



基于电子舌的电子烟甜度评价模型研究

巩效伟¹, 朱东来¹, 洪鎏¹, 李寿波¹, 牛云蔚², 杨继¹, 吴俊¹, 张霞¹,
李廷华¹, 陈永宽¹, 韩熠¹

1 云南中烟工业有限责任公司技术中心, 昆明市五华区红锦路367号 650231;

2 上海应用技术大学, 上海市奉贤区海泉路100号 201418

摘要: 为了建立电子烟甜度定量分析的客观方法, 利用电子舌对 60 个电子烟液样品进行测定得到 60 组数据, 通过偏最小二乘、人工神经网络和支持向量机三种方法对电子舌测定数据与人工感官数据进行关联分析, 建立了三个电子烟甜度评价模型。三个模型的比较结果显示, 支持向量机法所建立的模型对未知电子烟样品甜度预测结果最为可靠, 其中该模型的相关系数为 0.96, 预测结果的平均相对误差为 7.30%, 预测结果的均方根误差为 0.61。由此可知, 电子舌结合支持向量机法所建立的评价模型, 可以实现对未知电子烟甜度的可靠预测。

关键词: 电子舌; 电子烟; 甜度; 支持向量机

引用本文: 巩效伟, 朱东来, 洪鎏, 等. 基于电子舌的电子烟甜度评价模型研究 [J]. 中国烟草学报, 2017, 23 (6)

电子烟 (electronic cigarettes), 主要由雾化器、电池和控制元件等组成, 其产生烟雾的原理是电子烟液在电子烟雾化系统的电加热元件上气化成高温蒸汽向开口端喷出, 喷出后的蒸汽在空气中冷凝成烟状的微小雾滴, 从而形成类似传统卷烟的烟雾^[1]。电子烟的口味是由电子烟液来决定的。电子烟液 (E-liquid 或 E-juice), 是电子烟中用于雾化的含有香精 (也可能同时含有烟碱) 的溶液。烟液主要由甘油、丙二醇、香气成分、烟碱 (也可不含) 和其他成分等组成。由于甘油和丙二醇有甜味, 造成电子烟普遍存在甜味过重的问题, 给电子烟的口味和香气带来了不利影响, 尤其对烟草口味电子烟的影响较大。为了研究卷烟中化合物的甜度, 舒俊生等^[2]采用量子化学计算和统计学方法, 以 30 种化合物为训练集, 10 种化合物为验证集, 建立了甜味化合物的三维定量构效关系的函数逼近模型, 用于预测卷烟烟气中甜味化学成分的甜度, 且对卷烟烟气中的一些甜味化合物甜度值进行了理论预测。杨阳等^[3]为了探寻甜菊糖样品甜度评价的客观方法, 研究人员采用电子舌技术结合主成分分析, 以蔗糖为参比物, 对 5 种不同组成的甜菊糖样品进行了甜味特性评价, 并将评价结果与感官质量进行

了对比, 结果表明, 电子舌技术在代替人工感官进行甜味评价方面有很好的应用前景。在模型建立方面, 刘旭等^[4]采用基于支持向量机回归算法, 以常规化学分析方法测定的总糖、还原糖、总氮、烟碱的含量为参考值, 建立了烟草中主要成分近红外光谱定量分析定标模型, 并与偏最小二乘法、多元线性回归以及人工神经网络的定标模型进行比较, 结果表明支持向量机模型具有更好的预测能力。

电子舌技术是 20 世纪 80 年代发展起来的一种分析、识别液体“味道”的新型检测技术, 它使用一种类似于生物系统的材料作为传感器的敏感膜, 当类脂薄膜的一侧与味觉物质接触时, 膜电势发生变化, 从而产生响应信号, 对样品进行量化分析。电子舌技术的优点尤为突出: 首先, 不需要对样品进行任何的预处理, 直接对样品进行无损检测; 其次, 检测速度快, 电子舌检测一个样只需几十秒至几分钟, 同时还具有较高的灵敏度、可靠性和重复性; 最后, 电子舌获取的是对液体样本的味觉特征的总体评价, 规避了人的感觉器官存在疲劳和主观倾向性行为的缺陷。

目前, 电子烟研发人员均采用人工感官对电子烟甜度进行评价, 但人工感官存在主观性强的问题。为

基金项目: 云南中烟工业有限责任公司科技项目“具有中式卷烟风格的电子烟开发”(2015CP06)

作者简介: 巩效伟 (1982—), 硕士, 工程师, 主要从事新型烟草制品研究, Email: 415959426@qq.com

通讯作者: 韩熠 (1976—), 博士, 助理研究员, 主要从事新型烟草制品研究, Email: 15288389322@163.com

收稿日期: 2017-07-19; **网络出版时间:** 2017-11-28

了能够客观评价电子烟甜度,本文采用电子舌技术,结合偏最小二乘、人工神经网络和支持向量机三种方法,以人工感官评价的电子烟甜度值为参考值,建立了三个电子烟甜度的定标模型用于电子烟的甜度评价,经比较,结果显示支持向量机模型具有更好的预测效果。

1 材料与方法

1.1 材料、试剂和仪器

材料:电子烟液 1#-60#,电子烟(深圳合元科技有限公司)。实验用电子烟见图 1。



图 1 实验用电子烟

Fig.1 E-cigarette for experiment

试剂:甘油(USP级,美国Sigma公司),1,2-丙二醇(USP级,美国Sigma公司),1,3-丁二醇(USP级,美国Sigma公司);以下试剂均采购自美国Sigma公司,均为分析纯级别:羧甲基纤维素钠,山梨醇,KCl,NaCl,MgCl₂·6H₂O,无水CaCl₂,KH₂PO₄,NaN₃。

仪器:电子舌(法国,Alpha MOS公司),配备7个味觉传感器和1个参比电极。7个味觉传感器分别为I(酸味)、II(复合)、III(咸味)、IV(鲜味)、V(复合)、VI(甜味)、VII(苦味)。电子舌实物见图2。每根传感器除对目标味觉的响应起主要作用外,对其他味觉也有不同程度的响应;另外,不同味觉之间存在相互作用,如苦味对甜味有抑制作用,而采用单一传感器测定不出样品中某一味觉对其他味觉的影响。因此,与单一传感器测定某一味觉相比,采用多个传感器,能更加客观地评价样品的某一味觉值。为此,本文采用全部7个传感器对烟液样品进行测定,并通过建模的方法来评价电子烟的甜度。

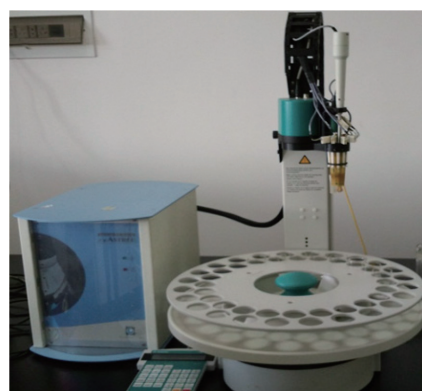


图 2 电子舌实物

Fig.2 Electronic tongue

1.2 方法

1.2.1 人工唾液的配制

通过查阅文献^[5],确定人工唾液配方为:羧甲基纤维素钠1%,山梨醇3%,KCl 0.12%,NaCl 0.085%,MgCl₂·6H₂O 0.05%,无水CaCl₂ 0.101%,KH₂PO₄ 0.35%,NaN₃ 0.0004%;按以上各成分的配比称量,先在一烧杯中对羧甲基纤维素钠单独加超纯水加热使其溶解,再将其它成分称取置于另一烧杯中加超纯水加以溶解,将二者混匀在容量瓶中定容至1L,并置于冰箱中低温保存待用。

1.2.2 电子舌测定及数据采集

将60份烟液样品均以1%(体积百分含量)的量添加到人工唾液中,用于电子舌分析,每个样品进样7次,取中间3次的采集数据进行分析。

1.2.3 人工感官甜度评价

(1)样品制备:将60个烟液样品各取1mL加入烟弹的吸油棉中,待烟液完全浸入吸油棉后,将烟弹安装在充满电的电子烟电池杆上,待感官评吸评价。

(2)电子烟甜度评价

采用9分制定量描述对电子烟进行甜度评价,0~3分表示无甜味或甜味较弱;4~6分表示甜味强度中等;7~9分表示甜味非常强烈。

以ISO 8586-1:1993(E)^[6]和ASTM STP 758^[7]为参考依据对10位感官评价人员进行培训(4女6男,年龄22-45):(1)由感官人员对不同的电子烟样品进行评吸并确定相关感官属性;(2)评价人员提出并讨论各感官属性的参考标准,确定电子烟样品的基本味觉为:甜、苦、涩;参照标准物为:甜(30g/L蔗糖),苦(0.15g/L硫酸奎宁),涩(1.0g/L硫酸铝)。

本次研究主要对电子烟的甜度进行品评,具体步骤为:(1)同时呈递给感官评价人员一定甜度的电

子烟样品和水溶液, 检验并训练其辨别能力, 10 位感官人员均能把电子烟样品与水样品区分开; (2) 同时呈递给感官评价人员不同甜度的电子烟样品, 检验并训练其区分能力, 直至所有感官人员均能把电子烟样品按不同甜度级别区分; (3) 呈递感官评价人员一定甜度的电子烟样品, 让其进行甜度的描述, 检验并训练其对电子烟甜度的定量描述能力。请 10 位感官评价人员进行抽吸, 评价电子烟甜度, 统计时计算算术平均值。

注: 本文中的感官人员均为来自专业实验室的长期从事感官评价的相关人员。

1.2.4 电子烟甜度评价模型建立

利用 Unscrambler version 9.7 分析软件 (CAMO ASA, Oslo, Norway), 采用偏最小二乘法将电子舌测定数据和人工感官甜度评价数据进行关联分析, 并建模; 利用 IOS 2.0 分析软件 (上海恒阳数据有限公司), 采用人工神经网络和支持向量机法, 将电子舌测定数

据和人工感官甜度评价数据进行关联分析, 并建模。具体为: 通过软件随机选择, 将 60 个用于建模的电子烟样品分成两部分, 一部分为建模集用于模型的建立, 另一部分为验证模型可靠性的测试样品集。其中选择总样本数量的 12% (即 7 个样品) 作为预测样本, 其余 53 个作为建模样本。建模完成后, 利用建立的模型对 7 个测试样本集进行预测, 比较测试值和真实值 (人工感官值) 之间的差异, 以此来验证模型的可靠性。最后对三个模型进行对比分析。

2 结果与讨论

2.1 人工感官评价和电子舌测定结果

表 1 为 60 个烟液样品的电子舌测定结果及所对应电子烟的人工感官评价结果。表中, 甜度感官值为 10 位评委评分的算术平均值; 电子舌的测定结果包括了 7 个传感器的测定值, 每个测定值均为 3 次测定值的算术平均值。

表 1 烟液样品电子舌测定结果和所对应电子烟的人工感官评价结果

Tab.1 Electronic tongue determination results of e-liquid and artificial sensory evaluation results of corresponding e-cigarettes

样品编号	甜度 感官值	电子舌传感器的测定值						
		I	II	III	IV	V	VI	VII
1#	6.6	2185.75	2311.84	3795.94	2189.80	2287.54	2099.51	2071.57
2#	7.8	2347.61	2515.52	4054.82	2211.18	2345.07	2201.50	2129.74
3#	4.5	2208.95	2401.33	3361.97	2157.60	2197.42	2342.25	2507.95
4#	6.4	2233.43	2414.36	3479.27	2166.31	2228.09	2356.37	2505.04
5#	6.2	2238.18	2416.63	3578.29	2171.27	2231.76	2357.73	2495.01
6#	6.8	2253.00	2418.67	3629.61	2170.09	2229.65	2352.56	2470.62
7#	6.8	2245.86	2412.83	3626.83	2157.69	2222.52	2341.15	2464.99
8#	6.8	2290.30	2448.70	3757.34	2166.57	2520.65	2420.50	2456.52
9#	7.5	2179.95	2337.75	3787.98	2166.25	2336.24	2117.55	2094.13
10#	2.5	1825.04	2073.68	2735.50	2326.97	2307.65	1898.30	2394.72
11#	1.2	1892.08	2152.52	2904.24	2520.10	2306.32	1979.37	2531.22
12#	5.6	2350.81	2675.78	3793.61	2297.86	2454.08	2130.02	2506.44
13#	5.2	2424.43	2726.91	3815.75	2257.71	2357.85	2181.76	2479.76
14#	4.2	2345.65	2677.63	3077.28	2086.06	2352.77	2155.68	2476.68
15#	5.6	2418.93	2721.17	3191.14	2094.54	2307.04	2196.91	2459.43

续表 1

样品编号	甜度 感官值	电子舌传感器的测定值						
		I	II	III	IV	V	VI	VII
16#	4.5	2439.33	2742.57	3274.85	2093.87	2265.13	2239.73	2444.96
17#	1.2	2467.13	2768.72	3217.85	2215.29	2322.01	2279.98	2535.64
18#	3.5	2424.87	2700.80	3248.11	2148.17	2203.12	2253.71	2443.47
19#	7.6	2468.01	2670.40	4158.00	2286.29	2146.97	2158.19	4743.17
20#	7.5	2447.72	2660.39	4152.65	2272.40	2133.39	2151.34	4724.24
21#	7.5	2445.20	2656.20	4151.52	2276.43	2132.04	2147.46	4753.41
22#	7.6	2432.29	2645.53	4155.21	2247.11	2121.62	2142.34	4775.20
23#	7.5	2457.99	2667.39	4252.76	2220.02	2118.32	2161.97	4876.78
24#	7.5	2396.98	2600.39	4286.34	2105.07	2042.72	2126.96	4750.74
25#	7.6	2458.45	2665.93	4144.82	2271.32	2137.49	2148.09	4873.49
26#	7.5	2455.51	2659.75	4136.42	2254.17	2124.74	2145.94	4856.36
27#	7.4	2456.49	2662.70	4119.85	2281.63	2138.55	2149.11	4625.30
28#	2.0	2642.03	2871.65	4420.73	2097.96	2016.36	2428.61	3205.43
29#	2.5	2633.15	2870.17	4413.55	2109.57	2024.39	2434.31	3225.38
30#	5.0	2172.09	2416.44	3458.11	1979.90	1912.60	1936.18	1787.71
31#	5.3	2212.56	2419.64	3463.36	1982.37	1960.71	1935.58	1790.07
32#	4.8	2216.22	2421.35	3449.77	1978.40	1954.02	1928.44	1790.49
33#	4.0	2164.28	2378.90	3213.43	1983.92	1904.33	1824.29	1761.28
34#	3.8	2226.66	2475.48	3529.49	2037.08	1962.48	1920.18	1815.81
35#	4.3	2198.44	2440.06	3493.91	2011.21	1943.79	1950.99	1805.18
36#	4.8	2199.13	2419.89	3469.11	1994.32	1981.11	1954.74	1805.42
37#	4.3	2213.50	2464.59	3575.61	2030.29	1970.52	1963.18	1808.28
38#	4.4	2207.08	2439.02	3538.90	1993.89	1945.00	1969.87	1794.10
39#	5.8	2183.31	2404.78	3411.68	1968.62	1954.78	1931.37	1789.31
40#	4.8	2193.83	2412.51	3481.69	1967.12	1959.77	1956.58	1793.88
41#	5.5	2205.18	2409.73	3502.77	1973.48	1961.39	1970.36	1792.32
42#	5.0	2206.00	2438.00	3553.31	2018.04	1944.67	1976.68	1797.69
43#	4.0	2210.57	2429.89	3538.88	1992.28	1924.20	1930.46	1793.19
44#	4.2	2225.63	2481.16	3633.74	2022.22	1925.44	1948.02	1788.28
45#	4.4	2192.01	2415.95	3511.46	1970.00	1914.51	1968.82	1789.46

续表 1

样品编号	甜度 感官值	电子舌传感器的测定值						
		I	II	III	IV	V	VI	VII
46#	5.3	2222.01	2422.83	3531.98	1977.53	1924.38	1966.37	1791.91
47#	8.5	1406.21	1883.02	1800.55	1276.59	3187.31	1616.19	5686.91
48#	6.5	2099.29	2549.02	2848.76	2062.74	2376.19	2064.45	3169.16
49#	5.3	2109.86	2538.92	2824.67	2074.96	2285.20	2081.88	2809.31
50#	4.8	926.44	1269.55	1739.97	1374.25	993.44	1319.63	7643.23
51#	1.6	709.87	1014.69	1468.33	870.92	1117.22	1144.20	2091.71
52#	3.3	850.27	1185.32	1758.43	1283.43	968.19	1200.76	4636.29
53#	4.5	2348.42	2664.83	3745.66	2031.31	1991.01	2359.90	2125.02
54#	1.8	2336.25	2633.55	3644.98	2048.53	1987.86	2342.66	2122.97
55#	2.0	2297.05	2608.10	3604.61	2063.05	1971.17	2317.34	2124.09
56#	2.5	2303.40	2604.56	3651.94	2092.09	1973.12	2305.09	2126.44
57#	2.5	2270.95	2574.23	3677.11	2073.07	1967.89	2281.45	2123.42
58#	2.8	2275.50	2569.52	3689.53	2083.31	1963.91	2264.21	2121.81
59#	3.0	2254.66	2555.92	3648.39	2087.56	1956.15	2237.31	2118.70
60#	2.8	2256.71	2560.11	3656.33	2103.13	1964.00	2230.68	2123.39

2.2 偏最小二乘法建模结果

2.2.1 预测模型建立

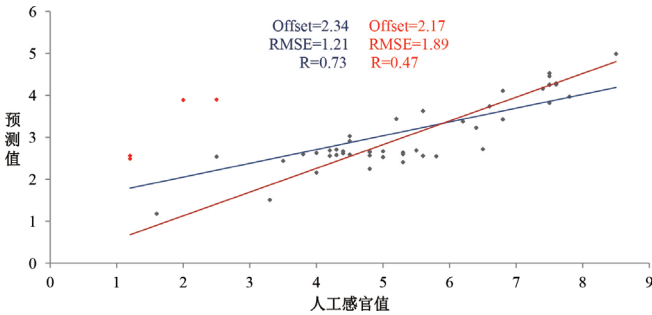
以电子舌 7 根传感器的响应信号值为自变量，以甜度的感官值为因变量，建立偏最小二乘法校正集模型，并根据此模型对预测样本集进行甜度的预测。表 1 列出的共 60 个样品中，其中前 53 个用来建立校正模型，后面 7 个样品用来验证模型。校正模型如图 3 所示，模型方程为：

$$Y=-0.5517-0.0005[X1]-0.0011[X2]+0.0015[X3]-0.0009[X4]+0.0019[X5]-0.0006[X6]+0.0003[X7]$$

由图 4 知，优化后的模型较优化前的模型稍好，相关系数由优化前的 0.73 提高到模型优化后的 0.90。

2.2.2 模型的验证

根据优化后的模型，通过软件自带的预测功能对其余 7 个样品进行甜度的感官值预测，预测结果如表 2。



注：红色代表预测模型，蓝色代表校正模型。下同。
Note: The red indicates predicting model. The blue indicates calibration model. The same below.

图 3 偏最小二乘法建模图（优化前）

Fig.3 Predicting model of the sweetness of e-liquid with partial least squares method (before optimization)

由图 3 知，通过偏最小二乘法建立的模型，其相关系数为 0.73，样品 11、17、28 和 29（图 3 红色标记的点）这四个点偏离回归曲线较大，去除这四个点

后,重新建立模型如图 4,模型优化后的预测方程为:
$$Y=-1.7381-0.0005[X1]-0.0010[X2]+0.0015[X3]-0.0009[X4]+0.0018[X5]+0.0002[X6]+0.0003[X7]$$

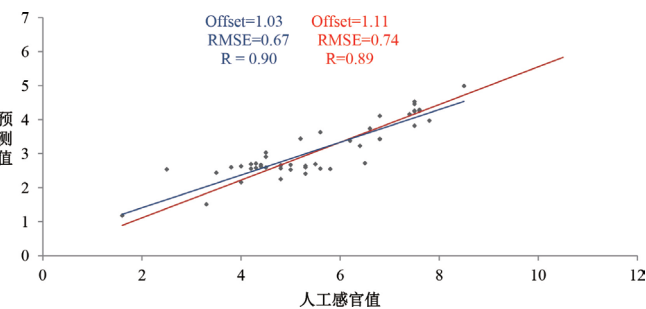


图 4 偏最小二乘法建模图 (优化后)

Fig.4 Predicting model of the sweetness of e-liquid with partial least squares method (after optimization)

表 2 利用偏最小二乘法模型对样品甜度的预测结果

Tab.2 Prediction results of the samples' sweetness by partial least squares model

样品编号	实际值	模型优化前的预测值	模型优化后的预测值
54#	1.80	2.02	2.77
55#	2.00	1.97	2.70
56#	2.50	2.03	2.75
57#	2.50	2.14	2.84
58#	2.80	2.15	2.84
59#	3.00	2.11	2.78
60#	2.80	2.13	2.78

由表 2 知:利用改进前的模型对样本进行预测时,除对样本 54 和 55 的预测值和实际值相差较小外,其余的均较大;而利用改进后的模型对样本进行预测时,除样本 54 和样本 55 的预测值和实际值相差较大外,对其余样本预测时,预测值和实际值较接近。说明改进后的模型对于预测电子烟的甜度值有一定的参考价值。

表 3 偏最小二乘模型预测结果的误差分析

Tab.3 Error analysis of partial least squares' prediction results

误差	数值
相对误差	1.22
平均相对误差	17.42%
均方根误差	0.74

由上表知:通过偏最小二乘法建立的模型,预测结果的平均相对误差为 17.42%,均方根误差为 0.74。预测结果的平均相对误差和均方根误差越小,其预测的结果越准确^[8],而本模型预测结果的平均相对误差大于 10%,说明采用偏最小二乘法建模对未知样品的甜度进行预测具有一定的局限性。

2.3 神经网络建模结果

2.3.1 预测模型建立

通过软件随机选择,给出的 7 个预测样本分别为 3#、41#、43#、12#、31#、20# 和 7#,其余 53 个样本为建模样本。使用神经网络方法,首先对其进行训练,即建模过程。训练给出的建模图形如图 5。由下图可以看出,通过神经网络法建模,模型的相关系数达到 0.97,模型的相关系数越高,说明模型的预测能力和稳健性越高^[9]。

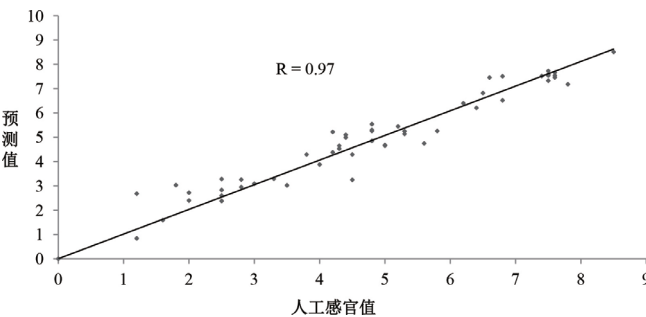


图 5 神经网络建模图

Fig.5 Artificial neural network modeling figure

2.3.2 模型的验证

利用建立的模型对 7 个测试样本集进行预测,比较测试值和感官值之间的差异。如果对样本的测试值与感官值较接近,则说明模型可靠,可以用来预测未知样本,若测试值与感官值之间的差别较大,则说明利用神经网络法建立的模型对样本预测时,预测的结果与实际值有一定的差异。预测的结果和预测结果的误差分析如表 4 和表 5。

由表 4 知:利用神经网络法建立的模型对预测样本进行预测时,对一些样本的预测偏差较大,如对样本 3 的预测值为 5.81,而实际值为 4.50;对样本 43 的预测值为 5.02,与实际值 4.00 相差 1.02;对样本 12 的预测值为 6.23,与实际值 5.60 相差 0.63。但对样品 41、样品 31、样品 20 和样品 7 的预测较准,与实际值基本一致。

表 4 人工神经网络模型的预测结果
Tab.4 Prediction results of artificial neural network model

序号	预测值	感官值
3#	5.81	4.50
41#	5.60	5.50
43#	5.02	4.00
12#	6.23	5.60
31#	5.31	5.30
20#	7.52	7.50
7#	6.60	6.80

表 5 人工神经网络模型预测结果的误差分析
Tab.5 Error analysis of artificial neural network model' s prediction results

误差	数值
相对误差	0.71
平均相对误差	10.15%
均方根误差	0.68

由表 5 知：利用人工神经网络法建立的模型对样本进行预测时，预测的平均相对误差为 10.15%，均方根误差值为 0.68。

2.4 支持向量机法建模结果

2.4.1 预测模型建立

通过软件随机选择，给出的 7 个预测样本分别为 36#、15#、26#、31#、32#、20#、和 49#，其余 53 个作为建模样本。使用支持向量机法，首先对其进行建模，建模图形如图 6。

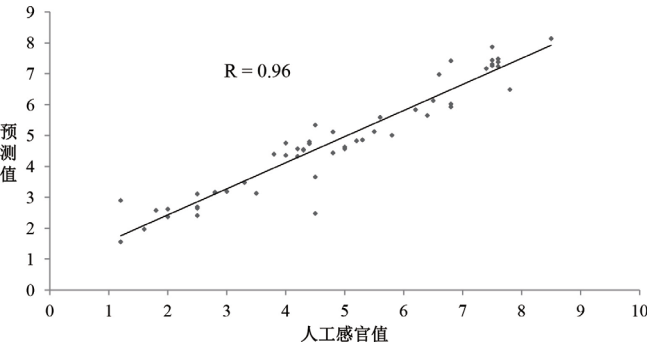


图 6 支持向量机建模图

Fig.6 Support vector machine modeling figure

由上图可以看出，通过支持向量机法建立的模型，其相关系数达到 0.96。

2.4.2 模型的验证

利用建立的模型对 7 个测试样本集进行预测，比较预测值和感官值之间的差异。如果对样本的预测值与感官值较接近，则说明模型可靠，可以用来预测未知样本，若预测值与感官值之间的差别较大，则说明利用支持向量机法建立的模型对样本预测时，预测的结果与感官值有一定的差异。预测的结果和误差分析如表 6 和表 7。

表 6 支持向量机模型的预测结果
Tab.6 Prediction results of support vector machine model

样品序号	预测值	感官值
36	5.00	4.80
15	4.08	5.60
26	7.40	7.50
31	4.99	5.30
32	4.96	4.80
20	7.28	7.50
49	4.95	5.30

由表 6 知：利用支持向量机法建立的模型对预测样本进行预测时，对个别样本的预测偏差较大，如对样本 15 的预测值为 4.08，而实际值为 5.60；但对大部分样品的预测值与感官值较接近，如对样本 36、样本 26、样本 32 和样本 20 的预测，预测值基本与感官值一致。

表 7 支持向量机模型预测结果的误差分析
Tab.7 Error analysis of support vector machine model' s prediction results

误差	数值
相对误差	0.51
平均相对误差	7.30%
均方根误差	0.61

由表 7 知：利用支持向量机法建立的模型对样本进行预测时，预测结果的平均相对误差为 7.03%，均方根误差为 0.61。

2.5 三个模型的比较

对电子舌结合偏最小二乘、人工神经网络和支持向量机法所建立的三个模型进行比较，比较结果见表 8。

表 8 三个模型的比较
Tab.8 Comparison of three models

多元方法	相关系数	平均相对误差 (预测结果)	均方根误差 (预测结果)
偏最小二乘	0.90	17.42%	0.74
人工神经网络	0.97	10.15%	0.68
支持向量机	0.96	7.30%	0.61

由上表可知：

(1) 从模型的相关系数来看，偏最小二乘法的最小为 0.90，均低于人工神经网络法的 0.97 和支持向量机法的 0.96，人工神经网络的相关系数与支持向量机的相差不大；从均方根误差比较，偏最小二乘法的最高，为 0.74，高于人工神经网络法的 0.68 和支持向量机法的 0.61；从建模集和预测结果的平均相对误差来比较，偏最小二乘法的均最高。说明三个模型相比，偏最小二乘法模型的预测能力低于其他两个模型。

(2) 人工神经网络和支持向量机法的比较：模型的相关系数基本一致，两者预测结果的均方根误差值有一定的差异，支持向量机法的为 0.61 低于人工神经网络法的 0.68；预测结果的平均相对误差也有一定的差异，支持向量机法的 7.30% 也低于人工神经网络法的 10.15%。支持向量机法预测结果的均方根误差和平均相对误差均低于人工神经网络法，说明通过支持向量机法建立的模型更为可靠。

(3) 通过以上数据可知，电子舌结合支持向量机法所建立的电子烟甜度评价方法，可以实现对未知电子烟甜度的可靠预测。由于电子舌测定的是电子烟液的响应数据，人工感官评价的是电子烟烟气的甜度，这也间接证明电子烟液与烟气的成分具有较强的一致性。

3 结论

利用电子舌对 60 个电子烟液样品进行测定得到了 60 组电子舌测定数据，通过偏最小二乘法、神经

网络法和支持向量机法三种方法对电子舌测定数据与电子烟人工感官甜度数据进行关联分析，建立了 3 个电子烟甜度评价模型。3 个模型的对比分析结果显示，支持向量机法所建立的模型对未知电子烟样品甜度预测结果最为可靠，其中该模型的相关系数为 0.96，预测结果的平均相对误差为 7.30%，均方根误差为 0.61。该模型的建立，为电子烟甜度的评价提供了客观、便捷的定量方法，对于电子烟液配方设计具有参考价值。

参考文献

[1] 韩力. 一种非可燃性电子喷雾香烟 [P]: 中国, 03111582.9. 2004-11-03.
HAN Li. A kind of Non-combustible Electronic Spray Cigarette[P]: China, 03111582.9. 2004-11-03.

[2] 舒俊生, 徐志强, 朱青林, 等. 卷烟烟气中甜味化合物甜度的理论预测 [J]. 食品工业科技, 2013, 34 (19): 111-114.
SHU Junsheng, XU Zhiqiang, ZHU Qinglin, et al. Theoretical predictions for sweetness of some sweet compounds in cigarette smoke[J]. Science and Technology of Food Industry, 2013, 34 (19): 111-114.

[3] 杨阳, 沈诚, 桑跃, 等. 电子舌在甜菊糖甜味特性评价中的应用 [J]. 农业机械学报, 2015, 46 (6): 239-243.
YANG Yang, SHEN Cheng, SANG Yue, et al. Evaluation of steviol glycosides sweetness taste by electronic tongue[J]. Journal of Agricultural Machinery, 2015, 46 (6): 239-243.

[4] 刘旭, 陈华才, 刘太昂, 等. PCA-SVR 联用算法在近红外光谱分析烟草成分中的应用 [J]. 光谱学与光谱分析, 2007, 27 (12): 2460-2463.
LIU Xu, CHEN Huacai, LIU Taiang, et al. Application of PCA-SVR to NIR prediction model for tobacco chemical composition[J]. Spectroscopy and Spectral Analysis, 2007, 27 (12): 2460-2463.

[5] Amaechi B T, Higham S M. In vitro remineralisation of eroded enamel lesions by saliva[J]. Journal of Dentistry, 2001, 29(5): 371-376.
Amaechi B T, Higham S M. In vitro remineralisation of eroded enamel lesions by saliva[J]. Journal of Dentistry, 2001, 29(5): 371-6.

[6] ISO 8586-1:1993 (E). Sensory analysis-General guidance for the selection, training and monitoring of assessors[S].
ISO 8586-1:1993 (E). Sensory analysis-general guidance for the selection, training and monitoring of assessors[S].

[7] ASTM STP 758. Guidelines for the selection and training of sensory panel members[S]. Philadelphia: 1981.
ASTM STP 758. Guidelines for the selection and training of sensory panel members[S]. Philadelphia: 1981.

[8] Danfeng Wang, Xichang Wang, Taiang Liu, Yuan Liu. Prediction of total viable counts on chilled pork using an electronic nose combined with support vector machine [J]. Meat Science, 2011, 07, 025.
Danfeng Wang, Xichang Wang, Taiang Liu, Yuan Liu. Prediction of total viable counts on chilled pork using an electronic nose combined with support vector machine [J]. Meat Science, 2011, 07, 025.

[9] 吴从元, 王俊, 韦真博, 等. 电子舌预测不同体积分数牛奶的表观黏度 [J]. 农业工程学报, 2010, 26(6), 226-229.
WU Congyuan, WANG Jun, WEI Zhenbo, et al. Prediction of apparent viscosity of milk with different volume fraction using electronic tongue[J]. Transaction of the CSAE, 2010, 26(6), 226-229.

Research on e-cigarettes' sweetness evaluation models based on electronic tongue data

GONG Xiaowei¹, ZHU Donglai¹, HONG Liu¹, LI Shoubo¹, NIU Yunwei², Yang Ji¹, WU Jun¹, ZHANG Xia¹, LI Tinghua¹,
CHEN Yongkuan¹, HAN Yi^{1*}

1 R & D Center, China Tobacco Yunnan Industrial Co., Ltd., Kunming 650231, China;

2 Shanghai Institute of Technology, Shanghai 201418, China

Abstract: The aim of this work is to establish objective methods to quantitatively analyze e-cigarettes' sweetness. Sixty samples of e-liquid were collected and measured by electronic tongue. Based on correlation analysis of electronic tongue data and artificial sensory data, three sweetness evaluation models were established by partial least squares, artificial neural network and support vector machine. Comparison results indicated that the support vector machine model was the most reliable for predicting sweetness of unknown e-cigarette samples. The correlation coefficient of the model was 0.96 with average relative error of predicted results of 7.30% and root mean square error of predicted results of 0.61. It was concluded that the evaluation model based on the combination of electronic tongue and the support vector machine can achieve reliable prediction of unknown e-cigarettes' sweetness.

Keywords: electronic tongue; e-cigarette; sweetness; support vector machine

Citation: GONG Xiaowei, ZHU Donglai, HONG Liu, et al. Research on e-cigarettes' sweetness evaluation models based on electronic tongue data [J]. Acta Tabacaria Sinica, 2017,23(6)

*Corresponding author. Email: 15288389322@163.com

(上接第 21 页)

Stability and release behavior of nicotine in e-liquids

YANG Yang, XU Jian^{*}, LIU Jinli, LU Xinbo, LI Xia, ZHU Shuxiu
China Tobacco Zhejiang Industrial Co., Ltd., Hangzhou 310024, Zhejiang, China

Abstract: Data reference was provided for further research and development of electronic cigarette products. Seven brands of commercial e-cigarettes and 30 e-liquids were compared in terms of maximum puff number of battery, nicotine content and its release behavior. Results showed that: (1) E-liquids were highly stable under natural temperature in six months. (2) Due to lack of regulations, e-liquids may contain inaccurately labelled nicotine levels. (3) Puff number based on battery capacity was in the range of 50-420. (4) Releasable nicotine in cartridges and battery energy had a significant influence on release behavior of nicotine.

Keywords: electronic cigarette; e-liquid; nicotine; release behavior

Citation: YANG Yang, XU Jian, LIU Jinli, et al. Stability and release behavior of nicotine in e-liquids [J]. Acta Tabacaria Sinica, 2017,23(6)

*Corresponding author. Email: xujian@zjtobacco.com