

(19) 中华人民共和国国家知识产权局



(12) 发明专利

(10) 授权公告号 CN 103226136 B

(45) 授权公告日 2014. 12. 03

(21) 申请号 201210388661. 7

审查员 严小波

(22) 申请日 2012. 10. 15

(73) 专利权人 红塔烟草(集团)有限责任公司

地址 653100 云南省玉溪市红塔大道 118 号

(72) 发明人 董伟 李晋明 李忠任 孟昭宇

任继阳 冯磊 郭仁 台希

朱慧贤 吴亿勤 张伟 许健

秦云华 汤建国 张凤梅 龚荣岗

桂永发 戚文辉 汤利民

(74) 专利代理机构 昆明今威专利商标代理有限公司 53115

代理人 赛晓刚

(51) Int. Cl.

G01N 30/02 (2006. 01)

G01N 30/06 (2006. 01)

权利要求书2页 说明书9页 附图2页

(54) 发明名称

一种卷烟香型的检测判定方法

(57) 摘要

本发明方法涉及一种卷烟香型检测判定方法，属于卷烟香型梯度定性、定量鉴别应用技术领域。本发明属于首创，通过对卷烟致香物的同时蒸馏萃取(SDE)优化方法，在比传统同时蒸馏萃取(SDE)萃取更多种类致香物的基础上，进行卷烟致香物的定性、定量分析，从而为上述应用技术领域提供数字化的卷烟致香物化学基础数据。优化卷烟致香物分析和对照卷烟香型指数Y的计算，准确地从定性化到定量化(数字化)确定出卷烟香型范围：清香型、中间香型、浓香型。本发明卷烟香型判断准确率在86. 67%。为卷烟的香型梯度分类、品牌风格特征叶组配方的维护与研究开发、香精香料的参配，提供数据化的化学判断。

B

CN 103226136

1. 一种卷烟香型的检测判定方法,其特征在于步骤如下:

(1) 卷烟香型致香物萃取:用同时蒸馏萃取(SDE)优化萃取方法进行如下操作:在蒸馏瓶中,拟进行烟草致香物分析的烟丝样品 20 或 30 克,加入水 350 或 450ml,加入内标物质,以备蒸馏;在萃取瓶中,加入 40ml 二氯甲烷;

①萃取时间:萃取剂使用二氯甲烷,水浴恒温 60°C,常规萃取方式进行 3 小时;

②萃取温度:加热套蒸馏温度为 198°C -200°C,使得沸腾剧烈,以便更完全地萃取半挥发性的物质;

③按常规分离:在分液漏斗中,对萃取的二氯甲烷溶液加入过量的硫酸钠,比例是烟丝样品重量的 0.5 倍,让硫酸钠充分吸收萃取的二氯甲烷溶液中的水分,随后,先后各一次,用 10ml 二氯甲烷冲洗瓶,保证萃取物全部萃取;

④按常规浓缩:将步骤③中的萃取剂浓缩至 0.5-0.4ml,回流至 1-1.1ml;

⑤按常规将步骤④中制取的样品不过夜冷藏,直接上机进行气相色谱-质谱(GC-MS)的气质分析;

(2) 气相色谱质谱 GC-MS 定性、定量分析卷烟香型致香物;

所述的气相色谱-质谱(GC-MS)条件:

色谱柱:DB-5, 30m×0.25mm i. d. ×0.25 μm d. f.;

程序升温:按 4°C /min 的加热速度,第一次升温到 40°C 保温 2min,随后升温到 250°C,保温 10min;

进样口:250°C;载气:He;柱头压:100kPa;

分流比:30 : 1;进样量 1.0 μL;

传输线温度:250°C;

离子源温度:150°C;

EI 能量:70eV;

扫描范围:35 ~ 350u;

内标:正十七烷;对采集到的图谱利用 NIST1.11 升级版谱库进行检索;采用面积归一法定量;

分析的结果是:理论上峰图面积达 0.03% 以上的可以认为是一种物质,因为有些致香物的含量实际很少;15 种、多批次的不同品牌的卷烟,它们被分析出来的致香物种类一般在 300 种;有比较性的 116 种,用于统计分析 110 种;

(3) 分析判定:采用步骤(2)获得的对卷烟致香物定性、定量分析出来的 10 种相关性大的物质,代入能由 Matlab 软件进行逐步回归分析的下列公式:

卷烟香型指数 $Y = -0.494 + 0.015 X_1$ (糠醛) + 0.321 X_2 (2-环戊稀 1,4-二酮) + 0.072 X_3 (苯甲醇) + 0.144 X_4 (二氢猕猴桃内酯) - 0.003 X_5 (巨豆三稀酮) - 0.169 X_6 (肉豆蔻酸) - 0.161 X_7 (苯甲酸苄酯) + 0.799 X_8 (法尼基丙酮) - 0.025 X_9 (棕榈酸甲酯) - 0.024 X_{10} (棕榈酸);

该回归方程的复相关系数 $R=0.977$,决定系数 $R^2=0.954$, $P = 0.007$,香型指数回归方程方差分析的 F 值达显著水平 $P \leq 0.05$;10 个显著因子回归系数的偏相关系数达显著水平,

(4) 计算后获得相应卷烟香型指数 Y 数值,作为卷烟香型判断数值,为卷烟的香型梯

度分类、品牌风格特征叶组配方的维护与研究开发、香精香料的参配,提供数据化的判断标准。

一种卷烟香型的检测判定方法

技术领域：

[0001] 本发明方法涉及一种卷烟香型检测判定方法，属于卷烟香型梯度定性、定量鉴别应用技术领域。为卷烟的香型梯度分类、品牌风格特征叶组配方的维护与研究开发、香精香料的参配，提供数据化的化学判断。

背景技术

[0002] 卷烟按其制作工艺一般分为四类：混合型、烤烟型、外香型、雪茄型。主料不同，口味不同，中国的卷烟一般为烤烟型；国外的卷烟一般为混合型。混合型由白肋烟、香料烟、烤烟等为原料，焦油含量低于烤烟型。混合型香烟和烤烟型香烟相比最大的优点就是香气量足而且焦油含量低。

[0003] 我国幅员辽阔，各地气候及土壤条件不同，生产出的烤烟原料在烟质特性上差异较大。20世纪50年代，根据烤烟吸食时的香气特点，将其分为三种类型，即清香型，中间香型，浓香型。

[0004] 关键的是，卷烟香型与烤烟香型特征的相似性：国内卷烟也有上述香型的相同性。在烟草行业，虽然对卷烟的香型类型没有明确的分型，但是，各地烟草公司的卷烟仍然带有烤烟香型的特征。例如，红塔的软玉溪卷烟就明显地带有清香型的特征，河南卷烟帝豪带有焦甜香韵；贵州卷烟黄果树带有烟草本香。同时，有些卷烟也有上述香型范围内的特殊香型香韵，例如：黄鹤楼（树苔香，属于清香型范围）。所以，卷烟在香型类型上也可以纳入香型类型的研究范围。

[0005] 卷烟香型与烤烟香型特征具有相似性，烤烟的香型特征如下：

[0006] ①清香型：香气清雅飘逸，具有清甜香韵，香气传感速度快，扩散力强，是给予良好香气感觉的重要因素，吃味舒适，烟味浓度较淡，地方性杂气较轻，劲头柔软至适中，代表类型云南，福建的烟叶。

[0007] ②中间香型：香气纯正稳定，烟草本香突出，香气传感速度中等，是卷烟产品的主体香气，吃味干净，烟味浓度较淡至较浓，地方性杂气有至较大，劲头柔软至较大，代表类型贵州、山东以及东北的烟叶。

[0008] ③浓香型：香气浓郁沉溢，具有焦甜香韵，香气传感速度较慢、绵长厚实，吃味舒适，地方性杂气很轻至较重，劲头适中，代表类型河南、湖南、安徽的烟叶。

[0009] 由于卷烟香型与烤烟香型特征具有相似性，有从清香型到浓香型的梯度含义，人们可以采用赋值的方法，将香型由定性指标转变成数值指标，数值从低值到高值，将清香型、中间香型和浓香型由小到大予以赋值。赋值的依据是以（软）玉溪卷烟和云南烟叶为清香型的典型代表，在统计学上根据分析出的化学成分和含量赋值的。

[0010] 卷烟香型也像烤烟香型一样，有一定的梯度：清香型——清偏中——中偏清——中间香型——中偏浓——浓偏中——浓香型。相应赋值为：1.8——2.13——2.46——2.8——3.13——3.46——3.8。

[0011] 刘钟祥等人曾提出根据嗅香、香气类型、烟味浓度、生理强度、口感等5个要素，结

合过去烟叶香气类型的划分,给烤烟型卷烟的香气类型分类定性。但所取要素人为因素大,是一种主观的卷烟香型定性判断,无卷烟致香物的定量判断,判断不够准确。可靠性差的缺点。

发明内容

[0012] 本发明目的在于克服上述现有技术的缺点,建立判断卷烟香型风格化学模型,为卷烟叶组配方香型(主要为清香型)提供香型物质调整的定性、定量技术参数,为卷烟的香型梯度分类、品牌风格特征叶组配方的维护与研究开发、香精香料参配数量,提供数据化的判断技术参数。

[0013] 本发明一种卷烟香型的检测判定方法,其特征在于步骤如下:

[0014] (1) 卷烟香型致香物萃取:用同时蒸馏萃取(SDE)优化萃取方法进行如下操作:在蒸馏瓶中,拟进行烟草致香物分析的烟丝样品 20 或 30 克,加入水 350 或 450ml,加入内标物质,以备蒸馏;在萃取瓶中,加入 40ml 二氯甲烷。

[0015] ①萃取时间:萃取剂使用二氯甲烷,水浴恒温 60℃,常规萃取方式进行 3 小时;

[0016] ②萃取温度:加热套蒸馏温度为 198℃ -200℃,使得沸腾剧烈,以便更完全地萃取半挥发性的物质;

[0017] ③ 按常规分离:在分液漏斗中,对萃取的二氯甲烷溶液加入过量的硫酸钠,比例是烟丝样品重量的 0.5 倍,让硫酸钠充分吸收萃取的二氯甲烷溶液中的水分,随后,先后各一次,用 10ml 二氯甲烷冲洗瓶,保证萃取物全部萃取;

[0018] ④ 按常规浓缩:将步骤(3)中的萃取剂浓缩至 0.5-0.4ml,回流至 1-1.1ml;

[0019] ⑤ 按常规将步骤(4)中制取的样品不过夜冷藏,直接上机进行气相色谱-质谱(GC-MS)的气质分析;

[0020] (2) 气相色谱质谱(GC-MS)定性、定量分析卷烟香型致香物。

[0021] 所述的气相色谱-质谱(GC-MS)条件:

[0022] 色谱柱:DB-5 (30m×0.25mm i. d. ×0.25 μ m d. f.);

[0023] 程序升温:按 4℃ /min 的加热速度,第一次升温到 40℃ 保温 2min,随后升温到 250℃,保温 10min;

[0024] 进样口:250℃;载气:He;柱头压:100kPa;

[0025] 分流比:30 : 1;进样量 1.0 μ L;

[0026] 传输线温度:250℃;

[0027] 离子源温度:150℃;

[0028] EI 能量:70eV;

[0029] 扫描范围:35 ~ 350u;

[0030] 内标:正十七烷;对采集到的图谱利用 NIST1.11 升级版谱库进行检索;采用面积归一法定量。

[0031] 分析的结果是:理论上峰图面积达 0.03% 以上的可以认为是一种物质,因为有些致香物的含量实际很少。15 种、多批次的不同品牌的卷烟,它们被分析出来的致香物种类一般在 300 种。有比较性的 116 种,用于统计分析 110 种。

[0032] (3)分析判定:采用步骤(2)获得的对卷烟致香物定性、定量分析出来的 10 种相关

性大的物质,代入能由 Matlab 软件进行逐步回归分析的下列公式:

[0033] 卷烟香型指数 $Y = -0.494 + 0.015 X_1$ (糠醛) + $0.321 X_2$ (2-环戊稀 1,4-二酮) + $0.072 X_3$ (苯甲醇, 苯醇) + $0.144 X_4$ (二氢猕猴桃内酯) - $0.003 X_5$ (巨豆三稀酮) - $0.169 X_6$ (肉豆蔻酸, 十四酸) - $0.161 X_7$ (苯甲酸苄酯、安息香酸苄酯) + $0.799 X_8$ (法尼基丙酮) - $0.025 X_9$ (棕榈酸甲酯) - $0.024 X_{10}$ (棕榈酸);

[0034] 该回归方程的复相关系数 $R=0.977$, 决定系数 $R^2=0.954$, $P = 0.007$, 香型指数回归方程方差分析的 F 值达显著水平 ($P \leq 0.05$); 10 个显著因子回归系数的偏相关系数达显著水平,

[0035] (4) 计算后获得相应卷烟香型指数 Y 数值, 作为卷烟香型判断数值, 为卷烟的香型梯度分类、品牌风格特征叶组配方的维护与研究开发、香精香料的参配, 提供数据化的判断标准。

[0036] 本发明 10 种与卷烟香型相关性很大的物质, 相互协调, 产生了卷烟主体香型; 通过 10 物质计算出的卷烟香型指数 Y , 作为判断卷烟香型的数值指标。

[0037] 本首创发明卷烟香型判断准确率在 86.67%。为卷烟的香型梯度分类、品牌风格特征叶组配方的维护与研究开发、香精香料的参配, 提供数据化的化学判断。

附图说明:

[0038] 下面结合附图、表格所示实施例作进一步说明, 但本发明保护范围不限于此实施例。

[0039] 图 1 为传统 SDE 萃取检测方法与本发明优化 SDE 萃取检测方法获得的数据对照柱状图。

[0040] 图 2 是本发明卷烟香型设定与计算结果的直方图。

具体实施方式

[0041] 图 1 说明: 在蒸馏温度为 198°C - 200°C, 萃取时间超过 3 个小时后, 萃取物没有增加, 采用本发明优化 SDE 萃取方法获得的至香物质已达到极限, 再延长萃取时间已无意义。

[0042] (1) 卷烟香型致香物萃取: 用同时蒸馏萃取(SDE) 优化萃取方法进行如下工艺:

[0043] 在蒸馏瓶中, 拟进行卷烟致香物分析的烟丝样品 20 或 30 克, 加入水 350 或 450ml, 加入内标物质, 以备蒸馏; 在萃取瓶中, 加入 40ml 二氯甲烷。

[0044] ① 萃取时间的延长: 萃取剂使用二氯甲烷, 水浴恒温 60°C, 萃取时间进行 3 小时; 比传统的(SDE) 延长 1 小时。萃取时间的延长, 有更多的时间萃取物质, 便于更完全、彻底地萃取物质。萃取时间超过 3 小时的, 与萃取时间 3 小时的物质萃取种类相似, 已无多大意义。

[0045] ② 萃取时蒸馏温度的提高: 加热套蒸馏温度为 198°C - 200°C, 使得沸腾剧烈, 以便更完全地萃取半挥发性的物质; 虽然水在 100°C 时已经沸腾, 水温不再升高, 但是, 在密闭的环境和加热套 198°C - 200°C 的条件下, 蒸馏瓶中水温有所增加, 便于萃取高沸点物质, 增加了萃取物质的种类。①②两个特点结果用附图 1 示意。

[0046] ③ 按常规分离水分: 在分液漏斗中, 对萃取的二氯甲烷溶液加入过量的硫酸钠, 比例是烟丝样品重量的 0.5 倍, 让硫酸钠充分吸收萃取的二氯甲烷溶液中的水分, 随后, 先后各一次, 用 10ml 二氯甲烷冲洗瓶, 保证萃取物全部萃取。

[0047] ④ 按常规浓缩 : 将步骤(3)中的萃取剂浓缩至 0.5ml 左右, 回流至 1ml 左右。

[0048] ⑤ 按常规将步骤(4)中制取的样品不过夜冷藏, 直接上机进行 GC-MS (气相色谱 - 质谱) 气质分析;

[0049] (SDE) 优化方法萃取致香物①②特点说明 :

[0050] ①萃取时间长 : 在同时蒸馏萃取法中使用二氯甲烷萃取剂, 水浴恒温 60℃, 萃取 3 小时。萃取时间长。②萃取时的蒸馏温度 200℃, 使得沸腾剧烈, 以便更完全地萃取半挥发性的物质。这一点在国内文献中未见报道过, 云南省科学技术情报研究院查新提供。产生特点的原因在于 : ①萃取时间的延长, 有更多的时间萃取物质, 便于更完全、彻底地萃取物质。萃取时间超过 3 小时的, 与萃取时间 3 小时的物质萃取种类相似, 已无多大意义。②萃取时蒸馏温度的提高 : 加热套蒸馏温度为 198℃ - 200℃, 使得沸腾剧烈, 以便更完全地萃取半挥发性的物质; 虽然水在 100℃ 时已经沸腾, 水温不再升高, 但是, 在密闭的环境和加热套 198℃ - 200℃ 的条件下, 蒸馏瓶中水温有所增加, 便于萃取高沸点物质, 增加了萃取物质的种类。

[0051] 上述(SDE)优化方法的优势在于比传统的方法能够萃取更多种类的致香物。原来, 许多研究者在烟草致香物的萃取中, 萃取时间有 2 小时、2.5 小时、3 小时; 蒸馏温度 100℃, 萃取出来的物质不够完全、彻底, 对低沸点化合物的捕集量大, 对高沸点化合物的捕集相对较弱, 一般萃取出来的烤烟物质, 在 42 - 80 种之间。采用烟草致香物同时蒸馏萃取 (SDE) 优化方法后, 对高沸点化合物的捕集量增加, 卷烟被萃取出来的物质第一批次就达 300 个左右, 可用于条件分析的 100 - 110 个。

[0052] (2) 气相色谱质谱 (GC-MS) 定性、定量分析卷烟致香物

[0053] 气相色谱质谱 (GC-MS) 条件 : 色谱柱 : DB-5 (30m × 0.25mm i. d. × 0.25 μ m d. f.)

[0054] 程序升温 : 40℃(2min) → 4℃/min → 250℃(10min); 进样口 : 250℃; 载气 : He; 柱头压 : 100kPa; 分流比 : 30 : 1; 进样量 1.0 μ L; 传输线温度 : 250℃; 离子源温度 : 150℃; EI 能量 : 70eV; 扫描范围 : 35 ~ 350u; 内标 : 正十七烷; 对采集到的图谱利用 NIST1.11 升级版谱库进行检索; 采用面积归一法定量。

[0055] 结果 : ①采用偏弱极性的 DB-5 色谱柱 (近 96% 填充物为中性物质、余下的为偏弱极性) 分离绝大部分的中性和弱极性物质, 这一点不同于国内文献报道的用 DB-5 色谱柱分离中性物质。

[0056] ②理论上卷烟致香成分达 300 种左右, 有比较性的 116 种, 可用于条件分析的 110 种。

[0057] 气质联用仪 (GC-MS) 分析出来的卷烟致香物种类。

[0058] 表 1: 卷烟样品分析出来的原始物质 (初始数据大约有 300 个左右; 有比较性的 116 种, 可用于统计分析的数据有 110 种)。

[0059]

二氯甲醚	542-88-1
甲苯	108-88-3
异戊烯醛	107-86-8
己醛	66-25-1
二甲基四氢呋喃-3-酮	3188-00-9
糠醛	1998-1-1

康醇(呋喃甲醇)	98-00-0
当归内酯	591-12-8
2-环戊稀1,4-二酮	930-60-9
青叶醛	6728-26-3
1,2-丙二醇	6214-1-3
乙二醇单丁醚	111-76-2
2-乙酰基呋喃	1192-62-7
2,2-氧化二乙酰氯	21062-20-4
吡啶-2-甲醛	1121-60-4
5-甲基-2-呋喃甲醇	3857-25-8
苯甲醛(安息香醛)	100-52-7
5-甲基糠醛	620-02-0
甲基庚烯烷	110-93-0
3-(2-羟乙基)吲哚	13475-82-6
葵烷	124-18-5
2-乙基己醇	104-76-7
吡咯-2-甲醛	1003-29-8
苯甲醇(苄醇)	100-51-6
苯乙醛	122-78-1
2-乙酰吡咯	1072-83-9
甲苯胺(N-甲基苯胺)	100-61-8
2-氨基-3,5-二氢-4-咪唑-4-酮	503-86-6
N,N-二甲基苯胺	121-69-7
芳樟醇,沉香醇,里那醇	78-70-6
苯乙醇	1960-12-8
十二烷	112-40-3
茴香醛	123-11-5
吲哚	120-72-9
三乙酸甘油酯	102-76-1
N-甲基-2-吡咯甲醛	1192-58-1
2,6,6-三甲基-2-环戊稀1,4-二酮	1125-21-9
二乙二醇单丁醚	54446-78-5
薄荷醇	15356-70-4
十二烷	112-40-3
2,3-二氢苯并呋喃	496-16-2
己酸二甲酯	627-93-0
4-乙烯基-2-甲氧基苯酚	7786-61-0
三乙酸甘油酯	102-76-1
烟碱	1954-11-5
二乙酸甘油酯	25395-31-7
E-5-异丙基-8-甲基-6,8-壬二烯-2-酮	54868-48-3
丁香酚,丁子香酚(酸)	97-53-0
1,3,5-三甲基-2-(1,3-丁间二稀基)萘	5732-00-3
香叶基丙酮	3796-70-1
B-大马酮	23696-85-7
1,2-二氢-1,5,8-三甲基萘	4506-36-9
十一烷	1120-21-4
长叶烯	475-20-7
紫罗烯	475-03-6
6-甲氧基-3-甲基香豆酮	29040-52-6
5,6-二甲基-2-苯并咪唑啉酮	2033-30-9
二氢猕猴桃内酯	15356-74-8

巨豆三稀酮 A	38818-55-2
巨豆三稀酮 B	38818-55-2
十六烷(鲸酯烷)	544 - 76 - 3
巨豆三稀酮 C	38818-55-2
磷酸三丁酯	126 - 73 - 8
巨豆三稀酮 D	38818-55-2
正十七烷	629 - 78 - 7
2,3 - 二氢 - 1,1,3 - 三甲基 - 3 - 苯基 - 1H 茜	3910 - 35 - 8
2,6,6 - 三甲基 - 2 - 环戊稀 1,4 - 二酮	52260-01-2
1 (二氢) 石脑油	30316 - 31 - 5
肉豆蔻酸(十四酸)	544 - 63 - 8
苯甲酸苄酯(安息香酸苄酯)	120 - 51 - 4
菲	1985-1-8
正十八烷	593 - 45 - 3
香根(草) 酮(岩兰酮)	54878 - 25 - 0
蒎烷	473-55-2
八氢 - 1,4 - 二甲基 - 1 - 异亚丙基萘	6813-21-4
正十五酸	1002 - 84 - 2
邻苯二甲酸二异丁酯	84 - 69 - 5
邻苯二甲酸二丁酯	84-74-2
7,10,13 - 十六碳三稀酸甲酯	1000336 - 38 - 7
正十九烷	629 - 92 - 5
法尼基丙酮	1117 - 52 - 8
棕榈酸甲酯	112 - 39 - 0
亚麻酸	463 - 40 - 1
1,2 - 苯并异噻唑	309735 - 29 - 3
亚麻酸甲酯	301 - 00 - 8
棕榈酸	1957-10-3
棕榈酸己酯 (十六酸己酯)	628 - 97 - 7
B- 檬香烯	515 - 13 - 9
萘, 卫生球	473 - 13 - 2
4 - 乙烯基 - 2 - 甲氧基苯酚	100159 - 38 - 2
5 甲基 - 3 - 【1 - 甲基己烯基】 - 环己烯	5208 - 51 - 5
10 - 甲基 - 十七碳酸甲酯	2490-25-7
亚油酸	60 - 33 - 3
亚麻酸己酯	1191 - 41 - 9
1,5- 二乙烯基 - 3 - 甲基 1 - 2 - 亚甲基环己烯	74742 - 35 - 1
香树烯	25246-27-9
5 - 甲基 - 3 - 异丙稀基 - 环己烯	56816 - 08 - 1
4- 十六碳烯 - 6 - 炔	74744 - 54 - 0
臭樟脑	473 - 13 - 2
二十烷	112 - 95 - 8
二十一烷	629 - 94 - 7
正二十七烷	593 - 49 - 7
二十八烷	630 - 02 - 4
三十烷	638 - 68 - 6
三十一烷	630 - 04 - 6
邻苯二甲酸单 (2- 乙基己基) 酯	4376-20-9
正三十四烷	14167 - 59 - 0
油酸酰胺, 油酰胺	301 - 02 - 0
邻苯二甲酸二异辛酯	27554-26-3
四十四烷	7098-22-8

[0060] (3)分析判定:采用对卷烟致香物定性、定量分析出来的10种相关性大的物质,代入由Matlab软件对步骤(2)获得的定性、定量分析出来的数据进行逐步回归分析得出的下列公式,进行卷烟香型的检测判定。

[0061] 卷烟香型指数 $Y = -0.494 + 0.015 X_1$ (糠醛)+ $0.321 X_2$ (2-环戊稀1,4-二酮)+ $0.072 X_3$ (苯甲醇, 苯醇)+ $0.144 X_4$ (二氢猕猴桃内酯)- $0.003 X_5$ (巨豆三稀酮)- $0.169 X_6$ (肉豆蔻酸,十四酸)- $0.161 X_7$ (苯甲酸苄酯、安息香酸苄酯)+ $0.799 X_8$ (法尼基丙酮)- $0.025 X_9$ (棕榈酸甲酯)- $0.024 X_{10}$ (棕榈酸)

[0062] 该回归方程的复相关系数 $R=0.977$,决定系数 $R^2=0.954$, $P=0.007$,香型指数回归方程方差分析的F值达显著水平($P \leq 0.05$);10个显著因子回归系数的偏相关系数达显著水平。

[0063] 在一个多元线性回归模型中,并不是所有的X(自变量)和Y(因变量)都有显著的线性关系。为解决如何从大量可能相关的自变量中挑选出与因变量Y有显著关系的部分自变量X的问题,采用逐步回归分析的方法就是一种有效的方法。

[0064] 逐步回归的基本思想是:对全部因变量按其对Y影响程度大小,采用偏回归平方的大小进行判断,从大到小地依次逐个地引入回归方程,并随时对回归方程当时所含的全部变量进行检验,看其是否仍然显著,如不显著就将其剔除,直到回归方程中所含的所有变量对Y的作用都显著,才考虑引入新的变量。再在剩下的未选因子中,选出对Y作用最大者,检验其显著性,如显著,引入方程,不显著,则不引入。对已经引入的变量逐个检验,将不显著的剔出,这样就保证了最后得到的变量子集中所有的变量都是显著的。这样经过若干步,就得到了最优子集。

[0065] 多元线性回归方程表示为:

$$[0066] Y = a + b_1 X_1 + b_2 X_2 + \dots + b_n X_n$$

[0067] 在多元线性回归分析中,应该使得估计值 \hat{y} 与观测值y之间的残差在所有样本点上达到最小。我们用判定系数,或称可决系数,来评价多元线性回归模型的拟合程度。

$$[0068] R^2 = \frac{SSR}{SST} = \frac{\sum (\hat{y}_i - \bar{y})^2}{\sum (y_i - \bar{y})^2}$$

[0069] 在此,SSR为回归偏差,SST为总偏差,总离差平方和的分解公式为:总偏差(SST)=回归偏差(SSR)+剩余偏差(SSE)。

$$[0070] \text{而 } R = \frac{\sum (y_i - \bar{y})(\hat{y}_i - \bar{y})}{\sqrt{\sum (y_i - \bar{y})^2 \sum (\hat{y}_i - \bar{y})^2}} \text{ 为复相关系数,它是测量一个变量(例如因变}$$

量香型指数Y)与其它多个变量(例如自变量分析数据X1、X2、X3、Xn、Xn+1……)之间线性相关程度的指标。

[0071] 卷烟香型致香物统计分析也是基于逐步回归分析的原理、方法和步骤。本发明采用Matlab软件对卷烟致香物定性、定量分析出来的数据进行逐步回归分析,建立Y(因变量)与X(自变量)的“最优”回归方程。以15个卷烟样品多批次分析的110种香气成分的含量为自变量,以香型(赋值)为因变量进行逐步回归分析,建立了以上方程,即“香型指数”

方程。

[0072] (4) 计算后获得相应卷烟香型指数 Y 数值,作为卷烟香型判断数值,为卷烟生产的香型梯度分类、品牌风格特征叶组配方的维护与研究开发、香精香料的参配,提供数据化的判断标准,卷烟香型判断准确率在 86.67%。此判断方法属于首创。本发明给出附图 2 直方图进行说明。

[0073] 表 2 :15 种卷烟香型指数设定与计算结果对比表格

[0074]

分析物质 (ug/g)	糠醛	2—环戊稀 (1, 4—二酮)	苯甲醇 (苄醇)	二氢猕猴桃内酯	巨豆三稀酮	肉豆蔻酸(十四酸)	苯甲酸(安息香酸)	法尼基丙酮	棕榈酸甲酯	棕榈酸	计算结果	香型设定
玉溪	4.53	3.43	1.35	2.39	10.60	2.08	1.29	3.43	4.35	55.15	1.84	1.60
红塔 100	5.14	2.45	3.63	1.60	12.40	0.66	0.00	2.26	2.69	31.78	1.69	1.80
红塔 1956	7.67	5.32	2.00	3.32	13.41	2.77	0.00	3.04	3.46	80.40	1.86	1.80
红塔 150	5.24	3.51	1.37	1.82	10.03	2.42	0.00	2.78	3.28	43.91	1.72	1.70
云烟	6.18	3.06	1.62	2.19	14.37	1.81	3.00	3.81	4.37	47.03	1.99	1.80
黄果树	8.47	4.97	2.07	3.26	13.15	2.49	1.01	3.97	5.57	61.00	2.79	2.80
帝豪	7.58	7.07	2.56	5.54	14.74	5.54	0.00	5.03	5.11	74.97	3.98	3.80
芙蓉王	5.28	2.75	2.38	2.68	8.71	2.23	1.94	4.24	9.38	0.00	3.47	3.46
利群	0.33	3.94	1.67	3.60	11.30	3.68	1.67	5.69	7.95	65.23	3.27	3.40
泰山	0.87	3.56	8.54	3.63	14.52	2.29	0.00	3.70	4.44	55.18	2.89	2.80
白沙	5.62	5.74	3.29	2.56	13.58	2.10	1.53	3.81	4.15	35.39	3.48	3.46
黄鹤楼	6.18	4.90	2.10	4.33	14.27	0.00	6.56	4.14	8.85	55.73	2.60	2.60
双喜	7.24	5.83	3.21	4.04	25.20	2.76	1.47	3.46	6.99	44.24	3.05	3.00
苏烟	7.99	5.06	1.83	3.15	12.83	3.59	1.39	3.30	2.79	63.40	2.01	2.20
中华	7.84	5.79	4.77	5.25	21.54	4.09	0.00	4.50	3.68	74.02	3.55	3.60

[0075] (5) 卷烟的香型梯度与来自不同产区的烤烟香型梯度基本相似。云南烤烟是典型的清香型烤烟,则云南卷烟以玉溪(软)、云烟也是典型的清香型卷烟代表;贵州烤烟是中间香型烤烟,则贵州黄果树卷烟是中间香型卷烟;湖南烤烟是浓偏中香型烤烟,则湖南芙蓉王卷烟是浓偏中香型卷烟;河南烤烟是典型的浓香型烤烟,则河南卷烟帝豪也是典型的浓香型卷烟;中华卷烟是近浓香型的特殊卷烟。

[0076] 由于烟草致香物(SDE)优化检测方法的运用,萃取的烟草致香物种类比传统的(SDE)方法更多,就有了烟草香型风格特征在化学物质上的定性定量分析的较好基础,同时,选择有效的统计学分析方法,从而建立起卷烟香型检测判断方法,属于首创,因而,应该申请专利保护。

[0077] 本首创发明卷烟香型鉴别方法的卷烟香型指数 Y 中的化学成分糠醛是呋喃环系衍生物,呋喃环上连接一个甲醛基,又名呋喃甲醛。甲醛基是一个基团,用 R 表示。凡是有一个 R 或几个 R 的呋喃环系衍生物,都应该得到保护。二氢猕猴桃内酯是苯并呋喃酮类化合物,其衍生物都应该得到保护。从 C5 到 C18 的脂肪酸及其酯类化合物都应该得到保护。芳香醇及其酯类化合物都应该得到保护。

[0078] 对于卷烟香型鉴别方法的卷烟香型指数 Y 的进一步完善,本单位创立者有进一步的解释权。

[0079] 任何个人、组织、单位作为研究者时,不得间接地、微调地处理卷烟香型指数 Y 方程体系后,作为自己的实用和发明创造,除非自己的方程式中至少有 5 个物质(除去同分异构体)与现有的卷烟香型指数 Y 的物质不相同。

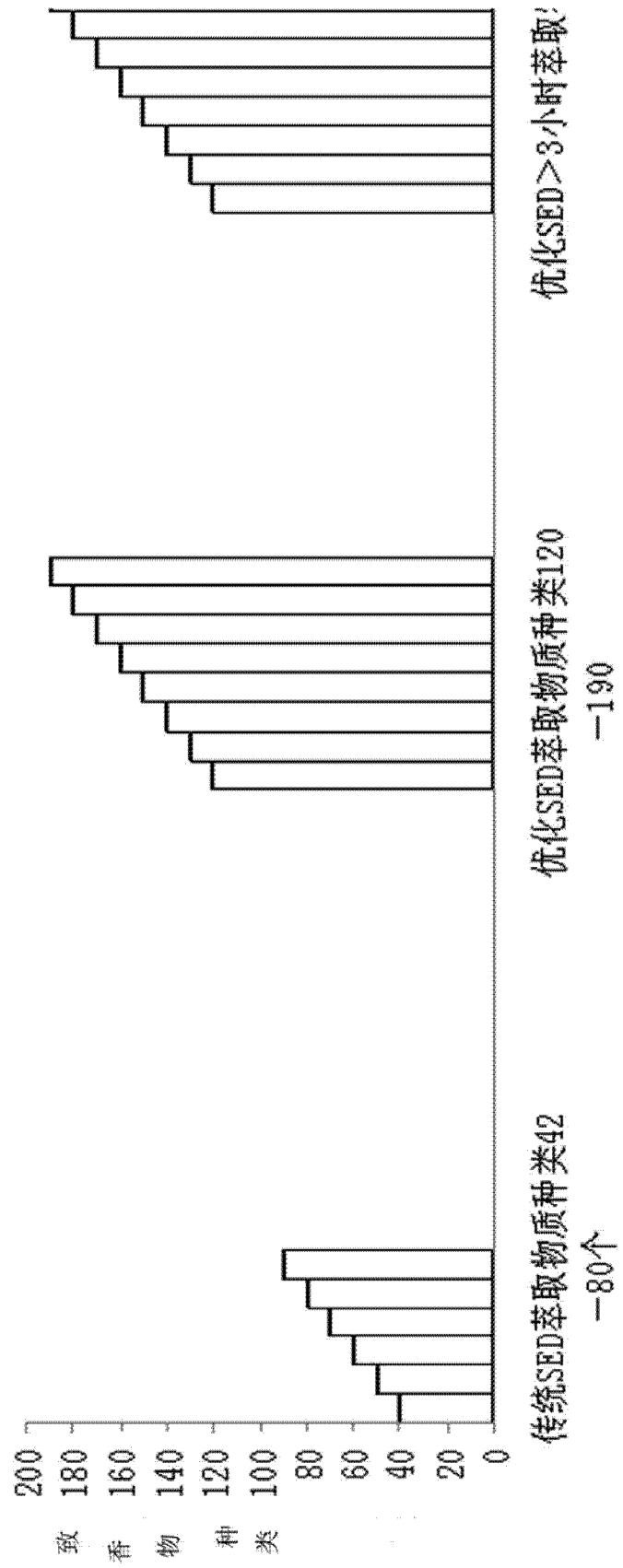


图 1

