

### 烟用香精香料指纹图谱与质控体系的研究

王玉<sup>1</sup>，徐若飞<sup>2</sup>，徐济仓<sup>1</sup>，赵迎春<sup>2</sup>，叶云峰<sup>2</sup>，王保兴<sup>1</sup>，侯英<sup>1</sup>，杨式华<sup>1</sup>

( 1 云南瑞升科技有限公司，昆明 650106； 2 曲靖卷烟厂，曲靖 655001 )

**摘要：** 引入指纹图谱相似度概念，通过计算测定值与标准值之间的相似度，对烟用香精香料的化学成分波动进行了表征。结合常规检测和化学指纹图谱检测，综合加料评吸和校正，建立了烟用香精香料控制体系 RS-04 及相关计算机辅助软件，系统运行结果令人满意。

**关键词：** 烟用香精香料；指纹图谱；相似度；质控体系

烟用香精香料技术是烟草行业的重要核心技术之一，烟用香精香料对保持卷烟品牌的香气风格特征具有重要意义。目前国家烟草专卖局大力发展中式卷烟，中式卷烟必然具有独特的香气风格和口味特征，具有明显的中国烤烟烟叶香气特征，在香气风格和口味特征上与英式、美式、日式等卷烟不同，具有明显的浓郁的中国烟叶烟香气风格，中式卷烟能使卷烟消费者在吸食的第一反应中分辨出来。所以发展中式卷烟对烟用香精香料提出了更高的要求，因而对其质量控制也提出了更高的要求，仅仅依靠感官和一些物理及常规指标来控制烟用香精香料的质量显然不能满足品质控制和研究开发的需要。

烟用香精香料的化学成分的多样性和复杂性一直都是其质量控制的重点和难点。复杂烟用香精香料对卷烟品质的影响是来自于自身多种成分之间的协同作用，所以系统的分析化学成分，建立全面反映所含成分的指纹图谱将更加有效地体现其化学成分的整体性。通过计算指纹图谱之间相似程度来定量的对烟用香精香料的化学成分进行控制，无疑是一种理想的质控途径。指纹图谱是近年来中药质量控制的热点<sup>[1-2]</sup>，对中药材及中成药来说，通过指纹图谱进行质量控制、辨别真伪是目前最有效的方法，而指纹图谱在烟用香精香料质量控制方面的应用报道相对较少。我们利用气相色谱-质谱联用仪（GC/MS）对烟用香精香料的化学成分进行分析，获取特征的指纹图谱，通过计算实测样品与标准样品之间指纹图谱相似度的数值，判断两者内在化学成分的接近程度，结合烟用香精香料的常规指标质量控制与加料评吸，建立了烟用香精香料的质量控制体系系统 RS-04，并创建相关的计算机辅助软件。通过系统的运行，有效的增强了对烟用香精香料品质监控的力度，为烟用香精香料的质量稳定提供了有力的保障。

#### 1 质量控制体系设定

以往的烟用香精香料质量控制主要通过质检人员的观感评价和常规检测为主，常规指标主要是指目前行业标准（YC/T145.1-9 1998）中规定的检测项目以及特定检测项目（如：甘草粉中甘草酸的含量等），这些指标一般都是已经有较为成熟的检测标准和检测方法。

但上述方法只是针对样品的某一类物质或某一特性进行分析检测，并不能较完整的反映样品的整体质量特性。在以往质量控制的基础上，结合化学指纹图谱检测，完善和补充相关样品前处理、仪器分析条件等内容，我们建立了烟用香精香料控制系统 RS-04，系统控制流程如图 1 所示。

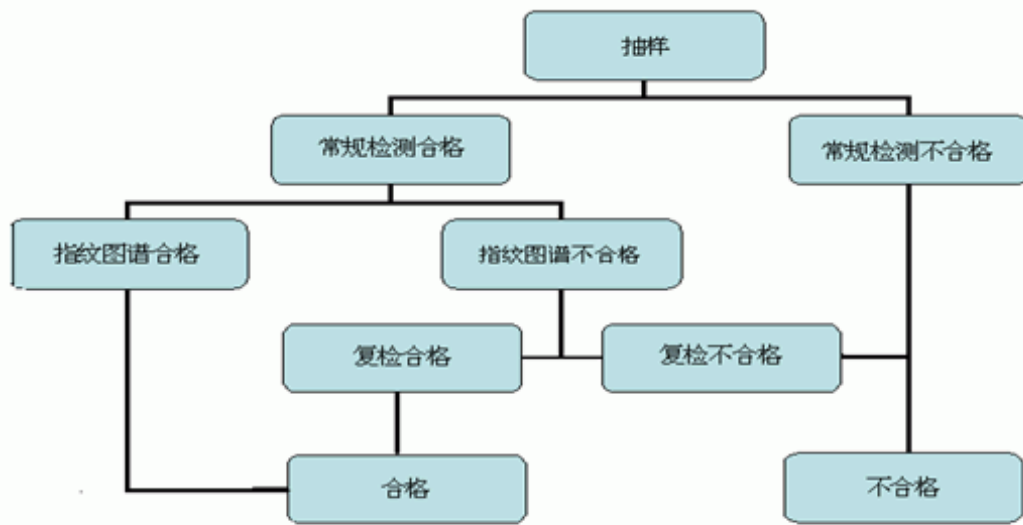


图1 控制流程

## 2 指纹图谱相似度的引入

化学指纹图谱分析不等同于一般的仪器分析，它通常由指纹图谱获取及指纹图谱鉴别计算两部分所组成，前者是指采用色谱、光谱以及色质联用等仪器分析方法，获取能够表征样品化学组成特征的组分群体分析图谱或图像；后者是应用计算分析技术对所获得的图谱数据进行处理，通过筛选和简化，获得专属、宏观、整体的化学特征综合信息，并对样品化学组成的总体波动情况进行估测<sup>[3]</sup>。用中药指纹图谱监控中药质量，并不要求指纹图谱中每一个组分都清楚，也不要求对每一组分都精确测定，但要求图谱具有指纹特征，即要求专属、稳定、实用。与中药组成相类似，复杂烟用香精香料的大多数化学成分也往往很难对其都进行定性分析，而且从质量控制的角度来说，保持产品的稳定性和延续性是质量控制核心目的。有关中药指纹图谱研究的资料<sup>[4-6]</sup>显示，采用计算测定值与认定值之间的相似度的大小来对样品化学成分进行监控是一个较为理想的途径。具体来说也就是在对图谱分析数据进行一定处理后（内标校正等），采用文献<sup>[6]</sup>的报道的相似度计算方法（向量夹角法）进行测定值与认定值之间相似度数值的相似度计算：把每个指纹图谱看作一组对应保留时间下的峰面积的数值，将这组数值看作多维空间中的向量，使两个指纹图谱间的问题转化为多维空间的两个向量的相似性问题，利用（1）式计算 $\mu$ 值来定量表征指纹图谱之间的相似性，所得数值与相似度临界点数值 $\mu_0$ 比较进行指纹图谱是否合格的判定。相似度临界点数值 $\mu_0$ 通过加料评吸的方法进行确认，实际计算值大于 $\mu_0$ 的认为是合格产品，实际计算值小于 $\mu_0$ 的认为是不合格产品。

$$\mu = \frac{X \cdot Y}{|X| \times |Y|} \quad (1)$$

X: 实测图谱中 N 个数值组成的行 (  $x_1, x_2, x_3, \dots, x_n$  )

Y: 标准图谱中 N 个数值组成的行 (  $y_1, y_2, y_3, \dots, y_n$  )

$$|X| = \sqrt{x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 + \dots + x_n^2}$$

$$|Y| = \sqrt{y_1^2 + y_2^2 + y_3^2 + \dots + y_n^2}$$

## 3 计算机辅助软件设计：

按照前面的原理，我们采用 C++ 语言作为开发语言，使用 Borland C++ Builder 作为集成开发平台，开发 RS-04 系统的计算机辅助软件。通过整合常规指标判定和指纹图谱指标判定以实现烟用香精香料质量判定自动化，同时提供历史检验数据检索、便捷记事本、功能增强等功能，并且对香精香料数据、质量检验数据进

行分类科学管理。将常规检测数值直接输入软件的相应目录，再将 GC/MS 图谱检索结果导入到软件的相应目录，点击确定键，质检结果就出来了，整个过程仅需要几分钟的时间，有效的缩短了判定的时间和提高了判定的效率。另外，如果质检结果不合格，系统会自动标注出哪几项指标不合格，便于分析人员复查。

## 4 讨论

### 4.1 前处理方法的选取

恰当的样品前处理方法是获取准确、可靠的化学成分指纹图谱的关键，也是进行样品化学成分控制的前提，所以针对不同性状的样品，必须采取不同的前处理方法。目前较为常用的样品前处理方法有：液液萃取，超临界萃取，同时蒸馏萃取，索氏提取，超声萃取，微波萃取等。通过大量的研究，一套行之有效的样品前处理的方法的选取模式已经形成，作为 RS-04 系统的一部分目前仍在更新和完善中。

### 4.2 指纹图谱相似度计算方法的选取

向量夹角余弦法计算指纹图谱相似度较传统的模式识别及人工神经网络方法相比具有数学概念简单、数据处理过程简便快速等明显的优势，但也存在数据分类较困难、不易提取特征变量的弱点。所以目前仅把指纹图谱分析作为唯一的检测标准是不适宜的，必须通过把常规检测与指纹图谱检测相结合，综合加料评吸等人工干预，才能达到全方位的从根本上对烟用香精香料的质量进行控制的目的。

### 4.3 分析仪器的选用及分析条件的设定

除了一些天然的提取物以外，烟用香精香料化学成分的分子量一般都较小（ $<400$ ），比较适合用 GC 进行检测分析，在这里使用 GC/MS 获取指纹图谱，主要是考虑在获取样品色谱信息的时候，同时也获取质谱的相关信息，为以后的软件功能增强和系统的升级提供重要的信息储备。就目前所采用的指纹图谱相似度计算公式来看，同样适用于 GC、HPLC、IR 等图谱。对不同组分的样品一般需要采取相应的程序升温条件，具体样品的分析条件是不尽相同的，但是同一个样品的分析条件必须保持一致，才能确保指纹图谱比较的准确性。

## 5 结论

规范化的前处理方法和仪器条件、可靠指纹图谱相似度的计算、强大的计算机辅助处理软件、以及必要的人工干预构成了整个 RS-04 系统的核心，为复杂烟用香精香料的全方位质量控制提供了确实可行的方法。经过一系列的实际应用测试表明：上述烟用香精香料控制体系的运行，规范分析检测流程，缩短了样品分析和检测时间，增加了烟用香精香料质量控制的广度和深度，为保持产品的稳定性和延续性提供了有力的保障。当然，强有力的技术支持和不断的系统升级是任何一个的质量控制系统是否具有生命力的关键要素，只有通过不断的更新和升级，才能提高系统的操作性和实用性，更好的为烟用香精香料的质量控制服务。

### 参考文献：

- [1] 梁逸曾. 浅谈中药色谱指纹图谱的意义、作用及可操作性 [J]. 中药新药与临床药理, 2001, 12 (3): 196-199
- [2] 李建银, 刘文, 邱德文, 等. 中药复方指纹谱图的研究现状及其前景 [J]. 武警医学, 2004, 15 (1): 59-60
- [3] 程翼宇, 陈闽军, 吴永江. 化学指纹图谱的相似性测度及其评价方法 [J]. 化学学报, 2002, 60 (11): 2017-2021
- [4] 蒋晔, 郝晓花, 刘红菊. 中药指纹谱图的构建与解析 [J]. 中成药, 2004, 26 (4): 262-264

[5] 孟庆华, 刘永锁, 王健松, 等. 色谱指纹图谱相似度的新算法及其应用 [J]. 中成药, 2003, 25 ( 1 ) : 4-8

[6] 王龙星, 肖红斌, 梁鑫淼, 等. 一种评价中药色谱指纹谱相似性的新方法: 向量夹角法 [J]. 药学学报, 2002, 37 ( 9 ) : 713-717

## Study on the Tobacco Flavor Fingerprint and Quality Control System

WANG Yu<sup>1</sup>, XU Ruo-fei<sup>2</sup>, XU Ji-cang<sup>1</sup>, ZHAO Ying-chun<sup>2</sup>, YE Yun-feng<sup>2</sup>,  
WANG Bao-xing<sup>1</sup>, HOU Ying<sup>1</sup>, YANG Shi-hua<sup>1</sup>

1 Yunnan Reascend Science & Technology Co., LTD, Kunming 650106

2 Qujing Cigarette Factory, Qujing 655001

**Abstract:** The similarity between two chromatographic fingerprints taken from GC/MS was evaluated. To control the quality of tobacco flavor, a system (RS-04) was established. using the system, the analysis and quality control of tobacco flavor is simple and feasible. The satisfactory results were given by running the system.

**Keywords:** tobacco flavor; fingerprint; similarity; system of quality control

---

www.tobacco.org.cn All Rights Reserved.

版权所有 中国烟草学会

本网站由中国烟草物资电子商务网提供技术支持