

卷烟烟丝有机酸与香气特征的相关分析

张燕^{1,2}, 马林^{1*}, 刘挺³, 白晓莉²

(1. 郑州轻工业学院 食品与生物工程学院, 河南 郑州 450002;

2. 红塔烟草集团有限责任公司 技术中心, 云南 玉溪 653100;

3. 中国海洋大学 信息科学与工程学院, 山东 青岛 266071)

摘要:采用基于信息增益的特征选择方法和相关系数法,对国内代表性品牌卷烟烟丝中有机酸成分及其香韵、香气量和香气质进行相关性分析,探索卷烟内在有机酸对卷烟香气特征的影响关系.结果表明:卷烟烟丝中丙二酸、苹果酸、草酸对卷烟香韵影响作用较为明显;草酸、苹果酸对卷烟香气量影响作用较为明显.检测的8种有机酸指标对卷烟香气质的影响作用都较为明显.

关键词:卷烟;有机酸;香气特征;相关性

中图分类号:S572 **文献标识码:**A **文章编号:**1674-5639(2012)03-0016-04

Correlation of Organic Acids and Aroma Characters in Cut Tobacco of Cigarettes

ZHANG Yan^{1,2}, MA Lin¹, LIU Ting³, BAI Xiao-li²

(1. Institute of Food and Biological Engineering, Zhengzhou University of Light Industry, Henan Zhengzhou 450002, China;

2. R&D Center of Hong-Ta Tobacco Group Co., Ltd., Yunnan Yuxi 653100, China;

3. College of Information Science and Engineering, China Ocean University, Shandong Qingdao 266071, China)

Abstract: The feature selection method based on information gain and array of correlation were first applied for analyzing the correlation of organic acids with flavor notes, aroma volume and aroma quality among different cut tobacco of cigarettes. The results showed that malonic acid, malic acid and oxalic acid had great influences upon flavor notes; oxalic acid and malic acid had great influences upon aroma volume; all the organic acids which were detected had great influences upon aroma volume aroma quality.

Key words: cigarettes; organic acids; aroma characters; correlation

卷烟中有机酸的种类和含量是影响卷烟质量的重要因素之一,在卷烟燃吸过程中,它们可以改善抽吸质量,醇和吃味,增强烟气浓度,通过调节烟气的酸碱平衡,间接影响卷烟的吸味和香气^[1-3].某些多元酸,如苹果酸、柠檬酸、酒石酸、草酸等,还是卷烟加料的常用成分.

卷烟中的化学成分十分复杂,对卷烟的香气风格、感官质量起到关键的影响作用.有研究^[4-6]报道了不同卷烟和烟叶中有机酸含量的差异性,还有研究^[7-8]报道了烤烟中的有机酸对烟叶品质的影响.而利用相关性分析技术,从这些众多的化学成分中,提取关键的特征指标项,分析其对卷烟香气特征的影响作用尚未见报道.相关性分析技术是数据挖掘^[9]技术的一个重要技术环节,本文拟首次应用相关系数法、基于信息增益的特征选择算法,从线性相关关系和非线性相关关系两个方面,研究有机酸对卷烟香气特征的影响关系,以期产品研发人员、调香师进行产品研发和调香工作提供参考依据.

1 材料与方法

1.1 材料

选择国内9个主要代表性牌号的卷烟样品,将其分别编号,其中相同字母不同数字的样品表示为同一牌号不同批次的卷烟样品.

1.2 方法

1.2.1 烟丝及烟气中十五酸、十七酸的测定方法

样品前处理:采用 ASE 100 快速溶剂萃取仪(美国戴安公司),准确称取用粉碎机粉碎的烟丝样品 1.5 g (或 1 张烟气收集虑片),与 5 g 中性氧化铝、1.5 g Florisil 硅藻土一起放入 34 mL 萃取池内.用 V(乙腈):V(二氯甲烷)=2:1 溶液作为萃取液,萃取温度 60℃,萃取压力 10.3 MPa,萃取时间 3 min,循环 1 次.氮气吹去溶剂后定容至 10 mL,待测.

采用 CP3800—1200L 气质联用仪(美国瓦里安公司)分析,DB—5 毛细管柱;载气:高纯氮气;流速:1 mL/min;进样量:1 μL,进样口温度:250℃;升温程序:150℃(1 min) 10℃/min 250℃(5 min);传输温

收稿日期:2012-05-02

作者简介:张燕(1982—),女,云南昆明人,助理工程师,主要从事卷烟研发与减害降焦技术研究.

通讯作者:马林(1962—),男,河南信阳人,教授,主要从事烟草品质及生物技术研究. E-mail:malindf@vip.sina.com

度:250℃;离子源温度:200℃;电离能量:70 eV.

用系列标准溶液得到峰面积与质量浓度进行线性回归,得出十五酸、十七酸的线性范围及线性方程;并得出该方法十五酸、十七酸的检出限($S/N>3$)、定量限($S/N>10$).

1.2.2 文献资料法

采用文献[10]的方法测定烟丝中非挥发性多元酸含量.

1.2.3 卷烟感官质量评价方法^[11]

由红塔集团技术中心评吸委员会对卷烟样品进行感官评价,采用DPS软件^[12]对卷烟香韵、香气质及香气量与烟丝中有机酸成分含量进行相关性分析.

1.2.4 基于信息增益的特征选择方法^[13]

分别以卷烟成品香韵、香气量、香气质得分为目标值,以烟丝中检测出的有机酸含量为输入变量,分析对卷烟香气特征有关键影响作用的指标项.

1.2.5 简单相关系数法^[14]

运用简单相关系数法,分析有机酸对卷烟香气特征的影响关系.

2 结果与讨论

2.1 卷烟烟丝有机酸质量分数及香气特征评吸数据样本集

卷烟烟丝有机酸质量分数及香气特征评吸数据样本集见表1.

表1 卷烟烟丝有机酸质量分数及香气特征评吸数据样本集

样本 编号	草酸/ (mg·g ⁻¹)	苹果酸/ (mg·g ⁻¹)	丙二酸/ (mg·g ⁻¹)	柠檬酸/ (mg·g ⁻¹)	丁二酸/ (mg·g ⁻¹)	富马酸/ (μg·g ⁻¹)	十五酸/ (μg·g ⁻¹)	十七酸/ (μg·g ⁻¹)	香韵/ 分	香气量/ 分	香气质/ 分
A1	6.03	83.99	1.93	10.56	7.98	9.82	3.13	6.33	9.92	14.42	15.42
A2	6.16	81.84	2.35	0.96	0.00	15.93	4.12	10.25	9.79	14.44	15.38
A3	4.89	79.02	1.74	0.97	6.12	14.69	5.02	11.54	9.79	14.46	15.33
A4	5.15	83.85	1.93	1.25	4.15	16.68	3.13	10.06	9.77	14.46	15.10
B1	2.44	87.47	1.92	1.49	10.30	15.17	1.59	4.03	9.50	15.00	15.47
B2	1.38	85.95	2.26	1.51	10.98	13.01	1.02	4.59	9.59	14.86	15.50
B3	2.25	88.14	2.05	1.70	10.83	11.32	1.63	3.20	9.32	14.86	15.45
B4	2.57	90.95	2.22	1.70	10.14	15.45	1.09	3.82	9.48	14.89	15.32
C1	16.72	97.25	2.22	1.60	10.90	35.35	2.21	4.87	8.50	14.54	15.54
C2	17.48	94.83	2.62	1.54	11.79	49.67	2.82	6.11	8.40	14.50	14.42
C3	19.43	100.83	4.28	1.75	11.06	64.99	1.33	4.18	8.42	14.50	14.38
C4	15.35	95.97	2.79	1.67	9.89	66.44	2.23	5.43	8.31	14.50	14.48
D1	21.00	96.71	3.03	0.66	10.63	9.10	3.28	7.58	8.50	14.50	14.90
D2	15.36	93.37	4.31	0.65	9.89	8.06	2.35	9.98	8.54	14.54	14.94
D3	17.78	90.06	3.33	0.63	9.77	12.25	2.57	5.80	8.38	14.48	14.77
D4	12.79	91.29	2.92	0.66	9.38	8.01	3.85	7.98	8.40	14.54	14.77
E1	2.53	85.76	2.68	0.75	11.58	6.84	3.01	6.83	9.08	14.57	14.98
E2	3.96	86.68	1.50	1.60	10.81	12.88	1.85	5.43	9.00	14.57	14.98
E3	0.51	5.04	1.69	1.53	0.93	327.90	2.30	4.93	9.02	14.57	14.89
E4	3.93	85.95	1.12	0.69	10.44	14.89	2.43	4.00	9.02	14.64	14.92
F1	5.16	94.48	1.25	0.93	10.07	7.19	2.29	5.51	8.98	14.50	14.50
F2	0.47	15.57	1.90	0.73	6.51	394.35	1.40	2.90	8.98	14.52	14.52
F3	4.19	78.77	1.12	0.74	9.97	9.90	2.03	3.78	8.85	14.39	14.41
F4	4.69	78.87	1.54	0.75	10.33	5.70	1.86	4.05	9.04	14.55	14.50
G1	2.33	69.08	1.71	0.70	12.74	8.43	2.66	4.99	9.50	14.63	15.42
G2	2.58	33.24	1.65	0.79	10.81	221.14	2.39	7.00	9.25	14.54	15.29
G3	2.98	75.82	1.37	0.80	11.78	9.66	1.38	4.00	9.43	14.40	15.42
G4	2.81	73.54	2.13	0.82	11.25	6.41	2.08	4.26	9.39	14.49	15.46
H1	4.83	80.33	0.98	1.23	10.80	7.46	4.67	13.63	9.50	15.00	15.43
H2	4.55	79.49	1.33	0.73	16.50	7.59	2.67	3.58	9.50	15.00	15.29
H3	5.10	85.06	1.92	0.85	14.72	7.51	1.43	2.53	9.13	15.02	15.36
H4	7.83	75.71	1.26	0.75	14.78	7.79	1.39	5.69	9.23	15.02	15.34
Y1	8.83	82.08	1.30	0.64	14.49	7.64	1.58	3.75	10.00	15.00	15.47
Y2	10.74	77.87	1.33	0.69	12.55	11.14	2.13	4.04	9.88	14.97	15.20
Y3	9.68	78.76	1.66	0.74	10.78	11.97	2.14	4.08	9.85	15.00	15.36
Y4	9.41	79.20	1.93	0.74	10.24	11.88	2.78	3.52	9.55	15.00	15.30

注:A1~A4为“中华(软)”;B1~B4为“芙蓉王(硬)”;C1~C4为“白沙(精品)”;D1~D4为“双喜(经典)”;E1~E4为“利群(硬)”;F1~F4为“黄鹤楼(软)”;G1~G4为“苏烟(软)”;H1~H4为“云烟(软珍)”;Y1~Y4为“玉溪(软)”.不同数字表示不同批次.

2.2 卷烟烟丝有机酸分析

2.2.1 关键指标特征选择

由下图1可以看出,对卷烟香韵有关键影响作

用的指标依次为丙二酸(重要性评分为1.57026),苹果酸(重要性评分为1.31294),草酸(重要性评分为1.29071).由下图2可以看出,对卷烟香气量

有关键影响作用的指标为草酸(重要性评分为 1.296 38),苹果酸(重要性评分为 0.796 85). 由图 3 可以看出,对卷烟香气质有关键影响作用的指标依次为柠檬酸(重要性评分为 2.925 13),苹果酸(重要性评分为 2.769 82),丙二酸(重要性评分为 2.285 76),丁二酸(重要性评分为 2.236 93),富马酸(重要性评分为 1.883 63),草酸(重要性评分为 1.554 59),十七酸(重要性评分为 1.333 76).

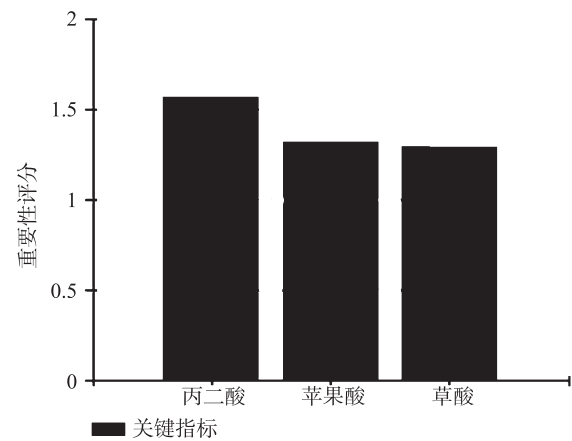


图1 卷烟香韵关键指标得分图

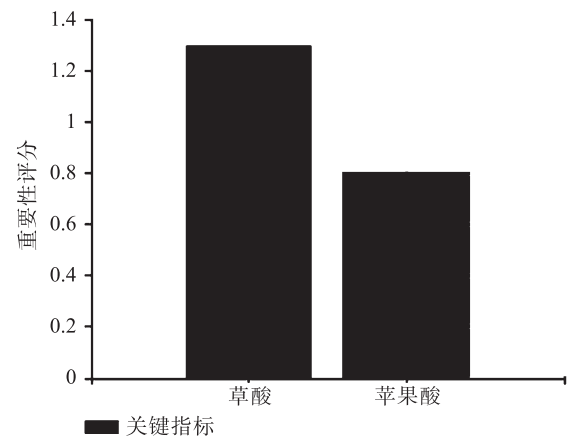


图2 卷烟香气量关键指标得分图

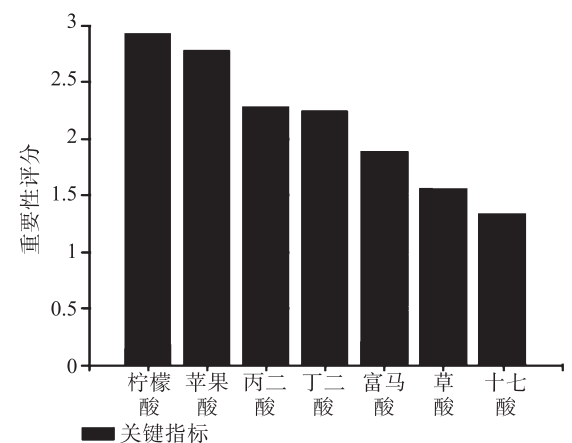


图3 卷烟香气质关键指标得分图

2.2.2 线性影响关系分析

运用相关系数法,从总体上来分析有机酸对卷烟香气特征的影响关系,相关系数见表 2.

表 2 卷烟烟丝有机酸相关系数表

有机酸	草酸	苹果酸	丙二酸	柠檬酸	丁二酸	富马酸	十五酸	十七酸
香韵	-0.59**	-0.18	-0.58**	0.20	-0.06	-0.16	0.08	0.03
香气量	-0.10	0.06	-0.28	-0.14	0.42**	-0.15	-0.19	-0.20
香气质	-0.46**	-0.07	-0.34*	0.12	0.13	-0.27	0.06	0.09

注:表中*、**分别表示相关性显著和极显著.

由表 2 可知,草酸和丙二酸与香韵呈极显著负相关,柠檬酸、十五酸和十七酸呈正相关,但相关性不显著. 丁二酸和苹果酸与香气量呈正相关,其中丁二酸呈显著正相关. 草酸与香气质呈极显著负相关,丙二酸呈显著负相关,呈正相关的有机酸指标相关性都不明显.

2.3 影响卷烟香气特征的关键有机酸指标的确定

利用信息增益特征选择法从非线性角度分析特征的影响作用的大小,利用相关系数法,从现行线性关系的角度分析特征影响作用的正负关系,结合行业经验(表 3)及化学背景等知识,对数据分析结果进行判断或修正,确定对影响卷烟香气特征的化学成分指标,丙二酸、苹果酸、草酸对卷烟香韵影响作用较为明显;草酸、苹果酸对卷烟香气量影响作用较为明显. 检测的 8 种有机酸指标对卷烟香气量的影响作用都较为明显.

表 3 有机酸在卷烟中的作用

序号	名称	在卷烟中的作用
1	草酸	改善卷烟吃味
2	苹果酸	增加烟香的圆润性,增加厚实饱满度,协调和改善香气和烟味. 在卷烟吸味方面,可增加烟气的优雅度,丰富烟香
3	丙二酸	烟气低级酸类如戊酸、异戊酸等致香成分的前体化合物. 能够增加烟叶香气品质
4	柠檬酸	在卷烟香气方面,可丰富烟香. 可降低刺激,改善口感和余味,但是含量高、影响吃味
5	丁二酸	具有特殊的酸脂气味,配制奶香型和果香型食用香精
6	富马酸	在卷烟吸味方面,可带来优雅的气息,有微弱的辛香气息. 在卷烟香气方面,可增加清香及辛香香韵

3 结论

本文首次采用基于信息增益的特征选择方法,筛选对国内主要代表性品牌卷烟香韵、香气量、香气质起关键影响作用的有机酸指标;并利用线性相关系数法,进一步分析化学成分对卷烟香气特征的总体影响作用. 结合行业经验,最终确定影响卷烟香气特征的关键有机酸指标,丙二酸、苹果酸、草酸对卷烟香韵影响作用较为明显;草酸、苹果酸对卷烟香气

量影响作用较为明显. 所检测的8种有机酸指标对卷烟香气量的影响作用都较为明显.

所采集的卷烟品牌虽然具有代表性,但数量较少,难以涵盖卷烟行业的所有品牌香气特征,有待进一步扩充品牌数量进行分析研究,方可得到更具广泛涵义的结论. 本文通过对国内代表性品牌卷烟有机酸与香气特征的相关性研究,旨在探索对卷烟香气特征有关键影响作用的主特征因素,以期为卷烟配方维护和功能性香精香料的开发工作提供参考依据. 卷烟的内在化学成分极为复杂,非线性关系较为明显,在今后的研究中,尚需探索卷烟常规化学成分、致香成分、氨基酸、水溶性糖等指标中对香气特征起关键影响作用的主特征因素.

[参考文献]

- [1]王瑞新. 烟草化学[M]. 北京:中国农业出版社,2003:170-174.
- [2]WEEKS W W. Chemistry of tobacco constituents influencing flavor and aroma[J]. Rec Adv Tob Sci,1985(11):175-200.
- [3]杨虹琦,周冀衡,杨述元,等. 不同纬度烟区烤烟叶中主要非挥发性有机酸的研究[J]. 湖南农业大学学报:自然科学版,2005,31(3):281-284.
- [4]申进朝,洗可法. 烟草中有机酸分析研究进展[J]. 烟草科技,

2003(8):29-32.

- [5]吴键,潘存宽,王修铭,等. 国内外卷烟多元酸和高级脂肪酸的分析研究[J]. 安徽农学通报,2009,15(18):24-26.
- [6]罗琼,薛冬,杨俊,等. 不同卷烟和烟叶中主要非挥发性有机酸含量的差异[J]. 烟草科技,2009(12):33-37.
- [7]杜咏梅,张建平,王树声,等. 主导烤烟香型风格及感官质量差异的主要化学指标分析[J]. 中国烟草科学,2010(5):7-12.
- [8]徐洁,彭漫江,常寿荣,等. 云南烟区原料差异化烟叶质量评价及红外检测技术在烟叶收购中的应用初探[J]. 昆明学院学报,2010,32(6):10-13.
- [9]韩家炜,堪博. 数据挖掘概念与技术[M]. 第2版. 北京:机械工业出版社,2007.
- [10]董伟,龚荣岗,彭国岗,等. 高效液相色谱法测定烟丝及烟气中多元酸的方法研究[J]. 食品工业,2011(6):86-88.
- [11]中华人民共和国国家质量监督检验检疫总局,中国国家标准化管理委员会. GB 5606.4—2005 卷烟:感官技术要求[S]. 北京:中国标准出版社,2005.
- [12]唐君义,洪明光. 实用统计分析及其 DPS 数据处理系统[M]. 北京:科学出版社,2002.
- [13]朱颖东,钟勇. 基于改进的 ID3 信息增益的特征选择方法[J]. 计算机工程,2010,36(8):37-39.
- [14]凯勒. 应用统计分析:使用 Excel[M]. 北京:机械工业出版社,2004.

(上接第12页)

20.89%. 处理1比处理5的防治效果提高了27.66%. 从菌剂结果可见,枯草芽孢杆菌的发酵液对烤烟脉斑病的防效仍不够理想,尚需进一步筛选其它的微生物菌剂;此外还需扩大该菌剂在烤烟种植的不同生态环境、不同品种下的防治效果,考察其药效与推广范围.

综合相关报道^[1-9],当前只有采取包括烤烟无病毒壮苗的培育,烟蚜虫等昆虫传毒介体的物理、化学和生物防治,以及合理使用包括本试验筛选出的微生物菌剂在内的抗病毒制剂等综合防治措施,才是对烤烟脉斑病防控的有效方法,也是目前烤烟生产上治理病毒病(包括 TMV, CMV, PVY, PVX, TSWV, TEV)应采用的重要举措.

[参考文献]

- [1]张仲凯,李毅. 云南植物病毒[M]. 北京:科学出版社,2001.

- [2]朱贤朝,王彦亭,王智发. 中国烟草病害[M]. 北京:中国农业出版社,2002.
- [3]孙宏宇,孙剑萍,栾双,等. 烟草马铃薯 Y 病毒病流行规律的初步研究[J]. 烟草科技,2005(12):39-42.
- [4]周本国,高正良. 安徽省烟草脉斑病(PVY)的发生趋势及防治措施[J]. 安徽农学通报,1998,4(1):34-35.
- [5]程宝玉,陈卫华. 豫西烟草脉斑病发生规律及药剂防治研究[J]. 烟草科技,2002(7):46-48.
- [6]李惠琴. 几种药剂对烟草病毒病防治效果[J]. 陕西农业科学,1996(6):7-8.
- [7]张廷金,余青,莫笑晗,等. 几种新型烟草花叶病毒抑制剂的田间药效试验[J]. 昆明学院学报,2010,32(6):20-22.
- [8]徐兴阳,端永明,董家红,等. 植物有机诱导抗病剂“多肽保”对 TMV 的防控效果[J]. 昆明学院学报,2010,32(6):6-9.
- [9]陈德鑫,徐宸,王凤龙,等. 诱导植物提高抗病毒病作用制剂防治烟草病毒病试验研究[J]. 中国烟草科学,2009,30(4):70-73.