



(12) 发明专利申请

(10) 申请公布号 CN 105158366 A

(43) 申请公布日 2015. 12. 16

(21) 申请号 201510546961. 7

(22) 申请日 2015. 08. 31

(71) 申请人 中国烟草总公司广东省公司

地址 510610 广东省广州市天河区林和东路
128 号

(72) 发明人 陈泽鹏

(74) 专利代理机构 广州粤高专利商标代理有限
公司 44102

代理人 任重

(51) Int. Cl.

G01N 30/02(2006. 01)

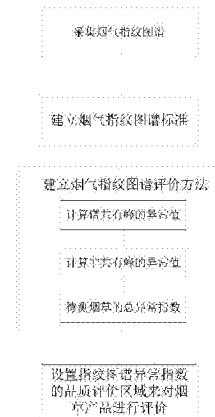
权利要求书2页 说明书5页 附图1页

(54) 发明名称

一种烟草产品质量评价方法

(57) 摘要

本发明提供一种烟草产品质量评价方法,该方法在反映大量化学信息的卷烟烟气 GC 谱图数据基础上,通过采集一定量的已知正常产品烟气的色谱数据,筛选共有峰建立标准谱图;采集测试样品烟气谱图与标准谱图比对,使用色谱峰面积权重确定每个色谱指纹峰容差,在此基础上将指纹图谱间共有峰、缺失峰和额外峰的情况之和作为总异常指数表达两种卷烟烟气指纹图谱间的差异,进行烟气质量评价和监控。



1. 一种烟草产品质量评价方法,其特征在於,包括以下步骤:

S1:采集烟草产品品质的烟气指纹图谱;

S2:根据采集的烟气指纹图谱,建立烟气指纹图谱标准;

S3:建立烟气指纹图谱评价方法,设置指纹图谱异常指数的品质评价区域,来评价烟草产品的质量。

2. 根据权利要求 1 所述的烟草产品质量评价方法,其特征在於,所述步骤 S1 的具体过程如下:

采集烟草产品烟气色谱数据建立 GC 谱图,以 GC 谱图积分后获得的色谱峰面积和色谱保留时间为坐标建立棒图得到烟气指纹图谱。

3. 根据权利要求 1 所述的烟草产品质量评价方法,其特征在於,所述步骤 S2 的具体过程如下:

选取若干数量已知的样本数据作为标准样本集,对样本色谱峰进行统计筛选,选择满足一定条件的指纹峰建立标准谱图,指纹峰的选择符合以下条件:

31) 设定一个峰在超过 60% 的样本中都出现,认为是共有峰,以全部共有峰组成色谱指纹峰,若一个峰在各谱图中出现几率不到 50%,这个峰就不能当作共有峰,这类峰的面积往往很小,其峰面积有时与噪声信号相近,影响到结果的可靠性;

32) 不同保留时间色谱峰代表不同化学物质,对判断造成干扰的峰尽量不选择;

33) 所选择的指纹峰应在色谱流出时间范围内分布较均匀且稳定。

4. 根据权利要求 1 所述的烟草产品质量评价方法,其特征在於,所述步骤 S3 中的建立烟气指纹图谱评价方法的具体过程如下:

计算待评价烟草产品谱图与标准谱图之间的指纹图谱异常指数来对其质量进行评判:

41) 计算待评价烟草产品谱图与标准谱图共有峰的异常值:

a:计算共有峰的相对误差:

$$RE_i = \frac{|A_{std,i} - A_{sam,i}|}{A_{std,i}} \times 100\% \quad i = 1, 2, \dots, n$$

其中 A_{std} 和 A_{sam} 分别表示标准谱图和待评价烟草产品谱图中某一相同保留时间色谱峰的峰面积,下标 i 表示色谱峰的序号;

b:计算标准谱图中共有峰的容差,由於在各类烟气样品中,不同化学物质的含量存在较大的差异,在同一谱图中,不同色谱峰的峰面积有较大差异,在设定评价指标时,不能只简单比较待评价烟草产品与标准品的绝对差异,还必须考虑标准谱图共有峰允许存在的相对误差即容差:

$$AE_i = \frac{1}{100W_i} + 3s$$

$$W_i = \frac{A_{std,i}}{\sum_{i=1}^n A_{std,i}} \times 100\%$$

其中 W_i 是第 i 个色谱峰的峰面积权重, s 是平行实验的测量标准偏差;

c :共有峰的异常值 :

$$AV_{C,i} = AE_i - RE_i$$

若异常值 $AV_{C,i}$ 为正,则认为该待评价烟草产品正常,如果异常值 $AV_{C,i}$ 为负值,则判别该待评价烟草产品中序号为 i 的色谱共有峰异常;

42) 计算待评价烟草产品谱图与标准谱图非共有峰的异常值 :

a1 :缺失共有峰的异常值

$$AV_{A,i} = 100W_i,$$

b1 :额外峰异常值

$$AV_{E,i} = 100W_i;$$

43) 计算待评价烟草产品谱图与标准谱图之间的指纹图谱异常指数 :

$$I = \sum_{i=1}^n AV_{C,i} + \sum_{i=1}^n AV_{A,i} + \sum_{i=1}^n AV_{E,i}。$$

5. 根据权利要求 1 所述的烟草产品质量评价方法,其特征在于,所述步骤 S3 中设置指纹图谱异常指数的品质评价区域的具体过程如下 :

统计标准样本集中每个样本的总异常指数,取均值为 \bar{I}_s ,计算待评价烟草产品谱图的总异常指数 \bar{I}_x ,建立品质评价区域 :

I、品质一致范围 : $\bar{I}_x \leq 3\bar{I}_s$;

II、品质相近范围 : $3\bar{I}_s \leq \bar{I}_x \leq 6\bar{I}_s$;

III、品质不同范围 : $\bar{I}_x \geq 6\bar{I}_s$ 。

一种烟草产品质量评价方法

技术领域

[0001] 本发明涉及烟草制品质量评价方法领域,更具体地,涉及一种烟草产品质量评价方法。

背景技术

[0002] 烟草制品的质量控制一直是烟草行业中一个重要的研究内容。据文献报导,烟草和烟气中已鉴定的化合物达 5000 多种,分析如此复杂的体系,目前使用最多的是气相和液相色谱法,大量先进的色谱仪器在烟草分析中的应用,可以在很短时间内得到上百甚至上万个烟气化学成分信号,因此需要科学有效的数据处理技术从大量信号中提取准确而直观的质量评价结果。传统的色谱数据分析方法是针对一部分分离得好的色谱峰进行峰面积定量,或者简单比较色谱图上有限的几个色谱峰。这些方法在分析反映卷烟烟气指纹特征的大量色谱信息方面显然有很大局限。

发明内容

[0003] 本发明提供一种烟草产品质量评价方法,该方法不要求对烟草产品的每个化学结构都清楚,通过对烟草产品烟气复杂化学成分进行群体宏观定量分析来对烟草产品进行指令评价。

[0004] 为了达到上述技术效果,本发明的技术方案如下:

[0005] 一种烟草产品质量评价方法,包括以下步骤:

[0006] S1:采集烟草产品品质的烟气指纹图谱;

[0007] S2:根据采集的烟气指纹图谱,建立烟气指纹图谱标准;

[0008] S3:建立烟气指纹图谱评价方法,设置指纹图谱异常指数的品质评价区域,来评价烟草产品的质量。

[0009] 进一步地,所述步骤 S1 的具体过程如下:

[0010] 采集烟草产品烟气色谱数据建立 GC 谱图,以 GC 谱图积分后获得的色谱峰面积和色谱保留时间为坐标建立棒图得到烟气指纹图谱。

[0011] 进一步地,所述步骤 S2 的具体过程如下:

[0012] 选取若干数量已知的样本数据作为标准样本集,对样本色谱峰进行统计筛选,选择满足一定条件的指纹峰建立标准谱图,指纹峰的选择符合以下条件:

[0013] 31) 设定一个峰在超过 60% 的样本中都出现,认为是共有峰,以全部共有峰组成色谱指纹峰,若一个峰在各谱图中出现几率不到 50%,这个峰就不能当作共有峰,这类峰的面积往往很小,其峰面积有时与噪声信号相近,影响到结果的可靠性;

[0014] 32) 不同保留时间色谱峰代表不同化学物质,对判断造成干扰的峰尽量不选择;

[0015] 33) 所选择的指纹峰应在色谱流出时间范围内分布较均匀且稳定。

[0016] 进一步地,所述步骤 S3 中的建立烟气指纹图谱评价方法的具体过程如下:

[0017] 计算待评价烟草产品谱图与标准谱图之间的指纹图谱异常指数来对其质量进行

评判：

[0018] 41) 计算待评价烟草产品谱图与标准谱图共有峰的异常值：

[0019] a : 计算共有峰的相对误差：

$$[0020] \quad RE_i = \frac{|A_{std,i} - A_{sam,i}|}{A_{std,i}} \times 100\% \quad i = 1, 2, \dots, n$$

[0021] 其中 A_{std} 和 A_{sam} 分别表示标准谱图和待评价烟草产品谱图中某一相同保留时间色谱峰的峰面积, 下标 i 表示色谱峰的序号；

[0022] b : 计算标准谱图中共有峰的容差, 由于在各类烟气样品中, 不同化学物质的含量存在较大的差异, 在同一谱图中, 不同色谱峰的峰面积有较大差异, 在设定评价指标时, 不能只简单比较待评价烟草产品与标准品的绝对差异, 还必须考虑标准谱图共有峰允许存在的相对误差即容差：

$$[0023] \quad AE_i = \frac{1}{100W_i} + 3s$$

$$[0024] \quad W_i = \frac{A_{std,i}}{\sum_{i=1}^n A_{std,i}} \times 100\%$$

[0025] 其中 W_i 是第 i 个色谱峰的峰面积权重, s 是平行实验的测量标准偏差；

[0026] c : 共有峰的异常值：

$$[0027] \quad AV_{c,i} = AE_i - RE_i$$

[0028] 若异常值 $AV_{c,i}$ 为正, 则认为该待评价烟草产品正常, 如果异常值 $AV_{c,i}$ 为负值, 则判别该待评价烟草产品中序号为 i 的色谱共有峰异常；

[0029] 42) 计算待评价烟草产品谱图与标准谱图非共有峰的异常值：

[0030] a1 : 缺失共有峰的异常值

$$[0031] \quad AV_{A,i} = 100W_i,$$

[0032] b1 : 额外峰异常值

$$[0033] \quad AV_{E,i} = 100W_i;$$

[0034] 43) 计算待评价烟草产品谱图与标准谱图之间的指纹图谱异常指数：

$$[0035] \quad I = \sum_{i=1}^n AV_{c,i} + \sum_{i=1}^n AV_{A,i} + \sum_{i=1}^n AV_{E,i}。$$

[0036] 进一步地, 所述步骤 S3 中设置指纹图谱异常指数的品质评价区域的具体过程如下：

[0037] 统计标准样本集中每个样本的总异常指数, 取均值为 \bar{I}_s , 计算待评价烟草产品谱图的总异常指数 \bar{I}_x , 建立品质评价区域：

$$[0038] \quad \text{I、品质一致范围：} \bar{I}_x \leq 3\bar{I}_s;$$

$$[0039] \quad \text{II、品质相近范围：} 3\bar{I}_s \leq \bar{I}_x \leq 6\bar{I}_s;$$

$$[0040] \quad \text{III、品质不同范围：} \bar{I}_x \geq 6\bar{I}_s。$$

[0041] 与现有技术相比,本发明技术方案的有益效果是:

[0042] 本发明在反映大量化学信息的卷烟烟气 GC 谱图数据基础上,通过采集一定量的已知正常产品烟气色谱数据,筛选共有峰建立标准谱图;采集测试样品烟气谱图与标准谱图比对,使用色谱峰面积权重确定每个色谱指纹峰容差,在此基础上将指纹图谱间共有峰、缺失峰和额外峰的差异情况之和作为总异常指数表达两种卷烟烟气指纹图谱间的差异,进行烟气质量评价和监控。

附图说明

[0043] 图 1 为本发明方法流程图。

具体实施方式

[0044] 附图仅用于示例性说明,不能理解为对本专利的限制;

[0045] 为了更好地说明本实施例,附图某些部件会有省略、放大或缩小,并不代表实际产品的尺寸;

[0046] 对于本领域技术人员来说,附图中某些公知结构及其说明可能省略是可以理解的。

[0047] 下面结合附图和实施例对本发明的技术方案做进一步的说明。

[0048] 实施例 1

[0049] 如图 1 所示,一种烟草产品质量评价方法,包括以下步骤:

[0050] S1:采集烟草产品品质的烟气指纹图谱;

[0051] S2:根据采集的烟气指纹图谱,建立烟气指纹图谱标准;

[0052] S3:建立烟气指纹图谱评价方法,设置指纹图谱异常指数的品质评价区域,来评价烟草产品的质量。

[0053] 步骤 S1 的具体过程如下:

[0054] 采集烟草产品烟气色谱数据建立 GC 谱图,以 GC 谱图积分后获得的色谱峰面积和色谱保留时间为坐标建立棒图得到烟气指纹图谱。

[0055] 步骤 S2 的具体过程如下:

[0056] 选取若干数量已知的样本数据作为标准样本集,对样本色谱峰进行统计筛选,选择满足一定条件的指纹峰建立标准谱图,指纹峰的选择符合以下条件:

[0057] 31) 设定一个峰在超过 60% 的样本中都出现,认为是共有峰,以全部共有峰组成色谱指纹峰,若一个峰在各谱图中出现几率不到 50%,这个峰就不能当作共有峰,这类峰的面积往往很小,其峰面积有时与噪声信号相近,影响到结果的可靠性;

[0058] 32) 不同保留时间色谱峰代表不同化学物质,对判断造成干扰的峰尽量不选择;

[0059] 33) 所选择的指纹峰应在色谱流出时间范围内分布较均匀且稳定。

[0060] 步骤 S3 中的建立烟气指纹图谱评价方法的具体过程如下:

[0061] 计算待评价烟草产品谱图与标准谱图之间的指纹图谱异常指数来对其质量进行评判:

[0062] 41) 计算待评价烟草产品谱图与标准谱图共有峰的异常值:

[0063] a:计算共有峰的相对误差:

$$[0064] \quad RE_i = \frac{|A_{std,i} - A_{sam,i}|}{A_{std,i}} \times 100\% \quad i=1,2,\dots,n$$

[0065] 其中 A_{std} 和 A_{sam} 分别表示标准谱图和待评价烟草产品谱图中某一相同保留时间色谱峰的峰面积, 下标 i 表示色谱峰的序号;

[0066] b : 计算标准谱图中共有峰的容差, 由于在各类烟气样品中, 不同化学物质的含量存在较大的差异, 在同一谱图中, 不同色谱峰的峰面积有较大差异, 在设定评价指标时, 不能只简单比较待评价烟草产品与标准品的绝对差异, 还必须考虑标准谱图共有峰允许存在的相对误差即容差:

$$[0067] \quad AE_i = \frac{1}{100W_i} + 3s$$

$$[0068] \quad W_i = \frac{A_{std,i}}{\sum_{i=1}^n A_{std,i}} \times 100\%$$

[0069] 其中 W_i 是第 i 个色谱峰的峰面积权重, s 是平行实验的测量标准偏差;

[0070] c : 共有峰的异常值:

$$[0071] \quad AV_{C,i} = AE_i - RE_i$$

[0072] 若异常值 $AV_{C,i}$ 为正, 则认为该待评价烟草产品正常, 如果异常值 $AV_{C,i}$ 为负值, 则判别该待评价烟草产品中序号为 i 的色谱共有峰异常;

[0073] 42) 计算待评价烟草产品谱图与标准谱图非共有峰的异常值:

[0074] $a1$: 缺失共有峰的异常值

$$[0075] \quad AV_{A,i} = 100W_i,$$

[0076] $b1$: 额外峰异常值

$$[0077] \quad AV_{E,i} = 100W_i;$$

[0078] 43) 计算待评价烟草产品谱图与标准谱图之间的指纹图谱异常指数:

$$[0079] \quad I = \sum_{i=1}^n AV_{C,i} + \sum_{i=1}^n AV_{A,i} + \sum_{i=1}^n AV_{E,i}。$$

[0080] 步骤 S3 中设置指纹图谱异常指数的品质评价区域的具体过程如下:

[0081] 统计标准样本集中每个样本的总异常指数, 取均值为 \bar{I}_s , 计算待评价烟草产品谱图的总异常指数 \bar{I}_x , 建立品质评价区域:

$$[0082] \quad \text{I、品质一致范围: } \bar{I}_x \leq 3\bar{I}_s;$$

$$[0083] \quad \text{II、品质相近范围: } 3\bar{I}_s \leq \bar{I}_x \leq 6\bar{I}_s;$$

$$[0084] \quad \text{III、品质不同范围: } \bar{I}_x \geq 6\bar{I}_s。$$

[0085] 在反映大量化学信息的卷烟烟气 GC 谱图数据基础上, 利用化学计量学处理复杂数据的优势及计算机技术设计了一种色谱指纹图谱异常指数法, 并建立了一套数据分析应用方法, 应用于卷烟产品烟气质量评价。

[0086] 1、采集一定量的已知正常产品烟气色谱数据, 筛选共有峰建立标准谱图, 根据正

常产品指纹图谱异常指数值（反映实验误差水平）设置指纹图谱品质监控区域；

[0087] 2、采集测试样品烟气谱图与标准谱图比对，计算共有峰和非共有峰指纹图谱异常指数值，进行烟气质量评价和监控。

[0088] 相同或相似的标号对应相同或相似的部件；

[0089] 附图中描述位置关系的用于仅用于示例性说明，不能理解为对本专利的限制；

[0090] 显然，本发明的上述实施例仅仅是为清楚地说明本发明所作的举例，而并非是对本发明的实施方式的限定。对于所属领域的普通技术人员来说，在上述说明的基础上还可以做出其它不同形式的变化或变动。这里无需也无法对所有的实施方式予以穷举。凡在本发明的精神和原则之内所作的任何修改、等同替换和改进等，均应包含在本发明权利要求的保护范围之内。

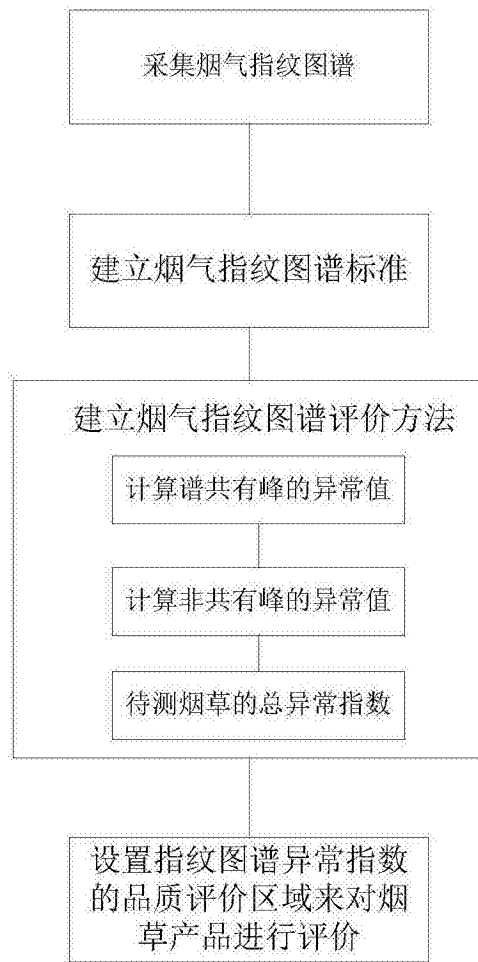


图 1