる蛋白質の吸収によると考えられます。

試料に含まれるアルコール量は、ビール：5 %、発泡酒：3 % ~ 5.5 %、ノンアルコールビール：0 %、また蛋白質量は 100 mL 中でビール：0.2 ~ 0.4 g、発泡酒とノンアルコールビール：0 ~ 0.3 g となっています。商品ラベルにはこれらの範囲に含まれる“ある値”や“範囲”として記されています。本データにおける紫外域と近赤外域での吸収の大きさは、蛋白質とアルコールのそれぞれの含有量を凡そ反映したものになっています。

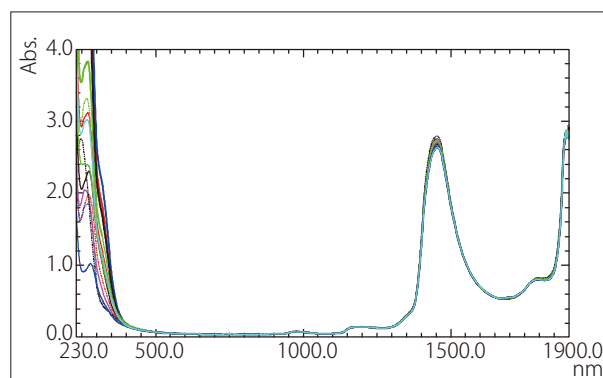


Fig. 1 ビール、発泡酒、ノンアルコールビールの吸収スペクトル  
(太線：ビール、細線：発泡酒、点線：ノンアルコールビール)  
Absorption Spectra of Beers, Low-malt Beers and Non-alcoholic Beers  
(Thick Line: Beers, Thin Line: Low-malt Beers, Dotted Line: Non-alcoholic Beers)

Table 1 分析条件  
Analytical Conditions

使用装置	: 島津紫外可視近赤外分光光度 UV-3600
測定波長範囲	: 230 nm ~ 1900 nm
スキャンスピード	: 中速
サンプリングピッチ	: 1.0 nm
測光値	: 吸光度
スリット幅	: 3 nm
検出器切替波長	: 870 nm, 1650 nm

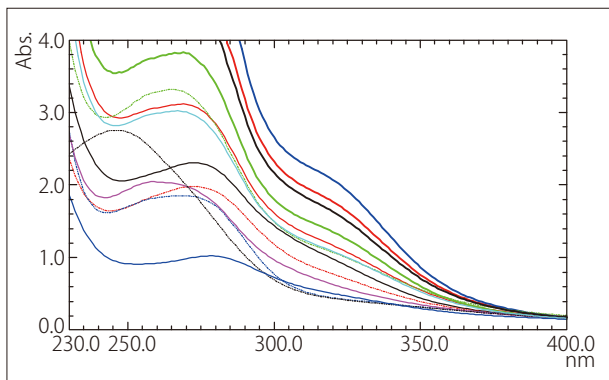


Fig. 2 Fig. 1の拡大図 (230 ~ 400 nm)  
(太線: ビール, 細線: 発泡酒, 点線: ノンアルコールビール)  
Expanded Spectra of Fig. 1 (230 ~ 400 nm)  
(Thick Line: Beers, Thin line: Low-malt Beers, Dotted Line: Non-alcoholic Beers)

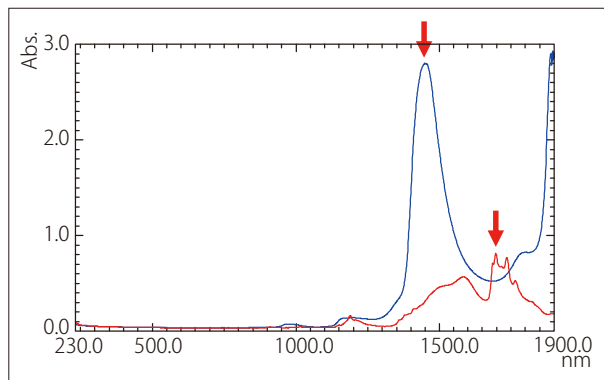


Fig. 5 水とエタノールの吸収スペクトル (青線: 水, 赤線: エタノール)  
Absorption Spectra of Water and Ethanol  
(Blue Line: Water, Red Line: Ethanol)

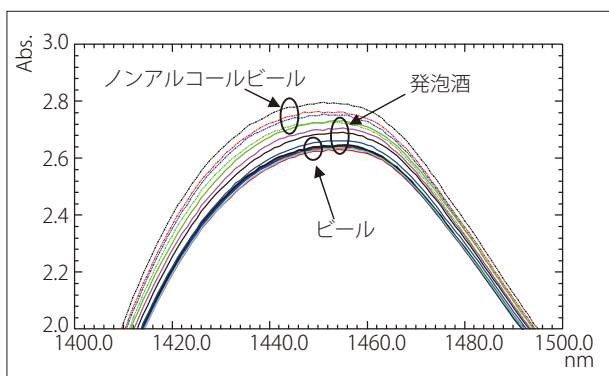


Fig. 3 Fig. 1の拡大図 (1400 ~ 1500 nm)  
(太線: ビール, 細線: 発泡酒, 点線: ノンアルコールビール)  
Expanded Spectra of Fig. 1 (1400 ~ 1500 nm)  
(Thick Line: Beers, Thin line: Low-malt Beers, Dotted Line: Non-alcoholic Beers)

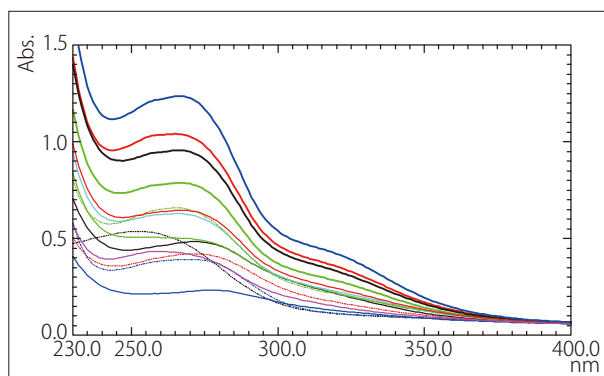


Fig. 6 5倍に希釈した試料の吸収スペクトル  
(太線: ビール, 細線: 発泡酒, 点線: ノンアルコールビール)  
Absorption Spectra of 5 times diluted Samples  
(Thick Line: Beers, Thin Line: Low-malt Beers, Dotted Line: Non-alcoholic Beers)

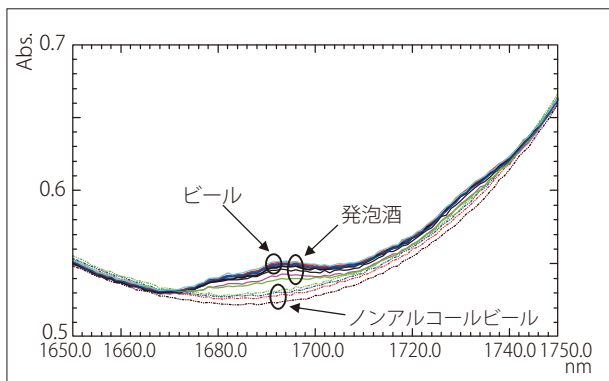


Fig. 4 Fig. 1の拡大図 (1650 ~ 1750 nm)  
(太線: ビール, 細線: 発泡酒, 点線: ノンアルコールビール)  
Expanded Spectra of Fig. 1 (1650 ~ 1750 nm)  
(Thick Line: Beers, Thin Line: Low-malt Beers, Dotted Line: Non-alcoholic Beers)

## ■多変量解析を用いたビール類の分類

### Classification for Various Kinds of Beer by Multivariate Analysis

多変量解析を用いてビール類の分類を試みました。5倍希釈の吸光度データ(230~400 nm)と希釈無しの吸光度データ(401~1870 nm)を用いて、主成分分析(PCA)を行いました<sup>1)</sup>。得られたスコアプロット<sup>2)</sup>をFig. 7に示します。Aがビール、Bが発泡酒、Cがノンアルコールビールに対応します。A, B, Cの各試料でグループを形成していることがわかります。スコアプロット上において近い点ほど“よく似た試料”となります。例えば、A1とA3やC1とC2は似ていると考えられますが、Fig. 8に示したそれらの紫外域のスペクトルを見ると互いによく似ていることがわかります。

Fig. 9にローディングプロット<sup>3)</sup>を示します。ローディングプロットを見ることで分類された各グループの特徴を把握することができます。Fig. 9を見ると、中心から右(または右上)方向に紫外域のデータ成分に対応するローディングベクトル<sup>3)</sup>成分が多くプロットされています。そのことは、Fig. 7のスコアプロットで右方向にプロットされた試料ほど紫外域の吸収が大きいことを意味します。実際その方向にあるA1~A4(ビール)は、Fig. 6を見ても紫外域の吸光度が高いものになっています。またFig. 9のローディングプロットで、中心から左上方向に水の吸収に対応する1400~1480 nmのローディングベクトル成分が多くプロットされています。このことはスコアプロットで左上方向にプロットされている試料ほど、純水に近い(アルコール分の少ない)試料であることを意味します。実際その方向にあるC1~C4(ノンアルコールビール)は、Fig. 3を見ても水の吸収に対応する1450 nm付近の吸光度が高いものになっています。

以上より、スコアプロットの右方向ほど主に紫外域の吸光度が高い試料が、また左上方向ほどアルコール分が少ない試料がプロットされていると言えます。表現を変えると、スコアプロット上で右方向に位置する試料ほど蛋白質等の有機物を多く含み、また左上方向に位置する試料ほどアルコール分の少ない試料であるということが出来ます。B1~B6の発泡酒は、紫外域の吸光度がそれほど高くなく(ノンアルコールビールと同程度)、アルコール分はビールと同程度のものも多いことから、スコアプロット上で左下方向に位置していると考えられます。

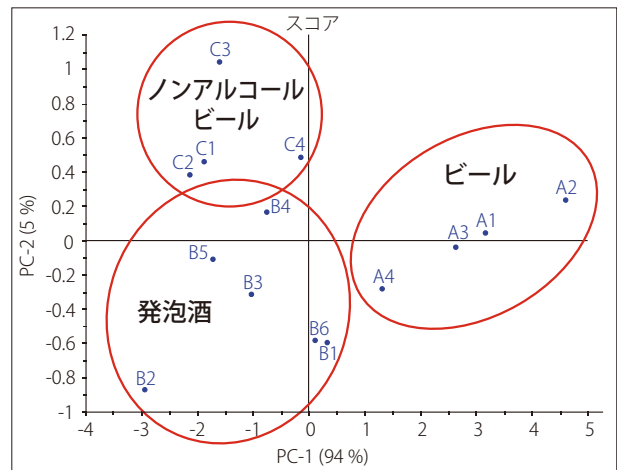


Fig. 7 スコアプロット  
Score Plot

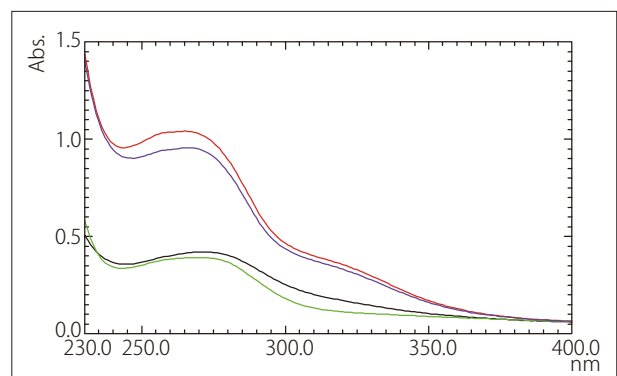


Fig. 8 A1とA3, C1とC2の吸収スペクトル  
(赤線: A1, 青線: A3, 黒線: C1, 緑線: C2)  
Absorption Spectra of A1 and A3, C1 and C3  
(Red Line: A1, Blue Line: A3, Black Line: C1, Green Line: C2)

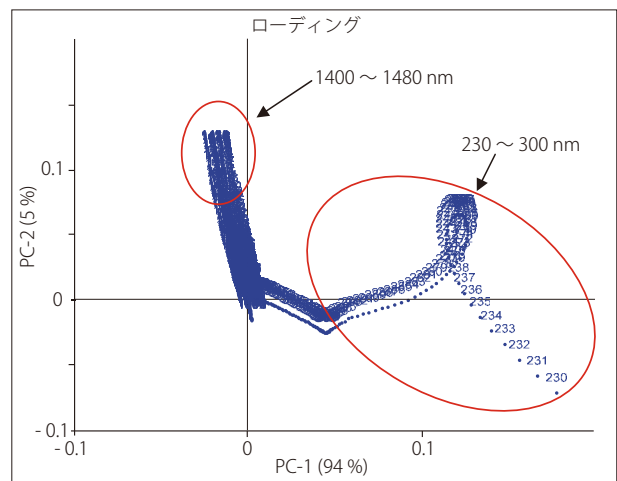


Fig. 9 ローディングプロット  
Loading Plot

## ■まとめ

### Summary

今回、ビール類の吸収スペクトルを見ることで、アルコールや蛋白質等の含有量の相違を確認することができました。また測定データに多変量解析を適用することで、ビール類の種類によって各グループに分類し、それらの特徴を把握することができました。食品の開発・研究においては多数の商品

を比較検討する必要がありますが、主成分分析（PCA）を用いると試料間の類似度を把握することができます。今回の結果は、分光分析と多変量解析の組み合わせがビール類を含む食品の開発に有効であることを示唆していると考えられます。

- 1) 多変量解析ソフトウェア The Unscrambler® を用いて計算を行ないました。The Unscrambler は CAMO 社の商標または登録商標です。なお、本解析に関してはデータに対し中心化（mean centering）を行い主成分分析を行いました。
- 2) スコアプロットとは、多次元空間中に表現された各試料の点を二つのローディングベクトル上に射影し、2次元グラフとして表現したものです。ローディングベクトルに関しては下記3)を参照下さい。
- 3) ローディングプロットとは、第一主成分、第二主成分（あるいは他の主成分の組み合わせ）の各ローディングベクトルの対応成分を2次元座標にプロットしたものです。ここでローディングベクトルは、データ行列に対し固有値計算を行うことにより得られるベクトルです。