

引用格式:

郝贤伟, 彭钰涵, 杨泽会, 陈晓水, 江智敏, 李波, 毕一鸣. 基于近红外光谱表征品质设计烟叶配方[J]. 湖南农业大学学报(自然科学版), 2023, 49(3): 284–290.

HAO X W, PENG Y H, YANG Z H, CHEN X S, JIANG Z M, LI B, BI Y M. Design of tobacco formulation based on the quality characterization by near infrared spectroscopy[J]. Journal of Hunan Agricultural University(Natural Sciences), 2023, 49(3): 284–290.

投稿网址: <http://xb.hunau.edu.cn>



基于近红外光谱表征品质设计烟叶配方

郝贤伟¹, 彭钰涵¹, 杨泽会², 陈晓水¹, 江智敏¹, 李波¹, 毕一鸣^{1*}

(1.浙江中烟工业有限责任公司, 浙江 杭州 310024; 2.云南烟叶复烤有限责任公司宣威复烤厂, 云南 曲靖 655400)

摘 要: 针对传统烟叶配方设计客观性不强、设计效率低的问题, 提出了一种基于近红外光谱表征品质的烟叶配方设计方法: 利用偏最小二乘法建立烟叶化学成分、部位、香型的近红外光谱模型, 并预测烟叶品质指标; 以品质指标为多维向量构建综合质量表征指数, 依据“相似相替”规则, 参照目标配方中的原烟等级, 筛选相似的替代烟叶并组成候选烟叶集合, 采用线性规划求解方法计算替代配方的构成比例。利用指标评价与感官验证相结合的方式, 验证 2020 年度四川烟叶配方设计效果。结果表明: 替代配方的烟叶部位、烟叶总糖、还原糖、总植物碱、总氮含量等与目标配方的相对误差小于 6%; 除刺激性指标外, 替代配方烟叶香气量、清晰度、透发性、成团性、杂气、余味及劲头等感官质量指标与目标配方的差异不显著。

关 键 词: 烟叶配方; 近红外光谱; 表征品质; 配方设计

中图分类号: TS452.1

文献标志码: A

文章编号: 1007-1032(2023)03-0284-07

Design of tobacco formulation based on the quality characterization by near infrared spectroscopy

HAO Xianwei¹, PENG Yuhan¹, YANG Zehui², CHEN Xiaoshui¹, JIANG Zhimin¹, LI Bo¹, BI Yiming^{1*}

(1.China Tobacco Zhejiang Industrial Co. Ltd, Hangzhou, Zhejiang 310024, China; 2.Xuanwei Redrying Factory, Yunnan Leaf Tobacco Redrying Co. Ltd, Qujing, Yunnan 655400, China)

Abstract: In view of the problems of weak objectivity and low design efficiency for traditional tobacco leaf formulation design, a method of tobacco formulation design was proposed based on the quality characterization by near infrared spectroscopy. The prediction model including conventional chemical compositions, position and aroma type was established by partial least square method, to predict the quality indexes of tobacco leaves. Using quality index as multidimensional vectors a comprehensive quality representation index was constructed. According to the rule of “similar substitution”, a set of candidate tobacco leaves was formed refer to the original tobacco grade in the target module to screen similar substitute tobacco leaves. The proportion of tobacco leaf in the substitute module is calculated by linear programming method. Using a combination of indicator evaluation and sensory verification to the effectiveness was verified for Sichuan tobacco leaf formulation designed in 2020. The results showed that the relative error of the tobacco leaf position, total sugar, reducing sugar, total alkaloids, and total nitrogen content was less than 6% between the substitute formula and the target formula. Except for stimulating indicators, there was no significant difference in sensory quality indicators such as aroma content, clarity, diffusivity, group nature, impurities, aftertaste, and strength between the substitute formulation and the target formulation.

收稿日期: 2022-11-03

修回日期: 2023-03-11

基金项目: 中国烟草总公司科技项目(110202103003); 浙江中烟工业有限责任公司科技项目(ZJZY2021A007)

作者简介: 郝贤伟(1987—), 男, 山东潍坊人, 硕士, 工程师, 主要从事烟草原料配方研究, hwxzjy2020@163.com; *通信作者, 毕一鸣, 博士, 工程师, 主要从事烟叶配方数字化设计研究, yimbi@163.com

Keywords: tobacco formulation; near-infrared spectrum; quality characterization; formulation design

卷烟产品质量的稳定性主要取决于烟叶原料质量的稳定性。卷烟企业通过将不同产地、不同品种、不同等级的烟叶进行配方打叶来保证卷烟原料的品质及数量的稳定供应,但传统的烟叶配方主要依赖感官评价的判断进行设计,烟叶品质易受主观因素影响,缺乏客观质量数据的支撑,影响烟叶的合理选择和使用;此外,传统经验配方受到有限的烟叶组合数量的限制,烟叶配方具有片面性:因此,亟需快速采集烟叶原料的质量数据并建立烟叶配方辅助设计方法,为传统经验配方提供技术支撑。利用数理统计方法对烟叶原料的化学成分、感官质量及烟气等指标进行拟合来设计烟叶配方^[1-3],需要进行大量的检测分析来获取原料及配方的信息,成本较高。近红外光谱技术应用于烟叶的检测及评价,可有效反映烟叶的常规化学成分^[4-5]、香气风格^[6-7]、烟叶部位^[8-9]、分级特性^[10-11]、部分高含量致香成分^[12]等信息。张建平等^[13]利用近红外技术量化分析烟叶风格来表征烟叶产地特征,设计的模拟配方具有目标烟叶的风格特征。郝贤伟等^[14]利用近红外光谱投影筛选与巴西烟叶风格相似的国产烟叶进行配方模块替代,设计出与巴西烟叶风格和品质相似的片烟模块,并在卷烟产品中进行替代应用。李石头等^[15]通过光谱相似表征烟叶相似来辅助卷烟配方维护,实现了替代配方在化学成分及感官指标等方面与原配方无显著差异。米津锐等^[16]利用 PPF 投影及蒙特卡洛方法,给出了在不同原料种类数下进行配方设计的比例上限值。

利用近红外光谱辅助配方设计在烟叶配方设计的实际应用中仍有一定难度:第一,若仅通过化学成分进行配方拟合,容易出现数值相近但感官品质相差较大的问题,虽能够提供一定的配方组合信息,但由于偏离经验配方过大,容易导致可信度较低;第二,若直接采用光谱误差最小的方式进行拟合并计算替代配方,虽能较为客观地模拟目标配方,但试验过程易受光谱波动的影响,导致计算结果波动大,且难以解释配方品质情况。鉴于此,笔者提出一种基于近红外光谱表征品质的烟叶配方设计方法:利用近红外光谱建立烟叶化学成分、香型、部位等指标的预测模型,从模拟实际配方过程

的角度出发,选择四川产区烟叶配方为设计目标,以近红外模型预测的化学成分、香型及部位等指标作为配方设计信息,针对目标配方中所有构成烟叶,采用“相似相替”规则筛选烟叶构成可供替代配方选择的烟叶集合,采用线性规划求解形成替代配方,以期作为烟叶配方数字化设计提供参考。

1 材料与方法

1.1 材料

供试材料为2020年度四川省凉山州、攀枝花市、泸州市、宜宾市、广元市、会东县、德昌县、会理县、宁南县、盐源县、普格县、米易县、叙永县、古蔺县、筠连县、兴文县、昭化县的云烟87的C2F、C3F烟叶,按照浙江中烟工业有限责任公司《原烟分选分类技术要求》制作C2FA1(为C2F选后原等级)、C2FC3(从C2F等级选叶后为C3F的等级)、C3FA1(C3F原等级),制样、切丝,样品共计34个。

1.2 方法

1.2.1 烟叶原料的近红外光谱扫描

烟叶样本在 40 °C 下烘干 4 h,用 Foss CT410 旋风磨(丹麦福斯公司)磨粉,过 250 μm 孔径筛。取烟叶粉末(高度约占样品杯总高度的 1/3),放入样品杯中,砝码放置在样品上方,自然压实后进行近红外扫描,采集光谱数据。光谱采集范围为 10 000~3800 cm⁻¹,光谱分辨率为 8 cm⁻¹,扫描 64 次。

1.2.2 烟叶常规化学成分检测

按照 YC/T 31—1996^[17]制备试样后,分别依据 YC/T 159—2002^[18]、YC/T 160—2002^[19]、YC/T 162—2011^[20]、YC/T 161—2002^[21]、YC/T 217—2007^[22]测定总糖、还原糖、总植物碱、氯、总氮和钾的含量。

1.2.3 烟叶感官质量评价

采用浙江中烟工业有限责任公司的方法,由 7 位评委进行定性和定量打分,对烟叶香型、彰显程度、香气量、清晰度、透发性、成团性、杂气、刺激性、余味和劲头等感官质量指标打分,单项满分均为 10 分^[14]。

1.2.4 基于近红外光谱的烟叶化学成分、部位及香型模型的建立

采用一阶导数进行光谱数据预处理^[23], 窗口宽度为 11, 多项式阶数为 2。对烟叶化学成分、部位、香型指标分别建模, 均使用留一交叉验证确定主因

子数。

烟叶 6 项化学成分的近红外预测模型按照文献^[24]方法建模, 结果见表 1。化学成分的近红外预测结果与流动分析仪检测结果的平均相对偏差小于 5%, 满足实际应用要求。

表 1 烤烟常规化学成分的近红外建模结果

化学成分	含量/%	均值/%	潜变量数	校正根均方误差	R ²	交叉验证根均方误差	预测根均方误差	平均相对偏差/%
总糖	15.62~43.12	29.46	20	0.51	0.99	0.66	0.50	3.42
总植物碱	0.63~4.52	2.47	20	0.07	0.99	0.10	0.08	2.52
还原糖	14.21~35.69	25.36	13	0.63	0.98	0.80	0.92	2.36
氯	0.01~2.91	0.38	14	0.05	0.97	0.08	0.05	11.76
钾	0.83~4.94	2.09	23	0.15	0.93	0.21	0.36	8.02
总氮	1.35~2.89	1.98	12	0.09	0.90	0.13	0.07	4.76

建立烟叶部位的近红外预测模型时, 烟叶部位指标采用经分级技师确认后的初烤烟叶样本, 上部叶赋值 1, 中部叶赋值 2, 下部叶赋值 3; 利用偏最小二乘法(PLS)对提取特征后的光谱与部位信息建模, 潜变量数由交叉验证误差与 F 检验^[24]确定。将模型计算的部位值与上、中、下部叶的标签值进行比较, 将该样本的部位判别为与标签值最接近的部位, 预测值 ≤ 1.5 时, 判别为上部叶; 介于 1.5 与 2.5 之间时, 判别为中部叶; ≥ 2.5 时, 判别为下部叶。烟叶部位模型校正根均方误差为 0.39, 交叉验证根均方误差为 0.40, 模型的训练集精度为 83.3%, 测试精度为 79.4%, 考虑到不同部位的相邻等级存在交叉的情况, 接近 80% 的正确率可以满足实际的评价需求。

建立烟叶香型的近红外预测模型时, 选择云南烟叶作为清香型典型样本、贵州和湖北烟叶作为中间香型典型样本、湖南烟叶作为浓香型典型样本, 采用 3 维标签定义香型并表征其彰显程度, 即清香 [1, 0, 0], 中间香 [0, 1, 0], 浓香 [0, 0, 1], 香型指数为 1, 表示该香型的典型样本, 其值的大小表征该香型的彰显程度; 其次, 利用蒙特卡洛抽样—交叉验证(MCCV), 每次抽样均利用线性判别分析模型(LDA)进行建模, 并对该次抽样中的测试数据进行预测, 记录预测结果。多次抽样后, 统计测试样本的分类正确率, 挑选正确率高于 90% 的样本作为建模样本; 最后, 对于 MCCV 遴选出的典型样本及其近红外光谱, 利用偏最小二乘法(PLS)量化其 3 维香型值。对于每一个片烟, 其 3 种香型指数

之和为 1, 因此, 只需获得 3 种香型指数中的任意 2 种, 即可通过计算得到第 3 种香型指数。需要说明的是, 香型指标的建模结果基于建模样本的选取, 如果对建模样本的产区等进行调整, 则相应的预测指标数据会有差异^[25]。

1.2.5 烟叶配方设计

1) 建立烟叶综合质量指数。烟叶化学成分、部位的表征均使用一维表征方式。由于三维香型指数之和为 1, 从配方设计使用简便角度出发, 使用一维指数(清香指数减去浓香指数)进行表征。烟叶综合质量指数为总糖、总植物碱、还原糖、氯、钾、总氮、部位及香型的 8 维向量。

选取目标配方中的各等级烟叶以及拟用于配方的其他等级烟叶, 采集近红外光谱数据并建模预测出各烟叶样本的综合质量指数; 每一样本的预测值为总糖、总植物碱、还原糖、氯、钾、总氮、部位、香型组成的 1×8 的向量。

2) 建立替代配方烟叶样本池。针对目标配方中的每个等级烟叶, 从拟用于替代配方的烟叶中选出若干个最相近烟叶; 将所有样本按列进行归一化, 记目标配方第 i 个烟叶的归一化指标值为 $H_i = [h_{i1}, h_{i2}, h_{i3}, \dots, h_{i8}]$, 待选第 j 个烟叶的归一化指标值为 $L_j = [l_{j1}, l_{j2}, l_{j3}, \dots, l_{j8}]$, 两者差异定义为:

$$S_j = \sum_{k=1}^8 |l_k - h_k| \quad (1)$$

其中: S_j 为两样本相似距离, S_j 越小, 相似度越高; j 为所有待选样本; $k=1, 2, 3, \dots, 8$, 分别表示总糖、总植物碱、还原糖、氯、钾、总氮、部位、香型等 8 项指标。将所有待选烟叶样本与目

标配方第 i 个烟叶样本计算,选取 S 值最小的 N 个, N 的取值为 6。遍历目标配方中所有的烟叶样本,将挑出的待选烟叶样本汇集为一个集合(删去重复选择的烟叶样本),共 M 个样本,选出的烟叶样本为一个集合,作为替代配方的烟叶样本池。

3) 求解替代配方构成。利用线性规划求解配方构成,得到与目标配方中各烟叶样本 S 值最接近的烟叶组成及其比例;记目标配方 8 项指标为 $R=[r_1, r_2, r_3, \cdots, r_8]$,求取 M 个烟叶样本的各个比例系数 $C=[c_1, c_2, c_3, \cdots, c_M]$,使得

$$Q_{\min} = \sum_{k=1}^8 |r_k - \sum_{p=1}^M c_p l_{pk}| \quad (2)$$

其中: $Q_{\min}$ 为替代配方与目标配方差异最小值,用来评价相似度,越小表示相似度越高; r_k 为目标配方第 k 指标的值; c_p 为配方中的各烟叶比例; l_{pk} 为 p 烟叶第 k 指标的值; $c_p \geq 0, p=1, 2, 3, \cdots, M, \sum_{p=1}^M c_p = 1$ 。

计算烟叶配方比例后,组配烟叶配方并计算替代配方与目标配方各项品质指标的差异;按照配方构成形成烟叶配方,结合评吸小组感官评价,验证

替代配方的有效性。

2 烟叶配方设计实例

2.1 目标配方的确定

选择四川省凉山会东县、德昌县构成的中部烟叶片烟模块为目标配方,该烟叶模块配方感官品质较好并在卷烟产品中稳定使用,会东县 C2FA1、C2FC3、C3FA1 烟叶构成比例分别为 14%、25%、26%,德昌县 C2FA1、C2FC3、C3FA1 烟叶构成比例分别为 5%、13%、17%。

2.2 烟叶综合品质的表征

为实现替代配方的设计目标,按照“相似相替”原则,在同省份产区内选取 5 个州(市)10 个县(凉山州的会理县、盐源县、宁南县、普格县、攀枝花市的米易县,宜宾市的筠连县、兴文县,泸州市的古蔺县、叙永县,广元市的昭化县)的 C2FA1、C2FC3 及 C3FA1 等级烟叶样本作为替代模块设计样本,并利用近红外模型预测各烟叶样本的质量指标。目标配方中的烟叶及待选烟叶的各质量指标近红外光谱预测值列于表 2。

表 2 四川省各县烟叶近红外模型的预测值

Table 2 Predicted values of near-infrared models for tobacco leaves in various counties of Sichuan Province											
编号	州(市)	县	等级	总糖/%	总植物碱/%	还原糖/%	氯/%	钾/%	总氮/%	部位	香型
1	凉山	德昌县	C2FA1	37.81	1.70	30.47	0.01	2.80	1.61	2.44	0.21
2	凉山	德昌县	C2FC3	38.57	1.24	31.44	0.02	3.18	1.49	2.65	0.12
3	凉山	德昌县	C3FA1	37.25	1.50	30.31	0.01	3.04	1.61	2.60	0.04
4	凉山	会东县	C2FA1	38.76	1.74	32.10	0.09	2.42	1.70	2.48	0.48
5	凉山	会东县	C2FC3	38.95	1.28	31.31	0.01	3.00	1.52	2.56	0.13
6	凉山	会东县	C3FA1	33.51	1.96	25.75	0.03	2.51	1.89	2.39	0.23
7	凉山	会理县	C2FA1	34.26	1.44	25.73	0.10	2.15	1.66	2.62	0.40
8	凉山	会理县	C2FC3	36.01	1.40	26.94	0.15	2.35	1.40	2.50	0.15
9	凉山	会理县	C3FA1	34.58	1.53	27.25	0.09	2.42	1.60	2.61	0.09
10	凉山	盐源县	C2FA1	37.71	1.74	29.97	0.09	2.03	1.68	2.32	0.25
11	凉山	盐源县	C2FC3	38.88	1.27	31.63	0.10	2.18	1.58	2.60	0.51
12	凉山	盐源县	C3FA1	38.70	1.29	31.42	0.17	2.17	1.69	2.63	0.52
13	凉山	宁南县	C2FA1	39.28	2.25	29.94	0.01	2.75	1.82	2.00	0.29
14	凉山	宁南县	C2FC3	39.12	2.09	30.05	0.04	2.41	1.73	2.13	0.26
15	凉山	宁南县	C3FA1	37.77	2.36	28.81	0.05	2.69	1.84	1.99	0.42
16	凉山	普格县	C2FA1	41.70	2.43	32.06	0.01	2.25	1.76	1.89	0.37
17	凉山	普格县	C2FC3	37.41	2.49	28.54	0.01	2.36	1.93	1.92	0.80
18	凉山	普格县	C3FA1	38.50	2.19	28.24	0.01	2.33	1.81	2.03	0.40
19	攀枝花	米易县	C2FA1	38.77	1.97	32.25	0.08	2.38	1.67	2.24	-0.01
20	攀枝花	米易县	C2FC3	38.62	1.76	31.89	0.16	2.41	1.57	2.25	0.06
21	攀枝花	米易县	C3FA1	38.94	1.86	31.80	0.13	2.56	1.63	2.25	-0.16
22	宜宾	筠连县	C2FA1	28.65	2.17	24.25	0.18	3.01	1.81	2.09	-0.20
23	宜宾	筠连县	C2FC3	29.19	2.10	23.89	0.24	2.99	1.73	2.12	-0.42

表 2(续)

编号	州(市)	县	等级	总糖/%	总植物碱/%	还原糖/%	氯/%	钾/%	总氮/%	部位	香型
24	宜宾	筠连县	C3FA1	33.27	2.35	27.96	0.14	2.58	1.89	1.98	0.03
25	宜宾	兴文县	C2FA1	29.34	2.50	23.85	0.16	3.24	1.87	1.94	-0.40
26	宜宾	兴文县	C2FC3	28.02	2.20	23.84	0.20	3.16	1.74	2.13	0.06
27	宜宾	兴文县	C3FA1	29.14	3.19	24.49	0.05	2.83	2.26	1.46	-0.14
28	泸州	古蔺县	C2FA1	29.44	2.98	24.44	0.27	2.43	1.97	1.66	-0.04
29	泸州	古蔺县	C2FC3	29.17	2.55	25.09	0.31	2.40	1.83	1.96	-0.21
30	泸州	古蔺县	C3FA1	30.78	2.89	25.99	0.32	2.03	1.81	1.58	-0.14
31	泸州	叙永县	C2FA1	27.04	3.54	23.50	0.73	2.57	2.13	1.45	-0.37
32	泸州	叙永县	C2FC3	25.63	2.96	21.60	0.46	2.76	2.25	1.84	-0.42
33	泸州	叙永县	C3FA1	27.17	2.53	22.90	0.28	2.64	2.07	2.02	-0.38
34	广元	昭化县	C3FA1	34.19	2.55	27.92	0.11	2.38	1.92	1.76	-0.18

2.3 烟叶替代配方的建立

以德昌县 C2FA1 为例, 计算得出与其最相似的原烟等级, 并列与德昌县 C2FA1 最相似的 10 个等级, 如表 3 所示。需要说明的是 S 值的计算由每个指标分别归一化后进行距离计算, 但由于凉山州各县(区)烟叶的氯含量较低, 而其他市级产区的氯含量相对较高, 不同产区归一化处理的数据会存在差异较大的现象, 对 S 值的计算也会产生较大的影响。

表 3 与德昌县 C2FA1 等级相似的原烟等级

Table 3 Raw tobacco samples similar to Dechang C2FA1				
编号	州(市)	县	等级	S
13	凉山	宁南县	C2FA1	5.00
14	凉山	宁南县	C2FC3	5.39
10	凉山	盐源县	C2FA1	5.48
9	凉山	会理县	C3FA1	5.53
8	凉山	会理县	C2FC3	6.66
15	凉山	宁南县	C3FA1	6.73
19	攀枝花	米易县	C2FA1	7.03
21	攀枝花	米易县	C3FA1	7.10
7	凉山	会理县	C2FA1	7.48
18	凉山	普格县	C3FA1	7.74

由表 3 可以看出, 宁南县 C2FA1 的 S 值最小, 说明与目标配方中的德昌县 C2FA1 最相似, 这 2 个县同属于四川省凉山州, 且地理位置相邻, 土壤质地及气候条件比较相似; 2 个县的 C2F 等级烟叶在感官评吸方面均表现为香气量充足、烟气绵团感较好; 因此, 宁南县 C2FA1 与德昌县 C2FA1 相似的结果, 与传统经验配方的认识具有较高的一致性。在以往的烟叶配方研究中, 配方模拟计算时没有考虑实际配方过程中单个烟叶“相似相替”的过程, 多在可供选择的大量样本中进行筛选, 其计算

出的配方可能在所设定的指标中与目标配方相似。但由于不同地域烟叶的生态条件存在较大差异, 模拟配方与目标配方的感官评价结果虽然有相似之处, 但具体风格及品质特点也会有较明显的差异, 在实际应用中进行同比例替代使用往往具有一定的难度。通过对目标配方中的每一烟叶进行相似烟叶筛选, 能够大概率规避上述情况的出现。遍历目标配方中 6 个烟叶样本, 通过筛选得到候选的烟叶集合如表 4 所示。

表 4 与目标配方相似的候选烟叶样本池

Table 4 Candidate tobacco sample pool similar to the target formulation			
编号	州(市)	县	等级
7	凉山	会理县	C2FA1
8	凉山	会理县	C2FC3
9	凉山	会理县	C3FA1
10	凉山	盐源县	C2FA1
11	凉山	盐源县	C2FC3
12	凉山	盐源县	C3FA1
13	凉山	宁南县	C2FA1
14	凉山	宁南县	C2FC3
15	凉山	宁南县	C3FA1
18	凉山	普格县	C3FA1
19	攀枝花	米易县	C2FA1
20	攀枝花	米易县	C2FC3
21	攀枝花	米易县	C3FA1
22	宜宾	筠连县	C2FA1
24	宜宾	筠连县	C3FA1
26	宜宾	兴文县	C2FC3
34	广元	昭化县	C3FA1

由表 4 可以看出, 入围候选烟叶样本池的烟叶主要为凉山、攀枝花、宜宾及广元等产区烟叶, 而泸州未入围。分析不同地(市)产区烟叶的质量差异, 由表 5 可以看出, 攀枝花烟叶与凉山烟叶的 8 项指

标均没有显著差异,说明攀枝花烟叶与凉山烟叶质量最为接近;宜宾烟叶与凉山烟叶相比,除氯、总氮外,其他指标均存在显著差异;泸州烟叶与凉山烟叶总糖、总植物碱、还原糖、氯、总氮、部位、香型等指标与凉山烟叶的差异显著且差异最大,总糖、还原糖含量明显低于其他市区烟叶,总植物碱、总氮含量明显高于其他地市烟叶,香型预测值负值最大,与凉山烟叶香型预测值差异最大;广元烟叶与凉山烟叶总糖、总植物碱、总氮、部位及香型等指标方面存在显著差异。凉山、攀枝花等产区与云

南曲靖、楚雄等产区相邻,生态条件极为相似,内在感官表现方面均呈现较明显的清甜香韵;宜宾邻近云南昭通,内在感官评价认为其烟叶具有一定的清甜香韵,但清甜香型风格不够明显;泸州与遵义产区相邻,其烟叶一般认定为中间香型,香气量较足,有一定冲击感;广元地理位置靠近陕西省,距凉山州较远,其风格特点一般认定为中间香型:因此,近红外光谱模型预测结果与传统经验认识具有较高的一致性。

表 5 各地市烟叶近红外模型表征值

Table 5 Multiple comparison of predicted value of tobacco from different prefecture-level producing areas based on near infrared spectra								
州(市)	总糖/%	总植物碱/%	还原糖/%	氯/%	钾/%	总氮/%	部位	香型
凉山	37.71a	1.77c	29.55ab	0.06b	2.50b	1.68bc	2.35a	0.32a
攀枝花	38.78a	1.86bc	31.98a	0.12b	2.45b	1.62c	2.25ab	-0.04b
宜宾	29.60c	2.42ab	24.71c	0.16b	2.97a	1.88ab	1.95bc	-0.18b
泸州	28.21c	2.91a	23.92c	0.40a	2.47b	2.01a	1.75c	-0.26b
广元	34.19b	2.55a	27.92b	0.11b	2.38b	1.92a	1.76c	-0.18b

同列不同小写字母表示州(市)间的差异有统计学意义(P<0.05)。

2.4 替代配方比例的构成

在获取替代配方的烟叶样本池后,利用线性规划方法求解配方构成,即求解一个约束最小二乘问题,忽略所得最优解中比例小于 1.0%的样本,得出与目标配方的相似的替代配方的构成(表 6)。

基于近红外模型的目标配方与替代配方的质量指标对比见表 7,替代配方的总糖、还原糖、总植物碱、总氮、部位等指标与目标配方的相对误差小于 6%;钾、氯及香型的相对误差则超过 10%,这 3 个指标主要受量纲影响,可以说明替代配方与

目标配方的整体差异较小。

表 6 基于指标相似的替代烟叶配方的构成

Table 6 Formulation composition of substitute tobacco leaves based on similar indictors			
州(市)	县	等级	比例/%
凉山	会理县	C2FA1	5.0
凉山	会理县	C3FA1	23.0
凉山	盐源县	C2FA1	5.0
凉山	盐源县	C3FA1	40.0
凉山	宁南县	C2FC3	2.0
攀枝花	米易县	C3FA1	25.0

表 7 目标配方与替代配方小样的各项质量指标的比较

Table 7 Comparison of various quality indexes between target formulation and alternative formula sample								
配方	总糖/%	总植物碱/%	还原糖/%	氯/%	钾/%	总氮/%	部位	香型
替代配方	37.11	1.70	29.77	0.10	2.47	1.68	2.37	0.23
目标配方	37.12	1.69	29.79	0.08	2.81	1.66	2.52	0.20
相对误差/%	0.03	0.59	0.07	12.86	12.10	1.20	5.95	15.00

对替代配方与目标配方进行感官质量评价,结果见表 8。可以看出,除刺激性指标外,替代配方烟叶的香气量、清晰度、透发性、成团性、杂气、余味及劲头等指标与目标配方的差异不显著,替代配方在刺激性、余味方面的得分优于目标配方的,

香气量得分略低于目标配方的。结合近红外光谱模型预测质量指标及感官评吸结果,发现替代配方与目标配方在化学成分、部位、香型等指标方面较接近,且感官指标具有较好的相似度。

表 8 替代配方与目标配方烤烟的感官评吸得分

Table 8 Comparison of sensory assessment scores between target formulation and alternative formulation samples										
配方	香型	彰显程度	香气量	清晰度	透发性	成团性	杂气	刺激性	余味	劲头
替代配方	清香型	8.62±0.15	7.41±0.21	8.29±0.20	8.49±0.24	7.35±0.15	7.53±0.18	8.22±0.13	8.20±0.15	5.32±0.01
目标配方	清香型	8.51±0.27	7.52±0.22	8.32±0.19	8.52±0.26	7.42±0.20	7.58±0.21	8.03±0.17	8.03±0.17	5.41±0.21
P 值	1.00	0.38	0.34	0.74	0.84	0.42	0.64	0.03	0.07	0.31

3 结论

利用近红外光谱对烟叶常规化学成分、香型及部位建模,反映烟叶质量的总糖、总植物碱、还原糖及总氮的平均相对偏差小于 5%,部位评价模型的训练和测试精度分别为 83.3%和 79.4%,香型评价模型利用三维香型指数可定量反映产区香型特征及典型性,建模效果良好并能满足实际需求。

利用近红外光谱模型预测的烟叶化学成分、香型及部位等指标作为配方设计信息,筛选相似烟叶并对配方比例求解,采用指标评价与感官验证相结合的方式评价替代配方的设计效果,结果表明:替代配方烟叶的总糖、还原糖、总植物碱、总氮、部位等与目标配方的相对误差小于 6%;除刺激性指标外,替代配方的香气量、清晰度、透发性、成团性、杂气、余味及劲头等其他感官质量指标与目标配方的差异不显著,替代配方与目标配方质量较为接近。

参考文献:

- [1] 郭科,薛源,胡丹,等. 基于组合优化的卷烟叶组配方设计[J]. 中国烟草学报, 2007, 13(2): 21-23.
- [2] 雒兴刚,王楠,张忠良,等. 关联规则挖掘方法在智能卷烟配方维护中的应用[J]. 中国烟草学报, 2018, 24(3): 21-29.
- [3] 王蓓蓓,唐兴宏,钱颖颖,等. 基于矩阵的多维关联规则算法在烟叶复烤配方的应用研究[J]. 计算机与数字工程, 2019, 47(1): 253-257.
- [4] 王东丹,李天飞,吴玉萍,等. 近红外光谱分析技术在烟草化学分析上的应用研究[J]. 云南大学学报(自然科学版), 2001, 23(2): 135-138.
- [5] 蒋锦锋,李莉,赵明月. 应用近红外检测技术快速测定烟叶主要化学成分[J]. 中国烟草学报, 2006, 12(2): 8-12.
- [6] 束茹欣,蔡嘉月,杨征宇,等. 应用近红外光谱投影模型法分析烟叶的产区与风格特征[J]. 光谱学与光谱分析, 2014, 34(10): 2764-2768.
- [7] 王一丁,赵铭钦,付博,等. 利用可见-近红外光谱鉴定不同香型风格烤烟的方法[J]. 中国烟草科学, 2015, 36(6): 88-93.
- [8] 蔡嘉月,梁森,温亚东,等. 应用可见-近红外高光谱分析烟叶的颜色和部位特征[J]. 光谱学与光谱分析, 2014, 34(10): 2758-2763.
- [9] 于春霞,马翔,张晔晖,等. 基于近红外光谱和 SIMCA 算法的烟叶部位相似性分析[J]. 光谱学与光谱分析, 2011, 31(4): 924-927.
- [10] 王毅,马翔,温亚东,等. 应用近红外光谱分析不同年度工业分级烟叶的特性[J]. 光谱学与光谱分析, 2012, 32(11): 3014-3018.
- [11] 刘艺琳,张海燕,彭海根,等. 应用近红外光谱判别烟叶等级模型的可靠性及化学成分特征分析[J]. 光谱学与光谱分析, 2020, 40(10): 3260-3264.
- [12] 杨建云,田孟玉,裴梓烨,等. 基于近红外光谱技术的初烤烟叶致香成分含量特性快速定量评价[J]. 轻工学报, 2018, 33(5): 60-68.
- [13] 张建平,陈江华,束茹欣,等. 近红外信息用于烟叶风格识别及卷烟配方研究的初步探索[J]. 中国烟草学报, 2007, 13(5): 1-5.
- [14] 郝贤伟,帖金鑫,何文苗,等. 基于近红外光谱-感官评价的巴西烟叶风格模拟及替代[J]. 烟草科技, 2018, 51(10): 83-89.
- [15] 李石头,廖付,何文苗,等. 基于近红外光谱相似的烟叶替代与卷烟配方维护[J]. 烟草科技, 2020, 53(2): 92-97.
- [16] 米津锐,马翔,张雅娟,等. 基于近红外光谱投影及蒙特卡洛方法的烟叶配方比例上限分析[J]. 光谱学与光谱分析, 2011, 31(4): 915-919.
- [17] YC/T 31—1996 烟草及烟草制品试样的制备和水分测定[S].
- [18] YC/T 159—2002 烟草及烟草制品水溶性糖的测定[S].
- [19] YC/T 160—2002 烟草及烟草制品总植物碱的测定[S].
- [20] YC/T 162—2011 烟草及烟草制品氯的测定[S].
- [21] YC/T 161—2002 烟草及烟草制品总氮的测定[S].
- [22] YC/T 217—2007 烟草及烟草制品钾的测定[S].
- [23] SAVITZKY A, GOLAY M J E. Smoothing and differentiation of data by simplified least square procedure[J]. Analytical Chemistry, 1972, 44(11): 1906-1909.
- [24] XIANG B K, CHENG C H, XIA J, et al. Simultaneous identification of geographical origin and grade of flue-cured tobacco using NIR spectroscopy[J]. Vibrational Spectroscopy, 2020, 111: 103182.
- [25] LIAO F, LI Y S, HE W M, et al. Evaluation of aroma styles in flue-cured tobacco by near infrared spectroscopy combined with chemometric algorithms[J]. Journal of Near Infrared Spectroscopy, 2020, 28(2): 93-102.

责任编辑: 罗慧敏
英文编辑: 吴志立