



# 基于烟丝挥发 / 半挥发性组分构建卷烟果香风格特征预测模型

李超<sup>1</sup>, 王明锋<sup>1</sup>, 张志敏<sup>2</sup>, 张承明<sup>1</sup>, 王文元<sup>1</sup>, 李娥贤<sup>3</sup>, 秦云华<sup>1</sup>

1 云南中烟工业有限责任公司技术中心, 卷烟产品质量检测中心, 昆明市五华区红锦路181号 650023;

2 中南大学化学化工学院, 湖南长沙 410083;

3 云南省农业科学研究院生物技术与种质资源研究所, 云南昆明 650223

**摘要:** 用 GC-MS/MS 检测了 80 种国内市售成品卷烟烟丝中 73 种挥发 / 半挥发性成分, 通过因子分析和逐步线性回归建立了卷烟果香风格特征预测模型。研究发现: ① 7 个公因子对原指标的累积方差解释率为 87.77%; ② 含 N 或 O 原子的羰基化合物, 环酮及长链羧酸类, 烯醇, 苄醇类化合物, D/L-薄荷醇等对果香风格特征贡献较大; ③ 模型对于训练集果香评吸指标具有较好的拟合效果, 决定系数  $R^2 = 0.939$ , 对测试集也具有较好的预测能力, 平均绝对误差 (MAE) = 0.1876, 预测结果可以接受, 适用于预测卷烟果香风格特征。

**关键词:** 果香风格特征; GC-MS/MS; 因子分析; 逐步线性回归

**引用本文:** 李超, 王明锋, 张志敏, 等. 基于化学组分的卷烟果香风格特征定量预测模型构建 [J]. 中国烟草学报, 2017, 23 (1)

卷烟产品品质的提升, 关键在于感官品质的提升, 如何建立卷烟感官品质的评价方法一直都是行业的研究热点<sup>[1-4]</sup>。目前, 卷烟感官品质的评价主要是通过专家评吸来进行, 并已发布实施了相关国家和行业标准<sup>[5-6]</sup>。但由于评吸者存在主观性<sup>[7-8]</sup>, 评吸结果的重现性与稳定性存在一定的不足<sup>[9-10]</sup>。感官特征与化学成分之间存在内在联系, 不同化学组分会对卷烟感官特征产生不同程度的影响<sup>[11-14]</sup>。产品品质特征的预测早先多见于食品的口味风格判断<sup>[15-16]</sup>, 近年来, 基于化学成分的卷烟感官评价方法研究也有了较多的报道。如吴宁宁等<sup>[10]</sup>通过烟丝提取物的 GC/MS 数据和主成分回归 (PCR) 方法预测卷烟烟气的感官特征; 王明锋等<sup>[17]</sup>通过相关分析和多元线性回归 (MLR) 方法考察了影响卷烟感官舒适性的相关因素及应用技术; 林顺顺等<sup>[18]</sup>和沈宁等<sup>[8]</sup>分别采用偏最小二乘回归 (PLSR) 方法研究烟叶常规化学成分对市售卷烟感官品质特征的影响。但上述研究多集中于研究烟叶的化学组分与感官的关系, 且存在仅使用色谱图数

据点建模, 无法构建化学指标含量与感官评吸结果数据的关联模型; 分析指标数量不足, 无法全面综合衡量化学指标对某一感官特性的影响; 统计方法缺乏内外部验证, 无法建立稳健的校正模型, 或所使用的模型并不适用于所研究体系等。

基于化学成分含量对卷烟感官品质特征建模实际上可以理解为处理一种广义灰色体系<sup>[19]</sup>, 即一种复杂的多组分体系, 且其影响因素不清晰, 主要依靠已有的化学或物理方法所得的定量数据作为标杆来分析, 并以此建模。因此, 本研究采用因子分析 (Factor Analysis) 降维<sup>[20-21]</sup>, 并采用逐步线性回归方式建模<sup>[22-23]</sup>, 通过模型的构建研究烟丝挥发性 / 半挥发性成分对卷烟果香特征指标的影响, 旨在为卷烟产品的配方设计、品质提升和管控提供参考。

## 1 材料与方法

### 1.1 试验材料

80 种国内市售成品卷烟 (盒标焦油 8~12 mg/支,

**基金项目:** 云南中烟工业有限责任公司 2015 年度科技项目“适用于卷烟产品质量管控的分析检测平台搭建及应用” (2015JC07); 云南中烟工业有限责任公司 2013 年度科技项目“红塔集团质量监督检测实验室建设” (2013JC10); 中国烟草总公司 2015 年度科技项目高静压 (HHP) 技术在卷烟香精香料中的应用研究 (110201402036)

**作者简介:** 李超 (1985—), 硕士, 工程师, 主要从事烟草化学、数理统计研究, Email: super88man66@126.com

**通讯作者:** 秦云华 (1969—), 硕士, 高级工程师, 主要从事卷烟产品质量监督工作, Email: qinyh@ynzy-tobacco.com

**收稿日期:** 2016-07-13; **网络出版日期:** 2017-02-13

盒标烟碱 0.6~1.2 mg/支, 盒标 CO 9~13 mg/支, 2015 年分别购自昆明市、上海市、长沙市等市场); 水符合 GB/T 6682 中一级水的要求; 无水乙醇、丙二醇、乙醚(色谱纯, 德国 Merck 公司); 73 种挥发性有机化合物标样(具体见表 2)(分析纯或以上, 美国 Sigma 公司); 萘(内标, 纯度 99%, 百灵威科技有限公司)。

## 1.2 试验仪器

Scion TQ 三重四极杆气质联用仪(德国 Bruker 公司); HY-4 往复调速多用振荡摇床(振荡频率调节为 150 r/min, 江苏省金坛市友联仪器研究所); AT201 电子分析天平(感量 0.0001g, 瑞士 Mettler-Toledo 公司); 5000 $\mu$ L 移液器(德国 Eppendorf 公司); Milli-Q 超纯水仪(美国 Millipore 公司)。

## 1.3 方法

### 1.3.1 标准工作溶液配制

分别称取 73 种有机化合物标样各 0.0050 g(或 0.0100 g)于不同的 50 mL(或 100 mL)容量瓶中, 用无水乙醇丙二醇混合溶液(无水乙醇: 丙二醇 = 9: 1)定容, 配制成质量浓度为 100 $\mu$ g/mL 的标准储备液, 摇匀后倒入棕色香精香料瓶中封存, 同时放入 4 $^{\circ}$ C 冰箱中冷藏备用。以乙醚为溶剂, 采用上述标准工作储备溶液制备系列标准工作溶液, 该系列标准工作溶液至少配制 5 级, 其浓度范围应覆盖样品中挥发性有机化合物的含量, 其中内标萘浓度为 1 $\mu$ g/mL。

### 1.3.2 样品处理与分析

随机取新开包的同一品牌的烟支进行试样制备, 每个实验样品制备 3 个平行样。剥去卷烟纸和滤嘴, 取出烟丝, 记录重量, 再分别放入 3 个 100 mL 锥形瓶中, 作为试样。在试样中分别加入 1 mL 60 $\mu$ g/mL 的内标萘、9 mL 乙醚, 迅速盖上盖摇匀, 置于振荡摇床上震荡 2 h, 用 10 mL 针筒取上层萃取液经 0.22 $\mu$ m 微孔滤膜过滤, 供 GC-MS/MS(气相色谱-质谱/质谱仪)分析, 分析条件为: 色谱柱: DB-5MS(30 m  $\times$  0.25 mm, 0.25 $\mu$ m, 美国 Agilent 公司)弹性石英毛细管色谱柱; 进样口温度: 250 $^{\circ}$ C; 载气: He, 恒流模式, 柱流量 1 mL/min, 进样量: 1 $\mu$ L, 分流比: 10: 1; 升温程序: 50 $^{\circ}$ C(2 min), 以 5 $^{\circ}$ C/min 的速率升温至 250 $^{\circ}$ C(20 min); 传输线温度: 250 $^{\circ}$ C; 电离方式: EI; 离子源温度: 170 $^{\circ}$ C; 电离能 70 eV; 灯丝电流: 80 $\mu$ A; 全扫描监测 Full scan 模式, 扫描范围: 10~500 amu; 多反应监测 MRM 模式。选择 IS(萘)作为内标物, 其定量离子对为: 128/101.9、碰撞能为: 22eV。其他组分的定性、定量离子对, 碰撞能选择参数略。

对照标样的保留时间、定性离子对和定量离子对, 确定试样中的目标化合物。当试样和标样在相同保留时间处( $\pm 0.2$  min)出现, 且各定性离子的相对丰度与浓度相当的标准溶液的离子相对丰度一致, 则判断样品中存在对应的被测物。每个样品平行测定 3 次。根据试样中目标化合物的定量离子峰面积计算样品中挥发性及半挥发性有机化合物的含量。试样中挥发性及半挥发性有机化合物的含量按式(1)进行计算:

$$C_s = \frac{(\frac{A_s}{A_i} + a) \times C_i \times V}{k \times m} \quad (1)$$

其中,  $C_s$  表示试样中某一种特征物质的含量, 单位为 mg/kg;  $A_s$  为试样中挥发性或半挥发性有机化合物的峰面积, 单位为 U(积分单位);  $A_i$  为内标物质的峰面积, 单位为 U(积分单位);  $C_i$  为加入内标物质的量, 单位为  $\mu$ g/mL;  $V$  为萃取溶液的体积;  $m$  为称取烟丝质量, 单位为 g;  $k$  为各挥发性或半挥发性有机化合物的标准工作曲线斜率;  $a$  为各挥发性或半挥发性有机化合物的标准工作曲线截距。经测定, 成品卷烟烟丝样品的检出限和定量限分别为 0.0020~2.1596 mg/kg、0.0065~7.1987 mg/kg。

### 1.3.3 卷烟果香风格特征评价

由云南中烟工业有限责任公司卷烟产品质量检测中心组织 10 名国家级评烟委员组成的评吸小组对 80 种卷烟样品的感官特征进行评价<sup>[6]</sup>, 主要考察对感官品质具有重要影响之一的果香香气风格评吸特征, 特征赋分范围为 0~10 分, 评价的最小计分单位为 0.5 分, 取 10 人评吸结果的算术平均值, 结果保留 2 位小数, 作为卷烟果香感官评分数据。

### 1.3.4 因子分析模型的建立

本研究由于涉及烟丝中 73 种挥发性/半挥发性成分含量的测定, 指标较多, 所以考虑采用因子分析模型<sup>[24-25]</sup>来进行降维。

### 1.3.5 数据分析

采用 SPSS 22.0 统计学软件的数据处理模块对不同烟丝挥发/半挥发性化学指标与其果香感官评分进行分析。采用因子分析和逐步线性回归方法来探索不同卷烟果香风格特征与其物质基础间的关系。

## 2 结果与讨论

### 2.1 成品卷烟的果香风格特征分析

果香风格特征评分用变量  $y$  表示, 指标得分见表 1。从表中可知, 80 种卷烟果香风格特征的得分变化范围为 0.500~3.000 分, 品牌之间存在一定差异性。

## 2.2 成品卷烟烟丝化学成分含量描述统计

卷烟样品烟丝化学组分总共包含 73 个指标，每种组分用一个  $x_n(n=1\sim 73)$  变量表示，构成化学成分 X

矩阵，各组分含量的描述统计参见表 2。从表中可知，不同化学组分的含量在卷烟烟丝中的差异较大；对于同一组分，在不同品牌卷烟中其含量也存在较为明显的差异。

表 1 成品卷烟样品的感官香气风格特征得分描述统计

Tab.1 Descriptive statistics for score of finished cigarette samples sensory aroma style features

项目	最小值	最大值	范围	平均值	标准偏差	方差	偏度	峰度
果香	0.500	3.000	2.500	1.840	0.800	0.640	-1.263	0.778

注：有效样本量 N = 80。

表 2 成品卷烟样品烟丝中 73 种化学组分含量描述统计

Tab.2 Descriptive statistics for 73 chemical components of finished cigarette samples

检测指标	最小值	最大值	平均值	标准偏差
3- 羟基 -2- 丁酮 ( $x_1$ )	0	4.174	2.764	0.774
异丁酸乙酯 ( $x_2$ )	0.113	0.317	0.183	0.049
乙酸异丁酯 ( $x_3$ )	0	0.145	0.043	0.048
丁酸乙酯 ( $x_4$ )	0.149	0.37	0.28	0.071
2- 甲基四氢呋喃 -3- 酮 ( $x_5$ )	1.848	2.969	2.446	0.254
乳酸乙酯 ( $x_6$ )	17.369	42.332	32.263	8.596
2- 甲基吡嗪 ( $x_7$ )	0	0.242	0.144	0.106
糠醇 ( $x_8$ )	0.784	1.544	0.986	0.203
$\alpha$ - 当归内酯 ( $x_9$ )	0.544	0.783	0.654	0.07
2,6- 二甲基吡啶 ( $x_{10}$ )	0.165	0.26	0.193	0.025
戊酸乙酯 ( $x_{11}$ )	0	0.061	0.006	0.017
3- 乙基吡啶 ( $x_{12}$ )	0	0.725	0.285	0.129
5- 甲基糠醛 ( $x_{13}$ )	0	0	0	0
6- 甲基 -5- 庚烯 -2- 酮 ( $x_{14}$ )	0.103	0.187	0.146	0.026
2,3,5- 三甲基吡嗪 ( $x_{15}$ )	0	0.094	0.052	0.03
甲基环戊烯醇酮 ( $x_{16}$ )	0	1.267	0.816	0.4
R-(+)- 柠檬烯 ( $x_{17}$ )	2.722	7.421	4.897	1.258
苜醇 ( $x_{18}$ )	0.04	0.087	0.069	0.012
苯乙醛 ( $x_{19}$ )	0.372	0.602	0.452	0.062
$\gamma$ - 己内酯 ( $x_{20}$ )	0.22	0.56	0.407	0.105
4- 羟基 -2,5- 二甲基 -3(2H)- 呋喃酮 ( $x_{21}$ )	1.802	2.071	1.928	0.09
苯乙酮 ( $x_{22}$ )	0.011	0.034	0.022	0.006
2- 乙酰基吡咯 ( $x_{23}$ )	0.758	1.465	0.938	0.199
$\delta$ - 己内酯 ( $x_{24}$ )	0	1.552	0.957	0.398
氧化异佛尔酮 ( $x_{25}$ )	0	0.245	0.147	0.084
芳樟醇 ( $x_{26}$ )	0	0	0	0
异戊酸异戊酯 ( $x_{27}$ )	0	0.593	0.297	0.147
苯甲醛二甲缩醛 ( $x_{28}$ )	0	0.021	0.001	0.005
苯乙醇 ( $x_{29}$ )	0.404	0.934	0.549	0.159
麦芽酚 ( $x_{30}$ )	71.283	81.374	76.158	3.422
异佛尔酮 ( $x_{31}$ )	0	0.09	0.031	0.034
3,5,5- 三甲基环己烷 -1,2- 二酮 ( $x_{32}$ )	0	3.73	2.241	1.639
$\gamma$ - 庚内酯 ( $x_{33}$ )	0	0	0	0

mg/kg

续表 2

L-薄荷醇 (x <sub>34</sub> )	0	0.352	0.107	0.141
D-薄荷醇 (x <sub>35</sub> )	0	0.515	0.156	0.207
$\alpha$ -松油醇 (x <sub>36</sub> )	0	0	0	0
乙基麦芽酚 (x <sub>37</sub> )	0	25.383	16.924	10.83
$\beta$ -环柠檬醛 (x <sub>38</sub> )	0	0.4	0.211	0.194
香茅醇 (x <sub>39</sub> )	0.415	0.613	0.536	0.056
香芹酮 (x <sub>40</sub> )	0	0	0	0
苯乙酸乙酯 (x <sub>41</sub> )	0	0.406	0.131	0.154
香叶醇 (x <sub>42</sub> )	0	0	0	0
对茴香醛 (x <sub>43</sub> )	0	0.385	0.147	0.173
乙酸芳樟酯 (x <sub>44</sub> )	0	0	0	0
乙酸苯乙酯 (x <sub>45</sub> )	0	0.754	0.388	0.358
$\gamma$ -辛内酯 (x <sub>46</sub> )	0.016	0.046	0.029	0.009
4-甲基-2-苯基-1,3-二氧戊环 (x <sub>47</sub> )	0	0	0	0
反式-肉桂醛 (x <sub>48</sub> )	0	0	0	0
茴香烯 (x <sub>49</sub> )	0.308	0.388	0.359	0.021
4-乙烯基愈创木酚 (x <sub>50</sub> )	1.325	1.841	1.546	0.17
洋茉莉醛 (x <sub>51</sub> )	0.394	0.489	0.422	0.024
山楂花酮 (x <sub>52</sub> )	0.623	0.726	0.681	0.036
丁香酚 (x <sub>53</sub> )	0.558	1.14	0.816	0.201
$\gamma$ -戊基丁内酯 (x <sub>54</sub> )	0.047	0.156	0.096	0.03
二氢香豆酯 (x <sub>55</sub> )	0.15	0.258	0.196	0.027
$\delta$ -壬内酯 (x <sub>56</sub> )	0	0.413	0.126	0.184
香兰素 (x <sub>57</sub> )	6.661	7.582	7.112	0.316
$\beta$ -二氢大马酮 (x <sub>58</sub> )	0.228	0.376	0.293	0.045
$\beta$ -石竹烯 (x <sub>59</sub> )	2.005	4.021	2.705	0.657
3-乙氧基-4-羟基苯甲醛 (x <sub>60</sub> )	0	3.576	2.226	1.621
肉桂酸乙酯 (x <sub>61</sub> )	0	0	0	0
$\gamma$ -癸内酯 (x <sub>62</sub> )	0	0.49	0.246	0.227
$\beta$ -紫罗兰酮 (x <sub>63</sub> )	0.226	0.33	0.285	0.026
$\delta$ -癸内酯 (x <sub>64</sub> )	0	0.193	0.081	0.093
覆盆子酮 (x <sub>65</sub> )	0.314	1.648	0.446	0.302
$\gamma$ -十一内酯 (x <sub>66</sub> )	0	1.787	0.657	0.36
$\delta$ -十一内酯 (x <sub>67</sub> )	0.514	0.758	0.624	0.08
$\gamma$ -十二内酯 (x <sub>68</sub> )	1.083	1.935	1.453	0.243
$\delta$ -十二内酯 (x <sub>69</sub> )	0.749	0.866	0.796	0.032
苯甲酸苯甲酯 (x <sub>70</sub> )	0.245	2.195	0.778	0.598
金合欢基丙酮 (x <sub>71</sub> )	27.309	79.305	55.466	16.431
肉桂酸苯酯 (x <sub>72</sub> )	1.841	2.485	2.089	0.194
肉桂酸肉桂酯 (x <sub>73</sub> )	5.742	13.771	8.067	2.589

注: 有效样本量 N = 80。

### 2.3 成品卷烟烟丝挥发性 / 半挥发性化学成分的因子分析

对不同烟丝样本进行因子分析, 计算前首先将 10 种未检出物质剔除。由于 63 种指标间量纲及数值差异较大, 所以从相关阵出发, 采用主成分提取方法,

首先对取样足够度进行 Kaiser-Meyer-Olkin 及 Bartlett 检验, 计算结果显示相关阵为非正定矩阵, 说明存在不大于零的特征向量。采用变量逐步带入筛选的方式来剔除对自变量阵  $X$  影响极小的变量, 具体作法为, 每次带入  $X$  中的一个自变量进行因子分析, 考察相

关阵是否为正定矩阵，如果不是正定矩阵则剔除该变量，反之则保留。通过计算，一共有 34 个变量进入因子分析模型，并进行最大方差法旋转，迭代 15 次收敛。其取样足够度情况见表 3，由于  $KMO=0.775>0.5$ ，且  $Bartlett\ sig. <0.0001$ ，呈 1% 显著性水平，说明样本较适合于进行因子分析。34 个指标共可提取 7 个公因子，其所能解释原指标的累积方差贡献率为 87.77%，说明在用所提取的 7 个因子来表征原始指标特性的同时，可保留大部分信息。

表 3 不同烟叶样本的 KMO 和 Bartlett 检验

Tab.3 KMO and Bartlett test of different tobacco samples

Bartlett df	Bartlett sig.	近似卡方值	KMO 度量
561	<0.0001	53215.043	0.775

通过因子得分系数矩阵可以列出不同烟叶各原始指标通过线性组合而成的 7 个公因子的表达式，如公式 (2)，公式中  $X_i$  为样本中各指标变量的标准化值， $\gamma_i$  为因子的得分系数， $F_j$  为各因子的因子得分， $i$  的取值范围为 (1, 34)。据公式计算各样本的因子得分，并保存为新变量  $F_j$ ， $j = 1\sim 7$ ，可用以替代原指标来衡量烟叶的品质特征。

$$F_j = \gamma_1 X_1 + \gamma_2 X_2 + \dots + \gamma_i X_i \quad (2)$$

采用因子旋转法（最大方差法）对 7 个公因子的实际意义进行解释，如表 4 所示。

表 4 因子旋转矩阵

Tab.4 Factor rotation matrix

指标名称	公因子编号							mg/kg
	1	2	3	4	5	6	7	
3- 羟基 -2- 丁酮	0.223	0.239	0.124	0.070	-0.743	0.322	-0.216	
异丁酸乙酯	0.699	-0.073	0.317	0.319	0.230	-0.187	-0.018	
乙酸异丁酯	0.104	0.229	0.192	-0.320	0.030	0.854	0.057	
丁酸乙酯	0.120	0.656	0.141	0.310	-0.534	0.104	0.144	
2- 甲基四氢呋喃 -3- 酮	-0.172	0.200	0.663	0.456	-0.339	0.237	0.166	
乳酸乙酯	-0.375	-0.026	0.318	0.330	-0.208	0.678	-0.278	
糠醇	0.422	0.140	0.350	0.136	0.373	-0.611	0.180	
$\alpha$ - 当归内酯	0.195	-0.040	0.011	0.786	-0.044	-0.049	0.043	
2,6- 二甲基吡啶	0.175	-0.001	0.281	0.129	0.088	0.019	0.811	
戊酸乙酯	0.226	0.662	0.553	-0.164	-0.152	-0.135	-0.032	
3- 乙基吡啶	0.500	0.400	0.148	-0.218	0.032	-0.452	0.475	
6- 甲基 -5- 庚烯 -2- 酮	0.374	0.503	0.288	0.579	-0.313	0.107	0.085	
2,3,5- 三甲基吡啶	0.309	0.799	-0.010	0.313	0.228	-0.236	0.101	
甲基环戊烯醇酮	-0.119	0.474	0.527	0.164	-0.378	-0.182	-0.068	
R-(+)- 柠檬烯	0.555	0.212	0.143	0.614	-0.039	-0.049	0.354	
苜醇	-0.062	0.151	0.088	0.851	0.089	-0.213	0.215	
苯乙醛	0.217	0.104	0.154	0.758	-0.168	0.384	-0.174	

续表 4

$\gamma$ -己内酯	0.773	0.206	0.091	0.191	0.192	-0.082	0.419
4-羟基-2,5-二甲基-3(2H)-咪喃酮	0.300	0.102	0.819	0.161	0.231	0.283	0.144
苯乙酮	0.474	0.321	0.172	0.373	0.108	0.552	-0.182
2-乙酰基吡咯	-0.813	0.103	-0.064	0.214	0.396	-0.003	-0.227
$\delta$ -己内酯	0.820	0.004	0.258	0.223	-0.260	-0.151	-0.200
氧化异佛尔酮	0.767	0.112	-0.165	0.282	0.052	0.312	0.399
异戊酸异戊酯	0.566	0.364	0.176	0.353	-0.497	-0.121	-0.154
苯甲醛二甲缩醛	0.290	0.663	0.525	-0.170	-0.098	0.023	-0.137
苯乙醇	-0.794	-0.190	0.133	0.020	0.379	-0.132	-0.291
麦芽酚	-0.018	-0.002	0.899	0.004	0.266	0.195	0.145
异佛尔酮	-0.062	0.901	0.165	-0.026	0.045	0.246	0.012
L-薄荷醇	-0.043	0.093	0.169	-0.031	0.874	-0.056	-0.040
D-薄荷醇	-0.053	-0.011	0.088	0.020	0.919	0.053	0.035
乙基麦芽酚	-0.030	-0.241	0.500	-0.487	0.543	0.190	-0.195
$\beta$ -环柠檬醛	-0.273	0.325	0.021	-0.140	0.072	0.261	-0.806
香茅醇	0.184	0.196	0.831	0.126	0.012	-0.133	0.071
乙酸苯乙酯	-0.066	0.838	-0.112	0.266	-0.117	0.196	-0.236

注: a. 提取方法: 主成分分析法; b. 旋转方法: 带 Kaiser 规范化的最大方差法。

## 2.4 果香风格特征与烟丝挥发性 / 半挥发性化学成分的逐步线性回归分析

### 2.4.1 逐步线性回归模型的建立

将 80 种卷烟样品随机分为训练集 (50 种) 和测试集 (30 种) 两个数集, 以训练集样品烟丝中 34 种化学组分的 7 个因子得分为自变量矩阵  $X$ , 以样品果香风格特征得分指标为因变量  $Y$  进行逐步线性回归分析, 步进法标准为: 7 个自变量  $x$  逐步进入方程, 考察方程有效性  $F$  的概率值  $P$ , 当  $P > 0.10$  时则剔除

该变量, 当  $P \leq 0.05$  时则选择进入方程。通过筛选, 公因子 2、3、4、5、6 合计 5 个变量进入回归方程。回归方程的摘要参见表 5, 从表中可知, 方程的决定系数  $R^2 = 0.939$ , 调整决定系数  $R^2 = 0.929$ , 说明回归方程的拟合效果优良。

通过 5 个变量的标准化回归系数可以列出标准化回归预测方程, 即:  $Y = 0.254 X_2 - 0.596 X_3 + 0.352 X_4 - 0.449 X_5 - 0.441 X_6$ 。将样品的 5 个因子得分带入方程即可求出相应的果香评吸得分。回归方程的系数经  $t$  检验均显著。

表 5 回归模型摘要  
Tab.5 Regression Model Summary

模型	$R$	$R^2$	$R^2$	标准偏斜度误差	变更统计资料				
					$R^2$	F 值变更	df1	df2	显著性
1	0.969 <sup>a</sup>	0.939	0.929	0.2131	0.939	90.051	5	49	0.000

### 2.4.2 线性回归模型的验证

将测试集(30种样品)34种化学组分含量代入2.4.1中所建立的线性回归模型中计算并预测果香评吸得分值 $Y$ ,并与感官评吸结果对比作图1,从图中可以看出模型对测试集的预测效果较好,预测值与实际值在每个样本上的误差较小。预测值与实际评吸的MAE值(平均绝对误差)为0.1876,说明所建立的模型对于果香这一感官品质指标具有较好的预测能力。

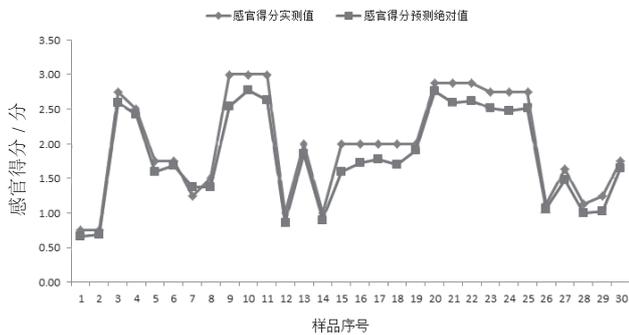


图1 测试集果香风格特征预测值与感官评吸值对比

Fig.1 predictive value and sensory evaluation results of fruity style characteristics by test Set Model

## 3 结论

构建了卷烟果香风格特征预测模型,该模型拟合及预测效果优良,决定系数 $R^2=0.939$ ,调整决定系数 $R^2=0.929$ ,测试集平均绝对误差(MAE)=0.1876。该模型可指导加料配方的调整和生化处理,可为针对性调控卷烟果香风格特性提供支撑。

## 参考文献

- [1] 徐轲. 卷烟感官指标消费者评价方法[J]. 中国烟草科学, 2010, 1:53-55.  
XU Ke. Sensory evaluation method cigarette consumers[J]. Chinese Tobacco Science, 2010, 1: 53-55.
- [2] 李栋, 朱文魁, 文锦孟, 等. 卷烟感官评价自动化试样制备系统的设计[J]. 烟草科技, 2014,9:23-26.  
LI Dong, ZHU Wenkui, WEN Jinmeng, et al. Design of automatic test sample preparing system for cigarette sensory evaluation[J]. Tobacco Science & Technology, 2014, 9:23-26.
- [3] 万伟, 单雪华, 邓小华, 等. 衡阳烟叶品质特征感官评价[J]. 作物研究, 2015,6:630-634.  
WAN Wei, SHAN Xuehua, DENG Xiaohua, et al. Sensory evaluation on quality characteristics of flue - cured tobacco from Hengyang[J]. Crop Research, 2015, 6: 630-634.
- [4] 胡建军. 烟叶质量评价方法优选与实证研究[D]. 湖南农业大学, 2009.  
HU Jianjun. Optimization and Empirical Study on Evaluation Methods of Tobacco Leaf Quality[D]. Hunan Agricultural University, 2009.
- [5] 国家质量监督检验检疫总局. GB 5606.4-2005 卷烟第4

- 部分:感官技术要求[S]. 北京:中国标准出版社, 2005.  
General Administration of Quality Supervision, Inspection and Quarantine. GB 5606.4-2005 Cigarette - Part 4: Sensory technical requirements[S]. Beijing: China Standard Press, 2005.
- [6] 国家烟草专卖局. YC/T 497-2014 卷烟中式卷烟风格感官评价方法[S]. 北京:中国标准出版社, 2002.  
State Tobacco Monopoly Administration. YC/T 497-2014 Cigarette Chinese cigarette-style sensory evaluation method[S]. Beijing: China Standard Press, 2002.
- [7] 龙章德, 林顺顺, 田兆福, 等. 基于电子鼻分析的原料烟叶鉴别[J]. 食品与机械, 2013,4:35-39.  
LONG Zhangde, LIN Shunshun, TIAN Zhaofu, et al. Identification of tobacco material based on electronic nose analysis[J]. Food & Machinery, 2013, 4:35-39.
- [8] 沈宁, 赵娟, 于静洋, 等. 基于PLSR分析常规化学成分对市售卷烟感官品质的影响[J]. 食品与机械, 2015, 6: 47-52.  
SHEN Ning, ZHAO Juan, YU Jingyang, et al. Influence of Chemical Composition on conventional commercial cigarette sensory quality based on PLSR[J]. 2015, 6: 47-52.
- [9] 顾永波, 肖作兵, 刘强, 等. 基于电子舌技术的卷烟主流烟气味觉识别[J]. 烟草科技, 2011,8:48-51.  
GU Yongbo, XIAO Zuobin, LIU Qiang, et al. Taste pattern recognition of mainstream cigarette smoke based on electronic tongue[J]. Tobacco Science & Technology, 2011, 8: 48-51.
- [10] 吴宁宁, 杨俊, 张天栋, 等. 卷烟的感官特征与其烟丝提取物GC/MS数据之间的关系[J]. 烟草科技, 2013,11:31-35.  
WU Ningning, YANG Jun, ZHANG Tiandong, et al. Relationship between sensory characteristics of cigarettes and GC/MS data of cut filler extracts[J]. Tobacco Science & Technology, 2013, 11: 31-35.
- [11] 武德传. 大理烤烟品质特征及主要影响因素研究[D]. 湖南农业大学, 2010.  
WU Dechuan. Study on quality characteristic and main affecting factors in dali flue-cured tobacco[D]. Hunan Agricultural University, 2010.
- [12] 安随元. 卷烟材料对卷烟品质影响因子的研究[D]. 湖南农业大学, 2013.  
AN Suiyuan. Study on the effects of cigarette materials on cigarette quality[D]. Hunan Agricultural University, 2010.
- [13] 窦玉青, 汤朝起, 王平, 等. 闽西、赣中不同香型烤烟主要化学成分对吸食品质的影响[J]. 烟草科技, 2009, 11: 15-20.  
DOU Yuqing, TANG Chaoqi, WANG Ping, et al. Effects of major chemical components in flue-cured tobacco with different flavor types from west Fujian and middle Jiangxi on their smoking quality[J]. Tobacco Science & Technology, 2009, 11: 15-20.
- [14] 汤朝起, 王平, 窦玉青, 等. 河南烤烟主要化学成分与吸食品质的关系[J]. 中国烟草科学, 2009, 30(5): 41-45, 49.  
TANG Chaoqi, WANG Ping, DOU Yuqing, et al. Relationship between major chemicals of flue-cured tobacco and its smoking quality in Henan province[J]. Chinese Tobacco Science, 2009, 30(5): 41-45, 49.
- [15] Hernández MM, Gallardo V T, Osorio R G, et al. Prediction of total fat, fatty acid composition and nutritional parameters

- in fish using MID-FTIR spectroscopy and chemometrics[J]. LWT-Food Sci Technol, 2013, 52(1): 12-20.
- [16] Shen F, Ying Y B, Li B B, et al. Prediction of sugars and acids in Chinese rice wine by mid-infrared spectroscopy[J]. Food Res Int, 2011, 44(5): 1521-1527.
- [17] 王明锋. 卷烟感官舒适性相关因素分析及应用技术研究[D]. 云南大学, 2010.  
WANG Mingfeng. Correlation factor analyses of sensorycoziness of cigarette and its application[D]. Yunnan University, 2010.
- [18] 林顺顺, 张晓鸣. 基于 PLSR 分析烟叶化学成分与感官质量的相关性 [J]. 中国烟草科学, 2016, 37(1): 78-82.  
LIN Shunshun, ZHANG Xiaoming. Correlation of tobacco chemical components and sensory quality assessed by PLSR[J]. Chinese Tobacco Science, 2016, 37(1): 78-82.
- [19] 梁逸曾, 许青松. 复杂体系仪器分析 - 白、灰、黑分析体系及其多变量解析方法 [M]. 北京: 化学工业出版社, 2012:152-185.  
LIANG Yizeng, XU Qingsong. Instrumental Analysis of Complex Systems-White, Gray and Black Analytical System and Their Multivariate Methods[M]. Beijing: Chemical Industry Press, 2012: 152-185.
- [20] 马庆华, 李永红, 梁丽松, 等. 冬枣优良单株果实品质的因子分析与综合评价 [J]. 中国农业科学, 2010, 12: 2491-2499.  
MA Qinghua, LI Yonghong, LIANG Lisong, et al. Factor analysis and synthetical evaluation of the fruit quality of Dongzao[J]. Scientia Agricultura Sinica, 2010, 12: 2491-2499.
- [21] 辛督强, 韩国秀. 因子分析法在科技期刊综合评价中的应用 [J]. 数理统计与管理, 2014, 1: 116-121.  
XIN Duqiang, HAN Guoxiu. Factor analysis application in the comprehensive evaluation of Sci-Tech journals[J]. Journal of Applied Statistics and Management, 2014, 1: 116-121.
- [22] 付勇, 汪立今, 柴凤梅, 等. 多元线性回归和逐步回归分析在白石泉 Cu-Ni 硫化物矿床研究中的应用 [J]. 地学前缘, 2009, 1:373-380.  
FU Yong, WANG Lijin, CHAI Jinfeng, et al. The application of multi-variate linear regression combined with stepwise regression analysis for Cu-Ni sulfide deposit of Baishiquan[J]. Earth Science Frontiers, 2009, 1: 373-380.
- [23] 谭立云, 刘海生, 谭龙. 逐步线性回归与神经网络预测的算法对比分析 [J]. 华北科技学院学报, 2014,5:60-65.  
TAN Liyun, LIU Haisheng, TAN Long. Algorithm comparative analysis with stepwise line arRgeression and neural network[J]. Journal of North China Institute of Science and Technology, 2014, 5: 60-65.
- [24] 何晓群. 多元统计分析 [M]. 北京: 中国人民大学出版社, 2012:143-154.  
HE Xiaogun. Multivariate Statistical Analysis[M]. Beijing: China Renmin University Press, 2012: 143-154.
- [25] [美] 约翰逊, 威克恩著, 陆璇译. 实用多元统计分析 [M]. 北京: 清华大学出版社, 2001:103-117.  
Johnson R A, Wichern D W. Practical multivariate statistical analysis[M]. Beijing: Tsinghua University Press, 2001: 103-117.

## Establishment of quantitative prediction model for fruit note of cigarette based on volatile/semi-volatile components in tobacco

LI Chao<sup>1</sup>, WANG Mingfeng<sup>1</sup>, ZHANG Zhimin<sup>2</sup>, ZHANG Chengming<sup>1</sup>, WANG Wenyuan<sup>1</sup>, LI Exian<sup>3</sup>, QIN Yunhua<sup>1\*</sup>

<sup>1</sup> Cigarette Product Quality Inspection Institute, Technology Center, China Tobacco Yunnan Industrial Co., Ltd., Kunming 650023, China;

<sup>2</sup> Chemistry and Chemical Engineering College, Central South University, Changsha 410083, China;

<sup>3</sup> Institute of Biotechnology and Genetic Resources, Yunnan Academy of Agricultural Sciences, Kunming 650223, China

**Abstract:** 73 volatile/semi-volatile components in 80 cigarette brands sold in the market were detected by GC-MS / MS method to establish a prediction model for fruity style characteristic of cigarette by factor analysis and step-wise linear regression method. Results showed that ① The cumulative variance interpretation rate of seven common factors to the original indicators was 87.77%. ② Carbonyl compound containing N or O atoms, cyclic ketones and long-chain carboxylic acids, alcohol, benzyl alcohol compound, D/L-menthol had greater contribution to fruity characters. ③ Regression model had good result for smoking fruity index of the training set, with determination coefficient R at 0.939. The model also had great predictive ability for smoking fruity index of the testing set, with mean absolute error at 0.1876 only. With accurate regression and prediction results, the model could be used as an objective method to predict sensory quality in cigarette.

**Keywords:** chemical composition; fruity style characteristics; GC-MS/MS; factor analysis; step-wise linear regression

**Citation:** LI Chao, WANG Mingfeng, ZHANG Zhimin, et al. Establishment of quantitative prediction model for fruit note of cigarette based on volatile/semi-volatile components in tobacco [J]. Acta Tabacaria Sinica, 2017, 23(1)

\*Corresponding author. Email: qinyh@ynzy-tobacco.com