

基于 PLSR 分析酚类物质对市售卷烟感官品质的影响

Influence of polyphenol compounds on sensory quality of commercial cigarettes using partial least square regression

郭磊¹ 苏加坤¹ 邵灯寅¹ 沈宁² 赵娟²
GUO Lei¹ SU Jia-kun¹ SHAO Deng-yin¹ SHEN Ning² ZHAO Juan²
于静洋² 夏书芹² 蔡继宝¹ 张晓鸣²
YU Jing-yang² XIA Shu-qin² CAI Ji-bao¹ ZHANG Xiao-ming²

(1. 江西中烟工业有限责任公司, 江西 南昌 330000; 2. 江南大学食品学院, 江苏 无锡 214122)

(1. Tobacco Jiangxi Industrial Co., Ltd., Nanchang, Jiangxi 330000, China; 2. School of Food Science and Technology, Jiangnan University, Wuxi, Jiangsu 214122, China)

摘要:为探究多酚物质对卷烟感官品质的影响,采用偏最小二乘回归分析法(PLSR)分析绿原酸、茛菪亭和芸香苷与卷烟感官品质的相关性。结果表明,绿原酸与口腔刺激/舌部灼烧、口腔残留/干燥感呈显著正相关;茛菪亭与收敛、喉部刺激呈显著负相关;芸香苷对卷烟的舒适感没有显著影响;在卷烟的烟气特性中,绿原酸与杂气呈显著正相关,绿原酸和茛菪亭与劲头呈显著负相关,芸香苷对烟气特征没有显著影响。

关键词:卷烟;感官品质;绿原酸;茛菪亭;芸香苷;偏最小二乘回归分析法

Abstract: The Partial Least Square Regression (PLSR) analysis was used to study the influence of polyphenols, such as chlorogenic acid, scopoletin and rutin contents on sensory quality. The results showed that there were significantly positive correlations between chlorogenic acid and oral irritation or tongue burning, oral coating or dryness. There were significantly negative correlations between scopoletin and astringency and throat irritation. However, there were no significant correlations between rutin and comfort characteristics. For smoke characteristics, there was a significantly positive correlation between chlorogenic acid and off-taste. Chlorogenic acid and scopoletin had significantly negative influences on impact. Rutin had no significant influence on smoke characteristics.

Keywords: cigarettes; sensory quality; chlorogenic acid; scopoletin; rutin; PLSR

多酚是烟叶中重要的香气前体物,其含量的高低与烘烤后的烟叶颜色及卷烟香气具有密切关系^[1]。在卷烟燃吸过程中,多酚及其热解产物转移到烟气中,对烟气香味有直接影响^[2]。钟庆辉^[3]曾提出以酚类化合物与蛋白质含量比值作为判断烟叶香吃味的化学指标,并称其为芳香值;多酚类物质对卷烟感官品质具有重要影响,2005 年云南省烟草公司将多酚含量作为优质烟叶化学成分考核指标之一^[4]。绿原酸、芸香苷和茛菪亭作为烟草多酚类化合物中的主要成分,占总多酚的 75%~90%^[5]。烤烟中含有 3% 以上的绿原酸、1% 左右的芸香苷^[6]。

偏最小二乘回归分析主要用于建立多因变量与多自变量的统计关系^[7]。在回归分析中,当自变量与因变量的个数都很多,并且自变量之间以及因变量之间都存在较严重的多重贡献时,采用一般的多元回归方法,其分析结果的可靠性极低,而采用 PLSR 分析,则可以较好地解决这个问题^[8]。目前,PLSR 已得到了广泛应用^[9-15]。

近年来关于多酚类物质对卷烟感官质量影响的研究已有报道^[16-18],但以往的分析多以烟叶原料或叶组为研究对象,基于 PLSR 分析酚类物质对成品卷烟感官品质的影响则没有研究。本试验选取 10 种市售成品卷烟,采用 PLSR 方法对成品卷烟多酚含量和感官品质进行相关性分析,从而研究成品卷烟多酚化合物对感官品质的影响,为卷烟加料配方的调整、成品卷烟的质量评价提供科学依据。

1 材料与方法

1.1 试验材料

10 种市售成品卷烟:江西中烟工业有限责任公司;绿原酸、芸香苷、茛菪亭;色谱纯,美国 Sigma 公司。

基金项目:江西中烟工业有限责任公司技术创新项目(编号:赣烟工科计 2013-05)

作者简介:郭磊(1982—),男,江西中烟工业有限责任公司工程师,硕士。E-mail:recallerman@163.com

通讯作者:蔡继宝,张晓鸣

收稿日期:2015-09-30

1.2 试验仪器

电子天平:AL204 型,梅特勒—托利多仪器(上海)有限公司。

高效液相色谱仪:Waters1525 型,沃特世中国有限公司。
PDA 二极管阵列检测器:Waters2996 型,沃特世中国有限公司

1.3 试验方法

1.3.1 卷烟感官品质评价 参照 GB/T 16447—2004 调节卷烟样品水分,制备样品;感官评吸由 9 名省级以上卷烟感官评吸专家完成。按 10 分标度制,对各卷烟样品的品质特征进行评分,评分标准见文献[19]中的表 1。取平均值作为各感官评价指标得分,保留一位小数。

表 1 10 个卷烟样品的感官品质特征得分
Table 1 Sensory scores of 10 kinds of cigarettes

样品	口腔刺激/ 舌部灼烧	口腔残留/ 干燥感	收敛	喉部刺激	喉部干燥	鼻腔刺激	香气	丰富性	细腻/柔 和/圆润	杂气	烟气浓度	劲头	总分
样品 1	8.1	8.2	7.9	8.2	8.1	8.1	8.4	7.9	8.1	8.2	8.1	5.1	94.4
样品 2	8.2	8.1	7.6	7.4	8.1	7.4	7.9	7.4	8.1	7.9	7.6	5.4	91.1
样品 3	7.4	7.1	6.6	6.9	7.1	7.4	6.9	6.8	7.2	7.0	8.1	5.4	83.9
样品 4	7.0	6.4	6.4	6.9	6.8	7.2	7.1	7.1	6.9	7.0	8.1	5.0	81.9
样品 5	8.2	8.1	8.4	8.1	8.2	8.5	8.1	9.0	8.0	7.3	7.8	4.9	94.6
样品 6	8.1	8.2	7.9	8.2	8.0	8.0	8.4	8.4	8.9	7.9	8.0	5.0	95.0
样品 7	7.9	8.1	8.6	8.2	8.1	8.4	9.1	7.9	7.8	8.0	7.9	5.5	95.5
样品 8	7.9	8.1	8.6	8.1	7.9	8.5	8.0	7.9	8.5	8.0	8.0	5.0	94.5
样品 9	8.0	8.0	6.8	7.1	7.1	8.0	8.1	7.9	7.9	8.0	7.0	5.0	88.9
样品 10	7.5	7.0	6.8	7.0	8.0	8.1	8.0	7.5	7.5	7.0	8.1	5.0	87.5

由表 1 可知,总分较高的样品 1、5、6、7、8 的各个感官指标都较高,总分较低的其余样品的各个感官指标得分也都较低,说明 12 个指标之间具有一定的协调性。

2.2 多酚类化合物的含量分析

多酚化合物绿原酸、芸香苷、茛菪亭的含量见表 2。
由表 2 可知,同一样品卷烟中,绿原酸含量最高,其次是芸香苷,茛菪亭含量最低。其中,样品 1 的绿原酸含量最高,样品 3 的绿原酸含量最低。结合感官评价结果(表 1)可知,样品 1 的感官品质得分较高,而样品 3 的感官品质得分较

表 2 10 个卷烟样品中多酚类化合物的含量
Table 2 The content of polyphenol compounds of 10 kinds of cigarettes (n=3) mg/g

样品	绿原酸	茛菪亭	云香苷
样品 1	12.38±0.27	0.22±0.02	8.24±0.24
样品 2	11.88±0.27	0.20±0.01	9.74±0.31
样品 3	9.14±0.30	0.23±0.02	7.37±0.24
样品 4	9.32±0.30	0.27±0.01	7.00±0.47
样品 5	10.24±0.36	0.23±0.02	7.03±0.61
样品 6	10.56±0.38	0.24±0.01	8.58±0.28
样品 7	9.96±0.40	0.17±0.01	7.14±0.57
样品 8	11.65±0.14	0.20±0.01	6.83±0.57
样品 9	12.24±0.26	0.23±0.02	8.44±0.49
样品 10	10.27±0.26	0.27±0.01	8.44±0.24

1.3.2 多酚测定 卷烟多酚类化合物绿原酸、芸香苷、茛菪亭含量测定,按 YC/T 202—2006《烟草及烟草制品 多酚类化合物绿原酸、茛菪亭和芸香苷的测定》执行。

1.3.3 数据分析 采用偏最小二乘回归(PLSR)法以绿原酸、芸香苷、茛菪亭的含量为 X 变量,以感官指标为 Y 变量对卷烟感官品质与多酚类化合物绿原酸、芸香苷、茛菪亭进行相关性分析。

2 结果与讨论

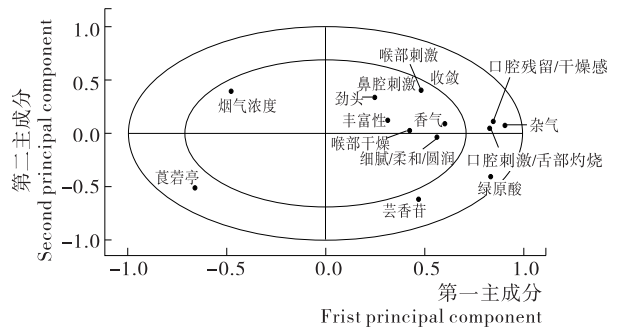
2.1 感官品质特征分析

感官品质特征共包含 12 个指标,各个指标的得分见表 1,其中总分为所有指标得分的总和。

低,可以初步判定绿原酸有利于卷烟的感官品质。对于茛菪亭,样品 4 和 10 的含量最高,而二者的感官品质得分都较低,可以推断茛菪亭不利于卷烟的感官品质。

2.3 多酚类化合物与卷烟感官品质的相关性分析

为了进一步考察多酚物质对卷烟品质的影响,以 3 个化学指标(绿原酸、芸香苷、茛菪亭)为自变量(X),12 个品质特征指标为因变量(Y),运用 PLS2(多因变量)对品质特征指标进行相关性分析,见图 1。



两个圆分别表示 50%和 100%的解释方差
图 1 多酚类物质和感官品质的偏最小二乘回归 PLSR 相关性分析

Figure 1 The correlation loadings plot between the polyphenol compounds and sensory characteristics based on Partial Least Squares Regression(PLSR)

根据交叉有效性得到的最优主成分个数为两个,它们累积提取了 X 变量 88% 的信息。由图 1 可知,喉部刺激、口腔残留、口腔刺激、杂气变量位于两个圆环之间,可以很好的被化学变量解释。

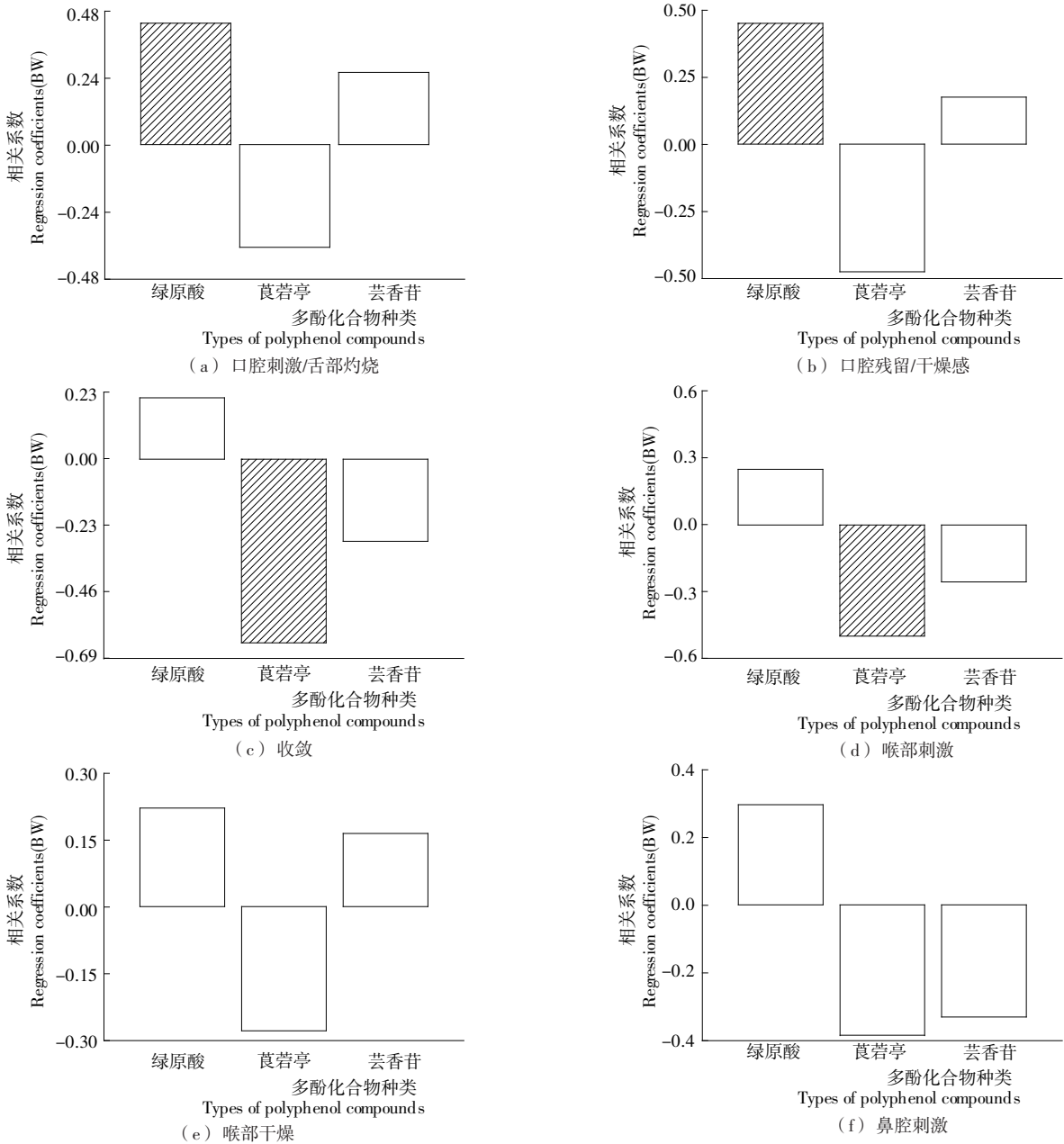
PC1(第一主成分)所解释的变量中,绿原酸和芸香苷以及感官指标(除了烟气浓度之外)位于载荷图的右侧,说明绿原酸和芸香苷与卷烟感官品质呈正相关。同时,感官指标集中分布在一侧也验证了感官品质各个指标之间的协调性。

2.4 多酚类化合物对卷烟感官品质特征的贡献性分析

为了更好地研究多酚物质对卷烟品质特征各个指标的具体影响,运用 PLS1(单因变量)进一步分析多酚类化合物与卷烟感官品质的相关性。

2.4.1 对舒适感特性的贡献性分析 以绿原酸、茛菪亭、芸香苷为自变量(X),分别以舒适感特性的各个指标为因变量(Y)进行了 PLS1 分析,结果见图 2。

由图 2 可知:绿原酸与舒适感特性的所有指标(口腔刺激/舌部灼烧、口腔残留/干燥感、收敛、喉部刺激、喉部干燥、鼻腔刺激)的回归系数都大于零,因此绿原酸与舒适感特性所有指标呈正相关(回归系数大于零表示正相关,回归系数小于零表示负相关),其中对口腔刺激/舌部灼烧、口腔残留/干燥感的影响达到显著水平。说明绿原酸对降低卷烟抽吸的刺激性和口腔残留具有一定作用。这可能是因为烟草在燃吸时,绿原酸产生酸性反应,中和了部分碱性,从而使口味醇和、刺激性降低。由 2.1 和 2.2 可知,样品 5 的口腔刺激/



斜杠柱形图表示显著相关,即 $P < 0.05$

图 2 多酚类物质对舒适感特性各指标的显著性影响分析

Figure 2 The contribution analysis of polyphenol compounds on each index of comfort characteristics

舌部灼烧和口腔残留/干燥感的得分都较高,其绿原酸的含量也较高;绿原酸含量最低的样品 3,其口腔刺激/舌部灼烧和口腔残留/干燥感得分都较低。

同样由图 2 可知,茛菪亭与舒适感特性所有指标的回归系数都小于零,因此茛菪亭与舒适感特性所有指标呈负相关,其中与收敛、喉部刺激呈显著负相关。说明茛菪亭不利于卷烟抽吸的舒适感。由多酚含量和感官评价结果可知,样品 7 的茛菪亭含量最低,其收敛、喉部刺激的得分最高;茛菪亭含量最高的样品 4 和 10 的收敛、喉部刺激得分都偏低。

芸香苷与舒适感特征各个指标都没有显著相关性,说明芸香苷对卷烟的舒适感没有明显影响。

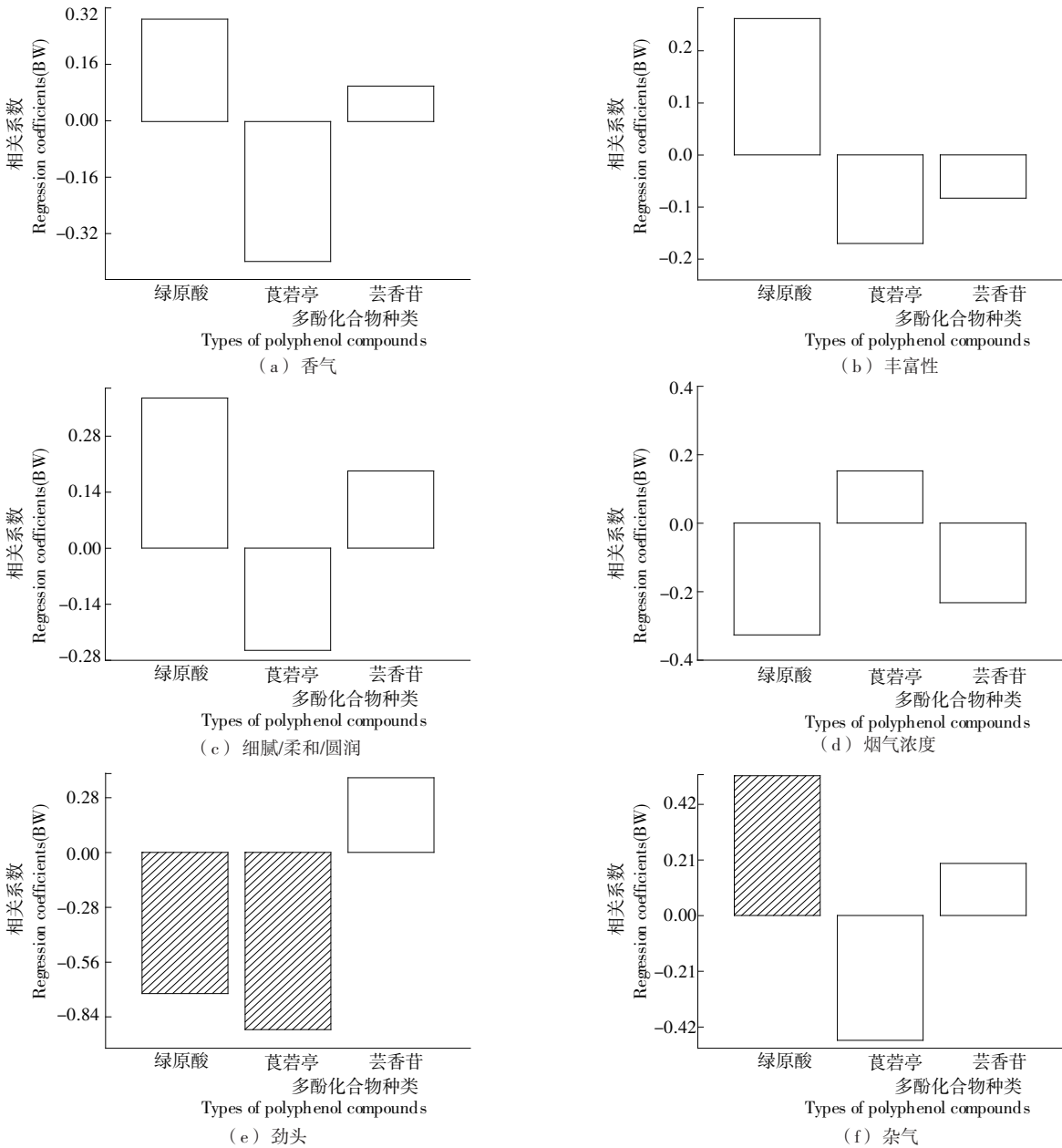
2.4.2 对舒适感特性的贡献性分析 以绿原酸、茛菪亭、芸香苷为自变量(X),分别以烟气特征各个指标为因变量(Y)

进行了 PLS1 分析,结果见图 3。

由图 3 可知:多酚类物质对烟气特征各指标的显著性影响分析中,只有绿原酸对杂气和劲头的影响以及茛菪亭对劲头的影响达到显著水平。其中,绿原酸与杂气的回归系数都大于零,说明二者呈正相关。因此绿原酸对降低卷烟抽吸的杂气具有一定作用,这可能与绿原酸降低刺激性的原因类似,都是由于绿原酸产生酸性反应,能中和部分碱性。

另外,绿原酸和茛菪亭与劲头的回归系数都小于零,可知绿原酸和茛菪亭与劲头呈负相关。说明多酚类化合物可降低卷烟的抽吸劲头。由 2.1 和 2.2 的分析可知劲头指标得分最低的样品 7 其绿原酸和茛菪亭的含量也都较低。

芸香苷与烟气特性各指标都没有显著相关性,说明芸香苷对卷烟的烟气特性没有明显影响。



斜杠柱形图表示显著相关,即 $P<0.05$

图 3 多酚类物质对烟气特征各指标的显著性影响分析

Figure 3 The contribution analysis of polyphenol compounds on each index of smoke characteristics

3 结论

采用 PLSR 分析方法找出了绿原酸、茛菪亭、芸香苷对卷烟品质特征各个指标的具体影响:绿原酸可减少口腔刺激,减少杂气,总体上与感官品质呈正相关;茛菪亭则会增加收敛和喉部刺激,不利于卷烟的感官品质。因此,可以通过调整卷烟叶组配方,适当增加绿原酸含量、降低茛菪亭含量;或通过外加绿原酸含量高的配料修饰改善卷烟抽吸品质。另外,在对卷烟品质进行评价时,通过对多酚物质的测定,可在一定程度预判卷烟的品质。

参考文献

1 牛莉莉. 我国主产烟区烤烟烟叶口感特性状况及与化学成分的关系分析[D]. 郑州: 河南农业大学, 2014: 16~19.

2 陈剑明, 冯洪涛, 夏启东, 等. 云南主产烟区不同品种烟叶多酚研究[J]. 安徽农业科学, 2013(13): 5 929~5 930.

3 杨君, 高宏建, 张献忠, 等. 烟草香味物质及其精油应用研究进展[J]. 香料香精化妆品, 2012(3): 45~49.

4 李应金, 吴玉萍, 戴翔, 等. 烟草中多酚含量测定方法研究[J]. 烟草农业科学, 2006, 2(3): 239~241.

5 朱小茜, 徐晓燕, 黄义德, 等. 多酚类物质对烟草品质的影响[J]. 安徽农业科学, 2005, 33(8): 1 910~1 911.

6 闫克玉. 烟草化学 [M]. 郑州: 郑州大学出版社, 2002: 159~160.

7 王惠文. 偏最小二乘回归方法及其应用[M]. 北京: 国防工业出版社, 1999: 1~5.

8 谢剑平, 刘百战, 洗可法, 等. 烟草香料技术原理与应用[M]. 北京: 化学工业出版社, 2009: 347~365.

9 Shi Xian-zhong, Mehrooz Aspandiar, David Oldmeadow. Using hyperspectral data and PLSR modelling to assess acid sulphate soil in subsurface[J]. Journal of Soils and Sediments, 2014(14): 904~916.

10 Zhu Jian-cai, Chen Feng, Wang Ling-ying, et al. Comparison of aroma-active compounds and sensory characteristics of durian

(Durio zibethinus L.) wines using strains of saccharomyces cerevisiae with odor activity values and partial least-squares regression[J]. Journal of Agricultural and Food Chemistry, 2015, 63 (7): 1 939~1 947.

11 Song Shi-qing, Tang Qi, Hayat Khizar, et al. Effect of enzymatic hydrolysis with subsequent mild thermal oxidation of tal-low on precursor formation and sensory profiles of beef flavors assessed by partial least squares regression[J]. Meat Science, 2014, 96(1): 191~1 200.

12 Karangwa Eric, Linda Virginie Raymond, Shabbar Abbas, et al. Temperature and cysteine addition effect on formation of sunflower hydrolysate Maillard reaction products and corresponding influence on sensory characteristics assessed by Partial Least Square Regression[J]. Food Research International, 2014 (57) 242~258.

13 Song Shi-qing, Zhang Xiao-ming, Xiao Zuo-bing, et al. Contribution of oxidized tallow to aroma characteristics of beef like process flavour assessed by gas chromatography-mass spectrometry and partial least squares[J]. Journal of Chromatography A, 2012, 1 254: 115~124.

14 龙章德, 林顺顺, 田兆福, 等. 烟草多酚类化合物对卷烟品质的影响[J]. 食品与机械, 2013, 29(6): 41~44.

15 秦蓝, 李风华, 田怀香, 等. 鸡精调味料人工感官评价与电子鼻感官分析的相关性研究[J]. 食品与机械, 2014, 30(4): 11~13.

16 朱向荣, 李高阳, 苏东林, 等. 基于近红外光谱与组合间隔偏最小二乘法的稻米镉含量快速检测[J]. 食品与机械, 2015, 31(4): 43~46.

17 席元肖, 宋纪真, 杨军, 等. 不同烤烟品种的类胡萝卜素、多酚含量及感官品质的比较[J]. 烟草科技, 2011(2): 70~74.

18 俞京, 章平泉, 龚珍林, 等. 烤烟主要多酚与其感官质量的典型相关性[J]. 烟草科技, 2010(1): 37~40.

19 苏加坤, 罗娟敏, 徐达, 等. 基于 PLSR 分析蛋白质与淀粉对市售卷烟感官品质的影响[J]. 食品与机械, 2015, 31(5): 16~20.

信 息 窗

科学家发现超级稻增产基因

中国水稻研究所超级稻种质创新团队与中国科学院等单位合作,从浙江地方大粒品种“宝大粒”中成功分离并克隆了一个重要基因 GS2,该基因能够显著提高超级稻产量。

据了解,这一研究成果得到国家自然科学基金委和科技部的资助,并在线发表在最新一期国际知名刊物《分子植物》杂志上。“宝大粒”是浙江地方大粒品种,其植株高而壮,穗长粒大,千粒重在 48 g 以上。研究人员通过分析,在第 2 染色体上获得了一个主效粒型基因 GS2,该基因发生了一个稀有显性突变,造成基因表达显著上升,从而促进细胞的分裂和生长,并最终特异增加了穗长和籽粒大小。

此外,研究人员还发现该 GS2 显性基因在杂合状态下

更符合生产需求,因此将含该 GS2 显性等位基因的恢复系与优异品质的不育系配组,将有助于培育高产超级稻水稻新品种。

水稻种子收获量是农业生产的直接考核指标。在生产上,水稻产量主要由有效穗数、每穗粒数和谷粒重三要素组成。谷粒重一般由千粒重表示,是粒长、粒宽和粒厚的综合体现。在水稻的长期驯化过程中,由于收获指数大和易加工等特点,逐渐形成了栽培种籽粒明显大于野生亲缘种的性状。因此,在超高产育种中,通过增加千粒重来提高水稻产量是育种家普遍使用的一个有效手段。

(来源:www.cifst.org.cn)