

# 部分烟气成分对卷烟感官舒适性的影响

王明锋<sup>1</sup>, 焦玉磊<sup>2</sup>, 赵建华<sup>3</sup>, 朱保昆<sup>1</sup>, 王坚<sup>1</sup>, 者为<sup>1</sup>

1 云南中烟工业有限责任公司技术中心, 云南昆明红锦路 367 号 650231;

2 泰安银监分局, 泰安市红门路 49 号 271000;

3 云南财经大学, 统计与数学学院, 云南昆明龙泉路 237 号 650221

**摘要:** 为更精确地拟合卷烟感官舒适性指标与部分烟气化学成分之间的关系, 除传统的线性回归模型外, 新引入 3 种非线性回归模型进行比较研究。同时, 对检测的 42 种烟气化学成分采用逐步回归方法进行变量选择, 以确定影响 10 个卷烟感官舒适性指标的关键烟气化学成分。研究表明: (i) 模型拟合方面, 在 9 个感官舒适性指标上非线性模型具有更好的预测性能, 其中有 3 个指标非线性模型统计上显著优于线性模型; (ii) 化学变量选择方面, 苯甲酸、氨和巴豆醛等 3 个化学成分对感官舒适性存在负面影响, 甲酸等 14 个化学成分对感官舒适性存在正面影响, 羟基乙酸、亚油酸和游离烟碱等 3 个化学成分对不同的感官舒适性指标有正面或负面不同的影响。研究结果可为卷烟产品研发提供科学依据。

**关键词:** 感官舒适性; 烟气化学成分; 线性模型; 非线性模型

**doi:** 10.3969/j.issn.1004-5708.2014.05.003

**中图分类号:** TS411      **文献标志码:** A      **文章编号:** 1004-5708 (2014) 05-0012-07

## Effect of certain smoke components on sensory coziness

WANG Mingfeng<sup>1</sup>, JIAO Yulei<sup>2</sup>, ZHAO Jianhua<sup>3</sup>, ZHU Baokun<sup>1</sup>, WANG Jian<sup>1</sup>, ZHE Wei<sup>1</sup>

1 Technology Center, China Tobacco Yunnan Industrial Co., Ltd., Kunming 650202, China;

2 Tai'an Field Office of China Banking Regulatory Commission, Taian 271000, China;

3 School of Statistics and Mathematics, Yunnan University of Finance and Economics, Kunming 650221, China

**Abstract:** Three non-linear regression models were introduced to study relationship between cigarette sensory coziness and chemical composition in smoke. To identify 10 chemicals key to sensory coziness index, variable selection using stepwise regression method was performed with 42 measured chemicals. Results showed that (i) in terms of model fitting, non-linear models had better prediction performance than their linear counterparts on 9 sensory coziness indexes, among which 3 indexes boasted significant statistical supremacy on non-linear models; (ii) in terms of variable selection, 3 chemicals, namely benzoic acid, ammonia and crotonic aldehyde, had negative effects on sensory coziness, while 14 chemicals, such as formic acid, had positive effects, and other 3 chemicals, namely glycolic acid, linolic acid and free nicotine, had either positive or negative effects on different sensory coziness indexes. Such results can provide a theoretical foundation for developing cigarette products.

**Keywords:** sensory coziness; chemicals in smoke; linear model; non-linear model

降低烟草的危害性已经成为烟草企业义不容辞的责任和义务, 同时也成为烟草企业的生存发展之道。

为此, 烟草行业启动了烟草的“减害降焦”工程。即尽可能降低主流烟气的有害成分, 从而降低对吸烟者的健康危害。单纯进行卷烟降焦并不困难, 最大的挑战在于当焦油释放量降低到一定程度时, 将导致烟气偏淡且香气不足, 会明显降低卷烟的感官质量, 难以被消费者接受。因此, 在降焦的同时如何保持或提升卷烟的感官舒适性, 已经成为烟草降焦过程中必须研究的课题。

“知润”是“保润”的第一步, 首先了解清楚哪

**基金项目:** 云南中烟工业有限责任公司科技项目计划 (2013JC13); 国家自然科学基金 (11361071)

**作者简介:** 王明锋 (1976—), 硕士, 高级工程师, 主要从事烟草化学研究, Email: hhwangmf@139.com

**通讯作者:** 者为 (1975—), 本科, 高级工程师, 主要从事烟草化学研究, Email: gabbriel@139.com

**收稿日期:** 2013-05-08

些化学成分对感官舒适性有重要影响并建立相应的影响关系式,根据建立的关系式便可有针对性地“保润”,选择性地降低有负面影响的有害化学成分,从而达到减害保润的目的。可见,“知润”这一步至关重要,在统计分析方面主要面临以下三个技术难点:(1)由于烟气的化学成分异常复杂,烟气的化学成分与卷烟感官舒适性之间可能存在非线性关系,仅套用传统线性模型可能会产生较大偏差;(2)模型的实用性要求确定影响卷烟感官品质的主要化学因素;(3)基于卷烟样本数据得到的结论是否具有普遍性,即模型对样本外的卷烟是否成立,对实际卷烟产品开发和生产是否具有实用意义。

国内烟草企业和相关科研机构近几年进行了一些相关研究,顾永波等<sup>[1]</sup>对 pH 测定结果与感官得分作相关性分析,杨凯等<sup>[2]</sup>通过因子分析与模式识别方法研究烟气水分与卷烟感官舒适性的关系,于川芳等<sup>[3]</sup>通过灰色关联分析的方法对影响卷烟劲头的烟气化学成分进行了研究,朱保昆等<sup>[4]</sup>对氨气的释放量与感官舒适性共十个感官舒适性指标之间的关系进行了相关分析,程传玲<sup>[5]</sup>等通过因子分析和相关分析的方法研究了 7 种主要酚类化合物与 10 个感官质量指标之间的关系。上述研究为烟草减害保润提供了有益的参考,但很不充分,均未能全面考虑上述三个难点。此外,考虑的感官舒适性指标或是烟气化学指标过少,影响了结果的准确性和实用性,分析方法比较单一,多为因子分析和相关分析。这两种分析方法不能得到两者之间比较准确的关系形式,对于实际生产的指导意义有限。

相比较存在的研究,本文的创新之处在于对卷烟感官舒适性和部分烟气化学成分进行较全面地评价和检测,在更全面的数据基础上,同时针对以上三个难点进行统计建模。针对难点(1),同时考虑线性模型和 3 种非线性模型:半对数模型、双对数模型和 Box-Cox 变换模型,比较全面地研究烟气化学成分与卷烟感官舒适性之间的关系形式。针对难点(2),采用逐步回归的方法对烟气的化学成分进行选择,筛选对卷烟感官舒适性有显著影响的化学成分。针对难点(3),将数据随机地分为训练集和检验集两部分,利用训练集建立模型,计算模型在检验集上的预测误差,并以此为标准从四种模型中选择最优模型。

## 1 材料与方法

### 1.1 材料

按照类型和品种覆盖全面、部位齐全、烟叶产区

覆盖广的原则,筛选了包括云南、贵州、四川、福建、湖北、安徽等烟叶主产区的代表性烟叶以及津巴布韦、巴西、美国等进口烟叶原料,品种涵盖了 K326、云 85、云 87、红大、CB,部位涵盖了上、中、下。50 个等级(详见表 1)的烟叶原料均采用统一工艺条件、统一辅助材料制备成卷烟样品,供感官舒适性评价。

#### 1.1.1 感官舒适性指标

感官指标的设置参考 GB5606.4-2005,去掉其香气指标、口味指标、只考虑品质指标并作细化得到 10 个感官舒适性指标:口腔尖刺( $Y_1$ )、口腔毛刺( $Y_2$ )、喉部尖刺( $Y_3$ )、喉部呛刺( $Y_4$ )、鼻腔刺激( $Y_5$ )、涂层( $Y_6$ )、残留( $Y_7$ )、收敛( $Y_8$ )、干燥感( $Y_9$ )、劲头( $Y_{10}$ )。各指标打分分值范围均为 0~9 分,单项评分最小为 0.5 分。刺激性指标分为大、中、小三个档次,对应分值分别为 1~3 分、4~6 分、7~9 分,刺激性越强,得分越低,刺激性越弱,得分越高。余味和干燥感指标判定与刺激性指标相同。劲头分为大、中等、小三个档次,对应分值分别为 7~9 分、4~6 分、1~3 分,劲头越大,得分越高,劲头越小,得分越低。选取 15 位具有丰富卷烟评吸经验的评价人员(具有国家烟草专卖局颁发的卷烟感官评吸技术合格证书)应用感官舒适性评价方法对 50 个烤烟型卷烟样品进行评价。

原始评吸数据由 50 个烤烟型卷烟样品构成,每个样品由 15 位评吸人员对 10 个感官舒适性指标打分,即每个样品有 15 个观测值。假设每个样品的观测值相互独立,服从均值为  $\mu$ , 协方差矩阵  $\Sigma$  的多元分布,则  $\mu$  的矩估计为 15 个观测值  $Y_1, Y_2, \dots, Y_{15}$  的平均值  $\bar{Y} = \sum_{i=1}^{15} Y_i / 15$ , 易知  $\bar{Y}$  服从均值为  $\mu$ , 协方差矩阵  $\Sigma/15$  的多元分布,意味着使用  $\bar{Y}$  作为每个样品的感官得分将缩减单个评吸人员之间的打分差异  $\Sigma$  缩减至  $\Sigma/15$ , 因此,计算每个样品的平均分  $\bar{Y}$  作为该样品的评吸数据。

#### 1.1.2 烟气化学成分

本文主要选取了涵盖有机酸、碱性化合物、羰基化合物、酚类化合物、烟气水分和烟气 pH 等系列化合物中的代表性烟气化学成分作为自变量,选取的依据是:①尽量选取能够运用标准方法和成熟文献报道方法测定的成分,以准确测定部分烟气成分的含量,为较为科学的分析部分烟气成分对卷烟感官舒适性的影响提供数据保障;②尽量选取烟草行业较为关注的烟气化学成分和卷烟企业经常开展检测的烟气化学成分。

表1 烟叶原料信息  
Tab. 1 Information on tobacco raw materials

编号	年份	产区	品种	等级	编号	年份	产区	品种	等级
2	2007	玉溪	K326	C3F	60	2007	黔西南	K326	C3F
4	2007	玉溪	云 85, 云 87	B2F	62	2007	龙岩	K326	B2F
6	2007	玉溪	云 85, 云 87	X2F	63	2007	龙岩	K326	C3F
10	2007	楚雄	K326	B2F	64	2007	龙岩	K327	X3F
11	2007	楚雄	K326	C3F	65	2007	三明	CB	B2F
15	2007	楚雄	云 85, 云 87	X2F	67	2007	三明	CB	X3F
17	2007	文山	—	C3F	68	2007	恩施	云烟 87	B2F
19	2007	辽宁	—	BL2	70	2007	恩施	云烟 87	X2F
21	2007	津巴布韦	—	ZWMA	75	2007	房县	云 87	X2F
22	2007	巴西	—	L1OAT	76	2007	房县	云 87	C3F
25	2007	美国	—	FCB2	81	2007	津巴布韦	—	ZWMT
31	2007	石宜	K326	B2F	82	2007	巴西	—	B1O
34	2007	昆明	红大	B3F	87	2007	攀枝花	—	B2LH
36	2007	昆明	红大	X2F	89	2007	攀枝花	—	X2LH
37	2007	曲靖	红大	B3F	93	2007	毕节	—	B2LH
38	2007	曲靖	红大	C3F	94	2007	毕节	—	C3FA
39	2007	曲靖	红大	XZF(配打)	95	2007	毕节	—	X23FH
40	2007	许昌	—	C3FL(配打)	97	2007	三明	K326	C3F
41	2007	临沂	NC82	C3L	103	2007	郴州	—	C23FA
44	2007	津巴布韦	—	LFXT	104	2007	郴州	—	X2FA
45	2007	巴西	—	M1F	105	2007	张家界	—	B23F
48	2007	美国	—	US-B1	106	2007	张家界	—	C23FA
51	2006	会理	红大	B2F	108	2007	三门峡	—	C3L
56	2007	仁怀	云烟 85	B2F	111	2007	皖南	—	C3FA
57	2007	仁怀	云烟 85	C3L	117	2007	延边	—	C3L

甲酸( $X_1$ )、乙酸( $X_2$ )、丙酸( $X_3$ )、丁酸( $X_4$ )、2-甲基丁酸( $X_5$ )、异丁酸( $X_6$ )、异戊酸( $X_7$ )、癸酸( $X_8$ )、戊酸( $X_9$ )、2-呋喃甲酸( $X_{10}$ )、苯甲酸( $X_{11}$ )、己酸( $X_{12}$ )、庚酸( $X_{13}$ )、羟基乙酸( $X_{14}$ )、乳酸( $X_{15}$ )、苹果酸( $X_{16}$ )、壬酸( $X_{17}$ )、反丁烯二酸( $X_{18}$ )、柠檬酸( $X_{19}$ )、十四酸( $X_{20}$ )、亚油酸( $X_{21}$ )、油酸( $X_{22}$ )、软脂酸( $X_{23}$ )、硬脂酸( $X_{24}$ )等有机

酸应用GC/MS方法<sup>[6]</sup>进行检测;游离烟碱( $X_{25}$ )、烟碱( $X_{26}$ )应用超高效液相色谱法<sup>[7]</sup>进行检测;氨( $X_{27}$ )应用离子色谱方法<sup>[8]</sup>进行检测;甲醛( $X_{28}$ )、乙醛( $X_{29}$ )、丙酮( $X_{30}$ )、丙烯醛( $X_{31}$ )、丙醛( $X_{32}$ )、巴豆醛( $X_{33}$ )、2-丁酮( $X_{34}$ )、丁醛( $X_{35}$ )等羰基化合物按照烟草行业标准YC/T 254-2008<sup>[9]</sup>进行检测;对二酚( $X_{36}$ )、邻二酚( $X_{37}$ )、苯酚( $X_{38}$ )、间、对甲

酚 ( $X_{39}$ )、邻甲酚 ( $X_{40}$ ) 等酚类化合物按照烟草行业标准 YC/T 255-2008<sup>[10]</sup> 进行检测; 烟气水分 ( $X_{41}$ ) 按照 GB/T 23203.1-2008 进行检测<sup>[11]</sup>; 烟气 pH ( $X_{42}$ ) 按照刘百战等<sup>[12]</sup> 建立的方法进行检测。

## 1.2 方法

### 1.2.1 回归模型

为更好地拟合部分烟气化学成分与卷烟感官舒适性之间的关系, 除传统的线性模型外, 本文引入了三种非线性模型, 包括半对数模型、双对数模型和 Box-Cox 变换模型<sup>[13]</sup>, 对四种模型的预测性能进行比较, 从中选择最优模型, 以处理保润的第 (1) 个难点。估计模型 (1) - (4) 之前先将自变量数据进行标准化预处理。

$$\text{线性模型: } Y_i = \beta_0 + \sum_{j=1}^{42} \beta_j X_j + \varepsilon_i, \quad i = 1, 2, \dots, 10 \quad (1)$$

$$\text{半对数模型: } \ln Y_i = \beta_0 + \sum_{j=1}^{42} \beta_j X_j + \varepsilon_i, \quad i = 1, 2, \dots, 10 \quad (2)$$

$$\text{双对数模型: } \ln Y_i = \beta_0 + \sum_{j=1}^{42} \beta_j \ln X_j + \varepsilon_i, \quad i = 1, 2, \dots, 10 \quad (3)$$

$$\text{Box-Cox 变换: } Y_i^{(\lambda)} = \beta_0 + \sum_{j=1}^{42} \beta_j X_j + \varepsilon_i, \quad i = 1, 2, \dots, 10 \quad (4)$$

其中  $Y_i^{(\lambda)}$  表示一个参数为  $\lambda$  的变换族, 当  $\lambda \neq 0$  时,  $Y_i^{(\lambda)} = (Y_i - 1) / \lambda$ , 当  $\lambda = 0$  时,  $Y_i^{(\lambda)} = \ln Y_i$ 。

### 1.2.2 变量选择

统计理论表明, 如果在模型中引入不重要的变量, 则会造成模型过于复杂, 降低模型的预测精度<sup>[14]</sup>, 特别是对于小样本情形, 王松桂等<sup>[15]</sup> 证明即使全模型是正确的, 减少一些自变量后, 虽然牺牲了估计和

预测值的无偏性, 但往往可以使小样本情形时的模型参数估计方差减小、从而预测精度提高。

本文所采用数据的样本个数 50, 自变量个数 42, 属小样本情形。此外, 烟气的化学因素之间有明显的相关关系。通过计算回归模型的方差膨胀因子<sup>[16]</sup> (Variance Inflation Factor, VIF) (具体细节省略), 线性模型、半对数模型、双对数模型和 Box-Cox 变换模型的 VIF 均有 34 个或以上大于 5, 占全部自变量数量的 80.95% 或以上, 多重共线性问题非常严重。

在应用所建立的模型进行卷烟生产及研发时, 必须考虑其应用成本。如果模型中烟气化学成分变量过多, 则检测和研发成本将过于昂贵, 模型将失去使用价值, 因此变量选择对于模型的适用性至关重要。

综合以上分析, 本文对变量进行筛选, 以在改进模型的预测精度同时更好地满足企业生产的需求。逐步回归是常用的一种变量选择方法, 可以达到选择变量的目的。逐步回归的前提是因变量服从正态分布, 为此, 对 (1) - (4) 式的因变量分别进行 Kolmogorov-Smirnov 正态性检验, 检验结果见表 2。由表 2 可知, 全部指标均通过正态性检验 ( $p$  值  $> 0.05$ ), 从而本文采用逐步回归的方法选择对感官舒适性指标有显著影响的化学成分, 以处理烟草保润的第 (2) 个难点, 并处理模型的共线性问题。逐步回归自变量进入  $p$  值取为 0.05, 剔除  $p$  值为 0.10。

表 2 因变量 Kolmogorov-Smirnov 正态性检验  
Tab. 2 Kolmogorov-Smirnov test of dependent variables

指标变换	口腔尖刺	口腔毛刺	喉部尖刺	喉部呛刺	鼻腔刺激	涂层	残留	收敛	干燥感	劲头
$Y_i$	0.764	0.254	0.346	0.900	0.607	0.624	0.523	0.504	0.632	0.955
$Y_i^{(\lambda)}$	0.793	0.338	0.505	0.933	0.667	0.929	0.556	0.675	0.581	0.964
$\ln Y_i$	0.656	0.189	0.308	0.778	0.554	0.480	0.465	0.402	0.632	0.965

## 2 结果与分析

### 2.1 四种回归模型的比较

回归模型是利用历史信息对未来进行预测的一个重要手段, 要根据模型的结果进行卷烟的研发及生产, 最关心的也是模型的预测性能。常见的模型评价标准比如调整的拟合优度、Akaike 信息准则、Bayes 信息准则等, 尽管以不同的方式考虑了模型复杂性, 然而并不直接评价模型的预测能力, 特别是对于小样本情形, 迄今为止并没有确定的理论结果偏好哪种标

准<sup>[17]</sup>。为此, 直接评价模型预测性能作为选择最优模型的标准, 通过计算检验预测误差, 对四种逐步回归模型进行比较, 以处理保润的第 (3) 个难点。

本文随机抽取 45 个样本作为训练集, 用于估计 (1) - (4) 式的方程, 剩余的 5 个样本作为检验集, 用于计算平均检验预测误差。为减少数据的变化性, 对 50 个样本进行 100 次随机划分。表 3 列出了四种模型的 100 个检验预测误差的均值与标准差。计算过程采用 MATLAB7.0 完成。

表3 检验预测误差的均值与标准差

Tab. 3 Average and standard deviation of prediction error (shown as mean  $\pm$  std.)

感官指标	线性模型	半对数模型	双对数模型	Box-Cox 变换
口腔尖刺 ( $Y_1$ )	0.111 $\pm$ 0.063	<b>*0.109</b> $\pm$ 0.061	0.132 $\pm$ 0.070	0.114 $\pm$ 0.065
口腔毛刺 ( $Y_2$ )	0.085 $\pm$ 0.056	<b>*0.082</b> $\pm$ 0.055	0.111 $\pm$ 0.069	0.086 $\pm$ 0.055
喉部尖刺 ( $Y_3$ )	0.089 $\pm$ 0.085	0.094 $\pm$ 0.106	<b>0.080</b> $\pm$ 0.050	0.084 $\pm$ 0.065
喉部呛刺 ( $Y_4$ )	0.175 $\pm$ 0.098	0.179 $\pm$ 0.093	<b>*0.163</b> $\pm$ 0.079	0.164 $\pm$ 0.107
鼻腔 ( $Y_5$ )	0.132 $\pm$ 0.077	<b>0.128</b> $\pm$ 0.072	0.149 $\pm$ 0.073	0.132 $\pm$ 0.085
涂层 ( $Y_6$ )	0.204 $\pm$ 0.132	0.200 $\pm$ 0.125	<b>0.191</b> $\pm$ 0.097	0.234 $\pm$ 0.208
残留 ( $Y_7$ )	0.182 $\pm$ 0.108	0.185 $\pm$ 0.111	<b>0.178</b> $\pm$ 0.103	0.183 $\pm$ 0.110
收敛 ( $Y_8$ )	0.156 $\pm$ 0.091	<b>0.152</b> $\pm$ 0.090	0.157 $\pm$ 0.088	0.155 $\pm$ 0.091
干燥感 ( $Y_9$ )	<b>0.130</b> $\pm$ 0.062	0.132 $\pm$ 0.060	0.147 $\pm$ 0.072	0.133 $\pm$ 0.064
劲头 ( $Y_{10}$ )	0.232 $\pm$ 0.143	<b>0.231</b> $\pm$ 0.147	0.279 $\pm$ 0.213	0.231 $\pm$ 0.148

注：黑体表示检验预测误差最小；\*表示预测误差的差异有统计学意义，匹配  $t$  检验， $p < 0.05$ 。

由表3可知，线性模型只在干燥感一个感官指标上的表现较好，但是这种差别并不显著，其余9个感官指标采用非线性模型具有更好的预测性能，尤其是口腔尖刺、口腔毛刺、喉部呛刺三个指标，非线性模型明显优于线性模型 ( $p$  值  $< 0.05$ )；此外，在喉部尖刺、喉部呛刺、涂层这三个感官指标上非线性模型的标准差清楚地优于线性模型，说明对这些感官指标，采用非线性模型显著改进模型的预测性能。

根据表3选择检验预测误差最小的模型作为最终拟合的模型：口腔尖刺、口腔毛刺、鼻腔、收敛、劲头为半对数模型；干燥感为线性模型；喉部尖刺、喉部呛刺、涂层、残留为双对数模型。

由表3可以发现所选出的十个最优模型中，预测误差的取值都在  $[0.08, 0.24]$  之间，模型对卷烟的感官舒适性进行预测的精度比较高，从而有效地处理了烟草保润的第(3)个难点，所得最优模型对卷烟产品开发具有实用指导意义。

## 2.2 最优模型结果与分析

根据2.1节得到的最优模型，对全部50个样本建立逐步回归模型，参数的估计和检验采用SPSS16.0进行。结果见表4。由表可知，所有10个选择的模型统计上高度显著 ( $p < 0.01$ )，可见模型对因变量有很强解释能力。各模型的各自变量的回归系数检验统计上也都显著 ( $p$  值  $< 0.05$ )，说明模型中的自变量对各感官质量的单项指标都有显著影响。VIF基本在1到

2之间，说明每个方程中自变量之间不存在共线性问题。

上表的逐步回归方程比较理想地解决了卷烟保润的(1)、(2)两个难点，可以准确知道卷烟感官舒适性各单项指标和烟气化学成分之间的预测模型形式，得到了影响卷烟感官舒适性各单项指标的重要烟气化学成分。

将以上10个模型的变量进行汇总，结果见表5。由表5可以看出，除亚油酸等不饱和脂肪酸对卷烟感官舒适性表现为负面影响外，甲酸、乳酸、十四酸等大部分有机酸对感官舒适性具有重要的正面影响作用，这与在卷烟调香中常用酸类物质来改善卷烟舒适性的做法是一致的；氨的释放量对喉部呛刺、鼻腔刺激具有明显的负面影响，巴豆醛对喉部尖刺具有明显的负面影响，降低卷烟烟气中氨、巴豆醛释放量是提升卷烟感官舒适性的一种有效手段，这与卷烟减害目标较为吻合；游离烟碱对刺激性指标、收敛、干燥感指标都有明显的负面影响，对劲头有正面影响，主要原因是游离烟碱易于穿透口腔黏膜从而更快速地被人体吸收，能对中枢神经产生强烈的作用<sup>[18]</sup>，从而对卷烟感官舒适性表现出较为显著的影响，而水分是常作为烟气质量评价的重要指标，其对口腔毛刺、收敛、劲头具有正面影响，为此在卷烟开发维护中采用相应的技术方法对游离烟碱、烟气水分进行适当调控，可以有效提升卷烟感官舒适性。

表 4 逐步回归模型结果  
Tab. 4 Results of stepwise regression models

因变量	模型及相关参数检验
口腔尖刺	$\ln\hat{Y}_1 = 1.934 - 0.028X_{25}^* + 0.018X_{40}^*$ $F=11.564, p_F = 0.000$ , 自变量 P 值均小于 0.01, VIF 值均小于 2。
口腔毛刺	$\ln\hat{Y}_2 = 1.860 - 0.042X_{25}^* - 0.015X_{21}^* + 0.016X_{41}^*$ $F=22.827, p_F = 0.000$ , 自变量 P 值均小于 0.01, VIF 值均小于 2。
喉部尖刺	$\ln\hat{Y}_3 = 1.895 - 0.019\ln X_{25}^* + 0.012\ln X_{14}^* + 0.015\ln X_5^* - 0.023\ln X_{33}^* + 0.014\ln X_{35}^* + 0.012\ln X_{30}^*$ $F=14.821, p_F = 0.000$ , 自变量 P 值均小于 0.05, VIF 值均小于 2。
喉部呛刺	$\ln\hat{Y}_4 = 1.189 - 0.052\ln X_{25}^* - 0.022\ln X_{27}^*$ $F=25.719, p_F = 0.000$ , 自变量 P 值均小于 0.05, VIF 值均小于 2。
鼻腔	$\ln\hat{Y}_5 = 1.794 - 0.046X_{25}^* + 0.020X_{14}^* - 0.020X_{27}^*$ $F=25.134, p_F = 0.002$ , 自变量 P 值均小于 0.05, VIF 值均小于 2。
涂层	$\ln\hat{Y}_6 = 1.786 + 0.023\ln X_{30}^* - 0.017\ln X_{21}^* + 0.016\ln X_{28}^*$ $F=5.983, p_F = 0.002$ , 自变量 P 值均小于 0.05, VIF 值均小于 2。
残留	$\ln\hat{Y}_7 = 1.749 + 0.016\ln X_{32}^* + 0.023\ln X_{28}^* - 0.020\ln X_{21}^* + 0.018\ln X_{20}^*$ $F=8.697, p_F = 0.000$ , 自变量 P 值均小于 0.05, VIF 值均小于 2。
收敛	$\ln\hat{Y}_8 = 1.799 + 0.012X_{29}^* - 0.063X_{25}^* + 0.037X_{26}^* + 0.024X_{41}^* + 0.014X_{15}^* + 0.012X_{11}^*$ $F=12.951, p_F = 0.000$ , 自变量 P 值均小于 0.05, VIF 值均小于 2。
干燥感	$\hat{Y}_9 = 5.870 - 0.161X_{25}^* + 0.118X_{15}^* + 0.089X_{11}^* + 0.093X_9^* - 0.090X_{21}^* + 0.086X_2^*$ $F=10.916, p_F = 0.000$ , 自变量 P 值均小于 0.05, VIF 值均小于 2。
劲头	$\ln\hat{Y}_{10} = 1.680 + 0.060X_{25}^* + 0.055X_{41}^* - 0.020X_{11}^* - 0.022X_{14}^* + 0.019X_{21}^*$ $F=28.547, p_F = 0.000$ , 自变量 P 值均小于 0.05, VIF 值均小于 2。

表 5 烟气化学因素与感官舒适性的关系  
Tab. 5 Relationship between smoke chemicals and sensory coziness

化学因素	口腔尖刺	口腔毛刺	喉部尖刺	喉部呛刺	鼻腔刺激	涂层	残留	收敛	干燥感	劲头
甲酸 (X <sub>1</sub> )								+	+	
乙酸 (X <sub>2</sub> )									+	
2- 甲基丁酸 (X <sub>5</sub> )			+							
戊酸 (X <sub>9</sub> )									+	
苯甲酸 (X <sub>11</sub> )										-
羟基乙酸 (X <sub>14</sub> )			+		+					-
乳酸 (X <sub>15</sub> )								+	+	
十四酸 (X <sub>20</sub> )						+	+			
亚油酸 (X <sub>21</sub> )		-				-	-		-	+
游离烟碱 (X <sub>25</sub> )	-	-	-	-	-			-	-	+
烟碱 (X <sub>26</sub> )								+		

续表 5

氨 (X <sub>27</sub> )	-	-		
甲醛 (X <sub>28</sub> )			+	+
乙醛 (X <sub>29</sub> )				+
丙酮 (X <sub>30</sub> )	+			
丙醛 (X <sub>32</sub> )				+
巴豆醛 (X <sub>33</sub> )		-		
丁醛 (X <sub>35</sub> )	+			
邻甲酚 (X <sub>40</sub> )	+			
H <sub>2</sub> O(X <sub>41</sub> )		+		+

注：空白表示没有明显关系，-表示存在负面的影响，+表示存在正面的影响。

### 3 结论

本文检测了 42 种烟气化学指标，采用逐步回归法，基于预测误差，建立了 10 个感官舒适性指标与化学成分之间的较优预测模型。在生产实践中，可通过检测较少烟气化学成分，较为客观地预测烤烟的感官舒适性。

### 参考文献

- [1] 顾永波, 肖作兵, 刘强, 等. 卷烟主流烟气 pH 值的测定及其与感官评吸的相关性研究 [J]. 食品工业, 2011(2):97-99.
- [2] 杨凯, 张朝平, 余苓, 等. 卷烟烟气水分对感官舒适性的影响 [J]. 烟草科技, 2009(7):9-11.
- [3] 于川芳, 卢斌斌, 牟定荣, 等. 卷烟劲头与其烟丝 - 烟气主要化学成分的相关性 [J]. 烟草科技, 2006(9):34-37.
- [4] 朱保昆, 者为, 李先毅, 等. 烤烟烟气中氨释放量对感官舒适性的影响 [J]. 食品工业, 2010(6):83-86.
- [5] 程传玲, 唐琦, 汪文良, 等. 单料烤烟主流烟气中主要酚类化合物及其与感官质量相关性分析 [J]. 郑州轻工业学院学报 (自然科学版), 2011, 26(1):5-8.
- [6] 鲁喜梅, 谢复炜, 刘晖, 等. 卷烟主流烟气总颗粒物中挥发性和半挥发性有机酸的分析 [J]. 烟草科技, 2006(6):24-29.
- [7] 王明锋, 刘秀明, 朱保昆, 等. 超高效液相色谱法测定卷烟烟气中游离态和质子化尼古丁含量 [J]. 云南大学学报 (自然科学版), 2010, 32(4):463-468.
- [8] 王希琴, 蔡继宝, 杨艳, 等. 卷烟主流烟气中氨的捕集及其离子色谱法测定 [J]. 分析测试学报, 2005, 24(6):81-84.
- [9] 全国烟草标准化技术委员会. YC/T 254-2008 卷烟主流烟气中主要羰基化合物的测定 高效液相色谱法 [S]. 北京: 中国标准出版社, 2008.
- [10] 全国烟草标准化技术委员会. YC/T 255-2008 卷烟主流烟气中主要酚类化合物的测定 高效液相色谱法 [S]. 北京: 中国标准出版社, 2008.
- [11] 全国烟草标准化技术委员会. GB/T 23203.1-2008 卷烟总颗粒物中水分的测定 第 1 部分: 气相色谱法 [S]. 北京: 中国标准出版社, 2008.
- [12] 刘百战, 舒俊生, 王素芳, 等. 烟叶类型和外加成分对卷烟烟气颗粒物 pH 值的影响 [J]. 烟草科技, 2003(3):24-27.
- [13] 王松桂, 史建红, 尹素菊, 等. 线性模型引论 [M]. 北京: 科学出版社, 2004:175-178.
- [14] 胡健颖, 姜国华, 王汉生. 实证研究中预测模型的选择: 从逐步回归到信息标准 [J]. 数理统计与管理, 2006, 25(1):21-26.
- [15] 王松桂, 陈敏, 陈立萍. 线性统计模型—线性回归与方差分析 [M]. 北京: 高等教育出版社, 2002:102-112.
- [16] 李子奈, 潘文卿. 计量经济学 [M]. 2 版. 北京: 高等教育出版社, 2005:117-127.
- [17] Hastie T, Tibshirani R, Friedman J. The elements of statistical learning[M]. 2nd edition, New York: Springer, 2009.
- [18] MORIE P. Fraction of protonated and unprotonated nicotine in tobacco smoke at various pH values[J]. Tobacco Science, 1972(16):167.