

李娥贤, 李超, 余腾琼, 等. 不同香型烟叶生物碱的差异规律 [J]. 福建农业学报, 2017, 32 (9): 987—995.

LI E-X, LI C, YU T-Q, et al. Alkaloids in Tobaccos of Different Aromatic Characteristics [J]. *Fujian Journal of Agricultural Sciences*, 2017, 32 (9): 987—995.

不同香型烟叶生物碱的差异规律

李娥贤¹, 李超², 余腾琼¹, 雷涌涛¹, 陶永萍³, 李学卫⁴, 丁铭^{1*}

(1. 云南省农业科学研究院生物技术与种质资源研究所, 云南 昆明 650223;

2. 云南中烟工业有限责任公司技术中心, 云南 昆明 650106;

3. 云南省烟草公司昭通市公司, 云南 昭通 657000;

4. 云南省烟草公司丽江市公司, 云南 丽江 674100)

摘要: 为研究不同香型烟叶中生物碱的差异规律, 运用经典的抽样方法, 从国内 15 个省份中的 71 个市和县收集 2011—2013 年间 3 类香型烤烟烟叶共 543 个样本。根据现行相关的行业标准文献方法进行定量检测, 并采用 *F*-假设检验、*Q*-型聚类分析和判别分析等数理统计手段研究了不同香型烟叶中生物碱含量的差异规律。结果表明: 2011 年和 2012 年度 3 种香型烟叶中新烟草碱和 2, 3'-联吡啶含量差异水平较为相似, 可以用来区分不同香型烟叶; 烟叶中假木贼碱是 2013 年度不同香型的特征物质, 可以用来区分清香和浓香型烟叶。不同年度 3 种香型中 6 种生物碱物质的含量均可以聚成 3 类; 采用烟碱、降烟碱、麦斯明、假木贼碱、新烟草碱和 2, 3'-联吡啶等较少数的成分指标的含量来对 3 类香型烟叶样本进行模式识别和判定, 回判及预测正确率分别为 55.7%~71.6%、50.0%~69.8%。

关键词: 卷烟; 生物碱; 差异规律; 判别分析; *Q*-型聚类分析

中图分类号: TS 41⁺1

文献标识码: A

文章编号: 1008—0384 (2017) 09—987—09

Alkaloids in Tobaccos of Different Aromatic Characteristics

LI E-xian¹, LI Chao², YU Teng-qiong¹, LEI Yong-tao¹, TAO Shui-ping³, LI Xue-wei⁴, DING Ming^{1*}

(1. *Yunnan Academy of Agricultural Sciences, Institute of Biotechnology and Genetic Resources, Kunming, Yunnan 650223, China*; 2. *Technology Center of Yunnan Tobacco Industry Co., Ltd., Kunming, Yunnan 650106, China*; 3. *Zhaotong, Yunnan 657000, China*; 4. *Lijiang, Yunnan 674100, China*)

Abstract: Alkaloids in tobaccos of different aromatic classifications were compared. Standard sampling method was employed to collect 543 flue-cured tobacco leaf specimens from 71 cities/counties in 15 provinces in China during 2011 and 2013. The samples were analyzed using the current industry methods, *F*-hypothesis testing, *Q*-clustering and discriminant analyses, as well as statistic methodology. The results showed that, between 2011 and 2012, the differences on the contents of and 2, 3'-bipyridyl in the 3 categories of tobaccos were similar, and could be used for differentiating the varieties; while anabaseine found in 2013 was a characteristic substance that could be used to distinguish between the lightly and the strongly aromatic types of tobaccos. In those years, the 6 alkaloid compounds tested in the 3 categories of tobaccos could be clustered into 3 groups. By using the contents of nicotine, reduced nicotine, Mai Siming, anabaseine, , and 2, 3'-bipyridine as indicators, the 3 aromatically different classifications of tobaccos could be identified with a discrimination rate of 55.7—71.6% and an accuracy of 50.0—69.8%.

Key words: cigarettes; alkaloids; pattern of differences; discriminant analysis; *Q*-clustering analysis

收稿日期: 2017—03—20 初稿; 2017—07—28 修改稿

作者简介: 李娥贤 (1985—), 硕士, 工程师, 主要从事分析化学、生物资源工作 (E-mail: 318475043@qq.com);

并列第一作者: 李超 (1985—), 硕士, 工程师, 主要从事烟草化学分析工作

* 通讯作者: 丁铭 (1973—), 博士, 研究员, 主要从事植物病毒研究、烟草质量监控工作 (E-mail: mingd73@163.com)

基金项目: 中国烟草总公司云南省公司科技计划项目 (2015YN21); 云南中烟工业公司科技项目 (2015CP08)

清香型、浓香型和中间香型 3 种类别是烤烟烟叶燃烧时产生香气所呈现出的 3 种特质^[1-4]。卷烟的感官风格特征很大程度上取决于烟叶的这几种香型特质，其是卷烟配方设计与工艺优化的重要因素之一，也是保持卷烟产品感官品质稳定的核心因素^[5]。烟叶的香型受其所生长的自然环境的影响甚大，不同产地的烟叶往往呈现出不同的香型特质^[6]。近代研究表明，烟叶的内在化学组成及含量对其香型能产生根本影响，所以，长久以来剖析不同香型烟叶的化学组成和感官特质之间的关联成为科技工作者孜孜以求的目标^[7-9]。目前，对于影响烤烟香型的各种因素的研究已有了较多的报道，主要集中于研究烤烟烟叶化学组成差异^[10-13]、不同部位特征^[14-15]和不同品种对香型产生的影响^[16-18]。有关于烤烟烟叶种植区域分布状况及 3 种香型烟叶化学组成间的关联研究虽然也有少量报道^[19-21]，但始终存在分析方法片面单一、所收集的样本数量达不到建模需求、数理模型的适用性未

经验证，研究内容不够深入完善等问题。所以，通过 *F*-显著性检验检验、*Q*-型系统聚类 and 判别分析等多种统计分析手段^[22-24]联用的方式，对 3 种香型烟叶进行判定和评价，可以为卷烟配方的设计和烤烟种植区域规划提供技术支撑。

1 材料与方法

1.1 试验材料

试验运用经典抽样的试验方法，从国内 15 个省份中 71 个市或县收集 2011—2013 年的烤烟烟叶样本，合计 543 个烟叶样本。2011—2013 年各年份所收集的烟叶样本数量分别为：180、169 和 194 个。根据相关行业及国家的感官评吸标准可以对这些烟叶的香型风格特征做出有效的主观判别，判定结果为：浓香型烟叶样本数量为 189 个，清香型烟叶样本数量为 177 个，中间香型烟叶样本数量为 177 个，具体情况参见表 1。

表 1 2011—2013 年烤烟烟叶样品的地区数量描述
Table 1 Number of flue-cured tobacco leaf samples, 2011—2013

烟叶 香型	样品数量 /个	采集的省份	采样的市(县)
清香型	177	云南、福建、贵州、四川	楚雄禄丰、毕节威宁、玉溪江川、玉溪华宁、文山砚山、三明宁化、三明泰宁、曲靖陆良、黔西南兴仁、曲靖师宗、黔东南天柱、普洱宁洱、普洱墨江、攀枝花米易、龙岩永定、南平建阳、龙岩长汀、六盘水盘县、凉山会理、临沧临翔、昆明宜良、红河泸西、红河建水、大理南涧、大理祥云
中间香型	177	贵州、湖北、湖南、辽宁、陕西、重庆、山东、黑龙江	张家界桑植、遵义、湘西凤凰、武隆、宜昌兴山、巫山、潍坊临朐、铜仁德江、黔东南凯里、黔南贵定、牡丹江宁安、临沂蒙阴、彭水、汉中南郑、临沂费县、怀化靖州、恩施利川、恩施咸丰、贵阳开阳、丹东宽甸、安康旬阳、毕节黔西、安顺西秀、
浓香型	189	河南、广东、安徽、湖南、江西、山东、陕西	宝鸡陇县、郴州桂阳、赣州信丰、漯河临颍、南阳内乡、平顶山宝丰、南阳方城、平顶山郏县、三门峡灵宝、商洛洛南、韶关南雄、皖南泾县、皖南旌德、皖南宣州、潍坊昌乐、潍坊高密、潍坊诸城、许昌襄县、延安富县、永州江华、驻马店确山、驻马店泌阳、长沙浏阳

1.2 试验方法

1.2.1 烤烟烟叶化学成分含量的检测方法 主要对浓香型、清香型和中间香型烟叶样本中 6 种生物碱（烟碱、降烟碱、麦斯明、假木贼碱、新烟草碱、2，3'-联吡啶）成分含量根据现行的国家和行业标准进行定量测定。

1.2.2 统计建模方法 采用 Chempattern 软件（科迈恩科技有限公司，中国）对 3 种香型烤烟烟叶样品中 6 种生物碱物质的含量进行监测分析。采用多元因子分析（MFA）、*F*-假设检验和 *Q*-系统聚类分析手段来探索不同香型烟叶样品中的生物碱差异。

2 结果与分析

2.1 3 种烤烟香型中各生物碱成分的 *F* 检验

2.1.1 2011 年度烟叶中 6 种生物碱的含量的 *F* 检验 对 2011 年度 3 种香型烟叶中 6 种生物碱物质的含量数据进行 *F* 检验，比较其显著性水平。2011 年 3 种香型烟叶中 6 种生物碱指标的 *F* 检验统计结果参见表 2，通过对各指标物质含量的 *F* 检验可知，烟碱在各种香型烟叶中的含量不存在显著性差异；降烟碱、麦斯明、假木贼碱在浓香型烟叶中存在显著性差异或极显著性差异；新烟草碱在 3 种香型烟叶两两比较中均存在极显著性差异；2，3'-联吡啶在 3 种香型烟叶两两香型烟叶比较中均

存在显著性或极显著性差异。6 种生物碱在其他两两比较中均不存在显著性差异。所以，在 2011 年的烟叶中新烟草碱和 2，3'-联吡啶是不同香型的特

征物质，可以用来区分不同香型烟叶，而降烟碱、麦斯明、假木贼碱可以用来区分浓香型烟叶和中间香型烟叶。

表 2 2011 年 3 种香型烤烟烟叶样品 6 种生物碱物质的 *F* 检验^①
Table 2 F-test on 6 alkaloids in 3 categories of tobaccos in 2011 ^①

序号	检测成分	对比香型	df ₁	df ₂	<i>F</i> 值	<i>f</i> 单尾 临界值	<i>P</i> (<i>F</i> ≤ <i>f</i>) 单尾	显著性 程度
1	烟碱	清—浓	66	65	0.077	3.912	0.782	—
		浓—中	65	49	3.916	3.923	0.050	—
		中—清	49	66	2.569	3.925	0.112	—
2	降烟碱	清—浓	66	65	6.133	3.915	0.015	*
		浓—中	65	49	1.424	3.926	0.235	—
		中—清	49	66	1.243	3.925	0.267	—
3	麦斯明	清—浓	66	65	6.260	3.915	0.014	*
		浓—中	65	49	2.152	3.926	0.145	—
		中—清	49	66	0.386	3.925	0.536	—
4	假木贼碱	清—浓	66	65	3.465	3.915	0.065	—
		浓—中	65	49	8.912	3.926	0.003	**
		中—清	49	66	0.690	3.925	0.408	—
5	新烟草碱	清—浓	66	65	0.051	3.915	0.821	—
		浓—中	65	49	13.095	3.926	<0.0001	**
		中—清	49	66	12.185	3.925	<0.0001	**
6	2，3'-联吡啶	清—浓	66	65	13.261	3.915	<0.0001	**
		浓—中	65	49	41.096	3.926	3.5511E-09	**
		中—清	49	66	5.422	3.925	0.022	*

注：①显著性程度：当 $P>0.025$ 时，表示为—，没有显著性差异；当 $0.01<P\leq 0.025$ 时，表示为*，存在显著性差异；当 $P\leq 0.01$ 时，表示为**，存在极显著性差异。表 3~4 同。

2.1.2 2012 年度烟叶中 6 种生物碱的含量的 *F* 检验 对 2012 年度 3 种香型烟叶中 6 中生物碱物质的含量数据进行 *F* 检验，比较其显著性水平。2012 年 3 种香型烟叶中 6 种生物碱指标的 *F*-检验统计结果参见表 3，通过对各指标物质含量的 *F* 检验可知，新烟草碱在清香型烟叶和浓香型烟叶中存在极显著性差异，在中间香型烟叶和清香型烟叶中存在显著性差异；2，3'-联吡啶在浓香型烟叶和中间香型烟叶中存在极显著性差异，在中间香型烟叶和清香型烟叶中存在显著性差异。6 种生物碱在其他两两香型烟叶比较中均不存在显著性差异。所以，在 2012 年的烟叶中新烟草碱和 2，3'-联吡啶也是不同香型的特征物质，分别可以用来区分浓香

型烟叶和清香型烟叶、清香型烟叶和中间香型烟叶、中间香型烟叶和浓香型烟叶。
2.1.3 2013 年度烟叶中 6 种生物碱的含量的 *F* 检验 对 2013 年度 3 种香型烟叶中 6 中生物碱物质的含量数据进行 *F* 检验，比较其显著性水平。2013 年 3 种香型烟叶中 6 种生物碱指标的 *F* 检验统计结果参见表 4，通过对各指标物质含量的 *F* 检验可知，仅有假木贼碱的含量在清香型和浓香型烟叶存在显著性差异，6 种生物碱在其他两两香型烟叶比较中均不存在显著性差异。所以，在 2013 年的烟叶中假木贼碱是不同香型的特征物质，可以用来区分清香型烟叶和浓香型烟叶。

表 3 2012 年 3 种香型烤烟烟叶样品 6 种生物碱物质的 *F* 检验
Table 3 F-test on 6 alkaloids in 3 categories of tobaccos in 2012

序号	检测成分	对比香型	df ₁	df ₂	<i>F</i> 值	<i>f</i> 单尾 临界值	<i>P</i> (<i>F</i> ≤ <i>f</i>) 单尾	显著性 程度
1	烟碱	清—浓	46	60	1.888	3.932	0.172	—
		浓—中	60	63	0.203	3.919	0.653	—
		中—清	63	46	0.797	3.930	0.374	—
2	降烟碱	清—浓	46	60	1.726	3.932	0.192	—
		浓—中	60	63	0.030	3.919	0.864	—
		中—清	63	46	1.558	3.930	0.215	—
3	麦斯明	清—浓	46	60	0.546	3.932	0.461	—
		浓—中	60	63	0.593	3.919	0.443	—
		中—清	63	46	0.004	3.930	0.948	—
4	假木贼碱	清—浓	46	60	0.933	3.932	0.336	—
		浓—中	60	63.000	3.082	3.919	0.082	—
		中—清	63	46.000	0.411	3.930	0.523	—
5	新烟草碱	清—浓	46	60.000	19.838	3.932	<0.0001	**
		浓—中	60	63.000	4.386	3.919	0.038	—
		中—清	63	46.000	5.827	3.930	0.017	*
6	2,3'-联吡啶	清—浓	46	60.000	0.279	3.932	0.598	—
		浓—中	60	63.000	9.999	3.919	0.002	**
		中—清	63	46.000	5.205	3.930	0.025	*

表 4 2013 年 3 种香型烤烟烟叶样品 6 种生物碱物质的 *F* 检验
Table 4 F-test on 6 alkaloids in 3 categories of tobaccos in 2013

序号	检测成分	对比香型	df ₁	df ₂	<i>F</i> 值	<i>f</i> 单尾 临界值	<i>P</i> (<i>F</i> ≤ <i>f</i>) 单尾	显著性 程度
1	烟碱	清—浓	65	64	0.411	3.916	0.523	—
		浓—中	64	65	0.483	3.916	0.488	—
		中—清	65	65	0.011	3.915	0.918	—
2	降烟碱	清—浓	65	64	1.175	3.916	0.280	—
		浓—中	64	65	0.284	3.916	0.595	—
		中—清	65	65	0.223	3.915	0.638	—
3	麦斯明	清—浓	65	64	0.811	3.916	0.369	—
		浓—中	64	65	0.785	3.916	0.377	—
		中—清	65	65	0.001	3.915	0.977	—
4	假木贼碱	清—浓	65	64	0.355	3.916	0.552	—
		浓—中	64	65	0.039	3.916	0.844	—
		中—清	65	65	0.612	3.915	0.435	—
5	新烟草碱	清—浓	65	64	5.300	3.916	0.023	*
		浓—中	64	65	2.801	3.916	0.097	—
		中—清	65	65	0.257	3.915	0.613	—
6	2,3'-联吡啶	清—浓	65	64	1.186	3.916	0.278	—
		浓—中	64	65	3.540	3.916	0.062	—
		中—清	65	65	1.044	3.916	0.309	—

2.2 3 种烤烟香型烟叶 6 种生物碱的系统聚类分析
分别对 2011—2013 年各年度 3 种香型烟叶中

6 种生物碱物质的含量数据对照香型进行 Q-型系
统聚类分析, 来表征不同年度的烟叶香型情况。

2.2.1 2011年度烟叶中6种生物碱的Q-型聚类分析 对2011年度3种香型烟叶采用Q-型系统聚类方式进行分析,运用组间链接的聚类方式,采用投影区间(0—1)的数据标准化方法,欧式距离(Euclidean Distance),可探索不同香型样品的特征状况,见图1~3。由聚类的谱系图可知,3种香型6种生物碱的含量均可以聚成3类。具体为:清香型烟叶:①烟碱、假木贼碱、新烟草碱;②麦斯明、2,3'-联吡啶;③降烟碱。中间香型烟叶:①烟碱、降烟碱、2,3'-联吡啶;②麦斯明;③假木贼碱、新烟草碱。浓香型烟叶:①烟碱、降烟碱、2,3'-联吡啶;②麦斯明;③假木贼碱、新烟草碱。

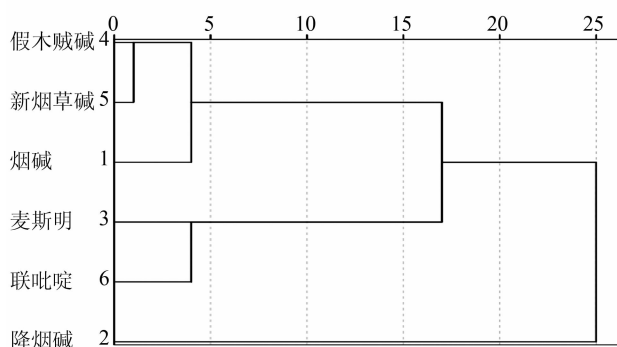


图1 2011年清香型烟叶6种生物碱Q-聚类谱系

Fig. 1 Q-clustering pedigrees of 6 alkaloids in lightly aromatic tobaccos in 2011

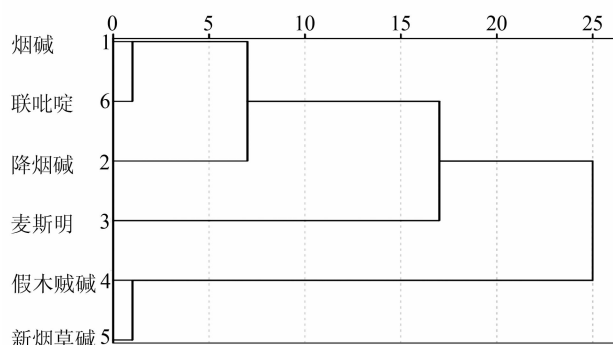


图2 2011年中间香型烟叶6种生物碱Q-聚类谱系

Fig. 2 Q-clustering pedigrees of 6 alkaloids in mildly aromatic tobaccos in 2011

2.2.2 2012年度烟叶中6种生物碱的Q-型聚类分析 对2012年度3种香型烟叶采用Q-型系统聚类方式进行分析,运用组间链接的聚类方式,采用投影区间(0—1)的数据标准化方法,欧式距离(Euclidean Distance),可探索不同香型样品的特征状况,如图4~6所示。从聚类谱系图可知,3种香型6种生物碱的含量均可以聚成3类。具体

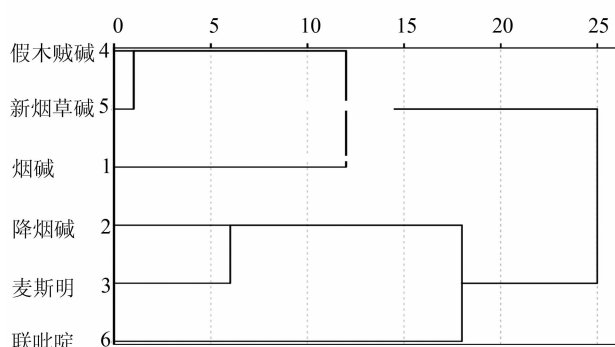


图3 2011年浓香型烟叶6种生物碱Q-聚类谱系

Fig. 3 Q-clustering pedigrees of 6 alkaloids in strongly aromatic Luzhou tobacco in 2011

为:清香型烟叶:①烟碱、假木贼碱、2,3'-联吡啶;②麦斯明;③新烟草碱、降烟碱。中间香型烟叶:①烟碱、假木贼碱、新烟草碱;②降烟碱、麦斯明;③2,3'-联吡啶。浓香型烟叶:①烟碱、假木贼碱、2,3'-联吡啶;②麦斯明;③降烟碱、新烟草碱。

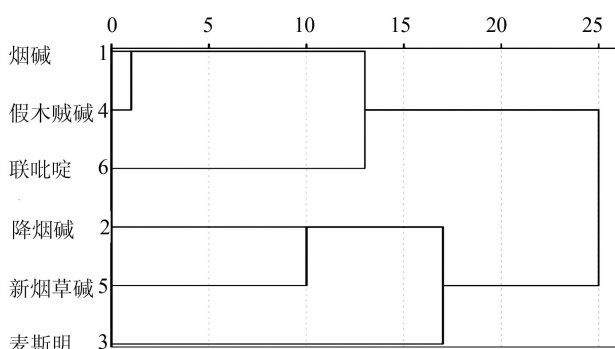


图4 2012年清香型烟叶6种生物碱Q-聚类谱系

Fig. 4 Q-clustering pedigrees of 6 alkaloids in lightly aromatic tobaccos in 2012

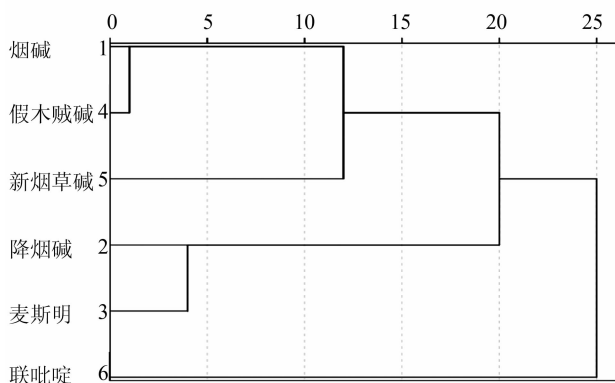


图5 2012年中间香型烟叶6种生物碱Q-聚类谱系

Fig. 5 Q-clustering pedigrees of 6 alkaloids in mildly aromatic tobaccos in 2012

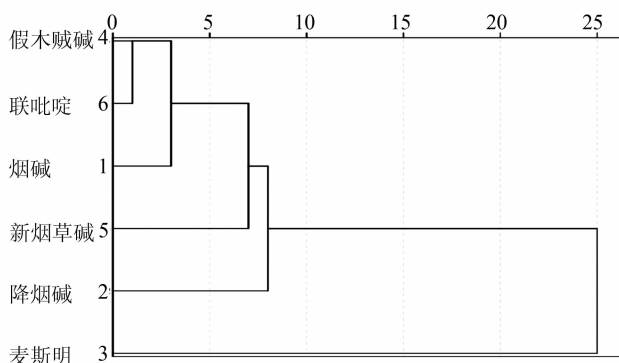


图 6 2012 年浓香型烟叶 6 种生物碱 Q-聚类谱系

Fig. 6 Q-clustering pedigrees of 6 alkaloids in strongly aromatic Luzhou tobacco in 2012

2.2.3 2013 年度烟叶中 6 种生物碱的 Q-型聚类分析 对 2013 年度 3 种香型烟叶进行 Q-型系统聚类分析, 数据标准化方法采用投影区间 (0—1), 聚类方式采用组间链接, 测量区间为欧式距离 (Euclidean Distance), 可分香型探索不同样品的特征状况, 见图 7~9。从聚类谱系图可知, 3 种香型 6 种生物碱的含量均可以聚成 3 类。具体为: 清香型烟叶: ①烟碱、假木贼碱、2, 3'-联吡啶; ②降烟碱、麦斯明; ③新烟草碱。中间香型烟叶: ①烟碱、假木贼碱、新烟草碱; ②降烟碱、麦斯明; ③2, 3'-联吡啶。浓香型烟叶: ①烟碱、降烟碱、2, 3'-联吡啶; ②麦斯明; ③假木贼碱、新烟草碱。

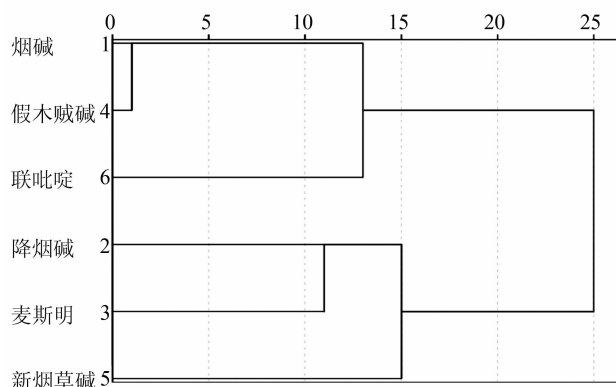


图 7 2013 年清香型烟叶 6 种生物碱 Q-聚类谱系

Fig. 7 Q-clustering pedigrees of 6 alkaloids in lightly aromatic tobaccos in 2013

2.3 6 种生物碱对 3 种烤烟香型烟叶的判别分析

分别对 2011—2013 年各年度 3 种香型烟叶中 6 种生物碱物质的含量数据对照香型进行了定量判别分析, 并构建了相应的不同年度烤烟烟叶香型的定量判别模型。

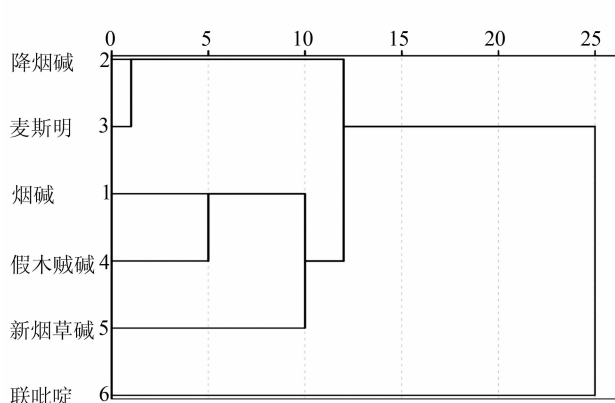


图 8 2013 年中间香型烟叶 6 种生物碱 Q-聚类谱系

Fig. 8 Q-clustering pedigrees of 6 alkaloids in mildly aromatic tobaccos in 2013

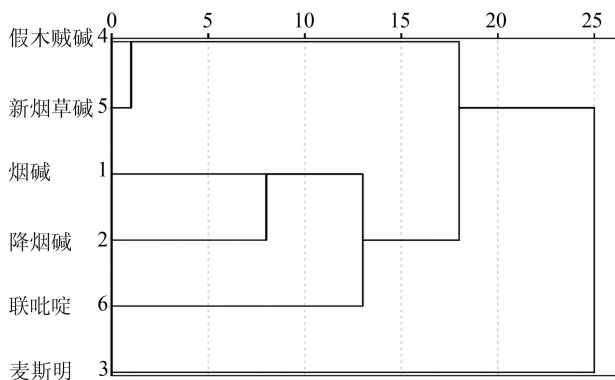


图 9 2013 年浓香型烟叶 6 种生物碱 Q-聚类谱系

Fig. 9 Q-clustering pedigrees of 6 alkaloids in strongly aromatic Luzhou tobacco in 2013

2.3.1 2011 年度烟叶中 6 种生物碱对烟叶香型的定量判别分析 以 3 种香型烟叶中 6 种生物碱的含量为自变量来对烟叶的 3 种香型进行定量判别分析。采用香型为分组变量, 并进行赋值 (1=清香、2=浓香、3=中间香)。所有自变量均计入计算, 使用的矩阵为组内相关矩阵, 构建 Fisher 定量判别函数, 定量判别函数的表达式可由标准化的判别函数系数矩阵写出。具体表达式为: $F_1 = -0.722x_1 + 0.509x_2 - 0.318x_3 + 0.207x_4 - 0.856x_5 + 1.600x_6$; $F_2 = 0.311x_1 - 0.922x_2 + 0.142x_3 - 1.423x_4 + 1.602x_5 + 0.603x_6$ (x_1 = 烟碱的含量、 x_2 = 降烟碱的含量、 x_3 = 麦斯明的含量、 x_4 = 假木贼碱的含量、 x_5 = 新烟草碱的含量、 x_6 = 2, 3'-联吡啶的含量)。对最初的 180 个样本各自所属的香型类别通过判别函数进行回判和留一交叉验证, 结果参见表 5, 从中可知, 初始分组案例中样本留一交叉验证正确率为 60.6%, 回判正确率为 65.6%。双坐投

影图可通过样本非标准化的 Fisher 函数计算得到的 Z 得分作出, 见图 10, 从中可知, 3 种不同香型的烟叶样本可投影至平面的不同区域, 区域间虽有重叠现象但并不严重。因此, 此种定量判别模型可对不同烟叶样品的香型进行分类和判定。

表 5 2011 年不同烟叶样本判别分类结果
Table 5 Classification of tobacco samples in 2011

项目		香型	预测组成员			合计
			清	浓	中	
初始	计数	清	44	16	6	66
		浓	16	37	12	65
		中	8	4	37	49
	%	清	66.7	24.2	9.1	100.0
		浓	24.6	56.9	18.5	100.0
		中	16.3	8.2	75.5	100.0
交叉验证 ^①	计数	清	43	16	7	66
		浓	20	32	13	65
		中	9	6	34	49
	%	清	65.2	24.2	10.6	100.0
		浓	30.8	49.2	20.0	100.0
		中	18.4	12.2	69.4	100.0

注:①仅对案例样本进行交叉验证;②已对交叉验证分组案例中的 60.6% 个进行了正确分类;③已对初始分组案例中的 65.6% 个进行了正确分类。

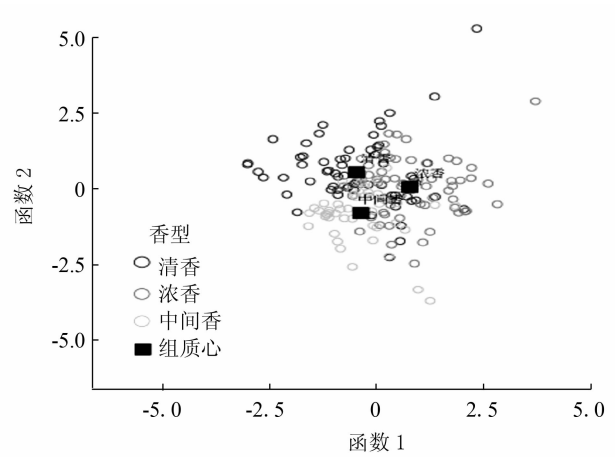


图 10 典型判别函数的双坐标投影

Fig. 10 Two-coordinate projection of a typical discriminant function for Table 5

2.3.2 2012 年度烟叶中 6 种生物碱对烟叶香型的定量判别分析 以 3 种香型烟叶中 6 种生物碱的含量为自变量来对烟叶的 3 种香型进行定量判别分析。采用香型为分组变量, 并进行赋值 (1=清香、2=浓香、3=中间香)。所有自变量均计入计算,

使用的矩阵为组内相关矩阵, 构建 Fisher 定量判别函数, 定量判别函数的表达式可由标准化的判别函数系数矩阵写出。具体表达式为: $F_1 = 1.044x_1 + 1.003x_2 - 1.194x_3 - 1.930x_4 - 0.528x_5 + 1.730x_6$; $F_2 = 0.609x_1 - 0.016x_2 - 0.623x_3 - 1.442x_4 + 1.851x_5 - 0.236x_6$ (x_1 = 烟碱的含量、 x_2 = 降烟碱的含量、 x_3 = 麦斯明的含量、 x_4 = 假木贼碱的含量、 x_5 = 新烟草碱的含量、 $x_6 = 2,3'$ -联吡啶的含量)。对最初的 169 个训练样本各自所属的香型类别通过判别函数进行回判和留一交叉验证, 结果参见表 6, 从中可知, 初始分组案例中样本留一交叉验证正确率为 69.8%, 回判正确率为 71.6%。双坐标投影图可通过样本非标准化的 Fisher 函数计算得到的 Z 得分作出, 见图 11, 从中可知, 3 种不同香型的烟叶样本可投影至平面的不同区域, 区域间虽有重叠现象但并不严重。因此, 此种定量判别模型可对不同烟叶样品的香型进行分类和判定。

表 6 2012 年不同烟叶样本判别分类结果
Table 6 Classification of tobacco samples in 2012

项目		香型	预测组成员			合计
			清	浓	中	
初 始	计数	清	32	9	5	46
		浓	7	46	7	60
		中	15	5	43	63
	%	清	69.6	19.6	10.9	100.0
		浓	11.7	76.7	11.7	100.0
		中	23.8	7.9	68.3	100.0
交叉验证 ^①	计数	清	32	9	5	46
		浓	7	45	8	60
		中	17	5	41	63
	%	清	69.6	19.6	10.9	100.0
		浓	11.7	75.0	13.3	100.0
		中	27.0	7.9	65.1	100.0

注:①仅对案例样本进行交叉验证;②已对交叉验证分组案例中的 69.8% 个进行了正确分类;③已对初始分组案例中的 71.6% 个进行了正确分类。

2.3.3 2013 年度烟叶中 6 种生物碱对烟叶香型的定量判别分析 以 3 种香型烟叶中 6 种生物碱的含量为自变量来对烟叶的 3 种香型进行定量判别分析。采用香型为分组变量, 并进行赋值 (1=清香、2=浓香、3=中间香)。所有自变量均计入计算, 使用的矩阵为组内相关矩阵, 构建 Fisher 定量判别函数, 定量判别函数的表达式可由标准化的判别函数系数矩阵写出。具体表达式为: $F_1 = -$

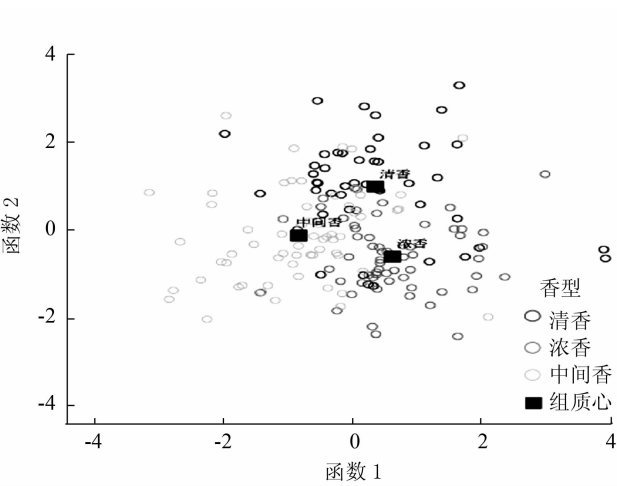


图 11 典型判别函数的双坐标投影

Fig. 11 Two-coordinate projection of a typical discriminant function for Table 6

$0.933x_1 - 0.421x_2 + 0.750x_3 + 1.567x_4 - 1.407x_5 + 0.484x_6$; $F_2 = 0.042x_1 + 0.865x_2 - 0.564x_3 - 1.407x_4 - 0.089x_5 + 1.339x_6$ (x_1 = 烟碱的含量、 x_2 = 降烟碱的含量、 x_3 = 麦斯明的含量、 x_4 = 假木贼碱的含量、 x_5 = 新烟草碱的含量、 x_6 = 2,3'-联吡啶的含量)。对最初的 194 个训练样本各自所属的香型类别通过判别函数进行回判和留一交叉验证,结果参见表 7,从中可知,初始分组案例中样本留一交叉验证正确率为 50.0%,回判正确率为 55.7%。

表 7 2013 年不同烟叶样本判别分类结果

Table 7 Classification of tobacco samples in 2013

项目		香型	预测组成员			合计
			清	浓	中	
初始	计数	清	34	18	13	65
		浓	11	41	12	64
		中	19	13	33	65
	%	清	52.3	27.7	20.0	100.0
		浓	17.2	64.1	18.8	100.0
		中	29.2	20.0	50.8	100.0
交叉验证 ^a	计数	清	32	18	15	65
		浓	13	38	13	64
		中	22	16	27	65
	%	清	49.2	27.7	23.1	100.0
		浓	20.3	59.4	20.3	100.0
		中	33.8	24.6	41.5	100.0

注:①仅对案例样本进行交叉验证;②已对交叉验证分组案例中的 50.0% 个进行了正确分类;③已对初始分组案例中的 55.7% 个进行了正确分类。

双坐标投影图可通过样本非标准化的 Fisher 函数计算得到的 Z 得分作出,见图 12,从中可知,3 种不同香型的烟叶样本可投影至平面的不同区域,区域间虽有重叠现象但并不严重。因此,此种定量判别模型可对不同烟叶样品的香型进行分类和判定。

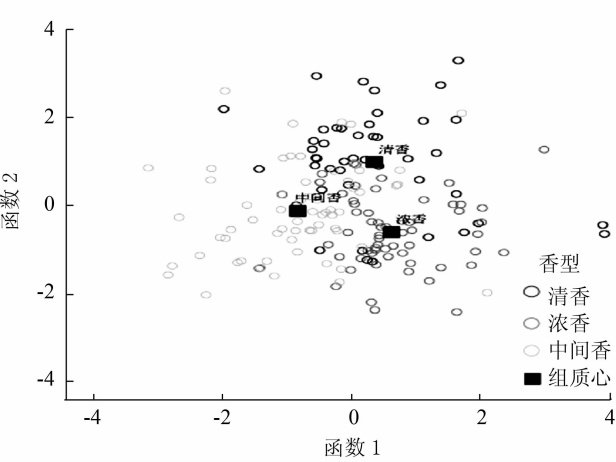


图 12 典型判别函数的双坐标投影

Fig. 12 Two-coordinate projection of a typical discriminant function for Table 7

3 讨论与结论

由于不同年份烟叶生长的自然环境条件,包括温湿度、日照时间和土地的肥力状况等的变化,会对烟叶中化学成分的变异及香型特征的形成产生重要的影响。所以在进行统计分析时,笔者分别对不同年份的数据予以统计,以区别和考察不同年份的环境因素对烟叶香型和其中生物碱含量的影响情况。

由 2011—2013 年度 6 种烟草生物碱含量的显著性水平检验 (F 检验) 可以看出,不同年度 3 种香型烟叶中 6 种生物碱的含量差异显著性水平并不一致。其中:(1) 在 2011 年的烟叶中新烟草碱和 2,3'-联吡啶是不同香型的特征物质,可用来区分不同香型烟叶,而降烟碱、麦斯明、假木贼碱可以用来区分浓香型烟叶和中间香型烟叶;(2) 在 2012 年的烟叶中新烟草碱和 2,3'-联吡啶也是不同香型的特征物质,分别可以用来区分浓香型和清香型烟叶、清香型和中间香型烟叶、中间香型和浓香型烟叶;(3) 在 2013 年的烟叶中假木贼碱是不同香型的特征物质,可以用来区分清香型烟叶和浓香型烟叶。因此,2011 年和 2012 年度 3 种香型烟叶中新烟草碱和 2,3'-联吡啶含量差异水平较为相似,可以用来区分不同香型烟叶;而在 2013 年,

烟叶中假木贼碱是不同香型的特征物质，可以用来区分清香型烟叶和浓香型烟叶。不同年度3种香型中6种生物碱物质的含量均可以聚成3类，其中烟碱和假木贼碱在不同年份清香型烟叶中均可聚为一类；新烟草碱和降烟碱在不同年份清香型烟叶中均可聚为一类；麦斯明在不同年份浓香型烟叶中均可单独聚成一类。

综上所述，2011—2013年3种香型烟叶中，生物碱指标含量存在一定的差异。2011年和2012年度3种香型烟叶中新烟草碱和2,3'-联吡啶含量差异水平较为相似，可以用来区分不同香型烟叶；而在2013年，烟叶中假木贼碱是不同香型的特征物质，可以用来区分清香型烟叶和浓香型烟叶。不同年度3种香型中6种生物碱物质的含量均可以聚成3类，其中烟碱和假木贼碱在不同年份清香型烟叶中均可聚为一类；新烟草碱和降烟碱在不同年份清香型烟叶中均可聚为一类；麦斯明在不同年份浓香型烟叶中均可单独聚成一类。采用Fisher判别分析定量模型可以运用烟碱的、降烟碱、麦斯明、假木贼碱、新烟草碱和2,3'-联吡啶等少数几种指标成分含量来对烟叶的不同香型进行分类和判别，回判及预测正确率分别为55.7%~71.6%、50.0%~69.8%。

参考文献：

- [1] 丁瑞康,王承瀚,朱尊权,等. 卷烟工艺学 [M]. 北京: 食品工业出版社, 1958: 49—71.
- [2] 张槐苓,葛翠英,穆怀静,等. 烟草分析与检验 [M]. 郑州: 河南科学技术出版社, 1994: 103—111.
- [3] 谢剑平. 烟草香原料 [M]. 北京: 化学工业出版社, 2009: 70—447.
- [4] 谢剑平. 烟草与烟气化学成分 [M]. 北京: 化学工业出版社, 2010: 73—903.
- [5] 陆龙建,陈磊,余冬,等. 多元因子分析在卷烟风格特征剖析中的应用 [J]. 烟草科技, 2012, 45 (10): 36—40.
- [6] 常爱霞,张建平,杜咏梅,等. 烤烟香型相关化学成分主导的不同产区烟叶聚类分析 [J]. 中国烟草学报, 2010, 16 (2): 14—19.
- [7] 谢剑平,赵明月,吴鸣,等. 白肋烟重要香味物质组成分析的研究 [J]. 烟草科技, 2002, 35 (10): 3—16.
- [8] 刘百战,宗若雯,岳勇,等. 国内外部分白肋烟香味成分的对比分析 [J]. 中国烟草学报, 2000, 6 (2): 1—5.
- [9] 邵岩,宋春满,邓建华,等. 云南与津巴布韦烤烟致香物质的相似性分析 [J]. 中国烟草学报, 2007, 14 (4): 19—25.
- [10] 洗可法,沈朝智,戚万敏,等. 云南烤烟中性香味物质分析研究 [J]. 中国烟草学报, 1992, 1 (2): 1—91.
- [11] 常爱霞,贾兴华,郝廷亮,等. 特香型烤烟挥发性致香物质的测定与分析 [J]. 中国烟草科学, 2002, (1): 1—5.
- [12] 李伟,陈江华,詹军,等. 烤烟香型间致香物质组成比例及其差异分析 [J]. 中国烟草学报, 2013, 19 (2): 1—6.
- [13] 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, 31 (5): 7—12.
- [14] 朱忠,洗可法,尚希勇,等. 中上部不同成熟度烤烟烟叶与主要化学成分和香味物质组成关系的研究 [J]. 中国烟草学报, 2008, 14 (1): 6—12.
- [15] 詹军,周芳芳,邓国宾,等. 基于化学成分和致香物质的烤烟上部烟叶香型判别分析 [J]. 湖南农业大学学报: 自然科学版, 2013, 39 (3): 232—241.
- [16] 李雪君,郭芳阳,李耀宇,等. 浓香型风格烤烟品种的筛选研究 [J]. 河南农业科学, 2010, 39 (11): 45—49.
- [17] 李宏光,周玲红,罗经仁. 湖南浓香型特色烟叶品种筛选研究 [J]. 作物研究, 2013, 27 (6): 568—571.
- [18] 胡亚杰,石保峰,首安发,等. 不同品种对贺州浓香型特色优质烟叶形成的影响 [J]. 广东农业科学, 2013, 40(5): 18—21.
- [19] 唐远驹. 关于烤烟香型问题的探讨 [J]. 中国烟草科学, 2011, 32 (3): 1—7.
- [20] 王文胜,马戎. 浓香型产区烟叶主要化学成分与风格品质特色及其关系研究 [J]. 中国烟草科学, 2013, 34 (5): 28—32.
- [21] 杨天沛,钟蕾,付继刚,等. 黔东南烟区烟叶致香物质的定量分析 [J]. 中国烟草科学, 2013, 34 (1): 22—28.
- [22] Richard A, Johnson, Dean W, Wichern. 实用多元统计分析 [M]. 陆璇译,译. 北京: 清华大学出版社, 2001: 17—103.
- [23] 朱万森等. 应用因子分析法对地面水质污染状况的研究 [J]. 复旦学报, 2003, 33 (3): 141—146.
- [24] 袁志发,周净芋. 多元统计分析 [M]. 北京: 北京科学出版社, 2002: 139—141.

(责任编辑: 黄爱萍)