

田震, 藏照阳, 毛文龙, 等. 云南楚雄和丽江烟叶关键质量指标筛选及分类研究[J]. 中国烟草学报, 2023, 29(4). TIAN Zhen, ZANG Zhaoyang, MAO Wenlong, et al. Screening and classification of key quality indexes of tobacco leaves from Chuxiong and Lijiang in Yunnan Province[J]. Acta Tabacaria Sinica, 2023, 29(4). doi:10.16472/j.chinatobacco. 2022.T0211

云南楚雄和丽江烟叶关键质量指标筛选及分类研究

田震¹, 藏照阳², 毛文龙¹, 李少鹏¹, 王桂瑶², 周会娜², 杨萌萌², 宋纪真^{2*}

1 江苏中烟工业有限责任公司, 技术中心, 南京市兴隆大街 29 号 210019;

2 中国烟草总公司郑州烟草研究院, 生态环境与烟叶质量重点实验室, 郑州市高新技术开发区枫杨街 2 号 450001

摘要:【目的】探索表征云南烟叶质量的关键指标, 并明确各指标在不同质量档次烟叶中的差异。【方法】针对楚雄和丽江烟叶, 采用唯一差别原则制备不同外观特征样品, 进行外观和感官质量评价, 以及常规化学成分和代谢组测定。采用随机森林分析筛选影响烟叶质量的关键质量指标, 并以此对烟叶样品进行聚类分析。【结果】(1) 筛选出 12 个关键质量指标: 品牌符合度、香气质、杂气、叶片结构、身份、油分、淀粉、总糖、总氮、酚酸、高级脂肪酸和氨基酸;(2) 将烟叶样品分为 3 个质量类别: 类 1 烟叶杂气较轻, 香气质中偏上, 品牌符合度好, 叶片结构疏松性较好, 身份中等, 总糖含量较高, 总氮和酚酸、高级脂肪酸、氨基酸类代谢产物含量较低; 类 3 烟叶杂气有, 香气质中等, 品牌符合度一般, 叶片结构疏松性最差, 身份稍厚, 总糖含量较低, 总氮和酚酸、高级脂肪酸、氨基酸类代谢产物含量较高; 类 2 烟叶绝大多数指标介于类 1 和类 3 之间;(3) 叶片结构、身份和总糖与烟叶质量呈正相关, 总氮和酚酸、高级脂肪酸、氨基酸类代谢产物含量与烟叶质量呈负相关。【结论】本研究结果明确了楚雄和丽江烟叶生产、收购、加工和配方应用等环节需重点关注的指标, 为提高烟叶质量和工业适用性奠定基础。

关键词: 烟叶质量; 质量指标; 随机森林; 代谢产物; 质量类别

烟叶是卷烟工业的基础, 其质量直接影响卷烟产品的品质^[1]。掌握能够表征烟叶质量的重要质量指标, 并明确指标的重要性和相关关系, 对烟叶生产和应用具有重要的指导意义^[2-3]。

目前, 主要通过外观质量、感官质量和化学成分评价指标来反映烟叶的质量^[4-6], 魏春阳等^[7]、过伟民等^[8]研究表明烤烟各外观质量因素均存在区域性分布, 黄清芬等^[9]、常爱霞等^[10]、蔡宪杰等^[11]、闫铁军等^[12]分别就烟叶的外观质量、化学成分与评吸质量的相关性进行了研究。吴殿信等^[13]对烤烟各评价指标进行量化处理, 并赋予不同的权重, 制定出了各等级烤烟烟叶的质量指数。邓小华等^[14]、王育军等^[15]、孟霖等^[16]运用描述统计和典型相关等统计分析方法, 探索了烟叶质量评价指标间的定性和定量相关关系。褚旭等^[17]应用综合赋权法对烟叶不同质量指标进行赋权评价。

然而, 当前研究大多是针对常规的质量评价指标, 对影响烟叶质量的代谢产物指标研究较少。随着现代分析技术的发展, 对烟叶内在低分子量 (<1000 Da) 代谢产物进行高通量定性和定量分析的代谢组学检测已应用于烟草研究领域^[18-21], 本研究结合烟叶外观、常规化学成分、感官等质量评价指标与代谢组学检测指标, 采用随机森林算法筛选能够表征云南楚雄和丽江烟叶质量的关键指标, 以期对烟叶生产和卷烟工业的原料配方应用提供理论依据。

1 材料与方法

1.1 材料

烟叶原料选用 2021 年度云南楚雄和丽江烟叶产区的初烤烟叶, 烟叶品种为云烟 87, 涉及 C1F、C2F、C3F、C4F、C3L、B1F、B2F、B3F 等级, 每个等级

基金项目: 中国烟草总公司重点研发项目“基于提升原料综合利用效能的卷烟配方设计技术集成与应用”(NO. 110202103006); 江苏中烟工业有限责任公司科技项目“基于苏产卷烟品牌需求的烟叶原料基地层级优化研究”(NO.202001)

作者简介: 田震 (1988—), 硕士研究生, 农艺师, 主要从事烟叶原料和卷烟配方研究, Tel: 025-69896817, Email: tianzhen@jszygs.com

通讯作者: 宋纪真 (1965—), Tel: 0371-67672312, Email: 1063067425@qq.com

收稿日期: 2022-08-12; **网络出版日期:** 2023-02-17

取样 20 kg。

1.2 方法

1.2.1 不同外观特征烟叶样品制备方法

在 GB2635—1992 烤烟分级标准规定的品质因素^[22]中选取颜色、叶片结构、身份、油分等 4 个易于分辨的外观特征指标，采用唯一差别原则分别制备云南楚雄、丽江中部烟叶和上部烟叶的不同外观特征质量烟叶样品，见表 1。在针对某一外观特征样品制备

时，要尽可能保持其他特征指标一致，如针对颜色指标制备中部烟叶样品时，需尽量选取叶片结构疏松、身份中等、油分一致的烟叶，按照其颜色深浅、含青和含杂程度进行分别取样；针对叶片结构指标制备中部烟叶样品时，需尽量选取不含青杂、颜色一致、身份中等、油分一致的烟叶，按照其叶片结构的疏松程度进行分别取样；同理，进行中部烟叶其他外观特征指标样品和上部烟叶各外观特征指标样品的制备。

表 1 不同外观特征烟叶样品制备方法
Tab.1 Preparation method of tobacco leaf samples with different appearance characteristics

特征指标	中部				上部			
	颜色	叶片结构	身份	油分	颜色	叶片结构	身份	油分
特征质量	柠檬黄	疏松	中等	较好	柠檬黄	疏松	中等	较好
	微带青	尚疏松	稍薄	中等	微带青	尚疏松	稍厚	中等
	含青重 轻微杂色 杂色较重				含青重 轻微杂色 杂色较重			

1.2.2 外观质量评价方法

以 GB2635—1992 烤烟分级标准为基础，建立烟叶外观质量 10 分制评分标准，由全国烟叶外观质量评

价专家组对烟叶样品的外观质量进行评价，评价指标包含颜色、成熟度、叶片结构、身份、油分和色度，评分标准见表 2。

表 2 烤烟外观质量评分标准
Tab.2 Appearance quality scoring standard of flue-cured tobacco

颜色	分数	成熟度	分数	叶片结构	分数	身份	分数	油分	分数	色度	分数
桔黄	7~10	成熟	7~10	疏松	8~10	中等	7~10	多	8~10	浓	8~10
柠檬黄	6~9	完熟	6~9	尚疏松	5~8	稍薄	4~7	有	5~8	强	6~8
红棕	3~7	尚熟	4~7	稍密	3~5	稍厚	4~7	稍有	3~5	中	4~6
微带青	3~6	欠熟	0~4	紧密	0~3	薄	0~4	少	0~3	弱	2~4
青黄	1~4	假熟	3~5			厚	0~4			淡	0~2
杂色	0~3										

1.2.3 感官质量评价方法

以《烟草及烟草制品 感官评价方法 YC/T138—1998》为基础，建立烤烟感官质量 9 分制评价方法，并邀请对云南烟叶质量要求相对一致的多家卷烟工业的评委组成评价专家组对烟叶样品进行感官质量评

价。评价指标包括浓度、劲头、香气质、香气量、透发性、杂气、细腻程度、圆润感、刺激性、余味、甜度和品牌符合度 12 个指标。其中，品牌符合度指标由各卷烟工业评委分别根据其品牌原料需求进行评价后取平均值。各评价指标评分标准见表 3。

表 3 烤烟感官质量评分标准
Tab.3 Sensory quality scoring standard of flue-cured tobacco

评价指标	程度	分值	评价指标	程度	分值
浓度	浓	7.6~9.0	劲头	大	7.6~9.0
	较浓	6.1~7.5		较大	6.1~7.5
	中等	4.6~6.0		中等	4.6~6.0
	较淡	3.1~4.5		较小	3.1~4.5
	淡	≤3		小	≤3
香气质	好-较好	7.6~9.0	香气量	足-较足	7.6~9.0
	中偏上	6.1~7.5		尚足	6.1~7.5
	中等	4.6~6.0		有	4.6~6.0
	中偏下	3.1~4.5		较少	3.1~4.5
	较差~差	≤3		少	≤3
透发性	透发	7.6~9.0	杂气	很轻	7.6~9.0
	较透发	6.1~7.5		较轻	6.1~7.5
	尚透发	4.6~6.0		有	4.6~6.0
	略差	3.1~4.5		较重	3.1~4.5
	差	≤3		重	≤3
细腻程度	细腻	7.6~9.0	圆润感	圆润	7.6~9.0
	较细腻	6.1~7.5		较圆润	6.1~7.5
	尚细腻	4.6~6.0		尚圆润	4.6~6.0
	稍粗糙	3.1~4.5		略差	3.1~4.5
	较粗糙	≤3		较差	≤3
刺激性	小	7.6~9.0	余味	舒适	7.6~9.0
	较小	6.1~7.5		较舒适	6.1~7.5
	有	4.6~6.0		尚适	4.6~6.0
	较大	3.1~4.5		欠适	3.1~4.5
	大	≤3		滞舍	≤3
甜度	甜	7.6~9.0	品牌符合度	好	≥86
	较甜	6.1~7.5		较好	76~85
	尚甜	4.6~6.0		一般	66~75
	略甜	3.1~4.5		较差	≤65
	较差~差	≤3			

1.2.4 常规化学成分检测方法

淀粉作为烟叶中主要的碳水化合物储备物质,其含量已成为烟草品质评价的重要指标^[23]。因此,在常规化学成分指标中增加了淀粉含量的检测。采用 YC/T 468—2013、YC/T 161—2002、YC/T 159—2002、YC/T 216—2007、YC/T 217—2007、YC/T 162—2002 等标准检测方法,对烟叶样品的总植物碱、总氮、总(还原)糖、淀粉、钾、氯等 6 个常规化学成分指标分别进行检测。

1.2.5 代谢组学测定

对烟叶样品中代谢产物进行测定,并采用面积归一法对测定结果进行定量比较。具体测定方法:取各样品烟叶粉末 20 mg 置于 2 mL 离心管中,加入 1.5 mL 提取试剂(乙腈:异丙醇:水=3:3:2),在 4℃ 环境

下超声提取 1 h,高速离心机 14000 r·min⁻¹ 离心 10 min,取上清液 500 μL 真空浓缩干燥^[24]。干燥后的样品加入衍生化试剂进行衍生化,取上层清液至进样瓶中待测。

使用 Agilent 7890/5975C 型气相色谱-质谱联用仪对样品进行测定,气相色谱-质谱条件参考 ZHAO 等^[25]。气相色谱条件:色谱柱 DB-5MS 柱(0.25 μm, 0.25 mm×30 m);载气:氦气;柱流速:1.2 mL/min;进样口温度:300℃;进样体积 1 μL;分流比 10:1。质谱条件:电子轰击(EI)离子源;电子能量 70 eV;检测器电压:1.2 kV;离子源温度:240℃;质量范围:m/z 33~600 amu;扫描方式:全扫描-选择离子监测(Scan-SIM)。通过比对 Scan 结果与标准谱图库以及标准品的保留时间、保留指数进行定性分析,然后利用特征离子 SIM 进行定量。

1.2.6 随机森林分析

随机森林是由多个决策树并行组成的一种集成的预测方法^[26]。因此,为分析每个特征的重要性,需先明确每个特征在每一棵决策树上所做的贡献量,这种贡献量的计算方法是求解该特征在某个节点上,分枝前后的基尼指数(Gini)差值,用同样的方法求得其他特征的贡献值,最后将某个特征基尼指数变化值除以所有特征基尼指数变化值之和,求得某个特征归一

化后的贡献量,并根据贡献量大小进行排序^[27]。在构建模型时,首先从原始数据集中有放回地随机抽取 N 个与原样本集同样大小的子集,对每个子集分别建立决策树模型。构建决策树时,从全部 K 个特征中随机抽取一个特征子集(特征子集大小通常取 $\log 2K$),然后从特征子集中选择最优的分裂特征进行建模^[28],见图 1。

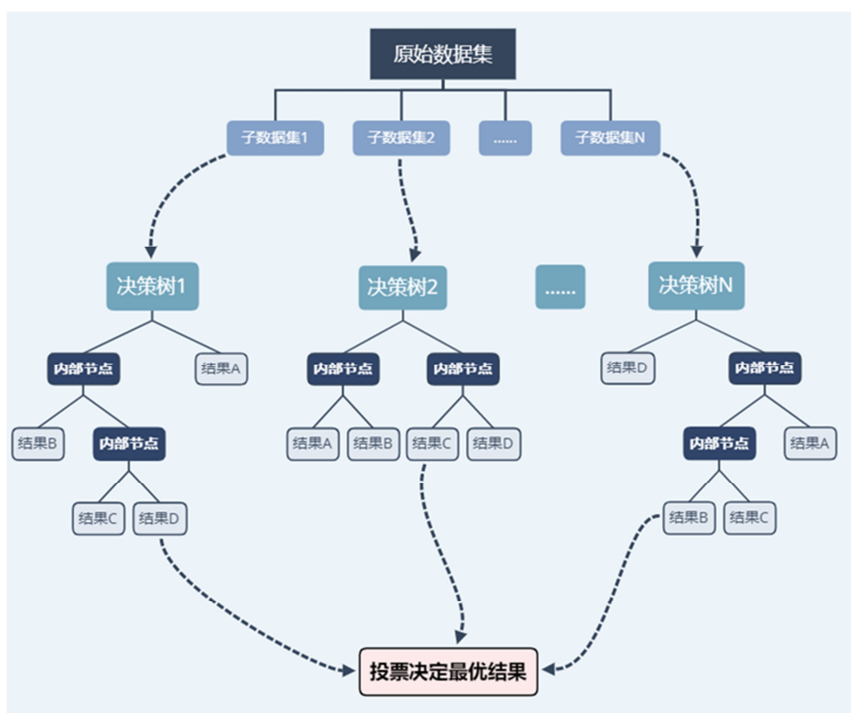


图 1 随机森林模型

Fig.1 Random forest model

1.2.7 数据分析方法

随机森林:采用 Python 3.9 及 sklearn 第三方库进行随机森林特征重要性分析和相关数据处理。通过随机森林特征重要性方法,分别评价各感官、外观、常规化学成分和代谢产物类型指标对感官各指标的相对重要性程度,并根据其重要程度排序进行赋分,重要程度排序最低的赋 1 分,重要程度排序倒数第二的赋 2 分,以此类推完成赋分后,对每个指标的全部赋分值累加,计算其综合重要性赋分值,并按照各类指标的综合重要性赋分值排名筛选相对重要的特征指标。

聚类分析:采用 R 4.1.3 和 LICORS 第三方包,对筛选的关键质量指标进行聚类分析,以 K-means++ 为聚类方法, K 选择 3,通过热图进行分类结果的可视化表达。

2 结果与分析

2.1 不同外观特征烟叶样品的制备

本研究采用唯一差别原则,按照颜色、叶片结构、身份、油分 4 个外观特征指标,分别制备了云南楚雄、丽江中部烟叶和上部烟叶的不同外观特征烟叶样品,共计 44 个烟叶样品,见表 4。其中,鉴于楚雄和丽江中部烟叶颜色以桔黄和柠檬黄为主、身份以中等和稍薄为主,上部烟叶颜色以桔黄为主、身份以中等和稍厚为主,故而未制备中部深桔黄、浅桔黄、稍厚样品和上部柠檬黄、稍薄样品;叶片结构稍紧的中部烟叶样品 2 个,其他中部烟叶样品叶片结构均为疏松;身份稍薄的中部烟叶样品 1 个,其他中部烟叶样品身份均为中等。

表 4 不同外观特征烟叶样品清单
Tab.4 The list of tobacco leaf samples with different appearance characteristics

外观指标	制样要求	中部叶样品数量/个	上部叶样品数量/个
颜色	深桔黄		1
	桔黄	2	1
	浅桔黄		1
	柠檬黄	2	
	含青程度高	2	2
	含青程度低	3	2
	含杂程度高	2	2
	含杂程度低	2	2
叶片结构	稍紧	2	2
	疏松		1
身份	稍厚		1
	中等		1
	稍薄	1	
油分	较好	2	2
	中等	2	2
	较差	2	2
合计		22	22

2.2 基于随机森林分析的关键质量指标筛选

2.2.1 关键外观指标筛选

通过随机森林特征重要性方法分析各外观指标对

感官指标的相对重要性，按照各外观指标的综合重要性赋分值选择排名前 3 的作为关键外观指标，由表 5 可知，关键外观指标分别为：叶片结构、身份和油分。

表 5 外观指标相对重要性分析
Tab.5 Analysis of relative importance of appearance indexes

	颜色	成熟度	叶片结构	身份	油分	色度
浓度	0.036	0.033	0.276	0.080	0.109	0.465
劲头	0.065	0.054	0.341	0.102	0.117	0.320
香气质	0.074	0.086	0.379	0.224	0.158	0.079
香气量	0.064	0.086	0.180	0.278	0.213	0.178
透发性	0.112	0.072	0.124	0.216	0.185	0.291
杂气	0.050	0.067	0.281	0.349	0.181	0.073
细腻程度	0.085	0.063	0.488	0.186	0.099	0.078
圆润感	0.064	0.085	0.382	0.184	0.192	0.094
刺激性	0.060	0.058	0.612	0.119	0.091	0.060
余味	0.046	0.092	0.466	0.165	0.163	0.068
甜度	0.059	0.045	0.626	0.161	0.040	0.069
品牌符合度	0.058	0.118	0.462	0.184	0.110	0.068
综合重要性赋分值	20	23	65	57	46	41

2.2.2 关键感官指标筛选

通过随机森林特征重要性方法分析各感官指标相对其他指标的重要性，按照各感官指标的综合重要性

赋分值选择排名前 3 的作为关键感官指标，由表 6 可知，关键感官指标分别为：杂气、品牌符合度和香气质。

表 6 感官指标相对重要性分析
Tab.6 Analysis of relative importance of sensory indexes

	浓度	劲头	香气质	香气量	透发性	杂气	细腻程度	圆润感	刺激性	余味	甜度	品牌符合度
浓度	/	0.746	0.013	0.015	0.083	0.020	0.013	0.010	0.017	0.034	0.029	0.020
劲头	0.609	/	0.021	0.040	0.045	0.062	0.037	0.026	0.029	0.034	0.059	0.039
香气质	0.008	0.003	/	0.032	0.005	0.415	0.050	0.103	0.042	0.226	0.021	0.095
香气量	0.015	0.026	0.098	/	0.105	0.501	0.015	0.085	0.014	0.065	0.010	0.068
透发性	0.152	0.073	0.042	0.230	/	0.113	0.058	0.048	0.067	0.017	0.025	0.175
杂气	0.007	0.029	0.393	0.112	0.008	/	0.053	0.131	0.019	0.080	0.070	0.098
细腻程度	0.016	0.012	0.082	0.017	0.006	0.046	/	0.106	0.384	0.153	0.148	0.030
圆润感	0.009	0.012	0.292	0.044	0.006	0.283	0.058	/	0.147	0.052	0.028	0.068
刺激性	0.009	0.011	0.065	0.016	0.013	0.070	0.358	0.125	/	0.077	0.239	0.016
余味	0.010	0.004	0.441	0.075	0.006	0.125	0.190	0.052	0.052	/	0.014	0.032
甜度	0.032	0.017	0.101	0.022	0.008	0.202	0.180	0.022	0.148	0.084	/	0.182
品牌符合度	0.004	0.015	0.301	0.021	0.017	0.433	0.019	0.017	0.022	0.106	0.046	/
综合重要性 赋分值	43	40	78	67	43	100	70	65	66	76	65	79

2.2.3 关键常规化学成分指标筛选

通过随机森林特征重要性方法分析各常规化学成分指标对感官指标的相对重要性，按照各常规化学成分

指标的综合重要性赋分值选择排名前 3 的作为关键常规化学成分指标，由表 7 可知，关键常规化学成分指标分别为：淀粉、总糖和总氮。

表 7 常规化学成分指标相对重要性分析
Tab.7 Analysis of relative importance of conventional chemical composition indexes

	总植物碱	总氮	还原糖	总糖	钾	氯	淀粉	糖碱比	氮碱比	钾氯比
浓度	0.198	0.135	0.059	0.022	0.092	0.103	0.048	0.032	0.243	0.068
劲头	0.212	0.127	0.025	0.032	0.022	0.099	0.093	0.261	0.066	0.062
香气质	0.037	0.075	0.086	0.349	0.091	0.055	0.105	0.093	0.038	0.071
香气量	0.048	0.072	0.158	0.141	0.072	0.034	0.284	0.082	0.055	0.054
透发性	0.076	0.083	0.191	0.038	0.129	0.042	0.155	0.150	0.097	0.039
杂气	0.055	0.069	0.076	0.227	0.086	0.065	0.191	0.083	0.055	0.092
细腻程度	0.085	0.061	0.074	0.269	0.095	0.072	0.127	0.088	0.071	0.058
圆润感	0.052	0.053	0.073	0.360	0.066	0.065	0.180	0.030	0.047	0.074
刺激性	0.075	0.114	0.039	0.337	0.093	0.080	0.100	0.057	0.068	0.038
余味	0.049	0.118	0.077	0.348	0.046	0.048	0.143	0.084	0.050	0.037
甜度	0.115	0.163	0.058	0.272	0.103	0.029	0.105	0.085	0.039	0.031
品牌符合度	0.026	0.143	0.078	0.209	0.096	0.053	0.127	0.160	0.039	0.070
综合重要性 赋分值	53	76	65	93	68	46	95	73	48	43

2.2.4 关键代谢产物类型指标筛选

106 种代谢产物，并按照代谢产物的官能团组成进行分类，共划分为 15 个代谢产物类型，见表 8。

利用代谢组学检测，在烟叶样品中定性定量出

表 8 代谢产物类型划分
Tab.8 Classification of metabolite types

类型	代谢产物
多元羧酸	柠檬酸、2-异丙基苹果酸、壬二酸、丙二酸、D-苹果酸、柠草酸、2-羟基戊二酸、L-抗坏血酸、富马酸、脱氢抗坏血酸、琥珀酸
短链羧酸	丙酮酸、乳酸、4-羟基丁酸、丙烯酸、4-胍基丁酸、乙醇酸
氨基酸	DL-异亮氨酸、甘氨酸、L-谷氨酸、L-脯氨酸、L-丙氨酸、L-丝氨酸、赖氨酸、L-亮氨酸、L-苏氨酸、反式-4-羟基-L-脯氨酸、苏氨酸、缬氨酸、L-半胱氨酸、天冬氨酸、L-酪氨酸、焦谷氨酸
酚酸	东莨菪苷、绿原酸、咖啡酸、4-羟基苯甲酸、对羟基苯甲酸、二咖啡酰奎宁酸、新绿原酸、熊果苷
水溶性糖	异麦芽糖、核糖、D-阿拉伯糖、D-鼠李糖、D-果糖、松三糖、海藻糖、蔗糖、D-葡萄糖、D(+)-木糖、塔格糖、左旋葡聚糖、纤维二糖
甾醇	胆固醇、豆甾醇、樟脑甾醇、谷甾醇、双氢速甾醇
生物碱	降烟碱、甲酰去甲烟碱、尼古丁、东莨菪碱、麦斯明
糖醇	D-苏糖醇、半乳糖醇、阿拉伯糖醇、赤藓糖醇、D-山梨醇、木糖醇、肌醇
高级脂肪酸	肉豆蔻酸、棕榈酸、十三烷酸、亚麻酸、硬脂酸、亚油酸、十八碳二烯酸、油酸
多元醇	甘油、乙二醇、1,2,4-丁三醇
磷酸化合物	磷酸、肌醇-3-磷酸
多羟基羧酸	甘油酸、奎宁酸、莽草酸
氮杂环类	2,3-二羟基吡啶、2-羟基吡啶、喹啉羧酸、3-羟基吡啶、腺嘌呤
糖酸	L-苏糖酸、黏酸、葡萄糖庚酸、半乳糖醛酸、核糖酸 γ -内酯、2-酮基-L-葡萄糖酸
其他类	α -生育酚、丙酮、甲氧色胺、苯酚、 α -香树脂醇、D-鞘氨醇、植物醇、乙醇胺

通过随机森林特征重要性方法分析各代谢产物类型对感官指标的相对重要性，按照各代谢产物类型的综合重要性赋分值选择排名前 3 的作为关键代谢产物

类型指标，由表 9 可知，关键代谢产物类型指标分别为：酚酸、高级脂肪酸和氨基酸。

表 9 代谢产物类型指标相对重要性分析
Tab.9 Analysis of relative importance of metabolite type indexes

	多元羧酸	短链羧酸	氨基酸	酚酸	水溶性糖	甾醇	生物碱	糖醇	高级脂肪酸	多元醇	磷酸化合物	多羟基羧酸	氮杂环类	糖酸	其他类
浓度	0.037	0.061	0.064	0.049	0.075	0.098	0.154	0.032	0.080	0.034	0.096	0.139	0.038	0.018	0.023
劲头	0.019	0.203	0.150	0.031	0.009	0.030	0.264	0.030	0.023	0.017	0.055	0.117	0.024	0.009	0.020
香气质	0.102	0.022	0.106	0.118	0.062	0.045	0.028	0.037	0.074	0.065	0.054	0.057	0.026	0.080	0.125
香气量	0.163	0.042	0.098	0.080	0.047	0.047	0.033	0.073	0.052	0.038	0.083	0.031	0.041	0.134	0.038
透发性	0.447	0.033	0.046	0.019	0.047	0.022	0.050	0.059	0.033	0.041	0.045	0.066	0.027	0.041	0.023
杂气	0.110	0.046	0.120	0.111	0.064	0.079	0.054	0.020	0.085	0.044	0.056	0.037	0.035	0.032	0.107
细腻程度	0.040	0.054	0.071	0.074	0.041	0.076	0.106	0.018	0.149	0.172	0.040	0.020	0.036	0.032	0.072
圆润感	0.047	0.035	0.025	0.170	0.084	0.060	0.043	0.038	0.094	0.064	0.063	0.094	0.030	0.034	0.118
刺激性	0.030	0.065	0.017	0.127	0.043	0.049	0.113	0.019	0.282	0.074	0.036	0.049	0.025	0.029	0.042
余味	0.032	0.068	0.078	0.082	0.089	0.076	0.060	0.025	0.172	0.064	0.059	0.055	0.029	0.026	0.086
甜度	0.032	0.101	0.197	0.100	0.042	0.018	0.106	0.021	0.222	0.046	0.031	0.014	0.020	0.014	0.037
品牌符合度	0.071	0.098	0.216	0.109	0.048	0.032	0.030	0.017	0.038	0.040	0.054	0.098	0.026	0.056	0.066
综合重要性赋分值	104	97	124	134	103	94	109	54	130	93	98	93	45	59	103

2.3 不同外观特征烟叶样品的聚类分析

将上述筛选出的杂气、品牌符合度、香气质、叶片结构、身份、油分、淀粉、总糖、总氮、酚酸、高级脂肪酸和氨基酸作为关键质量指标，并采用此 12

个指标对本研究的不同外观特征烟叶样品进行聚类分析。根据聚类结果可将烟叶样品分为 3 个质量类别，见图 2。

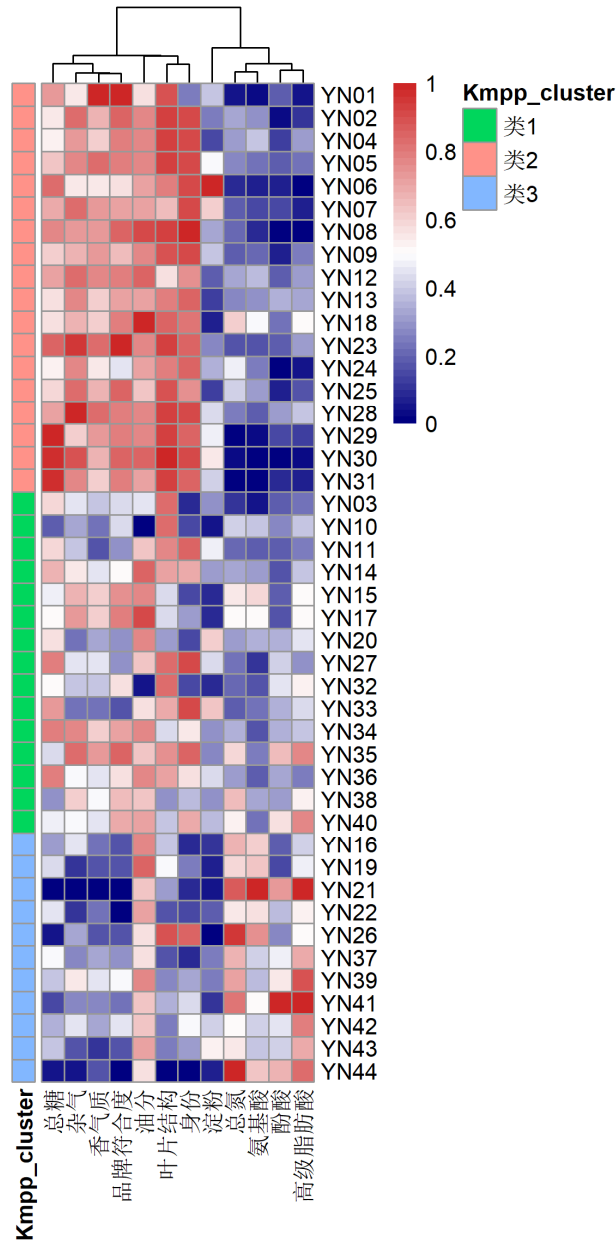


图 2 不同外观特征烟叶样品聚类分析

Fig.2 Cluster analysis of tobacco leaf samples with different appearance characteristics

针对 3 个质量类别烟叶样品，分析 12 个关键质量指标指标差异。由表 10 可知，类 1 烟叶样品的杂气较轻，香气质中偏上，品牌符合度好，相应的叶片结构疏松性较好，身份中等，油分有，总糖和淀粉含量较

高，总氮和酚酸、高级脂肪酸、氨基酸类代谢产物含量较低；类 3 烟叶样品的杂气有，香气质中等，品牌符合度一般，相应的叶片结构疏松性最差，身份稍厚，总糖含量较低，总氮和酚酸、高级脂肪酸、氨基酸类

代谢产物含量较高；类 2 烟叶样品的绝大多数指标介于类 1 和类 3 之间。总体上，类 1 的烟叶质量最佳，类 2 的烟叶质量其次，类 3 的烟叶质量最差。

表 10 3 类烟叶样品的关键质量指标差异
Tab.10 The differences of key quality indexes among three types of tobacco leaf samples

指标	类 1 (平均值±标准差)	类 2 (平均值±标准差)	类 3 (平均值±标准差)
杂气	6.38±0.13 a	5.91±0.20 b	5.45±0.19 c
品牌符合度	87.47±2.66 a	78.67±4.29 b	66.82±3.37 c
香气质	6.47±0.12 a	5.99±0.17 b	5.60±0.13 c
叶片结构	7.87±0.31 a	6.63±0.60 b	5.15±0.66 c
身份	7.97±0.30 a	6.83±0.60 b	6.12±0.46 c
油分	6.68±0.20 a	6.14±0.20 b	6.36±0.53 ab
淀粉/%	4.00±0.72 a	3.24 ± 0.60 b	3.36 ± 0.58 b
总糖/%	37.44±1.9 a	34.3±2.16 b	28.44±2.18 c
总氮/%	1.6±0.13 c	1.79±0.13 b	2.27±0.13 a
酚酸	$1.00 \times 10^{-3} \pm 0.24 \times 10^{-3}$ c	$1.32 \times 10^{-3} \pm 0.14 \times 10^{-3}$ b	$1.58 \times 10^{-3} \pm 0.10 \times 10^{-3}$ a
高级脂肪酸	$2.89 \times 10^{-4} \pm 0.28 \times 10^{-4}$ c	$3.50 \times 10^{-4} \pm 0.22 \times 10^{-4}$ b	$4.11 \times 10^{-4} \pm 0.21 \times 10^{-4}$ a
氨基酸	$6.98 \times 10^{-3} \pm 1.55 \times 10^{-3}$ b	$8.05 \times 10^{-3} \pm 1.22 \times 10^{-3}$ b	$12.36 \times 10^{-3} \pm 1.18 \times 10^{-3}$ a

注：同行小写字母不同表示差异显著 ($P < 0.05$)。

Note: Different lowercase letters in the same line show significant difference ($P < 0.05$).

3 讨论

本研究采用唯一差别原则制备烟叶样品，以期尽可能地体现后续外观、常规化学成分、感官等质量评价和代谢产物检测数据的差异，并按照官能团组成将检出的 106 种代谢产物划分为 15 个类型。而随机森林可以通过对特征使用的相对顺序，来评估输入特征对目标变量的相对重要性，越靠近决策树顶部的特征对预测结果的贡献最大^[29]。

在外观质量指标方面，筛选出叶片结构、身份和油分作为云南楚雄和丽江烟叶的关键外观质量指标，且叶片结构和身份与烟叶质量呈正相关作用。该结果与王芳等^[30]、王浩军等^[31]针对贵州、四川、福建、安徽等地区烟叶的研究结果存在差异，说明不同产区烟叶的外观指标与感官品质的内在联系存在一定差异；与潘义宏等^[32]针对云南普洱烟叶的研究结果相符，进一步验证了叶片结构和身份对云南烟叶品质的重要性。

在常规化学成分指标方面，筛选出总糖、淀粉和总氮作为云南楚雄和丽江烟叶的关键常规化学成分指标，且总糖与烟叶质量呈正相关，总氮与烟叶质量呈负相关。本研究结果与潘义宏等^[32]、王育军等^[15]关于

常规化学成分中总糖含量和总氮含量与烟叶品质的研究结果一致；而烟碱作为烟叶中较重要的常规化学成分指标，并未被筛选出来，究其原因，本研究采用唯一差别原则制备烟叶样品，且均来源于楚雄和丽江，样品间烟碱含量差异相对较小，因此其对感官质量影响的权重相对较小，范幸龙等^[33]也发现云南不同生态区烟叶的烟碱含量无明显差异；本研究样品中类 1 的淀粉含量最高，均值为 4%，类 2 和类 3 的淀粉含量为 3.3% 左右，说明淀粉含量过低也不利于烟叶感官质量。

在代谢产物类型指标方面，筛选出酚酸、高级脂肪酸和氨基酸作为云南楚雄和丽江烟叶的关键代谢产物类型指标，且该 3 类代谢产物均与烟叶质量呈负相关作用。本研究结果与杜咏梅等^[34]、过伟民等^[35]针对烟叶中高级脂肪酸和游离氨基酸与烟叶品质的研究结果基本一致；然而，与一般认为的酚类物质对烟草香气和吸味有积极影响^[36-37]的结论存在偏差，原因可能在于烟叶样品自身差异和样本量不够大的问题，抑或需要同时考虑烟叶调制过程中发生的棕色化反应^[38]，并单独采用高效液相色谱法对酚类物质进行检测^[39]等，还需要进一步的研究探索。

本研究进一步通过聚类分析将烟叶样品划分为 3 个质量类别。结果表明关键质量指标中的 3 个感官指标在不同质量类别中差异明显, 结合外观和常规化学成分指标的差异, 可以对 3 个类别的烟叶质量进行排序, 并总结出各类别烟叶的质量特征, 为实现通过关键外观、常规化学成分和代谢产物分析云南烟叶质量提供理论依据, 进而指导烟叶生产和工业配方应用。

4 结论

针对云南楚雄和丽江烟叶, 筛选出对烟叶感官质量相对重要的 12 个关键质量指标, 包括杂气、品牌符合度和香气质等 3 个感官质量指标, 叶片结构、身份和油分等 3 个外观质量指标, 淀粉、总糖和总氮等 3 个常规化学成分指标, 以及酚酸、高级脂肪酸、氨基酸等 3 个代谢产物类型指标。其中, 杂气、品牌符合度、香气质、叶片结构、身份、总糖含量与烟叶质量呈明显正相关, 总氮、酚酸、高级脂肪酸、氨基酸含量与烟叶质量呈明显负相关。因此, 楚雄和丽江烟叶的种植、调制和复烤加工过程中可以着重考虑提升烟叶总糖含量, 降低总氮和酚酸、高级脂肪酸、氨基酸类代谢产物含量, 以进一步提高烟叶质量; 烟叶采收、分级和工业收购过程中, 可以特别关注烟叶的叶片结构和身份, 以提升烟叶的质量均匀性和工业适用性。

参考文献

- [1] 朱尊权. 烟叶的可用性与卷烟的安全性[J]. 烟草科技. 2000(8): 3-6.
- [2] 尹启生, 陈江华, 王信民, 等. 2002 年度全国烟叶质量评价分析[J]. 中国烟草学报, 2003, 9(增刊 1): 59-70.
- [3] 周冀衡, 朱小平, 王彦亭, 等. 烟草生理与生物化学[M]. 合肥: 中国科学技术大学出版社, 1996: 107-109.
- [4] 闫克玉, 王建民, 屈剑波, 等. 河南烤烟评吸质量与主要理化指标的相关分析[J]. 烟草科技, 2001(10): 5-9.
- [5] 胡建军, 马明, 李耀光, 等. 烟叶主要化学指标与其感官质量的灰色关联分析[J]. 烟草科技, 2001(1): 3-7.
- [6] 胡战军, 马林, 程昌新, 等. 烤烟外观质量与感官评吸指标间的关系分析[J]. 云南农业大学学报, 2011, 26(6): 809-814.
- [7] 魏春阳, 杨明峰, 刘阳, 等. 县级区域尺度下烤烟外观质量指标的空间特征分析[J]. 中国烟草学报, 2010, 16(2): 45-49.
- [8] 过伟民, 蔡宪杰, 王信民, 等. 烤烟中部烟叶外观区域特征分布及其与外观品质和物理特性的关系[J]. 烟草科技, 2016, 49(12): 21-27.
- [9] 黄清芬, 张延军. 烟叶评吸质量与外观质量的相关性分析[J]. 江西农业学报, 2011, 23(11): 89-90.
- [10] 常爱霞, 杜咏梅, 付秋娟, 等. 烤烟主要化学成分与感官质量的相关性分析[J]. 中国烟草科学, 2009, 30(6): 9-12.
- [11] 蔡宪杰, 王信民, 尹启生. 成熟度与烟叶质量的量化关系研究[J]. 中国烟草学报, 2005, 11(4): 42-46.
- [12] 闫铁军, 马俊桃, 刘文锋, 等. 烟叶外观质量与感官舒适性的相关性分析[J]. 湖北农业科学, 2021, 60(23): 109-113.
- [13] 吴殿信, 袁志永, 闫克玉, 等. 烤烟各等级烟叶质量指数的确定[J]. 烟草科技, 2001(12): 9-15.
- [14] 邓小华, 周冀衡, 陈新联, 等. 烟叶质量评价指标间的相关性研究[J]. 中国烟草学报, 2008, 14(2): 1-8.
- [15] 王育军, 邵建平, 赵杰, 等. 曲靖烟叶质量评价指标间的相关性分析[J]. 作物研究, 2014, 28(5): 496-500, 505.
- [16] 孟磊, 代远刚, 王程栋, 等. 中间香型烤烟叶片质量指标间的典型相关分析[J]. 江苏农业科学, 2015, 43(3): 261-264.

- 2015, 43(3): 261-264.
- [17] 褚旭, 王珂清, 魏建荣, 等. 基于综合赋权法的烤烟烟叶质量评价[J]. 烟草科技, 2019, 52(10): 28-36.
- CHU Xu, WANG Keqing, WEI Jianrong, et al. Quality evaluation of flue-cured tobacco leaves based on comprehensive weighting [J]. Tobacco Science & Technology, 2019, 52(10): 28-36.
- [18] LI Yong, PANG Tao, LI Yanli, et al. Gas chromatography-mass spectrometric method for metabolic profiling of tobacco leaves [J]. J Sep Sci, 2011, 34(12): 1447-1454.
- [19] ZHANG Li, WANG Xiaoyu, GUO Jizhao, et al. Metabolic profiling of chinese tobacco leaf of different geographical origins by GC-MS [J]. Journal of agricultural and food chemistry, 2013, 61(11): 2597-2605.
- [20] LI Lili, ZHAO Chunxia, CHANG Yuwei, et al. Metabolomics study of cured tobacco using liquid chromatography with mass spectrometry: Method development and its application in investigating the chemical differences of tobacco from three growing regions [J]. Journal of separation science, 2014, 37(9-10): 1067-1074.
- [21] 向海英, 刘欣, 逢涛, 等. 基于非靶向代谢组学的红花大金元不同生育期烟叶代谢图谱差异分析[J]. 中国烟草学报, 2002, 28(4): 77-84.
- XIANG Haiying, LIU Xin, PANG Tao, et al. Differential analysis of metabolic profiles of Honghua Dajinyuan tobacco leaves in different growth stage based on untargeted metabolomics[J]. Acta Tabacaria Sinica, 2002, 28(4): 77-84.
- [22] GB 2635—1992 烤烟 [S].
- GB 2635-1992 Flue-cured tobacco [S].
- [23] 张坤兰, 崔国民. 烟叶外观质量与化学成分及评吸质量的相关性探析[J]. 园艺与种苗, 2014(3): 11-13, 16.
- ZHANG Kunlan, CUI Guomin. Research on the correlation of appearance quality and its chemical components, smoking quality of tobacco leaf[J]. Horticulture & Seed, 2014(3): 11-13, 16.
- [24] LIU Pingping, LUO Jie, ZHENG Qingxia, et al. Integrating transcriptome and metabolome reveals molecular networks involved in genetic and environmental variation in tobacco [J]. DNA research: an international journal for rapid publication of reports on genes and genomes, 2020, 27(2): a6.
- [25] ZHAO Yanni, ZHAO Chunxia, LU Xin, et al. Investigation of the relationship between the metabolic profile of tobacco leaves in different planting regions and climate factors using a pseudotargeted method based on gas chromatography/mass spectrometry [J]. Journal of proteome research, 2013, 12(11): 5072-5083.
- [26] Gomes Marques de Freitas Alexandre, Almir Cavalcante Minho Lucas, Elizabeth Alves de Magalhães Bárbara, et al. Infrared spectroscopy combined with random forest to determine tylosin residues in powdered milk [J]. Food Chemistry, 2021, 365: 130477.
- [27] Leo Breiman. Bagging Predictors [J]. Machine Learning, 1996, 24(2): 123-140.
- [28] 王奕森, 夏树涛. 集成学习之随机森林算法综述[J]. 信息通信技术, 2018, 12(1): 49-55.
- WANG Yisen, XIA Shutao. A survey of random forests algorithms [J]. Information and Communications Technologies, 2018, 12(1): 49-55.
- [29] André A, Laura T, Oliver S, et al. Permutation importance: a corrected feature importance measure[J]. Bioinformatics (Oxford, England), 2010, 26(10): 1340-7.
- [30] 王芳, 史改丽, 张庆明, 等. 烟叶外观质量与内在品质的相关性研究[J]. 中国农学通报, 2014, 30(31): 82-88.
- WANG Fang, SHI Gaili, ZHANG Qingming, et al. Correlation analysis of appearance characters and intrinsic quality of flue-cured tobacco [J]. Chinese Agricultural Science Bulletin, 2014, 30(31): 82-88.
- [31] 王浩军, 郭东锋, 杜丛中, 等. 基于关联规则的皖南焦甜香烟叶外观特征分析[J]. 中国烟草科学, 2014, 35(5): 93-97.
- WANG Haojun, GUO Dongfeng, DU Congzhong, et al. Appearance quality analysis of burnt-sweet tobacco leaves base on association rule algorithm [J]. Chinese Tobacco Science, 2014, 35(5): 93-97.
- [32] 潘义宏, 李佳佳, 蒋美红, 等. 烟叶外观质量、常规化学成分与其感官质量的典型相关分析[J]. 江苏农业科学, 2015, 43(10): 384-388.
- PAN Yihong, LI Jiajia, JIANG Meihong, et al. Canonical correlation analysis of tobacco leaf appearance quality, conventional chemical components and sensory quality [J]. Jiangsu Agricultural Sciences, 2015, 43(10): 384-388.
- [33] 范幸龙, 李炜, 张莉, 等. 云南不同生态区烟叶主要品质性状差异分析[J]. 中国烟草科学, 2020, 41(3): 77-82.
- FAN Xinglong, LI Wei, ZHANG Li, et al. Variations in major quality characteristics of flue-cured tobacco leaves planted in different ecological regions of yunnan province [J]. Chinese Tobacco Science, 2020, 41(3): 77-82.
- [34] 杜咏梅, 张怀宝, 付秋娟, 等. 烤烟非挥发有机酸、高级脂肪酸与其他成分及其感官品质的关系[J]. 烟草科技, 2011(6): 29-34.
- DU Yongmei, ZHANG Huaibao, FU Qiujuan, et al. Relationships of non-volatile organic acids and higher fatty acids in flue-cured tobacco with its other chemical components and smoking quality[J]. Tobacco Science & Technology, 2011(6): 29-34.
- [35] 过伟民, 郭建华, 董洪旭, 等. 烤烟游离氨基酸与感官品质的关联及烘烤过程的变化规律研究[J]. 中国烟草学报, 2018, 24(6): 16-25.
- GUO Weimin, GUO Jianhua, DONG Hongxu, et al. Correlation between free amino acids and smoking quality of flue-cured tobacco and variations during flue-curing process [J]. Acta Tabacaria Sinica, 2018, 24(6): 16-25.
- [36] 张秋芳, 刘奕平, 刘波, 等. 烟草主要酚类物质研究进展[J]. 福建农业学报, 2006, 21(2): 158-163.
- ZHANG Qiufang, LIU Yiping, LIU Bo, et al. Research progress in tobacco polyphenol substance[J]. Fujian Journal of Agricultural Sciences, 2006, 21(2): 158-163.
- [37] 龙章德, 林顺顺, 田兆福, 等. 烟草多酚类化合物对卷烟品质的影响[J]. 食品与机械, 2013, 29(6): 41-44.
- LONG Zhangde, LIN Shunshun, TIAN Zhaofo, et al. Study on the influence of polyphenol compounds on the tobacco quality[J]. Food & Machinery, 2013, 29(6): 41-44.
- [38] 谢剑平. 烟草与烟气化学成分[M]. 北京: 化学工业出版社, 2010.
- XIE Jianping. Chemical composition of tobacco and flue gas [M]. Beijing: Chemical Industry Press, 2010.
- [39] 张甜, 董学畅, 吴方评, 等. 固相萃取-高效液相色谱法测定烟草样品中 10 种多酚[J]. 分析化学, 2005, 33(3): 359-362.
- ZHANG Tian, DONG Xuechang, WU Fangping, et al. Study on solid phase extraction and high performance liquid chromatography method for the determination of ten polyphenols in tobacco[J]. Chinese Journal of Analytical Chemistry, 2005, 33(3): 359-362.

Screening and classification of key quality indexes of tobacco leaves from Chuxiong and Lijiang in Yunnan Province

TIAN Zhen¹, ZANG Zhaoyang², MAO Wenlong¹, LI Shaopeng¹, WANG Guiyao², ZHOU Huina²,
YANG Mengmeng², SONG Jizhen^{2*}

¹ Technology Center, China Tobacco Jiangsu Industrial Co., Ltd., Nanjing 210019, China;

² Key Laboratory of Eco-environment and Leaf Tobacco Quality, Zhengzhou Tobacco Research Institute of CNTC, Zhengzhou 450001, China

Abstract: [Objective] This study aims to explore the key quality indexes of Yunnan tobacco leaf and to clarify the difference of these quality indexes in tobacco leaf in different quality categories. [Methods] The tobacco leaf samples with different appearance characteristics were prepared by the unique difference principle for Chuxiong and Lijiang Tobacco, then appearance quality evaluation, sensory quality evaluation, conventional chemical composition detection and metabolome determination were carried out. The key quality indexes of tobacco leaf were screened by random forest analysis, and the cluster analysis of tobacco leaf samples was carried out. [Results] (1) A total of 12 key quality indexes were selected, including brand conformity, aroma, impurity, leaf structure, identity, oil content, starch, total sugar, total nitrogen, phenolic acids, advanced fatty acids and amino acids; (2) Tobacco leaf samples were divided into three quality categories. In category 1, tobacco leaves have light impurity, above-average aroma, good brand conformity, good leaf structure loose, medium status, high total sugar content, low contents of total nitrogen and phenolic acids, advanced fatty acids, amino acid metabolites. In category 3 tobacco leaves have impurity, medium aroma, general brand compliance, the worst loose leaf structure, slightly thick identity, low total sugar content, and high contents of total nitrogen and phenolic acids, advanced fatty acids, amino acid metabolites. In category 2, most quality indexes of tobacco leaves are between category 1 and category 3; (3) Leaf structure, identity and total sugar were positively correlated with leaf quality, while the contents of total nitrogen, phenolic acids, advanced fatty acids and amino acid metabolites were negatively correlated with tobacco leaf quality. [Conclusion] This study clarified the key indexes for the production, purchase, processing and formulation application of tobacco leaves in Chuxiong and Lijiang, laying a foundation for improving the quality and industrial applicability of tobacco leaves.

Keywords: tobacco leaf quality; quality index; random forest; metabolite; quality category

*Corresponding author. Email: 1063067425@qq.com

《烟草科技》2023 年第 6 期目次

· 烟草农学

NtLTP2 基因在烟草根系发育中的功能分析

..... 段史江, 陈小龙, 梁周虹, 等

湖北雪茄烟叶致霉菌分离鉴定及芽胞杆菌属拮抗菌株筛选

..... 张岱源, 叶长文, 李 栋, 等

云南玉溪烟区烟草黑胫病菌的生理小种鉴定及其致病性分析

..... 刘迎龙, 王军伟, 陆俊平, 等

基于单叶重分类的烤烟烟叶分切利用技术

..... 陈祖销, 高 远, 蔡宪杰, 等

烟草黑胫病菌高效杀菌剂的筛选

..... 李彩斌, 程云龙, 何 轶, 等

· 烟草化学

滤嘴活性炭对卷烟主流烟气生物碱截留的影响

..... 朴星宇, 胡 超, 吴东川, 等

分散固相萃取-GC-MS/MS 法同时检测卷烟主流烟气中 21 种酰胺类化合物

..... 潘立宁, 刘瑞红, 秦亚琼, 等

三种新型工艺加热卷烟再造烟叶的对比

..... 李奕蓉, 汤丹瑜, 刘春波, 等

基于多因素辅材参数的短支卷烟烟气有害成分预测模型

..... 何静宇, 宋伟民, 陈 洋, 等

· 烟草工艺

烟丝压缩过程中应力松弛模型的建立

..... 韩顺起, 付丽丽, 丁 伟, 等

不同材质、长度滤棒基棒对加热卷烟烟气气溶胶吸光度的影响

..... 王 松, 史占东, 曾 波, 等

· 设备与仪器

基于深度学习的烟叶等级分类及特征可视化

..... 鲁梦瑶, 陈 栋, 周 强, 等

阵列式多通道逐口吸烟机的设计

..... 冯露露, 付丽丽, 王 乐, 等

YF17A 烟支存储输送装置柔性连接系统的设计

..... 卢志敏, 张小杭, 苏 铃, 等