

川渝烤烟化学成分与香气的灰色优势分析

李东亮, 戴亚, 李力, 薛芳, 邓发达

(川渝中烟工业公司, 四川 成都 610066)

摘要: 为了探讨烟叶质量评价指标体系中各化学成分指标的相对重要性, 采用优势分析法从化学成分与感官质量香气的角度对化学成分的重要性进行了评价。结果表明, 应用灰色优势分析法并结合烟草化学分析可以找到与感官质量香气关系最密切的一组化学成分指标, 针对北方区川渝烟叶基地烤烟, 选择蛋白质、pH 值、柠檬酸、油酸、己酸、二氢猕猴桃内酯、巨豆三烯酮 D、苯乙醛和二氢大马酮作为烤烟化学成分的评价指标, 从原评价指标体系的 65 个指标缩减为 9 个指标。

关键词: 川渝烤烟; 化学成分; 香气; 灰色优势分析

中图分类号: S572.01 文献标志码: A 文章编号: 1007-1032(2010)03-0280-05

Grey superior analysis of relationships between chemical components and aroma property of flue-cured tobacco of Chuanyu area

LI Dong-liang, DAI Ya, LI Li, XUE Fang, DENG Fa-da

(China Tobacco Chuanyu Industrial Corporation, Chengdu 610066, China)

Abstract: In order to study the importance of chemical component index among tobacco quality evaluation, the importance of chemical components were evaluated according to the relationship between chemical components and sensory quality by grey superior analysis. The results indicated that a group of chemical component index which has close connection with sensory quality had been found by grey superior analysis and tobacco chemistry analysis. For the flue-cured tobacco from Chuanyu tobacco base in the main tobacco-growing areas in north, 9 tobacco quality evaluation indexes were chosen such as protein, pH value, citric acid, oleic acid, hexanoic acid dihydroactinidiolide, mgstigmatrienone D, phenylacetaldehyde and dihydro damascenone suggesting the reduction of tobacco quality evaluation indexes to nine from the original sixty-five.

Key words: flue-cured tobacco of Chuanyu; chemical components; aroma property; grey superior analysis

烟叶中的化学成分是形成烟叶质量诸要素的基本因素, 化学成分与烟叶生理结构共同决定着烟叶感官、物理、外观、经济和安全等各个要素。卷烟企业追求的是在尽可能保持成本的情况下, 保持配方的稳定连续性, 并改善其内在品质。要达到这个目的, 就必须确定烟叶化学成分与烟叶品质之间的关系^[1]。但烟草中的化学成分十分复杂, 据

Roberts^[2]报道, 烟叶和烟气中化学成分的总数达 5 868 种, 其中烟叶专有的成分达 1 872 种, 烟叶和烟气共有的成分达 1 172 种。目前, 烟叶研究检测的化学成分指标也有数十种之多, 而且它们之间的关系十分复杂, 难以完全掌握它们之间的全部信息。

指标众多不仅增加了烟叶品质分析和质量综合评价的难度, 而且对于烟叶化学成分适宜区域的

收稿日期: 2010-02-24

基金项目: 四川省科学技术厅项目(2008JY0143)

作者简介: 李东亮(1973—), 男, 山西平遥人, 博士, 高级工程师, 主要从事烟草质量评价研究, lidongliang163@yahoo.com.cn

确定、叶组配方烟叶原料的选择都造成了较大困难。李东亮等^[3-4]分别运用灰色统计分析和灰色关联聚类法对化学成分指标相对重要性进行了评价，确定了化学成分指标中相对重要的指标，并简化了化学成分指标数量，但均未从化学成分与感官质量关系的角度对化学成分的重要性进行评价。笔者采用灰色优势分析法对化学成分与感官质量香气的关系进行研究，旨在贴近配方实际，为解决烟叶质量评价中评价指标众多、难以确定影响感官质量的关键指标等问题提供理论支撑。

1 材料与方法

1.1 材料

供试材料为川渝中烟工业公司库存的 2006 年陈化烟叶，140 份样品，烟叶产区为中国北方烟草种植区川渝中烟烟叶基地。

1.2 检测指标及方法

常规化学成分(总植物碱、还原糖、氯、钾、总糖、总氮、pH 值、醚提总量、蛋白质、挥发碱、挥发酸、淀粉、果胶、纤维素、氮碱比、糖碱比、钾氯比和糖蛋比)依据行业标准方法检测；多酚和多元有机酸及高级脂肪酸(绿原酸、茛苳亭、芸香苷、草酸、丙二酸、琥珀酸、苹果酸、柠檬酸、月桂酸、肉豆蔻酸、棕榈酸、亚油酸、油酸和硬脂酸)参照文献^[5]的方法检测；酸性香味成分(正丁酸、异戊酸、戊酸、 β -甲基戊酸、己酸、庚酸、辛酸、壬酸和癸酸)和中性香味成分(糠醛、糠醇、2-乙酰基呋喃、5-甲基糠醛、苯甲醛、6-甲基-5-庚烯-2 酮、苯甲醇、苯乙醛、2-乙酰基吡咯、芳樟醇、苯乙醇、吲哚、茄酮、 β -大马酮、二氢大马酮、 β -紫罗兰酮、香叶基丙酮、二氢猕猴桃内酯、巨豆三烯酮 A、巨豆三烯酮 B、巨豆三烯酮 C、巨豆三烯酮 D、新植二烯和法尼基丙酮)参照文献^[6]、^[7]的方法检测；感官质量香气采用“九分制”单料烟评吸标准。

1.3 分析方法

采用灰色优势分析法处理全部试验数据。根据灰色绝对关联度矩阵中各行、各列关联度大小，判

断子序列与母序列的关系，分析哪些因素是主要影响因素，哪些是次要影响因素，并将主要影响因素称为优势因素^[8-12]。

2 结果与分析

2.1 灰色绝对关联度矩阵

(1) 数据标准化。首先对原始数据依据均值化

公式 $x'_{ij} = \frac{x_{ij}}{\bar{x}_j}$ 进行标准化处理。式中： x'_{ij} 为均值化

后数据， \bar{x}_j 为 j 个指标的平均值。

(2) 求化学成分各指标始点零化象及 $s_i (s_j)$ 、

$|s_j - s_i|$ 。设有 n 个聚类对象， m 个聚类指标，得到原始数据序列：

$$\left\{ \begin{array}{l} x_1 = (x_1^{(1)}, x_1^{(2)}, \dots, x_1^{(n)}) \\ x_2 = (x_2^{(1)}, x_2^{(2)}, \dots, x_2^{(n)}) \\ \vdots \\ x_m = (x_m^{(1)}, x_m^{(2)}, \dots, x_m^{(n)}) \end{array} \right\};$$

原始数据序列的始点零化象：

$$\left\{ \begin{array}{l} x_1^0 = (x_1^0(1), x_1^0(2), \dots, x_1^0(n)) \\ x_2^0 = (x_2^0(1), x_2^0(2), \dots, x_2^0(n)) \\ \vdots \\ x_m^0 = (x_m^0(1), x_m^0(2), \dots, x_m^0(n)) \end{array} \right\}.$$

式中： $x_i^0(k) = x_i(k) - x_i(1)$ 。令 $|s_i| =$

$$\left| \sum_{k=2}^{n-1} x_i^0(k) + \frac{1}{2} x_i^0(n) \right|, \quad |s_j| = \left| \sum_{k=2}^{n-1} x_j^0(k) + \frac{1}{2} x_j^0(n) \right|,$$

$$|s_j - s_i| = \left| \sum_{k=2}^{n-1} (x_j^0(k) - x_i^0(k)) + \frac{1}{2} (x_j^0(n) - x_i^0(n)) \right|.$$

将感官质量香气作为特征列，其他对象各化学成分指标作为因素列，依据公式 $r_{ij} = (1 + |s_j| + |s_i|) / (1 + |s_j| + |s_i| + |s_j - s_i|)$ 计算目标对象与其他对象的灰色绝对关联度。

将感官质量香气(香气质和香气量)作为特征列，常规化学成分、多酚、多元有机酸及高级脂肪酸、酸性香味成分和中性香味成分分别作为因素列，依据上述计算公式分别计算常规化学成分、多酚、多元有机酸及高级脂肪酸、酸性香味成分和中性香味成分与感官质量香气(香气质和香气量)的灰

色绝对关联度，得到灰色绝对关联度矩阵，结果见表1和表2。

表1 感官质量香气与常规化学成分、多酚、多元有机酸及高级脂肪酸的灰色绝对关联度矩阵

Table 1 Absolute grey correlation matrix between aroma property and routine chemical components, polyphenol, multiple organic acid, higher fatty acid

常规化学成分	香气质	香气量	多酚、多元有机酸、高级脂肪酸	香气质	香气量
总植物碱	0.666 7	0.703 4	绿原酸	0.650 2	0.623 1
还原糖	0.610 1	0.590 3	萹苳亭	0.520 9	0.525 5
氯	0.577 2	0.594 2	芸香苷	0.726 6	0.685 7
钾	0.568 9	0.584 0	草酸	0.770 5	0.721 8
总糖	0.600 9	0.582 8	丙二酸	0.584 4	0.603 0
总氮	0.695 6	0.738 6	琥珀酸	0.524 4	0.529 8
pH值	0.967 3	0.938 5	苹果酸	0.620 9	0.599 1
醚提总量	0.662 7	0.698 5	柠檬酸	0.984 8	0.922 7
蛋白质	0.935 3	0.970 8	月桂酸	0.511 3	0.513 7
挥发碱	0.527 6	0.533 6	肉豆蔻酸	0.518 9	0.523 0
挥发酸	0.540 3	0.549 2	棕榈酸	0.726 0	0.775 7
淀粉	0.729 4	0.688 1	亚油酸	0.665 3	0.701 6
果胶	0.849 6	0.786 6	油酸	0.972 4	0.933 8
纤维素	0.734 0	0.691 8	硬脂酸	0.578 5	0.595 8
氮碱比	0.651 5	0.684 8			
糖碱比	0.612 6	0.592 3			
钾氯比	0.632 4	0.661 5			
糖蛋比	0.855 3	0.791 3			

2.2 灰色优势分析

设 $Y_i(i=1,2,\dots,s)$ 为系统特征行为序列， $X_j(j=1,2,\dots,m)$ 为相关因素行为序列。

$$\Gamma=(\gamma_{ij})=\begin{bmatrix} \gamma_{11} & \gamma_{12} & \cdots & \gamma_{1m} \\ \gamma_{21} & \gamma_{22} & \cdots & \gamma_{2m} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \gamma_{s1} & \gamma_{s2} & \cdots & \gamma_{sm} \end{bmatrix}$$

为其灰色绝对关

联矩阵。若存在 $l, j \in \{1, 2, \dots, m\}$ ，满足 $\gamma_{il} \geq \gamma_{ij}, i = 1, 2, \dots, s$ ，则称系统因素 X_l 优于系统因素 X_j ，记为 $X_l \succ X_j$ ；若 $\forall j = 1, 2, \dots, m, j \neq l$ ，恒有 $X_l \succ X_j$ ，则称 X_l 为最优因素；若存在 $l \in \{1, 2, \dots, m\}$ ，使 $\forall j = 1, 2, \dots, m, j \neq l$ ，有 $X_l \succeq X_j$ ，则称系统因素 X_l 为准优因素。

依据灰色绝对关联度矩阵，并按照上述计算公式分别计算常规化学成分、多酚、多元有机酸及高

级脂肪酸、酸性香味成分和中性香味成分各指标体系中影响香气(香气质、香气量)的优势因素，结果见表3。

表2 感官质量香气与酸性香味成分和中性香味成分的灰色绝对关联度矩阵

Table 2 Absolute grey correlation matrix between aroma property and acidic aroma components, neutral aroma components

酸性香味成分	香气质	香气量	中性香味成分	香气质	香气量
正丁酸	0.508 5	0.510 4	糠醛	0.587 2	0.571 5
异戊酸	0.531 6	0.538 6	糠醇	0.664 6	0.700 8
戊酸	0.657 4	0.692 0	2-乙酰基呋喃	0.580 5	0.598 2
β -甲基戊酸	0.520 9	0.525 5	5-甲基糠醛	0.508 6	0.510 4
己酸	0.778 2	0.839 3	苯甲醛	0.518 8	0.522 9
庚酸	0.508 2	0.509 9	6-甲基-5-庚烯-2-酮	0.528 4	0.534 7
辛酸	0.563 6	0.577 6	苯甲醇	0.824 0	0.765 6
壬酸	0.576 0	0.592 7	苯乙醛	0.911 1	0.837 0
癸酸	0.535 1	0.542 8	2-乙酰基吡咯	0.540 6	0.549 6
			芳樟醇	0.568 0	0.583 0
			苯乙醇	0.669 2	0.706 3
			吡咯	0.610 9	0.635 3
			茄酮	0.624 2	0.601 8
			β -大马酮	0.663 0	0.633 6
			二氢大马酮	0.908 1	0.834 6
			β -紫罗兰酮	0.510 5	0.512 8
			香叶基丙酮	0.679 5	0.719 0
			二氢猕猴桃内酯	0.932 9	0.973 4
			巨豆三烯酮 A	0.630 5	0.659 2
			巨豆三烯酮 B	0.821 3	0.763 4
			巨豆三烯酮 C	0.597 0	0.618 3
			巨豆三烯酮 D	0.939 1	0.860 0
			新植二烯	0.525 2	0.520 7
			法尼基丙酮	0.801 5	0.747 2

表3中各指标优势值的大小表示常规化学成分、多酚、多元有机酸及高级脂肪酸、酸性香味成分和中性香味成分各指标体系中各单项指标对香气的影响大小，其中，酸性香味成分指标体系中己酸为最优因素，常规化学成分、多酚、多元有机酸及高级脂肪酸和中性香味成分各指标体系中各单项指标为准优因素，无最优因素。依据优势值的大小排序，并结合烟草化学对各指标的描述，可分别确定各指标体系中对香气影响的主次因素。

表 3 各指标体系中影响香气的优势因素

Table 3 Superior analysis on factors affecting aroma property among each index system

常规化学成分		多酚、多元有机酸及高级脂肪酸		酸性香味成分		中性香味成分	
优势指标	优势值	优势指标	优势值	优势指标	优势值	优势指标	优势值
蛋白质	1.906 1	柠檬酸	1.907 5	己酸	1.617 5	二氢猕猴桃内酯	1.906 3
pH 值	1.905 9	油酸	1.906 2	戊酸	1.349 3	巨豆三烯酮 D	1.799 1
糖蛋比	1.646 6	棕榈酸	1.501 7	壬酸	1.168 7	苯乙醛	1.748 1
果胶	1.636 2	草酸	1.492 3	辛酸	1.141 2	二氢大马酮	1.742 7
总氮	1.434 2	芸香苷	1.412 3	癸酸	1.077 9	苯甲醇	1.589 6
纤维素	1.425 8	亚油酸	1.366 8	异戊酸	1.070 2	巨豆三烯酮 B	1.584 7
淀粉	1.417 5	绿原酸	1.273 3	β -甲基戊酸	1.046 4	法尼基丙酮	1.548 6
总植物碱	1.370 1	苹果酸	1.220 0	正丁酸	1.018 9	香叶基丙酮	1.398 6
醚提总量	1.361 3	丙二酸	1.187 4	庚酸	1.018 2	苯乙醇	1.375 5
氮碱比	1.336 3	硬脂酸	1.174 3			糠醇	1.365 5
钾氯比	1.293 9	琥珀酸	1.054 2			β -大马酮	1.296 6
糖碱比	1.204 9	萹苈亭	1.046 4			巨豆三烯酮 A	1.289 7
还原糖	1.200 4	肉豆蔻酸	1.041 9			吲哚	1.246 2
总糖	1.183 7	月桂酸	1.025 0			茄酮	1.226 0
氯	1.171 4					巨豆三烯酮 C	1.215 3
钾	1.152 9					2-乙酰基呋喃	1.178 7
挥发酸	1.089 4					糠醛	1.158 8
挥发碱	1.061 2					芳樟醇	1.151 0
						2-乙酰基吡咯	1.090 2
						6-甲基-5-庚烯-2 酮	1.063 1
						新植二烯	1.045 9
						苯甲醛	1.041 7
						β -紫罗兰酮	1.023 3
						5-甲基糠醛	1.019 0

有研究^[13-14]表明, 如烤烟中蛋白质含量超过 15%, 则烟气强度过大, 香气和吃味变差, 产生辛辣味、苦味和刺激性, 并且蛋白质含量高, 燃吸时会产生一种如同燃烧羽毛的蛋白质臭味; 蛋白质含量过低, 抽吸时平淡无味, 吃味和香气也变差, 但烟叶中含有适量的蛋白质, 能够赋予烟草充足的香气和丰满的吃味强度, 平衡糖过多或过少而产生的烟味平淡或强度过大. 烟草水溶液 pH 值反映烟草有机和无机组分的酸碱平衡状态, 它是由含有各种水溶性烟叶组分的缓冲体系控制的^[15]. 烟叶的 pH 值还可以作为强度(含氮碱类)、刺激尖锐程度(无机的碱类), 以及间接地作为芳香性的表示^[16], 因此, 结合烟草化学意义, 依据表 3 常规化学成分优势分析结果, 选择蛋白质和 pH 值作为北方区川渝基地烤烟常规化学成分的评价指标.

烟气的感官质量与烟叶中柠檬酸的含量成反比^[17]. 油酸一般对烟叶和烟气的香气没有直接作用, 但可以调节烟草的酸碱度, 使吸味醇和, 还可以增加烟气浓度, 间接影响烟气的香气, 在烟气中起平衡作用^[13]. 因此, 结合烟草化学意义, 依据表 3 多酚、多元有机酸及高级脂肪酸优势分析结果, 选择柠檬酸和油酸作为北方区川渝基地烤烟多酚、多元有机酸及高级脂肪酸的评价指标.

不饱和脂肪酸是烤烟主要的致香成分之一, 巨豆三烯酮是形成烤烟精油香气的主要成分之一^[18]. 烟草羰基化合物是烟叶精油的主要成分之一, 醛、酮分子结构中的羰基是致香基团, 许多是重要的致香物质^[13]. 二氢大马酮是玫瑰油的主要香气化合物之一, 它赋予烟气花香和木香的吸味品质^[2]. 二氢猕猴桃内酯属于烟草中的内酯类物质, 比酸、醇具有更

浓的芳香,在烟草中可起到消除刺激性的作用^[13].苯乙醛烟香气味强烈,具有花香、皂香^[13].结合烟草化学意义,依据表3中性香味成分优势分析结果,选择二氢猕猴桃内酯、巨豆三烯酮D、苯乙醛和二氢大马酮作为北方区川渝基地烤烟中性香味成分的评价指标.

综上所述,在常规化学成分、多酚、多元有机酸及高级脂肪酸、酸性香味成分和中性香味成分各指标体系中选择蛋白质、pH值、柠檬酸、油酸、己酸、二氢猕猴桃内酯、巨豆三烯酮D、苯乙醛和二氢大马酮作为北方区川渝基地烤烟化学成分的评价指标.

3 小结

应用灰色优势分析法对烟草化学成分与感官质量香气的关系进行分析,可以找到与感官质量香气关系最密切的一组化学成分指标,不仅可以简化化学成分评价指标,而且可以找到影响烟叶感官质量香气的一组关键指标,这对于解决烟叶质量评价中评价指标众多、难以确定影响感官质量的关键指标等问题具有较好的指导价值.

针对北方区川渝烟叶基地烤烟香气,选择蛋白质、pH值、柠檬酸、油酸、己酸、二氢猕猴桃内酯、巨豆三烯酮D、苯乙醛和二氢大马酮作为北方区川渝基地烤烟化学成分的评价指标,从原评价指标体系的65个指标缩减为9个指标.

从烟草化学的角度分析,也有一些指标对香气的较大影响,但优势分析值较小,这可能与本试验的限制条件有关.本试验所取样品只代表北方区川渝烟叶基地烤烟特点,与大产区样品还未尽一致,但采用优势分析方法,并结合本企业烟叶基地实际样品,可选择针对本企业实际烟叶样品的质量评价指标体系.

参考文献:

- [1] 李朝建,李晓刚.烤烟主要化学成分与吸味品质的相关性[J].湖南农业大学学报:自然科学版,2009,35(3):252-256.
- [2] Roberts D L. Natural tobacco flavor[J]. Rec Adv of Tobacco Chem, 1988(14): 49-81.
- [3] 李东亮,胡军,许自成,等.基于灰色统计的烤烟化学成分相对重要性评价[J].农业系统科学与综合研究,2007,23(3):351-355.
- [4] 李东亮,许自成.烤烟化学成分指标的灰色关联聚类分析[J].农业系统科学与综合研究,2007,23(4):411-414,420.
- [5] 金永明,张明福,刘百战.烟草中多元酸和高级脂肪酸的分析[J].烟草科技,2002(4):21-24.
- [6] 李炎强,冼可法.同时蒸馏萃取法与水蒸气蒸馏法分离分析烟草挥发性、半挥发性中性成分的比较[J].烟草科技,2002(2):18-21.
- [7] 李炎强,冼可法.直接进样法分析烟草挥发性和半挥发性酸性成分[J].烟草科技,1998(6):22-24.
- [8] 傅立.灰色系统理论及其应用[M].北京:中国科学技术文献出版社,1992:66-73.
- [9] 雷铁柱,郭瑞林,王新海,等.灰色系统理论在农业上的应用[M].郑州:河南科学技术出版社,1996:43-58.
- [10] 焦芳婵,肖炳光,于海芹,等.烤烟主要农艺性状与产量的灰色关联度分析[J].湖南农业大学学报:自然科学版,2007,33(5):564-567.
- [11] 刘思峰,郭天榜.灰色系统理论及其应用[M].郑州:河南大学出版社,1991:74-85.
- [12] 刘思峰,郭天榜,党耀国,等.灰色系统理论及其应用[M].北京:科学出版社,1999:65-71.
- [13] 王瑞新.烟草化学[M].北京:中国农业出版社,2003:50-55.
- [14] 金闻博,戴亚.烟草化学[M].北京:清华大学出版社,1994:19-23.
- [15] Frankenburg W G. Chemical changes in the harvested tobacco leaf II. Chemical and enzymic conversions during fermentation and aging[J]. Adv Enzymology, 1950(10):325-331.
- [16] 左天觉.烟草的生产、生理和生物化学[M].朱尊权译.上海:远东出版社,1993:449-450.
- [17] Philips M, Bacot A M. The chemical composition of certain grades of type 11, American flue-cured tobacco: Relationships of composition to grade characteristics[J]. JAOAC, 1953(36):504-523.
- [18] Matsushima S. Relationship between composition of tobacco assertion oils and its aroma[J]. Nippon Nogeikagaku Kaishi, 1980, 54(12):1027-1035.

责任编辑: 娄 敏
英文编辑: 罗文翠