

烟叶配比感官质量模型在叶组配方设计中的应用与分析

杨乾栩, 冯斌, 杨清, 王猛, 蔡波, 杨蕾, 张天栋, 朱保昆*

(云南中烟工业有限责任公司 技术中心, 云南 昆明 650231)

摘要: 为减少人为主观对叶组配方的影响, 增强叶组配方的客观性, 以红大、K326、NC297 和云 87 4 种烟叶的不同配比及相应感官得分出发, 建立了烟叶配比值与感官得分之间的数学模型, 筛选了对感官得分影响较大的烟叶配比组成, 并对模型进行了分析和验证。结果表明: 烟叶配比值与叶组感官得分之间具有较强的相关性, 在一定条件下, 烟叶配比值能较好地反映感官质量得分; 通过模型分析, 可以筛选出对复配烟叶感官影响较大的烟叶配比, 有助于在叶组配方设计中正确控制不同烟叶的比例; 结合等高线图分析, 在一定条件下, 可确定在不同烟叶配比条件下复配烟叶的感官得分范围; 验证实验证明, 通过烟叶配比感官得分模型调整烟叶配比比例, 可提高叶组感官得分。因此, 通过烟叶配比建立数学模型, 可以从一定程度上指导叶组配方, 减少人为影响因素。

关键词: 叶组配方; 感官质量; 数学模型; 烟叶配比值

中图分类号: TS 4 **文献标志码:** A **文章编号:** 1673—1689(2017)07—0756—06

Application and Analysis of Tobacco Leafs Ratios-Sensory Quality Model in Tobacco Blend

YANG Qianxu, FENG Bing, YANG Qing, WANG Meng,
CAI Bo, YANG Lei, ZHANG Tiandong, ZHU Baokun*

(Technology Center, China Tobacco Yunnan Industrial Co., Ltd., Kunming 650231, China)

Abstract: For avoiding human influence on tobacco blend, enhancing objectivity of tobacco blend. A mathematical model was developed and validated between tobacco leaves ratio and the corresponding sensory quality based on four tobacco leaves of HongDa, K326, NC297 and Yun 87. The informative tobacco leaves ratios were screened and analyzed coupled with aroma components. Result showed that: the tobacco leaves ratios were correlative with sensory quality greatly, and the established model could reflect the correlation between tobacco leaves ratios and sensory quality; by model analysis, the informative tobacco leaves ratios could be screened, which is beneficial to quantity and ratios control of tobacco leaf in tobacco blend; the sensory quality of tobacco blend under different tobacco leaves ratios could be predicted conditionally by coupled with contour map analysis;

收稿日期: 2015-08-03

基金项目: 云南省科技厅项目(Y0120160047); 云南中烟工业有限责任公司科技项目(2015CP04, 2016CP3)。

作者简介: 杨乾栩(1987—), 男, 重庆万州人, 理学博士, 工程师, 主要从事烟叶叶组配方, 香精香料相关研究。E-mail: nioll2hyhh@126.com

* 通信作者: 朱保昆(1977—), 男, 云南陆良人, 副研究员, 主要从事产品维护与料香调配研究。E-mail: 363613373@qq.com

引用本文: 杨乾栩, 冯斌, 杨清, 等. 烟叶配比感官质量模型在叶组配方设计中的应用与分析[J]. 食品与生物技术学报, 2017, 36(07): 756-761.

by validation test, a better tobacco blend was get by through adjustment of the tobacco leafs ratios according to result of Tobacco Leafs Ratios -Sensory Quality Model. So by means of mathematical model, it is helpful for tobacco blend and free of human subjective factors.

Keywords: tobacco blend, sensory quality, mathematical model, tobacco leafs ratios

为了克服传统的叶组配方存在的问题,一些利用客观数据指导叶组配方的方法被不断提出^[1-6]。郭科等^[7]采用 BP 神经网络模型建立了叶组配方主要化学成分与感官质量和烟气化学成分之间的相互关系,并对模型进行了最优化求解,获得了烟叶配比的佳比例,使叶组配方不只依赖于人工评价。杨蕾等^[8]通过结合烟丝的挥发性成分和感官质量对红河卷烟产品重新进行了叶组配方设计,使得重新配比后的叶组致香成分总量较原叶组有了较大的提高,酮类、醇类的增幅达 10%。徐若飞等^[9]建立了基于烟气化学成分与卷烟品质的叶组配方专家系统,可实现包括烟叶质量评价、叶组配方设计等功能,这样的专家系统相比于常规的人工叶组配方,可以实现烟叶资源的合理利用,降低生产成本。王晓辉等^[10]建立了以烟叶原料中的 β -紫罗兰酮、 β -二氢大马酮和巨豆三烯酮总量为指标的聚类分析结果作为叶组化学分组方法,在一定程度上克服了传统感官评价法对叶组分组的人为主观影响,有利于针对性的分组加工。欧明毅等^[11]采用灰色关联度法研究了烟叶配方模块的内在品质与综合评分的关系,发现影响综合评分大小的主要是糖类物质,其次是烟碱质量分数。

虽然目前已有较多的客观叶组配方方法被提出,然而这些研究方法大多集中于叶组化学成分与感官质量之间的相互关系研究^[12],由于叶组化学成分复杂,且化学成分的高低并非完全对应于感官质量的好坏^[13],因此有必要开发新的叶组配方优劣预测方法,更全面地反映叶组配方情况。

1 材料与方法

1.1 材料、试剂与仪器

试验材料为 2008 年云南地区的红大(C2F)、K326(C1F)、NC297(C3F)和云 87(C3F)复烤烟叶。对照叶组采用国内某成品卷烟的主要叶组配方。

试验用试剂和药品均为分析纯,色谱分析类试剂均为色谱纯。

BUCHIR-3000 型旋转蒸发仪:瑞士 BUCHI 公

司产品;Agilent GC 6890N/5973N MSD 气相色谱/质谱联用仪:美国 Agilent 公司产品。

1.2 方法

1.2.1 样品的制备 采用 4 因素 5 水平均匀设计,均匀设计表通过好格子点法设计^[14],如表 1 所示:

表 1 4 因素 5 水平均匀设计表

Table 1 Uniform design table of 4 factors-5 levels

序号	样本 1	样本 2	样本 3	样本 4
实验 1	1	2	3	4
实验 2	2	4	1	3
实验 3	3	1	4	2
实验 4	4	3	2	1
实验 5	5	5	5	5

由于均匀设计本身优良性的缺点^[15-16],实验中补充两组烟叶复配试验。

按照表 2 的实验方案,对复配后的叶组样品进行致香成分分析和感官评价。

1.2.2 复配叶组同时蒸馏萃取 在同时蒸馏萃取装置一端圆底烧瓶中加入 20 g 碾碎的复配烟叶,并加入 200 mL 蒸馏水,另一端加入 20 mL 二氯甲烷,复配烟叶端用电热套加热,二氯甲烷端用 60 ℃水浴加热,同时蒸馏萃取 3 h。将获得的二氯甲烷萃取液用无水硫酸钠干燥后,于 4 ℃下静置 24 h。取二氯甲烷上清液,过滤后,将滤液用 Vigreux 柱浓缩至约 1 mL。每个复配叶组样品,同时蒸馏萃取 1 次。

表 2 实验组中各品种烟叶质量

Table 2 Weight of tobacco varieties in experimental group

试验编号	红大	K326	NC297	云 87	合计
FP-01	25	50	75	100	250
FP-02	50	100	25	75	250
FP-03	75	25	100	50	250
FP-04	100	75	50	25	250
FP-05	62.5	62.5	62.5	62.5	250
FP-06	50	71	57	72	250
FP-07	62	52	84	52	250

注:FP-01—FP05 代表均匀设计实验组,FP-06—FP-07 代表补充实验组^[17]。

选择萘为内标物,每1 mL二氯甲烷浓缩液中加入50 μ L,含0.1 mol/L萘的无水乙醇溶液,摇匀后,用于GC-MS分析。

1.2.3 复配叶组 GC-MS 分析

1)气相色谱条件 毛细管柱:HP-5MS(30 m $\times$ 0.25 mm,0.25 μ m);进样温度:240 $^{\circ}$ C;载气:He,1.0 mL/min;分流比 25:1;进样体积为2 μ L;程序升温,起始温度50 $^{\circ}$ C保持1min,以10 $^{\circ}$ C/min速度上升到260 $^{\circ}$ C,保持260 $^{\circ}$ C 5 min结束;GC-MS接口温度:280 $^{\circ}$ C。

2)质谱条件 EI方式,离子源温度:200 $^{\circ}$ C;离子化电压:70 eV,扫描范围:35~455 amu;扫描速率:1.65 scan/s;所得图谱经计算机谱库(NBS75,Wiley138)检索。

1.2.4 复配叶组样品感官分析 将配比烟叶叶组和对照叶组配方用相同的卷烟辅料卷制成烟支,按GB5606-2005^[18]的方法进行感官分析,由从事卷烟

产品研究工作多年,且具备卷烟国评资格的专业评吸技术人员7人对配比烟叶制成的烟支样品进行感官评价。

1.2.5 数据分析 将每组实验样品的烟叶质量转化为烟叶质量分数后^[19],采用Matlab 2012b进行的二次多项式逐步回归分析,其中变量进入和剔除的显著性检验 F 值分别为0.05和0.10,并采用SPSS 16进行模型及参数的方差分析。

2 结果与讨论

2.1 复配叶组样品致香成分分析

将复配的5个叶组样品进行GC-MS分析,表3是复配叶组样品的致香成分质量分数表,从中可以看出,不同配比的复配叶组总致香成分质量分数排序为:FP-03>FP-05>FP-07>FP-04>FP-06>FP-01>FP-02,其中FP-03的总致香成分最高,且其所含的酮类、新植二烯和酯类的质量分数也最高。

表3 复配叶组样品的致香成分质量分数

Table 3 Quality of aromatic constituents from the mixing ratio tobacco leaf

致香成分	FP-01	FP-02	FP-03	FP-04	FP-05	FP-06	FP-07
酮类	12.76	13.83	20.79	11.76	14.03	14.33	12.60
杂环类	1.85	1.96	2.74	1.68	1.69	1.74	1.43
醛类	2.89	2.94	3.68	2.58	3.06	2.48	1.57
有机酸类	14.42	5.22	9.99	10.29	13.53	12.31	6.78
醇类	2.89	2.35	7.05	2.07	2.48	2.74	1.87
酯类	12.18	4.86	17.64	9.68	10.67	7.29	8.44
苯酚类	1.08	1.29	.93	1.10	1.12	.98	1.02
新植二烯	191.2	129.5	363.2	249.9	291.7	223.4	273.1
总量	239.27	161.95	426.02	289.06	338.28	265.27	306.81

2.2 复配叶组样品感官质量分析

复配叶组样品的感官质量平均得分见表4。感官质量评价总分排序为:FP-03>FP-04>FP-01>FP-02>FP-06>FP-07>FP-05。通过表4感官评价得分与表3致香成分质量分数比较来看,感官质量得分排序与总致香成分质量分数的排序不完全相同,可见叶组致香成分含量与感官评价得分并不具有强相关^[13],从一定程度上说明采用叶组化学成分表征感官质量具有局限性。

2.3 感官质量模型建立及分析

为减少模型复杂度,提高模型的预测能力,将每组实验样品的烟叶质量分数转换为烟叶质量分数比^[20],转换后的数据如表5所示。

采用烟叶质量分数比的运算方式具有2个优

点:可避免相同烟叶配比,不同烟叶质量分数的情况下,一般模型无法给出相同预测结果的情况。但对于一般的模型,会将这两种情况视为不同的数据输入而得到不同的感官质量得分。因此,将烟叶质量分数比转化后,避免不同烟叶质量分数带来的影响;采用烟叶质量分数比的运算方式可减少参与建模的变量数。当烟叶数量增加时,则进入最终模型的变量数目要显著增加,同时也会导致建模所需样本量要增加。经过建模分析,当以百分比的方式进行二次回归建模时,需要6个变量才能达到之前的模型精度。

将转换后的烟叶的具体配比值和对应的感官评价总得分进行二次多项式逐步回归建模,共有3个变量被引入到模型中,模型表达式如下:

表 4 复配叶组样品的感官质量平均得分

Table 4 Averagesensory quality score of the mixing ratio tobacco leaf

指标	对照	FP-01	FP-02	FP-03	FP-04	FP-05	FP-06	FP-07
香韵	7.50	7.58±0.20	7.25±0.75	8.00±0.00	7.67±0.40	6.67±0.51	7.25±0.75	6.67±0.51
协调	9.00	9.00±0.00	8.75±0.27	9.00±0.00	8.75±0.41	8.25±0.27	8.75±0.41	8.75±0.41
香气值	7.50	7.67±0.51	7.25±0.41	7.75±0.27	7.42±0.37	6.67±0.40	7.25±0.27	7.42±0.37
香气量	7.50	7.33±0.40	7.58±0.37	7.75±0.52	7.67±0.60	7.33±0.51	7.67±0.60	7.33±0.51
浓度	7.00	6.92±0.49	7.25±0.27	7.50±0.54	7.08±0.20	7.17±0.25	7.08±0.20	7.08±0.20
杂气	8.00	7.92±0.20	7.75±0.27	8.00±0.00	7.92±0.20	7.17±0.25	7.17±0.25	7.17±0.25
刺激性	8.00	8.33±0.25	8.25±0.27	8.33±0.25	8.25±0.27	7.67±0.25	7.67±0.25	8.25±0.27
劲头	10.00	9.83±0.40	10.00±0.00	10.00±0.00	9.83±0.40	9.83±0.40	9.83±0.40	9.83±0.40
干净	3.50	3.58±0.20	3.50±0.00	3.67±0.25	3.58±0.49	3.00±0.31	3.50±0.00	3.00±0.31
回味	3.50	3.42±0.20	3.17±0.25	3.67±0.25	3.42±0.20	3.00±0.00	3.17±0.25	3.00±0.00
湿润	3.00	3.17±0.40	3.08±0.20	3.50±0.31	3.33±0.25	2.75±0.27	2.75±0.27	3.08±0.20
舒适	3.50	3.75±0.41	3.58±0.58	3.83±0.51	3.50±0.44	3.00±0.00	3.83±0.51	3.58±0.58
合计	78.00	78.50±0.63	77.58±1.82	80.92±1.42	78.67±1.36	72.58±0.86	75.92±0.67	75.16±1.02

表 5 转换后的叶组样品中的烟叶配比数据

Table 5 Converted mixing ratio data in tobacco leaf

序号	红大/K326 (x_1)	红大/NC297 (x_2)	红大/云 87 (x_3)	K326/NC297 (x_4)	K326/云 87 (x_5)	NC297/云 87 (x_6)
对照	0.90	0.60	0.90	0.67	1.00	1.50
FP-01	0.50	0.33	0.25	0.67	0.50	0.75
FP-02	0.50	2.00	0.67	4.00	1.33	0.33
FP-03	3.00	0.75	1.50	0.25	0.50	2.00
FP-04	1.33	2.00	4.00	1.50	3.00	2.00
FP-05	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00
FP-06	0.70	0.88	0.70	1.25	1.00	0.80
FP-07	1.20	0.75	1.20	0.63	1.00	1.60

$$Y=88.724-26.626X_1+2.958X_1^2+7.573X_1X_6$$

其中 X_1 为红大/K326, X_6 为 NC297/云 87, Y 为感官评价分值。

实际感官得分和模型预测感官得分散点图见图 1,模型的方差分析结果见表 6,模型参数的检验结果见表 7。该模型 $R^2=0.981$, 调整 $R^2=0.967$, $F=70.141$, $p=0.001$ 。模型的自变量包含红大/K326(X_1)和 NC297/云 87 (X_6), 表明复配叶组感官质量与 4 种烟叶的相对含量间具有高度统计学意义。

从图 1 还能看出,烟叶配比感官质量二次多项式模型构建较优。为防止模型过拟合,采用 Leave one out 交互验证方法对模型进行了检验,结果表明,模型交互验证预测误差为 0.2105,模型回归系数方差分别为 0.882、2.065、0.175 和 0.345,除 X_1 系数变化稍大外,其他回归系数均比较稳健,说明模型构建的比较稳健。

从表 7 可见, $X_1, X_1^2, X_1 \cdot X_6$ 的系数分别是 -8.446、3.394 和 5.658,这也从一定程度上说明了模型引入变量对卷烟叶组口感影响重要度分别是: $X_1 > X_1^2 > X_1 \cdot X_6$ 。

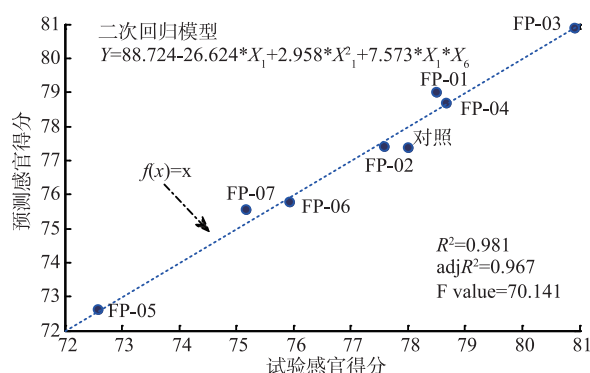


图 1 复配烟叶实际感官得分和预测感官得分散点图

Fig. 1 Scatter plot of the actual and predicted sensory quality score of mixing ratio tobacco leaf

表 6 模型方差分析结果

Table 6 Analysis resultsof model variance

模型	离差和	自由度	均方差	F 值	P 值
回归	44.758	3	14.919	70.141	0.001**
残差	0.851	4	0.231		
总计	45.609	7			

表 7 模型参数方差分析结果

Table 7 Analysis results of model parameter variance

模型	非标准化系	标准化系数	t 值	P 值
常数项	88.724		80.624	0.000
X_1	-26.626	-8.446	-11.896	0.000
X_1^2	2.958	3.394	9.404	0.011
$X_1 * X_6$	7.573	5.658	10.869	0.000

根据烟叶配比感官预测模型,在试验点范围内做烟叶配比关于感官质量的等高线图,考察不同烟叶配比组合变化对复配烟叶感官质量的影响变化,蓝色区代表感官得分较低配比组合,红色区代表感官得分较高的配比组合,如图 2。

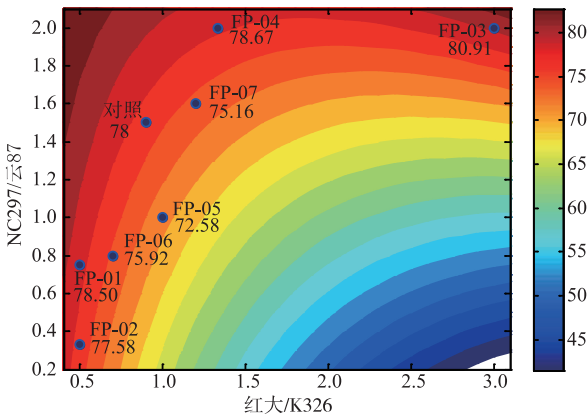


图 2 基于烟叶配比感官预测模型的红大/K326 与 NC297/云 87 等高线图

Fig. 2 Hongda/K326 and NC297/Yun 87 contour map based on tobacco leafs proportions -sensory quality model

表 8 列出了预测较高和较低感官得分时,烟叶配比大小与复配叶组感官质量评分的关系。

表 8 烟叶配比大小与复配烟叶感官质量评分的关系

Table 8 Relationship between mixing ratio tobacco leaf and sensory quality score

	红大/K326	NC297/云 87	预测感官评分
区间 1	<0.5	>1	>80
区间 2	>3	>2	>80
区间 3	>1	<1	<72

通过上面的分析不难发现,当红大/K326<0.5, NC297/云 87>1 时,叶组配方感官质量得分较高,同时烟叶配比操作相对容易,配比质量比较稳定。从图 2 也可以看出,当红大/K326<0.5,无论 NC297/云 87 值多少,基本上都能保证较高的感官质量得分。

2.4 模型的验证和应用

表 9 是验证试验复配烟叶的通过感官评价得分表。从表中来看,验证试验 1 调整后的叶组配方其香韵,香气值,舒适度等都较对照有所改善,其感官得分总分为 80.7,提升了大约 2.7 分。此配比条件下的理论感官得分预测值为 81.4,与实验值比较接近。相比之下,验证试验 2 中的叶组配方其感官得分明显低于验证试验 1,仅有 70.43 分,符合表 8 中的“较低”预测区。从模型验证误差来看,验证试验 2 的实际感官得分值与预测值误差大于验证试验 1,说明模型的预测范围应控制在建模试验点范围内。

表 9 验证试验复配烟叶感官得分

Table 9 Sensory quality score of validated mixing ratio tobacco leaf

感官质量	验证 1	验证 2
香韵	8.0±0.10	6.25±0.23
协调	9±0.21	8±0.13
香气值	8±0.40	6.67±0.12
香气量	8±0.33	7±2.0
浓度	7.5±0.27	6.92±0.22
杂气	8±0.25	7.17±0.15
刺激性	8±0.27	7.5±0.22
劲头	10±0.00	9±0.04
干净	3.6±0.10	2.85±0.12
回味	3.5±0.00	3±0.10
湿润	3.5±0.00	2.5±0.00
舒适	3.6±0.40	3±0.35
合计	80.7±1.22	70.43±0.98
预测值	81.4	68.4

3 结 语

烟叶是决定卷烟品质的根本,叶组配方的比例变化对卷烟特定吸味风格和品质的塑造有重要影响。通过模型分析可以筛选出对最终复配烟叶感官影响较大的烟叶配比,有助于在叶组配方中,掌握影响复配烟叶感官品质的主要因素,正确控制不同烟叶的含量和比例;结合等高线图,可确定在不同

烟叶配比条件下复配烟叶的感官得分,通过验证实验证明,结合烟叶配比感官得分模型,在一定条件

下,可以通过调整烟叶配比比例,提高叶组感官得分,对叶组配方案具有一定的指导意义。

参考文献:

- [1] ABDALLAH F M. 叶组配方和加工科学和技术技巧 [A]. 中国烟草学会第四届理事会第三次会议暨 2002 年学术年会会刊 [C]. 长沙:中国烟草学会,2002.
- [2] SHU Junsheng, YAO Zhongda, WANG Haojun, et al. Establishment of the optimal model on chemical content in flue-cured tobacco and smoke composition[J]. **Journal of Food Science and Biotechnology**, 2013, 32(3): 1673-1689. (in Chinese)
- [3] WANG Qiang, LI Mengjun, CHENG Yingwu. Research progress in data mining technology on cigarette formulation[J]. **Chinese Tobacco Science**, 2007, 28(4): 14-17. (in Chinese)
- [4] GIOKAS D L, THANASOULIAS N C, VLESSIDIS A G. Multivariate chemometric discrimination of cigarette tobacco blends based on the UV-Vis spectrum of their hydrophilic extracts[J]. **Journal of Hazardous Materials**, 2011, 185(1): 86-92.
- [5] LEBEAU B, HAMMERS W E. Estimation of tobacco blend compositions using closed-loop stripping analysis and stepwise multiple linear regression and partial least-squares techniques[J]. **Journal of Chromatography A**, 1992, 596(2): 285-289.
- [6] SHAO Huifang. The establishment of BP neural network based models for predicting tobacco leaf sensory quality[J]. **Acta Tabacaria Sinica**, 2011, 17(1): 19-25. (in Chinese)
- [7] GUO Ke, XUE Yuan, HU Dan, et al. Designing cigarette blending formulation based on combined optimization [J]. **Acta Tabacaria Sinica**, 2007, 13(2): 21-23. (in Chinese)
- [8] YANG Lei, YANG Qing, LI Yong. Design of cigarette blend based on analysis of volatile components in tobacco leaf[J]. **Tobacco Science & Technology**, 2010(8): 10-17. (in Chinese)
- [9] XU Ruofei, LIU Wei, CHEN Zhangyu, et al. Development of expert system for tobacco quality evaluating and cigarette blending [J]. **Tobacco Science & Technology**, 2007(6): 16-20. (in Chinese)
- [10] WANG Xiaohui, YI Bin, TAN Guozhi, et al. Method for grouping tobacco in a blend based on chemical properties thereof[J]. **Tobacco Science & Technology**, 2013(3): 5-7. (in Chinese)
- [11] OU Mingyi, WU Youxiang, XU Hongqing, et al. Grey system analysis on inner quality of tobacco blending module[J]. **Journal of Food Science and Biotechnology**, 2009, 28(4): 509-512. (in Chinese)
- [12] SUN Jingguo, HE Jiewang, WU Fengguang, et al. Comparative analysis on chemical components and sensory quality of aging flue-cured tobacco from four main tobacco areas of China[J]. **Agricultural Sciences in China**, 2011, 10(8): 1222-1231.
- [13] LI Heng, LUO Huayuan, WANG Yu, et al. Correlativity analysis on the aroma compositions and smoking quality of flue-cured tobacco leaves[J]. **Journal of Kunming University**, 2008, 30(4): 37-40. (in Chinese)
- [14] CAO Huirong, LI Li. Uniform design table based on MATLAB[J]. **Statistics and Decision**, 2008(6): 144-146. (in Chinese)
- [15] RITLEY B D. Review of number-theoretic methods in statistics[J]. **Journal of Royal Statistical Society. Series A**, 158(57): 180-190.
- [16] DING Yuan. Study of superiority of uniform design table[J]. **Chinese Journal of Applied Probability and Statistics**, 1986, (2): 153-158. (in Chinese)
- [17] QIN L T, LIU S S, ZHANG J, et al. A novel model integrated concentration addition with independent action for the prediction of toxicity of multi-component mixture[J]. **Toxicology**, 2011, 280(3): 164-172.
- [18] GB5606-2005. 卷烟感官技术要求[S]. 2005.
- [19] ROSTAMI H-A, NURMINEN S, JACKSON P-R, et al. Caffeine urinary metabolite ratios as markers of enzyme activity: a theoretical assessment[J]. **Pharmacogenetics**, 1996(6): 121-149.
- [20] SHANG Hongcai, ZHANG Boli, GAO Xiumei, et al. Pharmacodynamics comparative study of Salvia-Radix Notoginseng pair in different proportion[J]. **Liaoning Journal of Traditional Chinese Medicine**, 2002, 29(5): 297-299. (in Chinese)