



田数,李力群,郑美玲,等. 基于游离氨基酸含量的卷烟刺激性评价模型构建[J]. 轻工学报,2021,36(5): 76-83.

TIAN S, LI L Q, ZHENG M L, et al. Establishment of cigarette irritation evaluation model based on free amino acid contents[J]. Journal of Light Industry, 2021, 36(5): 76-83. DOI: 10. 12187/2021. 05. 010

中图分类号: TS41 文献标识码: A 文章编号: 2096-1553(2021)05-0076-08

基于游离氨基酸含量的卷烟刺激性评价模型构建

Establishment of cigarette irritation evaluation model based on free amino acid contents

田数^{1,2}, 李力群¹, 郑美玲², 郭春生¹, 叶亚军¹, 陈晨¹,
赵怡凡¹, 张峻松²

TIAN Shu^{1,2}, LI Liqun¹, ZHENG Meiling², GUO Chunsheng¹, YE Yajun¹,
CHEN Chen¹, ZHAO Yifan¹, ZHANG Junsong²

1. 内蒙古昆明卷烟有限责任公司, 内蒙古 呼和浩特 010020;
2. 郑州轻工业大学 食品与生物工程学院, 河南 郑州 450001
1. Inner Mongolia Kunming Cigarette Co., Ltd., Huhhot 010020, China;
2. College of Food and Bioengineering, Zhengzhou University of Light Industry, Zhengzhou 450001, China

关键词:

卷烟; 游离氨基酸;
刺激性评价;
主成分分析;
聚类分析

Key words:

cigarette; free amino acid; irritation evaluation; principal component analysis; cluster analysis

摘要:为构建以成品卷烟中游离氨基酸含量预测卷烟感官刺激性大小的评价模型,以12种不同风格的卷烟为研究对象,利用高效液相色谱法测定卷烟中游离氨基酸的含量,利用主成分分析法建立卷烟刺激性综合评价模型,并通过聚类分析和刺激性感官评价对模型进行验证。结果表明:12种卷烟可分为5类,与所建综合评价模型 $F=0.913F_1+0.087F_2$ 的预测结果基本一致;12种卷烟刺激性感官评价得分排序与综合评价模型预测的刺激性得分排序大体一致;以该模型计算12种卷烟游离氨基酸综合评价得分从低到高分别为酒香<树苔香<复合香<自然本香<焦甜香<本草香<淡雅香<烤甜香<奶甜香<清甜香<绵柔香<清香,得分越高表示该卷烟刺激性越大。

收稿日期: 2021-04-27

基金项目: 河南省科技攻关项目(182102310647)

作者简介: 田数(1992—),男,河南省商丘市人,郑州轻工业大学硕士研究生,主要研究方向为烟用香精香料和烟草化学仿香。

通信作者: 李力群(1971—),男,内蒙古自治区呼和浩特市人,内蒙古昆明卷烟有限责任公司高级工程师,主要研究方向为烟草化学和烟用香精香料。

Abstract: In order to build an evaluation model for predicting the sensory irritation of cigarettes based on free amino acid contents in finished cigarettes, 12 different styles of cigarettes were selected as the research objects. The contents of free amino acids in cigarettes were determined by HPLC. The comprehensive evaluation model of cigarette irritation was established by principal component analysis, and the model was verified by cluster analysis and sensory irritation evaluation. The results show that the comprehensive evaluation model $F=0.913F_1+0.087F_2$ was established. Through cluster analysis, 12 kinds of cigarettes could be divided into 5 categories, which was basically consistent with the prediction results of the comprehensive evaluation model. The ranking of sensory evaluation scores of 12 kinds of cigarettes was generally consistent with that predicted by the comprehensive evaluation model. The model was used to calculate the comprehensive evaluation scores of free amino acids of different types of cigarettes. The scores of 12 kinds of cigarettes from low to high were wine fragrance<tree moss fragrance<compound fragrance<natural fragrance<burnt sweet fragrance<herbal fragrance<elegant fragrance<roasted sweet fragrance<milk sweet fragrance<light sweet fragrance<soft fragrance<light fragrance. The higher the score, the greater the irritation of the cigarette.

0 引言

氨基酸是烟草中重要的含氮化合物之一,对烟草的感官呼吸品质和吸烟者的健康有很大影响^[1-5]。在调制和醇化过程中,烟叶中的氨基酸会与还原糖发生美拉德反应,生成一系列醛类、醇类、杂环类等对烟草香味有重要影响的化合物^[6-10]。在卷烟燃吸过程中,氨基酸则会产生烧焦羽毛的气味,对烟气吸味造成不良影响^[11]。一般认为,氨基酸含量过高,抽吸时刺激性强烈,而含量太低时,则烟气劲头不足,丰满度差^[12-15]。

刺激性是指抽吸卷烟时烟气对感官产生的一种不舒适感受,具体表现为对口腔的冲刺和撞击,使舌面产生毛刺和辣感。刺激性作为评价卷烟内在品质的一个重要指标,一直是行业内研究的热点^[16]。近年来,关于游离氨基酸与刺激性的关联性已有多项研究成果。王光耀等^[17]研究发现,酰胺类游离氨基酸与卷烟刺激性存在极显著正相关关系;邓国宾等^[12]通过主成分分析及相关性分析发现,酪氨酸、蛋氨酸与卷烟刺激性呈显著正相关关系;殷延齐等^[11]研究发现,不同品牌卷烟中各种氨基酸的含量分布对卷烟刺激性的评价有一定参考价值。但目前尚未见到基于卷烟中游离氨基酸含量构建评价模型来预测卷烟刺激性指标的研究报道。鉴

于此,本研究拟以市场上12种不同风格的卷烟为研究对象,采用高效液相色谱法对其游离氨基酸进行测定,利用主成分分析法建立一种基于游离氨基酸含量的卷烟刺激性评价模型,通过对卷烟抽吸时刺激性大小的预测优化制备工艺,提升卷烟内在品质。

1 材料与方法

1.1 材料与仪器

购买市售的12种不同风格卷烟,分别是绵柔香(C_1)、自然本香(C_2)、烤甜香(C_3)、清甜香(C_4)、酒香(C_5)、树苔香(C_6)、清香(C_7)、焦甜香(C_8)、复合香(C_9)、淡雅香(C_{10})、本草香(C_{11})、奶甜香(C_{12})。

天冬氨酸(Asp)、谷氨酸(Glu)、丝氨酸(Ser)、甘氨酸(Gly)、组氨酸(His)、苏氨酸(Thr)、丙氨酸(Ala)、精氨酸(Arg)、酪氨酸(Tyr)、缬氨酸(Val)、甲硫氨酸(Met)、色氨酸(Trp)、苯丙氨酸(Phe)、异亮氨酸(Ile)、赖氨酸(Lys)、亮氨酸(Leu),以上试剂纯度均 $\geq 99\%$,三乙胺、氢氧化钠、盐酸、冰乙酸(分析纯),购自上海阿拉丁生化科技股份有限公司;醋酸钠、邻苯二甲醛(纯度为99%),甲醇、四氢呋喃、乙腈(色谱纯),四硼酸钠(优级纯),购自天津市富宇精细化工有限公司。

1260型高效液相色谱仪,美国Agilent公司产;EL204型电子天平,梅特勒-托利多仪器(上海)有限公司产;SB-3200DT型超声萃取仪,宁波新芝生物科技股份有限公司产;DHG-9145A型电热恒温鼓风干燥箱,上海一恒科技有限公司产;ST-07B型多功能磨粉机,上海树立仪器仪表有限公司产。

1.2 实验方法

1.2.1 溶液配制 样品溶液制备:将剥离后的卷烟烟丝于40℃条件下干燥2h,利用磨粉机粉碎、过40目筛后混合均匀,密封储存。称取粉碎后的烟末2.0g(精确至0.0001g)于50mL容量瓶中,用0.1mol/mL的盐酸溶液定容后超声萃取20min,再以9000r/min的转速高速离心20min,取上清液,经0.45μm滤膜过滤,即得样品溶液。

氨基酸工作液的配制:分别称取16种氨基酸标准品于100mL容量瓶中,以0.1mol/mL的盐酸溶液配制浓度为2.5μmol/mL的氨基酸标准储备液;移取氨基酸标准储备液配制浓度分别为4nmol/mL、20nmol/mL、50nmol/mL、125nmol/mL、250nmol/mL、2500nmol/mL的氨基酸混合标准工作液。

衍生化试剂的配制:称取邻苯二甲醛固体5mg于2mL色谱瓶中,加入0.1mL甲醇,再加入1mL浓度为0.4mol/L的硼酸缓冲液(pH=10.4),充分振荡溶解,再加入20μL 3-巯基丙酸,混匀后置于4℃的冰箱中,备用。

1.2.2 高效液相色谱分析条件 流动相A:称取2.494g醋酸钠溶于适量水中,加入200μL三乙胺,用体积分数为1%的醋酸溶液调节pH值至7.2,再加入3mL四氢呋喃,定容至1L,经0.45μm滤膜过滤,备用。流动相B:称取13.608g醋酸钠溶于适量水中,用体积分数为1%的醋酸溶液调节pH值至7.2,定容至1L;取醋酸钠溶液200mL,分别加入400mL甲醇、400mL乙腈,混匀

后经0.45μm滤膜过滤,备用。

色谱柱:ZORBAX SB-C18柱(4.6mm×250mm,5μm);柱温40℃,流速为1mL/min,进样量10μL;荧光检测器激发波长350nm,发射波长450nm。流动相洗脱程序:0~0.5min,0%~1%流动相B;0.5~17min,1%~7%流动相B;17~21min,7%~10%流动相B;21~30min,10%~13%流动相B;34~37min,13%~100%流动相B;37~42min,100%流动相B;42~45min,100%~0%流动相B;45~55min,100%流动相A。

样品溶液和氨基酸工作液衍生化反应由自动进样器完成,自动进样程序参照冯雷等^[18]的方法进行。

1.2.3 卷烟感官评吸 参照《卷烟 第4部分 感官技术要求》(GB 5604.4—2005)^[19],组织内蒙古昆明卷烟有限责任公司技术中心评吸委员会7名成员进行评吸,对刺激性指标进行打分。满分20分,分值越高,表明刺激性越小。

1.3 统计分析方法

对实验数据进行整理,利用SPSS 25.0进行相关性分析、主成分分析和聚类分析。

2 结果与分析

2.1 游离氨基酸含量与刺激性关系模型

2.1.1 游离氨基酸含量与刺激性的差异性分析 对工作标准溶液进行色谱测定,以各氨基酸浓度(X)为横坐标,各组分响应峰面积(Y)为纵坐标建立回归方程,氨基酸标准品的保留时间及回归方程见表1。由表1可知,16种氨基酸在4~2500nmol/mL浓度范围内均线性良好($R^2 \geq 0.99$),可以满足卷烟烟丝中16种氨基酸的检测分析要求。

不同风格卷烟中游离氨基酸含量分析结果如表2所示。由表2可知,在12种卷烟样品中均检测到上述16种游离氨基酸,不同风格卷烟中游离氨基酸含量差异明显。从游离氨基酸的总含量来

表1 氨基酸标准品的保留时间及回归方程

Table 1 Retention time and regression equation of amino acid standards

序号	氨基酸	保留时间/min	回归方程	R ²
1	Asp	2.47	y=2.134 1x-0.908 3	0.999 6
2	Glu	3.28	y=1.718 5x-0.548 2	0.999 7
3	Ser	9.01	y=0.991 2x-0.960 0	0.999 8
4	Gly	14.31	y=0.635 4x-0.495 8	0.999 9
5	His	15.12	y=3.740 6x+0.506 8	0.999 8
6	Thr	16.16	y=1.465 0x-0.439 5	0.999 7
7	Ala	18.60	y=0.874 0x-0.416 9	0.999 8
8	Arg	25.65	y=1.579 8x-0.473 2	0.999 4
9	Tyr	28.94	y=1.691 9x-0.368 7	0.999 8
10	Val	31.80	y=1.031 0x-3.432 1	0.999 8
11	Met	32.24	y=0.987 8x-0.038 6	0.999 8
12	Trp	33.78	y=1.696 4x-0.413 6	1.000 0
13	Phe	34.38	y=1.366 1x-0.745 8	0.999 9
14	Ile	34.74	y=1.145 4x-0.234 2	1.000 0
15	Lys	36.41	y=1.136 2x-0.501 7	0.999 9
16	Leu	37.84	y=3.047 4x+0.888 4	0.996 9

看,其变化范围为 852.09~1 810.22 $\mu\text{g/g}$ 。其中 C₇ 中游离氨基酸总含量最高,为 1 810.22 $\mu\text{g/g}$, C₄(1 739.75 $\mu\text{g/g}$)和 C₁(1 721.98 $\mu\text{g/g}$)次之, C₁ 卷烟的叶组配方以四川烟叶为主要原料,而 C₄ 和 C₇ 卷烟的叶组配方以云南烟叶为主要原料。这两个产区烟叶中多数游离氨基酸含量中等偏高,但丙氨酸含量较高,这与袁帅等^[20]的研究结果一致。C₅ 卷烟以贵州烟区烟叶为主要原料,该烟区烟叶游离氨基酸含量较低^[20],因此 C₅ 卷烟中游离氨基酸总含量最低,为 852.09 $\mu\text{g/g}$ 。从各种游离氨基酸的含量来看,不同风格卷烟中 Asp 含量均大于其余 15 种氨基酸含量,占氨基酸总量的 21.76%~29.90%,这与殷延齐等^[11]的研究结果基本一致;Gly、Lys

含量在各类型卷烟中均未超过 1%;C₁₁ 中 Met 的含量明显高于其他类型卷烟。

卷烟感官评吸刺激性得分结果如表 3 所示。由表 3 可知,C₅、C₆ 和 C₉ 卷烟刺激性指标得分为 18.14~19.36,基本感受不到刺激性;C₂、C₃、C₄、C₈、C₁₀、C₁₁、C₁₂ 刺激性指标得分为 16.00~17.57,略有刺激性;C₁ 和 C₇ 刺激性指标得分分别为 15.57 和 15.00,刺激性较强。

2.1.2 游离氨基酸含量与刺激性的相关性分析 对 12 种风格卷烟的 16 种游离氨基酸与刺激性指标得分进行相关性分析,结果见表 4。由表 4 可见,各氨基酸指标之间既有正相关又有负相关,绝大多数相关关系的绝对值大于 0.5,表明指标间具有较强的相关性^[21]。特别地,Asp

表2 不同风格卷烟中游离氨基酸含量

Table 2 Free amino acid contents in different styles of cigarettes

卷烟	含量																总含量
	Asp	Glu	Ser	Gly	His	Thr	Ala	Arg	Tyr	Val	Met	Trp	Phe	Ile	Lys	Leu	
C ₁	374.67 ^h	184.67 ⁱ	70.98 ^k	14.45 ^j	108.53 ^l	43.21 ^b	310.74 ^k	36.76 ⁱ	176.43 ^j	79.83 ^l	4.11 ^g	103.61 ^k	151.29 ^k	10.85 ^j	10.24 ^g	41.61 ^k	1 721.98 ^j
C ₂	312.20 ^e	123.42 ^d	31.63 ^f	8.66 ^e	76.91 ^e	21.90 ^d	191.61 ^d	25.83 ^d	103.53 ^d	43.89 ^h	2.77 ^c	53.42 ^e	95.82 ^d	5.56 ^e	4.86 ^d	36.20 ^e	1 138.21 ^d
C ₃	385.15 ⁱ	128.57 ^f	28.14 ^d	9.56 ^f	78.17 ^f	25.88 ^f	222.51 ^h	34.13 ^g	114.63 ^e	48.19 ^j	3.90 ^f	46.20 ^d	124.95 ⁱ	8.48 ^h	8.34 ^f	38.18 ^e	1 304.98 ^h
C ₄	394.05 ^j	200.79 ^k	74.73 ^l	12.87 ^j	102.71 ^j	47.44 ^g	295.69 ^j	55.65 ^k	195.22 ^j	53.07 ^j	13.32 ⁱ	85.32 ⁱ	144.45 ^j	9.82 ⁱ	14.61 ⁱ	40.01 ^j	1 739.75 ^k
C ₅	251.71 ^a	91.39 ^b	11.54 ^a	2.44 ^a	55.59 ^a	12.02 ^a	153.98 ^a	19.75 ^b	69.84 ^a	27.81 ^a	2.10 ^b	35.58 ^a	76.15 ^a	3.58 ^a	3.72 ^b	34.89 ^d	852.09 ^a
C ₆	269.92 ^b	82.19 ^a	22.68 ^c	2.39 ^a	56.23 ^b	16.34 ^b	171.17 ^b	19.49 ^a	89.94 ^c	37.24 ^d	1.61 ^a	39.37 ^b	92.21 ^b	4.74 ^b	3.03 ^a	28.30 ^a	936.85 ^b
C ₇	440.30 ^l	195.43 ^j	60.81 ^j	12.52 ^h	106.57 ^k	43.72 ^j	316.12 ^l	51.50 ^j	205.07 ^k	59.82 ^k	3.36 ^{de}	86.04 ^j	163.39 ^j	12.09 ^k	14.02 ^h	39.46 ^h	1 810.22 ^l
C ₈	351.37 ^g	93.30 ^c	30.32 ^c	7.43 ^d	79.79 ^g	25.86 ^f	199.61 ^e	30.33 ^f	131.39 ^f	37.77 ^e	3.29 ^d	55.30 ^f	111.88 ^f	5.41 ^d	5.46 ^d	30.85 ^e	1 199.36 ^e
C ₉	306.58 ^d	102.92 ^d	22.22 ^b	4.21 ^b	62.84 ^c	20.40 ^c	176.60 ^c	20.30 ^c	84.01 ^b	36.40 ^c	8.42 ^h	44.64 ^c	96.79 ^c	5.84 ^f	3.02 ^a	30.01 ^b	1 025.20 ^c
C ₁₀	341.09 ^f	138.69 ^e	34.26 ^e	9.64 ^g	82.55 ^h	25.13 ^c	217.04 ^f	30.52 ^f	114.77 ^e	41.83 ^f	3.55 ^e	55.39 ^f	115.41 ^h	5.58 ^e	5.46 ^d	39.50 ^h	1 260.41 ^f
C ₁₁	304.68 ^c	126.93 ^f	36.82 ^h	6.01 ^e	74.26 ^d	25.07 ^c	234.03 ⁱ	29.17 ^e	135.81 ^h	34.66 ^b	24.43 ^j	60.77 ^g	95.39 ^c	4.99 ^e	6.54 ^e	36.64 ^f	1 236.20 ^f
C ₁₂	406.71 ^k	155.49 ^h	41.86 ^f	8.83 ^f	96.79 ^j	29.94 ^e	221.33 ^g	35.26 ^h	132.66 ^g	42.90 ^g	3.24 ^d	63.81 ^h	114.69 ^g	6.64 ^g	4.13 ^c	39.81 ⁱ	1 404.09 ^j

注:同一指标标注字母无相同者表示在 $\alpha=0.05$ 水平下存在显著差异。下同。

表3 卷烟刺激性感官评吸得分结果
Table 3 Sensory evaluation score of cigarette irritation

分

卷烟	评吸得分							均值
	评吸人 1	评吸人 2	评吸人 3	评吸人 4	评吸人 5	评吸人 6	评吸人 7	
C ₁	15.5	15.5	15.0	15.5	16.0	15.5	16.0	15.57 ^b
C ₂	17.5	18.0	17.5	17.0	17.5	17.0	18.5	17.57 ^f
C ₃	16.5	16.5	17.0	16.5	16.0	16.5	16.5	16.50 ^d
C ₄	16.0	16.5	16.0	16.5	16.5	16.0	16.5	16.29 ^{cd}
C ₅	18.5	18.0	18.5	18.0	18.0	18.5	18.0	18.21 ^g
C ₆	19.5	19.5	19.5	19.0	19.5	19.0	19.5	19.36 ^h
C ₇	15.0	15.0	15.0	15.0	15.0	15.0	15.0	15.00 ^a
C ₈	17.5	17.0	18.0	18.0	17.5	18.0	17.0	17.57 ^f
C ₉	18.0	18.5	18.0	18.0	18.0	18.5	18.0	18.14 ^g
C ₁₀	16.0	16.0	16.0	15.5	16.0	16.0	16.5	16.00 ^c
C ₁₁	17.5	17.0	17.0	17.0	17.0	16.5	16.0	16.86 ^e
C ₁₂	16.0	16.0	16.0	16.0	16.0	16.0	16.0	16.00 ^c

表4 不同风格卷烟游离氨基酸与刺激性指标得分间相关性分析

Table 4 Correlation analysis between free amino acids and irritation index scores in different styles of cigarettes

氨基酸	Asp	Glu	Ser	Gly	His	Thr	Ala	Arg	Tyr	Val	Met	Trp	Phe	Ile	Lys	Leu	总含量
Glu	0.814**																
Ser	0.734**	0.937**															
Gly	0.843**	0.905**	0.888**														
His	0.895**	0.934**	0.922**	0.951**													
Thr	0.837**	0.944**	0.978**	0.912**	0.945**												
Ala	0.796**	0.939**	0.952**	0.900**	0.921**	0.967**											
Arg	0.860**	0.909**	0.877**	0.838**	0.874**	0.932**	0.889**										
Tyr	0.817**	0.902**	0.944**	0.857**	0.918**	0.970**	0.967**	0.936**									
Val	0.659*	0.784**	0.836**	0.868**	0.824**	0.823**	0.854**	0.627*	0.751**								
Met	-0.059	0.168	0.218	0.004	0.039	0.178	0.224	0.177	0.236	-0.126							
Trp	0.706*	0.900**	0.966**	0.884**	0.927**	0.942**	0.950**	0.787**	0.919**	0.887**	0.171						
Phe	0.891**	0.882**	0.880**	0.911**	0.912**	0.941**	0.939**	0.884**	0.915**	0.865**	-0.044	0.868**					
Ile	0.841**	0.877**	0.854**	0.865**	0.856**	0.911**	0.922**	0.845**	0.871**	0.883**	-0.032	0.844**	0.968**				
Lys	0.727**	0.868**	0.864**	0.813**	0.789**	0.907**	0.914**	0.938**	0.915**	0.704*	0.215	0.799**	0.882**	0.886**			
Leu	0.664*	0.845**	0.692*	0.817**	0.796**	0.686*	0.734**	0.688*	0.643*	0.636*	0.107	0.697*	0.652*	0.631*	0.638*		
总含量	0.885**	0.960**	0.954**	0.936**	0.969**	0.986**	0.980**	0.932**	0.969**	0.836**	0.138	0.935**	0.960**	0.930**	0.900**	0.756**	
刺激性得分	-0.0858**	-0.876**	-0.746**	-0.881**	-0.900**	-0.800**	-0.844**	-0.786**	-0.791**	-0.690*	-0.098	-0.779**	-0.826**	-0.769**	-0.714**	-0.897**	-0.876**

注: *表示显著相关($P < 0.05$), **表示极显著相关($P < 0.01$).

与 Glu、Ser、Gly、His、Thr、Ala、Arg、Tyr、Phe、Ile、Lys 存在极显著 ($P < 0.01$) 正相关, 与 Val、Trp 和 Leu 存在显著 ($P < 0.05$) 正相关. Met 与其他氨基酸均不存在显著相关性 ($P \geq 0.05$). Ile 与 Phe 呈极显著 ($P < 0.01$) 正相关, 相关系数达 0.968, 高于其他所有相关系数. 游离氨基酸总含量与刺激性指标得分之间呈现极显著负相关, 表明游离氨基酸含量越高, 刺激性指标得分越低, 卷烟刺激性越大, 这与殷延齐等^[11]的研究结果相似. 另外, 除 Met 外, 其余氨基酸均与刺激性得分之间呈现显著负相关性, 说明氨基酸含量与刺激性得分的原始指标之间存在较多的共性, 直接采用原始指标进行聚类分析会造成信息的重叠, 影响结果的客观性, 因此要先对原始指标进行降维^[22].

2.1.3 游离氨基酸主成分分析及模型的建立 对不同风格卷烟的 16 种氨基酸进行主成分分析, 得到第一主成分的特征值和贡献率分别为 13.00 和 81.23%, 第二主成分的特征值和贡献率分别为 1.24 和 7.73%, 两个主成分的累积贡献率达到 88.96%, 可以用这两个主成分描述游离氨基酸的整体水平.

由主成分载荷矩阵(见表 5)可知, 第一主成分主要反映 Asp、Glu、Ser、Gly、His、Thr、Ala、Arg、Tyr、Val、Trp、Phe、Ile、Lys、Leu 共 15 种游离氨基酸指标的信息, 当第一主成分得分越高时, 说明这 15 种游离氨基酸含量越高; Met 在第二主成分上的载荷值大于 0.9, 即第二主成分主要反映 Met 含量指标的信息, 且当第二主成分得分越高时, 说明 Met 游离氨基酸含量越高.

表5 主成分载荷矩阵

Table 5 Principal component load matrix

氨基酸	第一主成分	第二主成分	氨基酸	第一主成分	第二主成分
Asp	0.865	-0.189	Tyr	0.960	0.151
Glu	0.964	0.068	Val	0.859	-0.278
Ser	0.959	0.125	Met	0.117	0.972
Gly	0.949	-0.133	Trp	0.940	0.058
His	0.965	-0.082	Phe	0.960	-0.169
Thr	0.985	0.074	Ile	0.936	-0.163
Ala	0.981	0.105	Lys	0.910	0.151
Arg	0.926	0.118	Leu	0.772	0.003

以16种游离氨基酸含量为初始自变量,按顺序分别记为 $X_1 \sim X_{16}$,根据各主成分的载荷向量除以各主成分特征值的算术平方根,得出两个主成分的方程表达式如下:

$$F_1 = 0.240X_1 + 0.267X_2 + 0.266X_3 + 0.263X_4 + 0.268X_5 + 0.273X_6 + 0.272X_7 + 0.257X_8 + 0.266X_9 + 0.238X_{10} + 0.033X_{11} + 0.261X_{12} + 0.266X_{13} + 0.260X_{14} + 0.252X_{15} + 0.214X_{16}$$

$$F_2 = -0.170X_1 + 0.061X_2 + 0.112X_3 - 0.119X_4 - 0.074X_5 + 0.066X_6 + 0.094X_7 + 0.106X_8 + 0.136X_9 - 0.250X_{10} + 0.873X_{11} + 0.052X_{12} - 0.152X_{13} - 0.147X_{14} + 0.136X_{15} + 0.003X_{16}$$

以第一、二主成分贡献率大小为分配系数,对两个主成分得分进行加权求和,可得 $F = 0.913F_1 + 0.087F_2$. 不同风格卷烟游离氨基酸含量的综合得分(F)及排名如表6所示. 游离氨基酸含量与卷烟刺激性大小呈现负相关关系,即游离氨基酸含量综合得分越高表示该卷烟刺激性越大,因此,以前述函数作为综合评价模型预测卷烟刺激性大小.

由表6可知,第一、二主成分得分最高的分别是 C_7 和 C_{11} . 从不同风格卷烟游离氨基酸主成分综合得分排名可知, C_7 综合评分最高, C_5 最低,表明不同风格卷烟的游离氨基酸含量存在差异性. 预测 C_5 刺激性最高、 C_6 次之、最后是 C_7 . 12种卷烟游离氨基酸平均综合得分为

0,在平均得分附近的有 C_{12} 、 C_3 、 C_{10} 、 C_{11} 、 C_8 和 C_2 ,综合得分为 $-1.395 \sim 0.720$;远大于平均得分的有 C_1 、 C_4 和 C_7 ,综合得分为 $4.598 \sim 5.134$;远低于平均得分的有 C_9 、 C_6 和 C_5 ,综合得分分别为 -3.036 、 -3.830 和 -4.391 .

表6 不同风格卷烟游离氨基酸含量的综合得分及排名

Table 6 Comprehensive score and ranking of free amino acid content in different styles of cigarettes

卷烟	第一主成分	第二主成分	综合得分	综合得分排名
C_1	5.174	-0.800	4.794	2
C_2	-1.578	-0.519	-1.395	9
C_3	0.172	-0.746	0.222	5
C_4	5.168	1.392	4.598	3
C_5	-4.826	-0.175	-4.391	12
C_6	-4.229	-0.473	-3.820	11
C_7	5.574	-0.524	5.134	1
C_8	-1.415	-0.378	-1.259	8
C_9	-3.304	0.232	-3.036	10
C_{10}	-0.407	-0.424	-0.335	6
C_{11}	-1.062	2.998	-1.231	7
C_{12}	0.733	-0.584	0.720	4

2.2 模型验证

2.2.1 基于卷烟游离氨基酸聚类分析的模型验证

将12种不同风格卷烟的16种氨基酸含量作为变量,利用SPSS 25.0软件对其进行聚类分析. 采用Ward法,选择欧氏距离进行分析,得到不同风格卷烟的氨基酸含量树状聚类图(见图1). 由图1可知,在欧式距离为2.5时,12种卷烟可分为5类, C_2 、 C_8 、 C_{10} 、 C_3 、 C_{12} 聚为一类,结合氨基酸总量(表2)和刺激性得分结果(表3)发现,该类卷烟游离氨基酸总含量适中,略有刺激性; C_5 、 C_6 和 C_9 聚为一类,该类卷烟游离氨基酸总含量较低,基本感受不到刺激性; C_1 、 C_7 聚为一类,该类卷烟游离氨基酸总含量较高,刺激性较强; C_4 聚为一类; C_{11} 聚为一类. 聚类分析结果与主成分分析结果基本一致,这也验证了综合评价模型的可靠性.

2.2.2 基于卷烟刺激性感官评价的模型验证

基于前期卷烟感官评吸得到的刺激性指标得分评价结果,利用Pearson相关性分析法,将

两种分值进行对比分析,结果如表7所示.由表7可知,两种方法呈现极显著负相关($P < 0.01$),相关系数为-0.87,该结果可以进一步验证该模型的可靠性.感官评吸得到的刺激性指标平均得分与刺激性指标模型综合得分在排序上存在一定的差异性,可能是受到评吸人员和环境的影响,造成两者结果存在一定偏差.

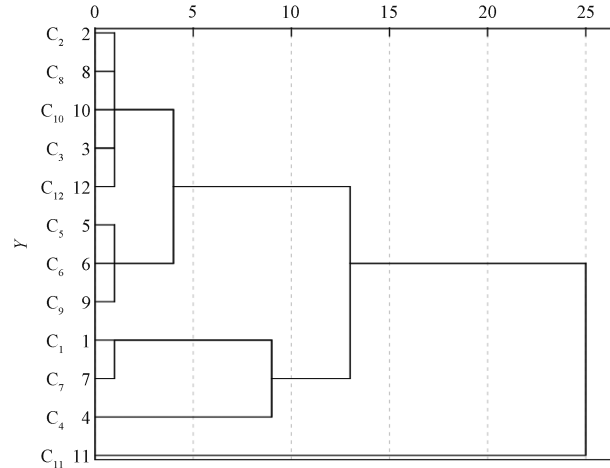


图1 不同风格卷烟游离氨基酸含量树状聚类图
Fig.1 The tree cluster diagram of free amino acids content in different styles of cigarettes

表7 感官评吸结果与模型评价结果对比
Table 7 Comparison of sensory evaluation results and model evaluation results

分类	卷烟	感官评吸		刺激性评价模型	
		得分	排序	综合得分	排序
第一类	C ₅	18.21±0.27	2	-4.391	1
	C ₆	19.36±0.24	1	-3.820	2
	C ₉	18.14±0.24	3	-3.036	3
第二类	C ₂	17.57±0.53	4	-1.395	4
	C ₈	17.57±0.57	4	-1.259	5
	C ₃	16.50±0.29	6	0.222	8
	C ₁₀	16.00±0.29	8	-0.335	7
	C ₁₂	16.00±0.00	8	0.720	9
第三类	C ₁	15.57±0.35	9	4.794	11
	C ₇	15.00±0.00	10	5.134	12
第四类	C ₄	16.29±0.27	7	4.598	10
第五类	C ₁₁	16.86±0.27	5	-1.231	6

3 结论

本文利用高效液相色谱法测定了12种风格卷烟中游离氨基酸的含量,通过差异性分析、相关性分析、主成分分析建立基于游离氨基酸卷烟刺激性综合评价模型,并通过聚类分析法

和刺激性感官评价对该模型进行验证.结果表明:12种卷烟中游离氨基酸在含量上存在较大差异,Asp在各卷烟中含量最高;建立了综合评价模型 $F = 0.913F_1 + 0.087F_2$,通过聚类分析可将12种卷烟分为5类,与综合评价模型预测结果基本一致;12种卷烟刺激性感官评价得分排序与综合评价模型预测的刺激性得分排序大体一致;以该模型计算不同类型卷烟游离氨基酸综合评价得分,得分越高表示该卷烟刺激性越大,12种卷烟得分从低到高分别为 $C_5 < C_6 < C_9 < C_2 < C_8 < C_{11} < C_{10} < C_3 < C_{12} < C_4 < C_1 < C_7$. 本文建立的综合评价模型可靠性较好,可通过卷烟中游离氨基酸的含量预测卷烟抽吸时的刺激性大小,为卷烟的刺激性预测提供理论依据.

参考文献:

[1] 赵娟,沈宁,于静洋,等.基于PLSR分析氨基酸对市售卷烟感官品质的影响[J].食品与机械,2016,32(1):11.

[2] 颜培强,焦玉生,张志鹏,等.烤烟不同部位叶片中主要含氮化合物的变化[J].生物技术,2010,20(4):86.

[3] 郭永新,石丽颖,冯春才,等.烤烟不同采收时期叶片中主要含氮化合物的变化[J].农业科技通讯,2009,38(11):74.

[4] 谢良文,路晓崇,裴晓东,等.烤烟烘烤过程中氨基酸含量变化对主要含氮化合物的影响[J].湖南农业大学学报,2016,42(2):152.

[5] 崔庆伟,田栾栾,路晓崇,等.烤烟烘烤过程中主要含氮化合物与烟气氨释放量的相关性研究[J].江西农业学报,2012,24(9):99.

[6] 许春平,曲利利,杜欢哲,等.云烟精油陶瓷膜分离组分的关键香气成分与感官属性的相关性分析[J].轻工学报,2021,36(3):45.

[7] 高徐梅,李新生,严新龙,等.利用美拉德反应降低再造烟叶中的还原糖[J].烟草科技,2014(12):52.

- [8] 李洪臣,朱顺成. 氨基酸对不同烤烟品种烟叶美拉德反应的影响[J]. 安徽农业科学,2020,50(3):26.
- [9] 苏宇. 烟叶成熟、烘烤及醇化过程中游离氨基酸及主要化学成分分析[D]. 长沙:湖南农业大学,2017.
- [10] 钱敏白,赵文红,刘晓艳,等. 不同氨基酸和糖对美拉德反应产物的影响[J]. 食品科学,2016,37(13):31.
- [11] 殷延齐,刘惠民,夏巧玲,等. 卷烟烟丝中游离态氨基酸的主成分分析和聚类分析[J]. 烟草科技,2007,51(10):36.
- [12] 邓国宾,曾晓鹰,薛红芬,等. 烤烟游离氨基酸与感官质量的相关性研究[J]. 中国烟草科学,2011,32(5):14.
- [13] 王晓园,谢晓斌,孙红恋,等. 不同采收时期对烤烟上部叶氨基酸含量和感官评吸的影响[J]. 江西农业学报,2013,25(11):54.
- [14] 肖明礼,杨庆,林锐峰,等. 风味蛋白酶提升烟叶抽吸品质的研究[J]. 浙江农业学报,2014,26(1):181.
- [15] 程昌合,解莹莹,王雪丽,等. 不同香型烤烟游离氨基酸组成和含量的差异分析[J]. 江西农业学报,2014,26(5):84.
- [16] 江苏中烟工业有限责任公司. 一种用于卷烟烟气刺激性成分评价的口腔模拟器及方法:201010589208.3[P]. 2011-07-20.
- [17] 王光耀,刘曙光,李少鹏,等. 醇化过程中不同产地片烟游离氨基酸差异及其与片烟品质的关系[J]. 南方农业学报,2020,51(5):1176.
- [18] 冯雷,陈章玉,王保兴,等. 柱前衍生化反相高效液相色谱法测定烟草中的游离氨基酸[J]. 云南大学学报(自然科学版),2003,66(1):247.
- [19] 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. 卷烟 第4部分 感官技术要求:GB 5606.4—2005[S]. 北京:中国标准出版社,2005.
- [20] 袁帅,董洪旭,徐磊,等. 我国烤烟游离氨基酸含量区域分布研究[J]. 安徽农业科学,2020,48(13):29.
- [21] 张婷,刘慧琴,郭勤卫,等. 十六份辣椒材料游离氨基酸组成的主成分分析与聚类分析[J]. 浙江农业学报,2021,33(4):640.
- [22] 王吉祥,官焕宇,屠祥建,等. 耐亚磷酸盐紫花苜蓿品种筛选及评价指标的鉴定[J]. 草业学报,2021,30(5):186.