

DOI: 10.13652/j.issn.1003-5788.2021.02.014

# 基于 Fisher 线性判别分析方法的卷烟 主流烟气质量预测模型构建

Construction of a prediction model for mainstream cigarette smoke quality  
based on Fisher linear discriminant analysis method

单秋甫<sup>1</sup> 张涛<sup>2</sup> 李超<sup>1</sup> 罗林<sup>1</sup> 陈芳锐<sup>1</sup> 张海涛<sup>1</sup>

SHAN Qiu-fu<sup>1</sup> ZHANG Tao<sup>2</sup> LI Chao<sup>1</sup> LUO Lin<sup>1</sup> CHEN Fan-rui<sup>1</sup> ZHANG Hai-tao<sup>1</sup>

(1. 云南中烟工业有限责任公司, 云南 昆明 650231; 2. 红云红河烟草[集团]有限责任公司, 云南 昆明 650231)

(1. Yunnan China Tobacco Industry Co., Ltd., Kunming, Yunnan 650231, China;

2. Hongyun Honghe Tobacco [Group] Co., Ltd., Kunming, Yunnan 650231, China)

**摘要:**为建立卷烟主流烟气质量判别方法,采用 Fisher 线性判别分析理论对 30 种中国市售成品卷烟的 16 个参数作为判别因子,提出了一氧化碳、焦油量和烟气烟碱量 3 个判别函数,建立了 Fisher 判别模型。经验证,该模型回代误判率 0,检验计算预测精度 100%。

**关键词:**卷烟;主流烟气;质量预测;Fisher 线性判别分析

**Abstract:** To establish a method for discriminating cigarette quality, using Fisher's linear discriminant analysis theory, 16 parameters of 30 kinds of Chinese commercial finished cigarettes as discriminating factors, and of CO, tar amount and smoke nicotine amount as three discriminant functions the Fisher discriminant model was established. After verification, the model has a false positive rate of 0, and the prediction accuracy of the test calculation is 100%.

**Keywords:** cigarette; mainstream smoke; quality prediction; Fisher's linear discriminant analysis

GB 5606.5—2005 规定了卷烟主流烟气中焦油量、烟气烟碱量和烟气一氧化碳量等质量指标,并要求各工业公司在烟盒上对三者进行标注。长期以来,通过色谱、质谱等分析仪器对这 3 个质量指标进行检测,其前处理较为复杂,时间较长,期间所用试剂较多,而且仪器采购、维护费用较高。对于卷烟香味成分指标的预测模型研究和构建,前人做了不少的工作,例如:李达等<sup>[1]</sup>构建了线性

模型揭示了卷烟挥发性香气成分与烟丝加香工艺参数之间的数学关系;李超等<sup>[2]</sup>通过研究烙铁温度与成品烟丝致香成分的关系,来预测不同工艺条件下的烟丝致香成分含量。但是通过卷烟物理指标结合烟丝常规化学成分来对烟气质量指标的预测模型研究和构建却鲜见报道。

Fisher 线性判别分析(Fisher linear discriminant analysis)最早是由 Fisher 在 1936 年提出的一种统计分析方法,其思想为:根据已有的训练样例的若干数量特征分析,将样例投影到一条直线上,根据组间距离最大,组内距离最小的原则确定线性判别函数的系数,建立线性判别方程,再结合相应的判别准则判别出一个新样品的类别,然后利用判别准则将样本分开<sup>[3-4]</sup>。该判别方法可以有效地实现对多指标数据的降维分析,同时对数据分布无要求等优点,被广泛用于人脸检测、矿井水文地质类型等领域<sup>[4-5]</sup>。

由于影响卷烟主流烟气质量的变量很多,且影响程度的大小不同。试验拟基于 Fisher 判别理论,利用卷烟的圆周、质量、长度等 16 个参数作为判别因子,提出判别函数,建立 Fisher 判别模型,以期对卷烟主流烟气质量的判别提供一种新的途径。

## 1 材料与方法

### 1.1 材料

30 种市售成品卷烟:盒标一氧化碳量为 7~12 mg,盒标焦油量为 7~13 mg,盒标烟气烟碱量 0.7~1.1 mg,2019 年分别购自厦门市、北京市、大理市等地。

### 1.2 试剂

乙酸、甲醇、乙腈、甲酸铵、氢氧化钠、氯化钙、盐酸、对羟基苯甲酸酞肼、D-葡萄糖、氯化钾、水杨酸钠、亚硝基

**基金项目:**云南中烟工业有限责任公司科技项目(编号:2017JC03)

**作者简介:**单秋甫,男,云南中烟工业有限责任公司技术中心工程师,硕士。

**通信作者:**张海涛(1977—),男,云南中烟工业有限责任公司技术中心研究员,硕士。E-mail:371225296@qq.com

**收稿日期:**2020-07-31

铁氰化钠:分析纯,国药集团化学试剂有限公司;

浓硝酸(质量分数为 65%~68%)、硝酸铁、9 水合硝酸铁(纯度>99.0%)、硫氰酸汞(纯度>99.0%)、氯化钠标准物质[GBW(E)060024c]、次氯酸钠(有效氯含量≥5%)、烟碱标准品(纯度≥99%);美国 Sigma 公司。

### 1.3 仪器与设备

气相色谱-质谱联用仪:Perkin Elmer Clarus 600 型,美国 Perkin Elmer 公司;

超高效液相色谱-串联质谱联用仪:Waters Acquity UPLC-TQD 型,配备电喷雾离子源(ESI),美国 Waters 公司;

连续流动分析仪:Skalar San++ 型,荷兰 Skalar 公司;

分析天平:ME235S-OCE 型,感量为 0.1 mg,德国 Sartorius 公司;

烟支物理指标综合测试台:SODIMAX 型,法国 SODIM 公司。

### 1.4 样品的测试方法

1.4.1 烟丝结构 按《卷烟工艺规范》及 YC/T 178—2003 执行。

1.4.2 烟丝常规化学成分

- (1) 水溶性糖:按 YC/T 159—2002 执行。
- (2) 氯:按 YC/T 162—2011 执行。
- (3) 钾:按 YC/T 217—2007 执行。
- (4) 总氮:按 YC/T 161—2002 执行。
- (5) 蛋白质:按 YC/T 249—2008 执行。
- (6) 烟碱:按 YC/T 246—2008 执行。

1.4.3 烟支卷制质量指标

(1) 卷烟的圆周、质量、长度、硬度、滤嘴通风率、纸通风率、总通风率和吸阻:按 GB/T 22838—2009 执行。

(2) 卷烟烟支烟丝密度及其分布均匀性:按 YC/T 476—2013 执行。

## 2 卷烟主流烟气质量预测的 Fisher 判别模型

### 2.1 判别指标的选取

根据相关标准<sup>[6-11]</sup>及实践经验,初步筛选出影响卷烟主流烟气质量的指标:卷烟的圆周、质量、长度、烟丝水分含量、烟丝烟碱含量、硬度、滤嘴通风率、纸通风率、还原糖含量、钾含量、总糖含量、含水率、氯含量、总通风率、吸阻和总氮含量。采用逐步判别分析法<sup>[12]</sup>对影响卷烟主流烟气质量的敏感指标进行逐步判别筛选。

假设判别函数原有  $q$  个变量,记  $X^*$ 。如果新的变量  $X_j$  的  $F \geq F_{进}$ ,表明变量  $X_j$  判别能力显著,相应地需在判别函数中增加变量  $X_j$ ,则:

$$F = \frac{n-k-q}{k-1} \times \frac{1-\Lambda(X_j|X^*)}{\Lambda(X_j|X^*)} = F_a(k-1, n-k-1),$$

$$k-1), \tag{1}$$

$$F_{进} = F_a(k-1, n-k-1), \tag{2}$$

$$\Lambda(X_j|X^*) = \frac{\Lambda(X^*, X_j)}{\Lambda(X^*)}, \tag{3}$$

式中:

$X^*$ 、 $X_j$ ——卷烟某个理化指标的数值;

$F_a$ ——线性方程的  $F$  统计量值;

$F$ ——原组合的线性方程的  $F$  统计量值;

$F_{进}$ ——新组合的线性方程的  $F$  统计量值;

$n$ ——原线性方程的自由度;

$k$ ——新组合的线性方程的自由度。

如果判别函数原有  $q$  个变量中有  $X_k$ ,满足  $F \leq F_{出}$ ,表明该变量对判别能力不显著,需将其剔除。则:

$$F = \frac{n-k-q}{k-1} \times \frac{1-\Lambda(X_k|X_k^*)}{\Lambda(X_k|X_k^*)} = F_a(k-1, n-k-q-1), \tag{4}$$

$$F_{出} = F_a(k-1, n-k-q-1), \tag{5}$$

式中:

$X_k$ ——卷烟某个理化指标的数值;

$F_a$ ——线性方程的  $F$  统计量值;

$F$ ——原组合的线性方程的  $F$  统计量值;

$F_{出}$ ——线性方程的  $F$  统计量值;

$n$ ——原线性方程的自由度;

$k$ ——新组合的线性方程的自由度。

从 36 种卷烟样品随机选取 30 种为训练集,其余 6 种样品为测试集。30 种为训练集每种有 5 个平行样,共计 150 个样品。

### 2.2 Fisher 判别分析模型的建立

2.2.1 判别函数的建立 参照文献<sup>[13-14]</sup>,将要判别的两组分别标记为 A 和 B,令组 A 有  $s$  数据,组 B 有  $t$  组数据,对于  $p$  个判别指标,则:

$$\text{组 A: } W^0 = \begin{bmatrix} x_{11}^0 & x_{12}^0 & \cdots & x_{1p}^0 \\ x_{21}^0 & x_{22}^0 & \cdots & x_{2p}^0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ x_{s1}^0 & x_{s2}^0 & \cdots & x_{sp}^0 \end{bmatrix};$$

$$\text{组 B: } W^1 = \begin{bmatrix} x_{11}^1 & x_{12}^1 & \cdots & x_{1p}^1 \\ x_{21}^1 & x_{22}^1 & \cdots & x_{2p}^1 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ x_{t1}^1 & x_{t2}^1 & \cdots & x_{tp}^1 \end{bmatrix}。$$

各组数据列的平均值为

$$\bar{x}_j^0 = \frac{1}{s} \sum_{i=1}^s x_{ij}^0, \bar{x}_j^1 = \frac{1}{s} \sum_{i=1}^s x_{ij}^1, j = 1, 2, \dots,$$

$p$ 。

作新矩阵  $M$ 、 $N$  及其离差矩阵  $S_1$ 、 $S_2$ 。

$$M = \begin{bmatrix} x_{11}^0 - \bar{x}_1^0 & x_{12}^0 - \bar{x}_2^0 & \cdots & x_{1p}^0 - \bar{x}_p^0 \\ x_{21}^0 - \bar{x}_1^0 & x_{22}^0 - \bar{x}_2^0 & \cdots & x_{2p}^0 - \bar{x}_p^0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ x_{m1}^0 - \bar{x}_1^0 & x_{m2}^0 - \bar{x}_2^0 & \cdots & x_{mp}^0 - \bar{x}_p^0 \end{bmatrix};$$

$$N = \begin{bmatrix} x_{11}^1 - \bar{x}_1^1 & x_{12}^1 - \bar{x}_2^1 & \cdots & x_{1p}^1 - \bar{x}_p^1 \\ x_{21}^1 - \bar{x}_1^1 & x_{22}^1 - \bar{x}_2^1 & \cdots & x_{2p}^1 - \bar{x}_p^1 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ x_{i1}^1 - \bar{x}_1^1 & x_{i2}^1 - \bar{x}_2^1 & \cdots & x_{ip}^1 - \bar{x}_p^1 \end{bmatrix}。$$

$S_1 = MM, S_2 = NN, S = S_1 + S_2。$

得到最优判别函数系数  $c_1, c_2, \dots, c_p。$

$$S \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_p \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_1^0 - \bar{x}_1^0 \\ x_2^0 - \bar{x}_2^0 \\ \vdots \\ x_p^0 - \bar{x}_p^0 \end{pmatrix}, \text{ 即 } \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_p \end{pmatrix} = S^{-1} \begin{pmatrix} x_1^0 - \bar{x}_1^0 \\ x_2^0 - \bar{x}_2^0 \\ \vdots \\ x_p^0 - \bar{x}_p^0 \end{pmatrix}。$$

利用 IBM SPSS 22.0 软件进行相关计算, 获得未标准化的 Fisher 判别函数系数。

2.2.2 一氧化碳判别模型的构建 若待测卷烟的盒标烟气一氧化碳量在 [7 mg, 9 mg], 则一氧化碳量判别模型:

$$C_{\text{正常}} = -15\ 160.93 + 43.612X_{\text{长度}} - 3\ 405.606X_{\text{吸阻}} + 1\ 109.039X_{\text{圆周}} + 33.918X_{\text{硬度}} + 15.863X_{\text{滤嘴通风率}} + 95.111X_{\text{盒标一氧化碳量}}, \quad (6)$$

$$C_{\text{异常}} = -8\ 647.21 + 30.475X_{\text{长度}} - 1\ 555.12X_{\text{吸阻}} + 813.207X_{\text{圆周}} + 21.03X_{\text{硬度}} + 20.575X_{\text{滤嘴通风率}} + 11.421X_{\text{盒标一氧化碳量}}, \quad (7)$$

式中:

$C_{\text{正常}}$ ——质量符合要求卷烟的一氧化碳判别函数值;

$C_{\text{异常}}$ ——质量异常卷烟的一氧化碳判别函数值;

$X_{\text{圆周}}$ ——烟支圆周, mm;

$X_{\text{吸阻}}$ ——烟支吸阻, kPa;

$X_{\text{长度}}$ ——烟支长度, mm;

$X_{\text{硬度}}$ ——烟支硬度, %;

$X_{\text{滤嘴通风率}}$ ——烟支滤嘴通风率, %;

$X_{\text{盒标一氧化碳量}}$ ——烟支盒标一氧化碳量, mg/支。

2.2.3 焦油判别模型的构建 若待测卷烟的盒标焦油量在 [7 mg, 9 mg], 则焦油量判别模型:

$$J_{\text{正常}} = -4\ 906.423 + 17.844X_{\text{烟丝水分}} + 1\ 073.656X_{\text{质量}} + 302.317X_{\text{圆周}} + 17.998X_{\text{滤嘴通风率}} + 76.809X_{\text{含水率}}, \quad (8)$$

$$J_{\text{异常}} = -2\ 853.338 + 14.624X_{\text{烟丝水分}} + 1\ 001.878X_{\text{质量}} + 194.138X_{\text{圆周}} + 13.106X_{\text{滤嘴通风率}} + 108.724X_{\text{含水率}}; \quad (9)$$

若待测卷烟的盒标焦油量在 (9 mg, 13 mg), 则焦油量判别模型:

$$J_{\text{正常}} = -122\ 231.797 - 35.295X_{\text{还原糖}} + 370.607X_{\text{烟丝烟碱}} - 144.763X_{\text{氯}} - 5.549X_{\text{烟丝水分}} + 10\ 206.485X_{\text{圆周}} + 30.984X_{\text{滤嘴通风率}} + 1.964X_{\text{总通风率}} - 377.531X_{\text{盒标焦油量}}, \quad (10)$$

$$J_{\text{异常}} = -120\ 947.405 - 38.337X_{\text{还原糖}} + 336.649X_{\text{烟丝烟碱}} - 110.918X_{\text{氯}} - 4.162X_{\text{烟丝水分}} + 10\ 145.234X_{\text{圆周}} + 30.457X_{\text{滤嘴通风率}} + 2.094X_{\text{总通风率}} - 350.939X_{\text{盒标焦油量}}, \quad (11)$$

式中:

$J_{\text{正常}}$ ——质量符合要求卷烟的焦油判别函数值;

$J_{\text{异常}}$ ——质量异常卷烟的焦油判别函数值;

$X_{\text{圆周}}$ ——烟支圆周, mm;

$X_{\text{吸阻}}$ ——烟支吸阻, kPa;

$X_{\text{长度}}$ ——烟支长度, mm;

$X_{\text{硬度}}$ ——烟支硬度, %;

$X_{\text{滤嘴通风率}}$ ——烟支滤嘴通风率, %;

$X_{\text{盒标一氧化碳量}}$ ——烟支盒标一氧化碳量, mg/支。

2.2.4 烟碱判别模型的构建 若待测卷烟的盒标烟气烟碱量在 [0.7 mg, 0.9 mg], 则烟气烟碱量判别模型:

$$Y_{\text{正常}} = -688.964 + 17.532X_{\text{还原糖}} + 90.679X_{\text{氯}} + 4.442X_{\text{硬度}} + 5.985X_{\text{纸通风率}} + 792.509X_{\text{盒标烟气烟碱量}}, \quad (12)$$

$$Y_{\text{异常}} = -673.653 + 20.092X_{\text{还原糖}} + 89.497X_{\text{氯}} + 3.144X_{\text{硬度}} + 4.966X_{\text{纸通风率}} + 804.683X_{\text{盒标烟气烟碱量}}; \quad (13)$$

若待测卷烟的盒标烟气烟碱量在 (0.9 mg, 1.1 mg], 则烟气烟碱量判别模型:

$$Y_{\text{正常}} = -6\ 805.283 + 240.987X_{\text{烟丝烟碱}} - 38.289X_{\text{氯}} + 277.514X_{\text{钾}} + 122.194X_{\text{总氮}} + 893.193X_{\text{吸阻}} + 420.862X_{\text{圆周}} + 12.698X_{\text{滤嘴通风率}} - 0.585X_{\text{总通风率}} + 14.28X_{\text{纸通风率}} + 703.185X_{\text{盒标烟气烟碱量}}, \quad (14)$$

$$Y_{\text{异常}} = -6\ 893.423 + 220.779X_{\text{烟丝烟碱}} + 21.513X_{\text{氯}} + 261.193X_{\text{钾}} + 145.277X_{\text{总氮}} + 945.853X_{\text{吸阻}} + 425.624X_{\text{圆周}} + 13.267X_{\text{滤嘴通风率}} - 0.508X_{\text{总通风率}} + 16.691X_{\text{纸通风率}} + 565.389X_{\text{盒标烟气烟碱量}}, \quad (15)$$

式中:

$Y_{\text{正常}}$ ——质量符合要求卷烟的烟碱判别函数值;

$Y_{\text{异常}}$ ——质量异常卷烟的烟碱判别函数值;

$X_{\text{圆周}}$ ——烟支圆周, mm;

$X_{\text{质量}}$ ——烟支质量, g/支;

$X_{\text{长度}}$ ——烟支长度, mm;

$X_{\text{烟丝水分}}$ ——烟丝水分含量, %;

$X_{\text{烟丝烟碱}}$ ——烟支硬度, %;

$X_{\text{滤嘴通风率}}、X_{\text{纸通风率}}、X_{\text{总通风率}}$ ——烟支滤嘴、烟支纸及总通风率, %;

$X_{\text{还原糖}}、X_{\text{钾}}、X_{\text{总糖}}、X_{\text{氯}}、X_{\text{总氮}}$ ——烟丝中还原糖、钾、总糖、氯、总氮的含量, %;

$X_{\text{盒标烟气一氧化碳量}}、X_{\text{盒标焦油量}}、X_{\text{盒标烟气烟碱量}}$ ——烟支盒标

一氧化碳量、盒标焦油量、盒标烟气烟碱量,mg/支。

当待检测卷烟同时满足  $C_{正常} > C_{异常}$ 、 $J_{正常} > J_{异常}$ 、 $Y_{正常} > Y_{异常}$  3 个判别式,则该待检测卷烟主流烟气质量合格;反之不合格。

对市售 30 个牌号 150 个样品的卷烟进行质量检测,部分训练样品的检测及采集到的相关参数如表 1 所示。同时,采用 1.2 的测试方法对主流烟气中焦油量、烟气烟碱量和烟气一氧化碳量进行检测。根据判别函数式计算出 150 个样品的判别函数值,部分训练样品的 Fisher 线性判别结果与检测结果对比如表 2 所示。表 2 中,判断列(如一氧化碳判断)值 1 代表正常,值 0 代表异常。由

表 2 可知,检测结果与 Fisher 线性判别结果一致,均为:A~H 8 个牌号卷烟主流烟气质量合格,I、J 两个牌号卷烟主流烟气质量不合格。

同时利用 Wilks 的 Lambda 检验来预估判别函数方程的显著性。检验结果如表 3 所示,一氧化碳、焦油和烟气烟碱量各判别函数方程的显著性概率 Sig.均为  $P < 0.05$ ,说明判别函数方程是显著的,该方程具有一定程度的外部推广应用性。

判别函数贡献率如表 4 所示,可以得到一氧化碳、焦油和烟气烟碱量各判别函数的方差贡献率,所建立的判别函数均能对分类的建模样品进行 100% 的分类判别,能

表 1 部分训练样品的各个指标值与判别函数值

Table 1 Each index value and discriminant function value of some training samples

牌号	还原糖/ %	烟丝烟碱/ (mg·支 <sup>-1</sup> )	氯/ %	钾/ %	总氮/ %	烟丝水分/ %	长度/ mm	吸阻/ kPa
A	16.33	2.46	0.74	2.66	2.24	5.28	84.35	1.17
B	20.07	2.32	0.78	2.33	2.18	9.63	84.08	1.02
C	20.58	2.47	0.65	2.18	2.13	9.37	84.09	1.13
D	21.08	2.32	0.64	2.60	2.14	8.84	84.17	0.96
E	21.23	2.31	0.60	2.62	2.19	7.37	83.88	1.00
F	21.79	2.30	0.67	2.38	2.01	4.94	73.93	0.90
G	18.13	2.20	0.65	2.28	2.09	8.74	84.06	1.17
H	20.12	2.08	0.79	2.64	1.92	6.88	84.00	0.93
I	17.00	2.37	1.05	2.36	2.28	7.50	84.05	1.18
J	20.08	2.26	0.62	2.39	2.06	3.88	87.90	1.15

牌号	质量/ (g·支 <sup>-1</sup> )	圆周/ mm	硬度/ %	滤嘴通风率/ %	总通风率/ %	纸通风率/ %	含水率/ %	盒标一氧化碳量/ (mg·支 <sup>-1</sup> )
A	0.88	24.31	62.41	8.08	14.19	6.10	12.24	12.0
B	0.89	24.32	62.34	30.99	38.60	7.61	12.12	9.0
C	0.91	24.33	62.70	12.06	22.93	10.87	12.03	12.0
D	0.91	24.27	61.89	19.53	25.48	5.95	12.40	11.0
E	0.90	24.21	61.28	18.56	26.41	7.85	12.38	11.0
F	0.82	24.23	62.90	34.52	40.74	6.22	11.79	8.0
G	0.91	24.25	64.69	15.75	23.95	8.20	11.59	10.0
H	0.89	24.20	63.78	19.60	26.50	6.90	12.56	11.0
I	0.89	24.32	63.38	10.23	22.27	12.04	12.07	11.0
J	0.68	20.15	57.76	33.19	40.39	7.20	12.91	8.0

牌号	盒标焦油量/ (mg·支 <sup>-1</sup> )	盒标烟气烟碱量/ (mg·支 <sup>-1</sup> )	$C_{正常}$	$C_{异常}$	$J_{正常}$	$J_{异常}$	$Y_{正常}$	$Y_{异常}$
A	10.0	1.1	14 896.0	13 496.8	122 620.3	122 550.5	7 000.2	6 960.9
B	8.0	0.8	15 466.8	14 156.3	5 055.1	4 618.5	690.1	676.9
C	11.0	1.1	15 087.9	13 640.6	122 370.2	122 296.2	6 948.7	6 921.9
D	10.0	1.0	15 622.7	13 995.0	122 323.3	122 219.9	6 801.9	6 767.7
E	11.0	1.0	15 364.5	13 839.1	121 299.9	121 222.0	6 838.4	6 808.9
F	8.0	0.8	15 314.6	14 036.3	4 917.5	4 481.7	704.5	696.5
G	8.0	0.8	14 810.5	13 615.2	122 853.7	122 716.3	658.3	636.6
H	10.0	0.9	15 697.9	14 016.6	121 516.5	121 429.0	773.3	760.3
I	10.0	1.0	14 808.7	13 521.1	122 629.4	122 557.0	6 940.3	6 958.0
J	8.0	0.8	10 337.3	10 611.6	3 574.8	3 636.6	653.0	646.4

很好地区分各个所划分的正常样品和异常样品情况。

综上所述,提出的 Fisher 线性判别分类识别正确率为 100%,代入回判公式可知误判率为 0,证明所建立的卷烟主流烟气质量 Fisher 判别分析模型是稳定、合理的。

对市售 30 个牌号 150 个样品的卷烟进行 PCA 分析(即指标差异上的客观评价),部分训练样品的一氧化碳 8~12 mg、焦油 8~11 mg 和烟气烟碱 0.8~1.1 mg 的 PCA 分析结果如图 1~3 所示。由图 1~3 可知,正常与异常样品具有明显的界限区分。图 1 中,盒标 8~12 mg 一氧化碳量异常样品主要在长度、吸阻、圆周和硬度 4 个

指标有异常。长度太长,吸阻太大、圆周和硬度太小均会导致样品的一氧化碳量发生异常。图 2 中,盒标 8~11 mg 焦油量的异常样品主要在质量、圆周、滤嘴通风率和含水率 4 个指标有异常。质量过轻、圆周过小、滤嘴通风率过大或过小和含水率太小均会导致样品的焦油量发生异常。图 3 中,盒标 0.8~1.1 mg 烟气烟碱量异常样品主要在还原糖和氯两个指标有异常。还原糖太大和氯太小或太大均会导致样品的烟气烟碱量发生异常。

2.3 Fisher 模型的外部验证

对验证测试集 K~P 6 个牌号样品进行质量检测,相

表 2 部分训练样品的检测结果与 Fisher 线性判别结果对比表

Table 2 Comparison table between the detection results of some training samples and the Fisher linear discrimination results

牌号	一氧化碳判断	一氧化碳盒标	一氧化碳实测	焦油量判断	焦油量盒标/(mg·支 <sup>-1</sup> )	焦油量实测/(mg·支 <sup>-1</sup> )	烟碱判断	烟碱盒标/(mg·支 <sup>-1</sup> )	烟碱量实测/(mg·支 <sup>-1</sup> )
A	1	12.00	11.85	1	10.00	10.35	1	1.10	1.12
B	1	9.00	9.25	1	8.00	8.12	1	0.80	0.85
C	1	12.00	12.22	1	11.00	11.32	1	1.10	1.05
D	1	11.00	11.38	1	10.00	10.35	1	1.00	1.06
E	1	11.00	10.86	1	11.00	10.85	1	1.00	1.04
F	1	8.00	8.12	1	8.00	8.21	1	0.80	0.83
G	1	10.00	10.09	1	8.00	8.01	1	0.80	0.82
H	1	11.00	11.14	1	10.00	9.79	1	0.90	0.94
I	1	11.00	11.06	0	10.00	12.25	1	1.00	0.96
J	0	8.00	10.12	1	8.00	8.37	0	0.80	0.99

表 3 判别函数显著性检验结果

Table 3 Discriminant function significance test results

预测指标前提	函数检验	Wilks 函数值	卡方	自由度	显著性水平
盒标一氧化碳量[7 mg,9 mg]	1	0.001	291.467	34	0.000
	2	0.209	68.948	16	0.000
盒标焦油量[7 mg,9 mg]	1	0.001	355.832	34	0.000
	2	0.255	65.522	16	0.000
盒标焦油量(9 mg,13 mg]	1	0.413	186.266	17	0.000
盒标烟气烟碱量[0.7 mg,0.9 mg]	1	0.205	134.770	34	0.000
	2	0.646	37.127	16	0.002
盒标烟气烟碱量(0.9 mg,1.1 mg]	1	0.457	245.955	17	0.000

表 4 判别函数贡献率

Table 4 Discriminant function contribution rate

预测指标前提	函数	特征值	方差贡献率	累计方差贡献率	正则相关性
盒标一氧化碳量[7 mg,9 mg]	1	156.157	97.6	97.6	0.997
	2	3.792	2.4	100.0	0.890
盒标焦油量[7 mg,9 mg]	1	422.314	99.3	99.3	0.999
	2	2.916	0.7	100.0	0.863
盒标焦油量(9 mg,13 mg]	1	1.423	100.0	100.0	0.766
盒标烟气烟碱量[0.7 mg,0.9 mg]	1	2.154	79.7	79.7	0.826
	2	0.548	20.3	100.0	0.595
盒标烟气烟碱量(0.9 mg,1.1 mg]	1	1.186	100.0	100.0	0.737

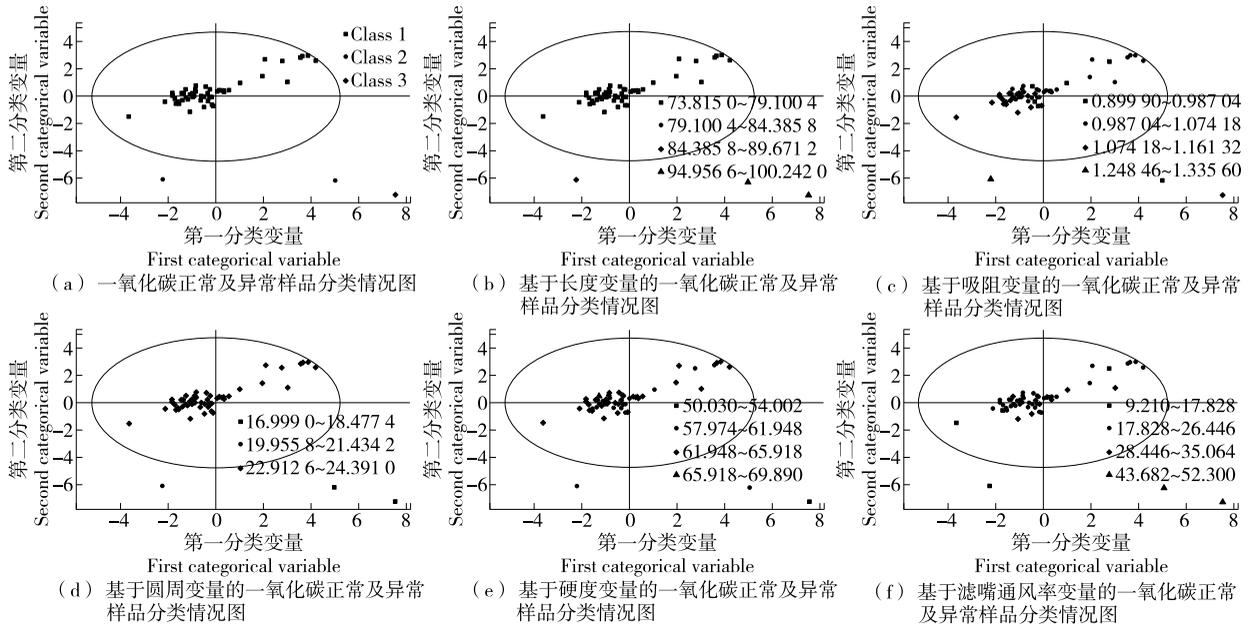


图1 盒标 8~12 mg 一氧化碳部分训练样品的 PCA 分析结果图

Figure 1 PCA analysis results of some training samples of 8~12 mg CO labeled in the box

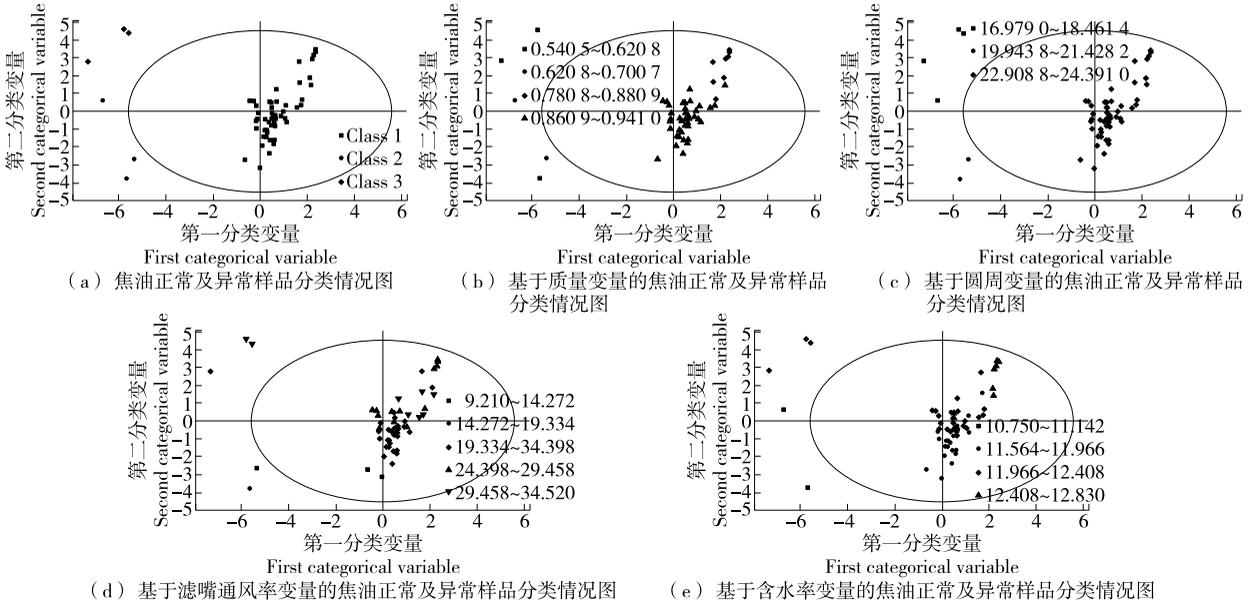


图2 盒标 8~11 mg 焦油部分训练样品的 PCA 分析结果

Figure 2 PCA analysis results of some training samples of 8~11 mg tar box label

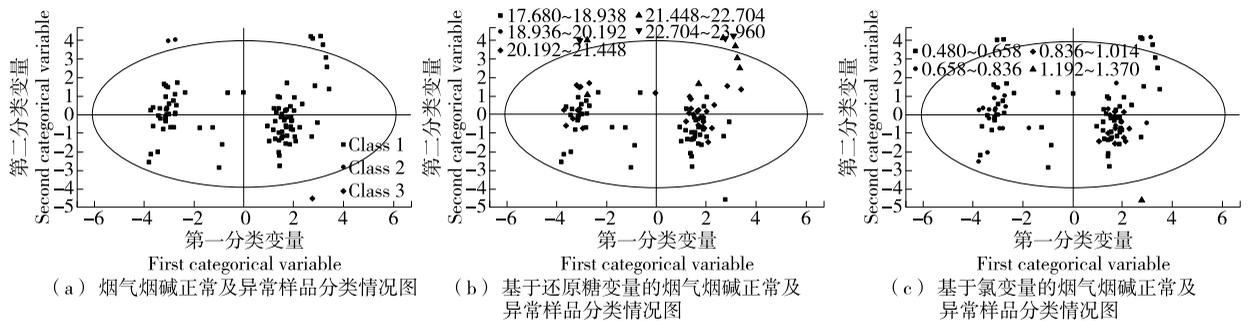


图3 盒标 0.8~1.1 mg 烟气烟碱部分训练样品的 PCA 分析结果

Figure 3 PCA analysis results of some training samples of smoke nicotine with box label of 0.8~1.1 mg

关参数如表 5 所示。同时,采用 1.2 节样品的测试方法对主流烟气中焦油量、烟气烟碱量和烟气一氧化碳量进行检测。Fisher 线性判别结果与检测结果对比如表 6 所示。由表 6 可知,检测结果与 Fisher 线性判别结果一致,均

为:K、L、M、O、P 5 个牌号卷烟主流烟气质量不合格,N 牌号卷烟主流烟气质量合格。结果表明提出的 Fisher 线性判别模型与实际检测结果吻合度较好,对于卷烟主流烟气质量具有较好的判别能力。

表 5 测试集 6 个牌号各个指标值与判别函数值

Table 5 Each index value and discriminant function value of the 6 brands in the test set

牌号	还原糖/%	烟丝烟碱/mg	氯/%	钾/%	总氮/%	烟丝水分/%	长度/mm	吸阻/kPa
K	21.95	2.48	0.66	2.04	2.14	8.64	99.83	1.32
L	22.56	2.28	0.54	2.76	2.19	9.24	83.84	0.96
M	22.36	2.54	0.68	2.08	2.20	8.22	100.08	1.12
N	15.97	2.50	0.72	2.63	2.24	7.50	83.65	1.19
O	17.08	2.24	1.06	2.26	2.38	7.54	84.14	1.13
P	21.32	2.32	0.75	2.12	2.18	8.56	84.12	1.08

牌号	质量/ (g·支 <sup>-1</sup> )	圆周/ mm	硬度/%	滤嘴通风率/%	总通风率/%	纸通风率/%	含水率/%	盒标一氧化碳量/ (mg·支 <sup>-1</sup> )
K	0.59	16.98	52.75	24.11	38.89	14.78	12.26	7.0
L	0.92	24.16	50.03	23.74	30.65	7.23	12.17	8.0
M	0.58	17.03	50.03	48.88	51.71	9.96	12.38	7.0
N	0.86	24.27	62.68	6.44	15.13	8.69	12.48	10.0
O	0.89	24.32	65.34	11.70	21.20	9.50	11.91	11.0
P	0.90	24.34	61.89	12.49	21.64	9.14	12.24	10.0

牌号	盒标焦油量/ (mg·支 <sup>-1</sup> )	盒标烟气烟碱量/ (mg·支 <sup>-1</sup> )	C <sub>正常</sub>	C <sub>异常</sub>	J <sub>正常</sub>	J <sub>异常</sub>	Y <sub>正常</sub>	Y <sub>异常</sub>
K	8.0	0.8	6 355.0	7 830.5	2 385.9	2 805.6	712.5	709.4
L	8.0	0.8	14 861.3	13 695.3	4 905.4	4 522.2	655.0	664.9
M	8.0	0.8	7 414.5	8 647.7	2 843.0	3 141.7	680.6	687.0
N	11.0	1.1	14 535.8	13 354.8	121 752.6	121 742.9	7 018.0	6 983.5
O	12.0	1.0	15 075.9	13 673.9	121 844.7	121 873.8	6 829.2	6 845.9
P	13.0	1.1	15 081.7	13 708.3	121 697.5	121 726.4	6 837.8	6 815.3

表 6 检测结果与 Fisher 线性判别结果对比表

Table 6 Comparison table of detection results and Fisher linear discrimination results

牌号	一氧化碳判断	一氧化碳盒标/ (mg·支 <sup>-1</sup> )	一氧化碳实测/ (mg·支 <sup>-1</sup> )	焦油量判断	焦油量盒标/ (mg·支 <sup>-1</sup> )	焦油量实测/ (mg·支 <sup>-1</sup> )	烟碱判断	烟碱盒标/ (mg·支 <sup>-1</sup> )	烟碱量实测/ (mg·支 <sup>-1</sup> )
K	0	7.0	8.95	0	8.00	10.12	0	0.80	1.02
L	1	8.0	8.25	1	8.00	8.35	0	0.80	1.10
M	0	7.0	9.10	0	8.00	10.09	0	0.80	1.05
N	1	10.0	10.35	1	11.00	10.84	1	1.10	1.06
O	1	11.0	10.86	0	12.00	13.59	0	1.00	1.18
P	1	10.0	10.29	0	13.00	14.52	1	1.10	1.05

### 3 结论

通过 Fisher 线性判别理论的应用,构建了以卷烟的圆周、质量、长度等 16 个参数作为判别因子的 Fisher 判别模型,实现了以卷烟物理指标和烟丝常规化学成分指标对卷烟烟气烟碱、烟气一氧化碳和烟气焦油量的预测,并将该模型应用于卷烟主流烟气的质量判别当中。该模型经过回代误判率为 0,检验计算预测精度达到 100%,表明所建立的卷烟主流烟气质量 Fisher 判别模型的方法科学合理,且可操作性强,能够应用于卷烟主流烟气质量

的判别中,有效解决了卷烟烟气指标测试条件要求高的现实问题。目前该方法还存在建模样本量不是很大的问题,后续将进一步加大样本量,力求使模型的适用范围更加广泛。

#### 参考文献

[1] 李达, 李晓科, 张涛, 等. 卷烟挥发性香气成分测定及烟丝加香工艺优化[J]. 食品与机械, 2020, 36(3): 84-90.

(下转第 92 页)

设备、改善试验方法和规范试验操作对提高试验结果的准确性至关重要。

### 参考文献

- [1] 吕倩, 邓泽新, 吴颖, 等. 婴幼儿营养米粉加工过程中营养素损耗研究[J]. 粮食与饲料工业, 2018(8): 7-9, 17.
- [2] HAMMERLING U. Retinol as electron carrier in redox signaling, a new frontier in vitamin A research [J]. Hepatobiliary Surg Nutr, 2016, 5(1): 1 528.
- [3] 黄成安, 张喜金, 潘拾朝, 等. 高效液相色谱法测定维生素片中维生素 A 醋酸酯含量的不确定度评定[J]. 食品安全质量检测学报, 2015, 6(8): 3 034-3 037.
- [4] DELUCA H. New concepts of vitamin D functions [J]. Annals of the New York Academy of Sciences, 1992, 669(9): 59-68.
- [5] SHAHROKHI S Z, GHAFARI F, KAZEROUNI F. Role of vitamin D in female reproduction [J]. Clin Chim Acta, 2016, 455: 3 338.
- [6] ZHANG Zi-feng, FAN Shao-hua, ZHENG Yuan-lin. Purple sweet potato color attenuates oxidative stress and inflammatory response induced by D-galactose in mouse liver[J]. Food and Chemical Toxicology, 2009, 47(2): 496-501.
- [7] 霍晓敏. 气相色谱法对干海参中的六六六、滴滴涕测量结果不确定度的评定[J]. 食品科学, 2013, 34(8): 244-248.
- [8] KERRIE L Kaspar, JEAN Soon Park, CHARLES R Brown, et al. Pigmented potato consumption alters oxidative stress and inflammatory damage in men[J]. The Journal of Nutrition, 2011, 141(1): 1-4.
- [9] AHMED S, KISHIKAWA N, OHYAMA K, et al. Selective

chemiluminescence method for monitoring of vitamin K homologues in rheumatoid arthritis patients[J]. Talanta, 2011, 85: 230-236.

- [10] PYKA A, NABIALKOWSKA D, BOBWR K, et al. Comparison of NP-TLC and RP-TLC with densitometry to quantitative analysis of tocopherol acetate in pharmaceutical preparation[J]. J Liq Chromatogr R T, 2011, 34: 2 548-2 564.
- [11] PALAKOV E M, CROW B S, BISHOP M J, et al. Rapid quantitative determination of fat-soluble vitamins and coenzyme Q-10 in human serum by reversed phase ultra-high pressure liquid chromatography with UV detection[J]. J Chromatogr B, 2009, 877: 8 994.
- [12] 樊垚, 黄翠丽, 王力清, 等. 超高效液相色谱法测定婴幼儿配方乳粉中的  $V_{D_3}$  含量的不确定度评定[J]. 食品科学, 2013, 34(12): 143-146.
- [13] SEMERARO A, ALTIERI I, PATRIARCA M, et al. Evaluation of uncertainty of measurement from method validation data: An application to the simultaneous determination of retinol and  $\alpha$ -tocopherol in human serum by HPLC[J]. J Chromatography B, 2009, 877(11): 1 209-1 215.
- [14] 杨洋, 徐春祥, 车文军. 高效液相色谱法测定奶粉中的三聚氰胺及其不确定度分析[J]. 食品科学, 2010, 31(4): 250-253.
- [15] 周荣杰, 葛城, 易灿, 等. 评定高效液相色谱法测定婴幼儿配方乳粉中乳铁蛋白含量的不确定度[J]. 食品安全质量检测学报, 2020, 11(5): 1 635-1 641.
- [16] 杨德毅, 刘莉, 吾建祥, 等. 高效液相色谱测定佛手中联苯肼酯残留量的不确定度评定[J]. 农药, 2019, 58(2): 125-129.

(上接第 84 页)

- [2] 李超, 袁湘云, 李达, 等. 烙铁温度对成品烟丝致香成分的影响[J]. 食品与机械, 2019, 35(8): 27-31, 36.
- [3] 周志华. 机器学习[M]. 北京: 清华大学出版社, 2016: 53-72, 97-120.
- [4] 孙文洁, 武强, 董东林, 等. 矿井水文地质类型划分的 Fisher 判别分析法: 以开滦矿区为例[J]. 中国矿业大学学报, 2012, 41(2): 231-235.
- [5] 孙俊, 蒋淑英, 毛罕平, 等. 基于线性判别法的生菜农药残留定性检测模型研究[J]. 农业机械学报, 2016, 47(1): 239-244.
- [6] 国家烟草专卖局. 烟草及烟草制品 水溶性糖的测定 连续流动法: YC/T 159—2002[S]. 北京: 中国标准出版社, 2002: 399-401.
- [7] 国家烟草专卖局. 烟草及烟草制品 氮的测定 连续流动法: YC/T 162—2011[S]. 北京: 中国标准出版社, 2011: 415-419.
- [8] 国家烟草专卖局. 烟草及烟草制品 钾的测定 连续流动法: YC/T 217—2007[S]. 北京: 中国标准出版社, 2007:

1-3.

- [9] 国家烟草专卖局. 烟草及烟草制品 总氮的测定 连续流动法: YC/T 161—2002[S]. 北京: 中国标准出版社, 2002: 1-3.
- [10] 国家烟草专卖局. 烟草及烟草制品 蛋白质的测定 连续流动法: YC/T 249—2008[S]. 北京: 中国标准出版社, 2002: 1-8.
- [11] 国家烟草专卖局. 烟草及烟草制品 烟碱的测定 连续流动法: YC/T 246—2008[S]. 北京: 中国标准出版社, 2008: 1-7.
- [12] 孟凡奇, 李广杰, 李明, 等. 逐步判别分析法在筛选泥石流评价因子中的应用[J]. 岩土力学, 2010, 31(9): 2 925-2 929.
- [13] 于秀林. 多元统计分析[M]. 北京: 中国统计出版社, 2002: 125-128.
- [14] 姜春露, 姜振泉, 孙强, 等. 基于 Fisher 判别分析法的无粘性土渗透破坏类型判别[J]. 应用基础与工程科学学报, 2012(5): 81-88.