DOI：10.13245/j.hust.260026

功能生物质热解活性气味识别与强度预测模型

向德宁[1] 林 蔚[1] 闫友科[2] 侯忠平[1] 叶 凯[1] 李 冉[1] 张延荣[2]
(1．湖北中烟工业有限责任公司武汉卷烟厂，湖北 武汉 430040；
2．华中科技大学环境科学与工程学院，湖北 武汉 430074)

摘要 针对复杂工业废气臭气浓度人工嗅辨测量不确定度高、多组分非线性感知交互难以准确定量的问题，提出了一种基于特征降维与机器学习的臭气浓度预测方法．针对典型烟草热解废气，采用SPME-GC-MS/GC-O(固相微萃取-气相色谱-质谱/嗅闻)联用技术并结合气味活度值进行解析，基于感官掩蔽效应将气味降维提取为乙醇、乙酸、薄荷酮与苯乙醛四项核心特征物质．依据真实工况排放区间构建全因子配气-嗅辨数据集(256组)，系统比选六种机器学习模型以重构特征物质浓度与整体气味强度间的非线性映射．结果表明：支持向量回归模型因决策曲面契合嗅觉感知机制而导致其泛化性能最优，测试集决定系数R^2=0.959 6，平均绝对百分比误差为7.58%．真实工业废气验证显示：SVR模型预测误差稳定收敛于20%以内，可实现废气臭气浓度的客观、快速评估．

关键词 功能生物质热解；废气；气味活性物质；SPME-GC-MS/GC-O；支持向量回归；臭气浓度预测
中图分类号 X1 **文献标志码** A **文章编号** 1671-4512(2026)10-0167-06

Identification of active odors and intensity prediction model for functional biomass pyrolysis

XIANG Dening[1] *LIN Wei*[1] *YAN Youke*[2] *HOU Zhongping*[1] *YE Kai*[1] *LI Ran*[1] *ZHANG Yanrong*[2]
(1．Wuhan Cigarette Factory，China Tobacco Hubei Industry Co. Ltd.，Wuhan 430040，China；
2．School of Environmental Science and Engineering，Huazhong University of Science and Technology，Wuhan 430074，China)

Abstract To address the problems of high uncertainty in the manual olfactometry measurement of odor concentration in complex industrial waste gas and the difficulty in accurately quantifying multi-component non-linear perceptual interactions，an odor concentration prediction method based on feature dimensionality reduction and machine learning was proposed. For the typical tobacco pyrolysis waste gas，the solid-phase microextraction-gas chromatography-mass spectrometry/gas chromatography-olfactometry (SPME-GC-MS/GC-O) combined technology and the odor activity value (OAV) were applied for analysis，and the odor was dimensionally reduced and extracted into four core characteristic substances，namely ethanol，acetic acid，menthone，and phenylacetaldehyde，based on the sensory masking effect. A full-factorial gas blending-olfactometry dataset (256 groups) was constructed according to the emission ranges of actual working conditions，and six machine learning models were systematically compared to reconstruct the non-linear mapping between characteristic substance concentrations and overall odor intensity. Results show that the support vector regression (SVR) model exhibits the optimal generalization performance (test set coefficient of determination R^2=0.959 6，mean absolute percentage error (MAPE) is 7.58%) because its decision surface conforms to the olfactory perception mechanism. The verification of real industrial waste gas shows that the prediction error of the SVR model stably converges to within 20%，and the objective and rapid evaluation of the waste gas odor concentration can be effectively realized.

Key words functional biomass pyrolysis；waste gas；odor-active compounds；SPME-GC-MS/GC-O；support vector regression；odor concentration prediction

收稿日期 2026-01-12.
作者简介 向德宁(1984—)，男，工程师；张延荣(通信作者)，教授，E-mail：yanrong_zhang@hust.edu.cn.
基金项目 国家重点研发计划资助项目 (2024YFE0110800).

植物或功能生物质(如烟草)热解产生的废气成分复杂，主要包括醛类、酮类、酸类、酚类及萜烯类等挥发性与半挥发性有机物[1]，所含微量挥发性有机物(VOCs)嗅觉察觉阈值极低，是工业异味管控难点[2]．当前异味监管(如国家标准GB 14554—1993)以臭气浓度为核心指标且高度依赖人工嗅辨法；然而该方法受嗅觉疲劳与个体差异限制，难以准确表征烟草等热解废气整体感知效应[3]，在严格受控下的实验室中再现性误差仍高达30%～40%[4]．此外，其高昂的检测成本与离线滞后性难以捕捉瞬态排放峰值，严重制约了异味的实时精细化监管．

为突破感官评价的生理局限，亟须构建“化学指纹-感官响应”客观评估范式．目前，GC-MS/GC-O结合气味活度值(OAV)已广泛用于石化、农药污染等领域，可有效识别关键气味活性物质[5]．然而，在真实基质中，多组分气体在中枢神经层面易产生掩蔽、协同或拮抗等非线性感知交互[6]．对数十种痕量VOCs进行全谱监测不仅推高硬件成本且易引入数据噪音，故精准提取主导气味强度的核心特征物质成为实现原位监测的关键前提．

近年来机器学习在臭气强度预测中展现出显著优势[7]．支持向量回归(SVR)、随机森林(RF)、神经网络等模型能有效处理高维、非线性、共线性数据[8]，已在垃圾渗滤液、养殖场等场景中实现高精度(R^2>0.8)的臭气浓度预测[9]，但针对功能生物质热解废气中关键气味物质识别与强度定量仍缺乏系统研究．本研究以典型烟草热解废气为研究对象，综合运用OAV、香气特征影响值(ACI)与GC-O技术，对高度复杂的挥发性体系进行物质特征降维与核心组分提取，系统构建并横向比选了六种机器学习回归模型(BP，CNN，ELM，RBF，RF，SVR)在低维、小样本任务下的泛化能力，以建立关键特征物质浓度与整体臭气浓度间的非线性映射关系，旨在为复杂工业废气臭气浓度的原位连续感知与精细化管控提供理论与技术支撑．

1　材料与方法

1.1　材料、试剂和仪器

废气样品取自某卷烟厂气味处理间废气排放口点位，采集3个标准气袋(3L)样品，于24 h内完成相关测试工作．实验材料与试剂：Tedlar采气袋、聚酯无臭嗅辨袋；特氟龙管、无味硅胶管；臭气进样器；C7～C30正构烷烃混标；农残级甲醇、甲苯-D8标准品；乙醇、乙酸、苯乙醛及薄荷酮标准气体．

实验仪器：HP-5001型真空气体采样箱、采样枪套件；采气泵、空压机；五路高精气体流量计配气仪；无臭空气制备器；TRACE 1300-ISQ气相色谱-嗅闻-质谱联用仪(美国Thermos公司)；ODP-3型嗅觉检测口(德国Gestel公司)；SPME纤维萃取头(灰色，50/30 μm DVB/CAR/PDMS，美国Supelco公司)；PAL RSI三位一体自动进样器(瑞士CTC分析仪器公司)．

1.2　实验方法

1.2.1　废气采样和SPME-GC-MS检测分析条件

参照国家标准HJ 732—2014采集废气排放口废气．采样前对Tedlar气袋进行三次老化．正式采样时，使用预热至50 ℃的采样枪从排气管道中采集废气，装入已老化的气袋，共采集3袋．样品采集后立即置于避光保温容器中，并于24 h内完成分析．

采用固相微萃取技术浓缩预处理废气样品．气相色谱(GC)条件：采用DB-5 MS型色谱柱(30 m×0.25 mm×0.25 μm)；高纯氦气(纯度不小于99.999%)，流速为1.6 mL/min．进样模式为不分流．升温程序：初始温度设为40 ℃并保持3 min，随后以5 ℃/min的速率升温至90 ℃并保持2 min，最后以5 ℃/min的速率升温至250 ℃并保持2 min．

质谱(MS)条件包括：采用70 eV的电子轰击源(EI)，离子源温度为250 ℃；在50～650原子质量单位范围内进行SCAN全扫描．通过正构烷烃的保留时间，计算各物质保留指数(retention index，RI)，对比数据库中DB-5色谱柱的各物质理论RI进行准确定性．

1.2.2　GC-O嗅闻

GC分离后的组分经1∶1分流分别进入质谱和嗅觉检测端．嗅闻传输管线为FS Tubing(熔融石英毛细管)，嗅觉检测口温度为200 ℃，传输线温度为250 ℃；高纯氦气(流速为1.6 mL/min)，辅以45 mL/min湿润空气进行混合，最终到达嗅辨员的气流温度降至约25 ℃．

由3名经培训的嗅辨员进行嗅闻，每人单次不超过40 min，间隔不少于30 min．嗅辨员实时记录气味特征及强度(1～5级，依次为极弱～极强)，嗅辨结果经方差分析(ANOVA)确认无显著系统性评分差异．最终结果以至少两人在同一时段对气味描述和强度判定完全一致为准．

1.2.3　废气感官评价与配气嗅辨方法

依据国家标准GB/T 29605—2013和ISO 8586：

2023，组建12人感官评价小组开展定量描述性分析(QDA)．成员经烟草特征气味标准品培训．感官评价在符合ISO 8589标准的环境中进行．按1.2.1方法采集废气样品于3 L氟膜气袋中，即时供评价员嗅闻．经小组讨论，确定8项气味属性，即木质味、醇味、泥土腥味、苦味、甜味、油脂味、酸味和青杂味，采用0～10分制评分．最终结果取平均值．

基于4种特征气味物质的定量结果，每种设4个浓度梯度，共设计256组正交配气方案．通过脚本控制五路高精度流量计动态配气，每种配比制备1 L样品用于嗅辨实验．参照国家标准HJ 1262—2022测定气味强度．

2　结果与讨论

2.1　废气样品的SPME-GC-MS/GC-O检测及气味特征降维分析

采用SPME-GC-MS/GC-O联用技术对废气中关键气味活性物质进行全谱解析．设A为基于嗅觉察觉阈值的无量纲的气味活度值(odor activity value，OAV)，有$A=w_1/w_2$，其中：w_1为实测浓度；w_2为嗅觉察觉阈值，嗅觉察觉阈值数据主要来源于文献[10]．

GC-MS共检出63种化合物，基于$A>1$的标准，共筛选识别出27种气味活性成分，主要为醛类(9种)、酯类(5种)和醇类(4种)．其中，苯乙醛(蜜香，OAV为3 137.16)、薄荷酮(薄荷香，OAV为1 696.19)占绝对浓度优势，如表1所示，表中：B为香气特征影响值，$B=(A/A_t)\times100\%$，其中A_t为所有物质的气味活度值总和．

GC-O甄别出另外25种活性组分，并且乙酸、乙醇、糠醛、苯乙醛、壬醛及薄荷酮等物质的嗅辨强度较高(见表2)．值得注意的是：苯乙醛在动态嗅闻中呈现出油脂气息，可能源于与微量脂肪醛的共流出及感官融合．图1为废气样品的气味感官评价雷达图，图中的8，6，4，2，0为不同气味的感官强度数据．废气样品的感官评价进一步印证，该排放口废气的整体感知轮廓主要由薄荷清凉味、油脂气味及醇味构成．

表1　废气样品中部分气味活度值大于1的关键化合物

化合物	分子式	A	B/%
乙醇	C_2H_6O	1.41	0.02
乙酸	$C_2H_4O_2$	19.93	0.31
苯乙醛	C_8H_8O	3 137.16	48.82
薄荷酮	$C_{10}H_{18}O$	1 696.19	26.39

表2　废气样品中部分关键物质的GC-O检测结果

化合物	气味描述	气味强度	保留指数
乙酸	刺激性酸味	5.0	600
乙醇	酒味、发酵味	4.3	668
糠醛	糊味	4.7	829
苯乙醛	油脂味、甜香、果香	5.0	1 057
壬醛	甜香、花香	4.3	1 104
薄荷酮	薄荷香味	5.0	1 142

糠醛等部分物质呈现出低A(2.13)与高GC-O嗅辨强度(4.7)的非线性感知偏差，可能源于气味分子的非线性浓度-响应机制及其动态释放特性．糠醛等含氧杂环化合物的嗅觉“差异阈值”较低，浓度-响应曲线陡峭，因此即使物理浓度略高于察觉阈值(A略大于1)，也能在动态嗅闻中激发强烈的感官响应[11]．这表明，单一静态理论指标难以全面反映复杂基质中的真实感知贡献．

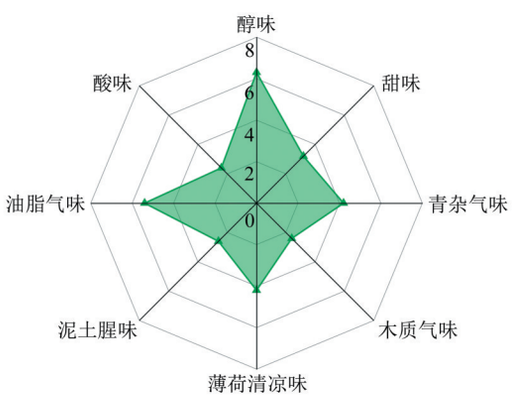


图1　废气样品的气味感官评价雷达图

综合OAV，GC-O分析及最终排放节点的实际浓度分布，本研究筛选出四种感官响应最显著的代表性物质作为核心特征变量：醇类主导物乙醇(GC-O实验中由人工嗅辨给出的气味强度评分为4.3)，酸类主导物乙酸(GC-O实验中由人工嗅辨给出的气味强度评分为5.0)，以及嗅辨强度趋于饱和的苯乙醛与薄荷酮．依据感官掩蔽效应，当此类高强度气味分子共存时，会竞争抑制并掩蔽木质、青杂等次要弱气味的感知[12]．因此，选取这四项物质能有效滤除冗余干扰，准确表征该工况下复杂废气的感官轮廓与整体臭气浓度水平．

2.2　配气-嗅辨实验与感官交互特性分析

基于上述四种核心特征物质，设计了4因素4水平的全因子配气-嗅辨实验．配气体积分数梯度锚定某卷烟厂制叶、制丝、加香等7种典型工况的

实际排放区间(乙醇为0.010 25%～0.038 32%，乙酸为0.002 58%～0.009 03%，薄荷酮为0.000 25%～0.000 90%；苯乙醛为0.000 78%～0.001 88%)，共构建256组废气样本(见表3)，用于标准化嗅辨与模型训练.

表3　全因子配气实验中核心特征物质的体积分数　%

乙醇	乙酸	薄荷酮	苯乙醛
0.04	0.010 0	0.001 00	0.002 0
0.03	0.007 5	0.000 75	0.001 5
0.02	0.005 0	0.000 50	0.001 0
0.01	0.002 5	0.000 25	0.000 5

p 值(probability value)为在原假设为真的前提下，观察到当前样本数据(或比当前数据更极端)情况的概率．图2为配气样品人工嗅辨获得的综合气味强度分布直方图，样本量n=256，由图可见：配气样本的整体臭气浓度集中于200～1600区间(均值为912)，近似服从正态分布(Shapiro-Wilk检验p > 0.05)．该分布区间与工厂长期历史监测趋势高度符合，从后验统计学角度证实了降维特征数据集在实际工业场景中的代表性与可靠性．

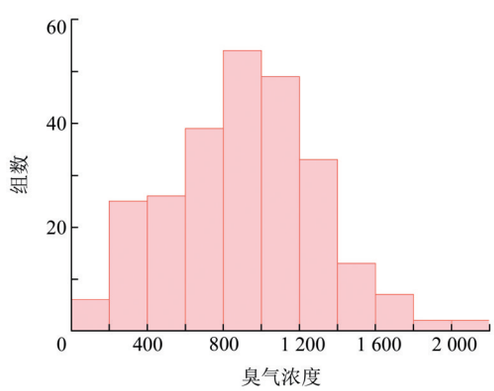


图2　配气样品人工嗅辨获得的综合气味强度分布直方图

图3为四种特征物质体积分数与臭气浓度分布散点图，进一步揭示了复杂体系中的非线性感知机制．当苯乙醛体积分数从0.000 5%升至0.002%时，臭气浓度均值由722单调递增至1 121，凸显了其对整体气味强度的主导作用．乙酸与薄荷酮在最高体积分数梯度(分别为0.01%与0.001%)下，触发了臭气浓度的非线性跃升，均值分别达到1 067和1 027；而乙醇体积分数与臭气浓度间缺乏明确的线性映射，在0.02%与0.03%区间甚至出现感官强度的反常下降．这反映了感官交互机制，即特定阈值下的乙醇与其他活性分子发生竞争性抵消(感官拮抗)[13]，导致整体气味强度不升反降．

多组分体系中存在显著的感官融合与调制效应．例如苯乙醛的蜜香在乙酸和乙醇的协同下，被

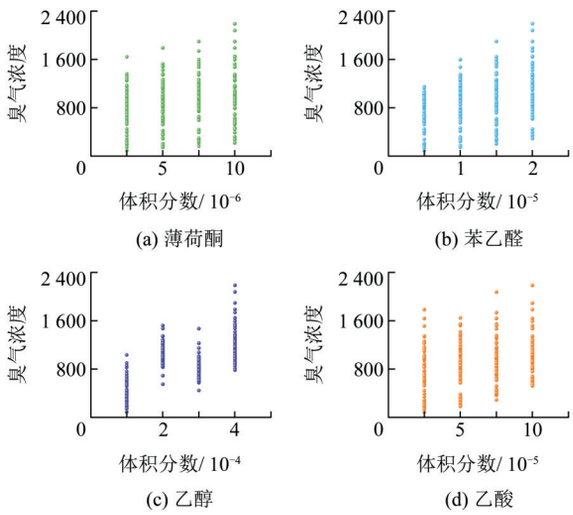


图3　四种特征物质体积分数与臭气浓度分布散点图

重构为浓重的油脂气味．此类感知偏移与前述的拮抗波动共同表明：气味重组具有高度非线性的交互本质，传统线性拟合方法难以准确刻画[14]．因此，本研究引入非线性机器学习算法以实现臭气浓度的有效预测．未来也可引入响应曲面法(RSM)等优化实验设计策略，提升模型的生态效度．

2.3　机器学习预测模型性能对比与分析

由于传统评估指标(如AIC/BIC)不适用于复杂的半参数模型(如随机森林、深度网络)，因此本研究采用训练集与测试集的性能差异(R^2与MAPE(平均绝对百分比误差)差值)作为衡量模型过拟合风险的核心基准．通过这一标准，系统比较了六种机器学习算法[15]，以筛选出在低维小样本条件下泛化能力最优的模型．六种机器学习算法分别为核方法(SVR，RBF)、集成学习(RF)与神经网络(BP，CNN，ELM))

图4为六种机器学习预测模型的性能对比，由图可见：以CNN和BP为代表的深层网络模型在训练集上实现了极高的拟合优度(训练集R^2分别达到0.984 4与0.971 8，MAPE均低于7%)，但在测试集上性能显著衰减(R^2分别降至0.901 9与0.901 5，MAPE均跃升至11%以上)，暴露出典型的高方差与过拟合缺陷．单隐层网络ELM受限于随机权重初始化，在低维空间内难以建立鲁棒映射(测试集R^2降至0.838 4，MAPE高达19.84%)；RBF网络虽表现出泛化稳定性，但整体拟合精度严重受限(R^2均低于0.73，MAPE接近25%)．相比之下，支持向量回归(SVR)模型在训练集(R^2=0.968 0，MAPE为6.53%)与测试集(R^2=0.959 6，MAPE为7.58%)之间实现了最优的泛化平衡．

SVR的显著优势与随机森林(RF，测试集R^2=

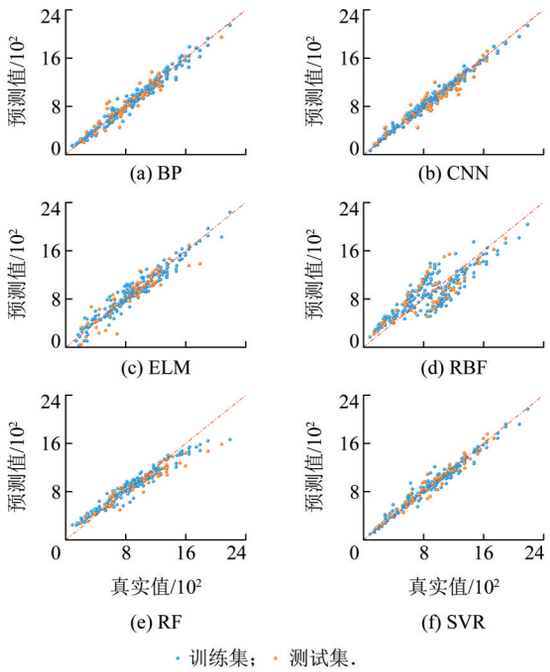


图4　六种机器学习预测模型的性能对比(臭气浓度)

0.864 8，MAPE 为 11.76%)的性能瓶颈，反映了算法底层架构与嗅觉心理物理学规律间的契合度．根据韦伯-费希纳定律，人类对气味强度的感知随物质浓度变化呈现连续且平滑的非线性响应[16]．SVR 凭借径向基(RBF)核函数，能够在高维空间中构建出连续平滑的非线性决策曲面，较好地拟合这一感知机制；且其结构风险最小化原则使模型在小样本(n=256)条件下具有强抗噪鲁棒性[17]．相反，RF 基于决策树对特征空间进行递归划分，其预测函数在数学上表现为分段常数形式(阶梯函数)．在低维、小样本约束下，RF 无法以足够细的粒度逼近高度平滑的感官响应曲面，易在决策边界处产生离散突变，从而限制了预测精度[18]．

综上所述，在特征物质驱动的臭气浓度预测中，SVR 模型不仅在数学逻辑上适配嗅觉感知机制，也在实证中展现出卓越的预测效能，成为解决低维、小样本臭气预测的最优范式．此外，基于卷烟厂排口臭气浓度长期稳定在 100～2 000 无量纲区间，本研究针对性地构建了涵盖该区间的高分辨力训练集，而非国标中宽泛冗余的测试跨度(30～10 000)．在此高生态效度数据基础上训练的 SVR 模型，其预测精度与泛化可靠性高度契合工业现场精细化、高频次在线监测的实际需求．

2.4　真实工况验证

为验证 SVR 预测模型在真实工业环境中的稳定与可靠性，对某卷烟厂经两级处理的实际排放废气进行测试．以精确定量的四种核心特征物质(乙醇、乙酸、薄荷酮、苯乙醛)体积分数作为输入变量，将模型预测的整体臭气浓度与第三方专业人工嗅辨结果进行基准比对．结果表明：第一批真实样本(实测乙醇、乙酸、薄荷酮、苯乙醛体积分数依次为 0.010 133%，0.003 218%，0.000 367%，0.000 525%)的模型预测臭气浓度为 146，人工嗅辨值为 131，相对误差为 11.45%；第二批样本(实测乙醇、乙酸、薄荷酮、苯乙醛体积分数依次为 0.012 576%，0.002 950%，0.000 354%，0.000 677%)的预测值为 412，人工嗅辨值为 354，相对误差为 16.38%．

在不同真实工况下，SVR 模型对未知样本的预测误差均收敛于 20% 以内．参照国际动态嗅辨标准(EN 13725：2022)，即便在严格受控条件下，专业人工嗅辨小组的批间重复误差通常也高达 20%，实验室中再现性误差甚至达 30%～40%[4]．由此可见：本研究构建的 SVR 模型在预测精度上已达到、甚至优于人工嗅辨的生理极限．这一数据驱动方法有效规避了高强度异味环境中常见的嗅觉疲劳与主观适应等干扰，为工业臭气的长期一致性监测提供可靠技术保障．

3　结论

a．通过 SPME-GC-MS/GC-O 联用分析，结合 OAV 与感官掩蔽效应，将 63 种复杂的挥发性组分降维至四项核心气味特征变量(乙醇、乙酸、薄荷酮、苯乙醛)．特征降维策略在大幅剔除微量冗余噪声的同时，最大限度地保留了主导废气宏观感官变化的核心信息．

b．SVR 模型在低维(4 维)、小样本(n=256)条件下展现出卓越的抗噪鲁棒性与泛化能力(测试集 R^2=0.959 6，MAPE 为 7.58%)，显著优于深层神经网络与树基模型．

c．在实际工业废气验证中，SVR 模型预测值的相对误差均稳定收敛于 20% 以内，验证了本文模型作为客观、高频监测替代方案的可靠性．

本研究提出的特征降维与非线性预测策略，为工业臭气的智能感知与高频监管提供了可行的工程转化路径，有望降低现场对大型色谱-质谱联用设备的依赖．未来，结合金属氧化物半导体(MOS)微型阵列传感器，并内嵌轻量化 SVR 边缘计算模块，可构建针对靶向异味分子的智能电子鼻系统．该系统通过传感硬件与机器学习算法的协同，可有效提取鲁棒气味模式，实现排气口臭气浓度的原位、定量和秒级监测，从而为将异味污染管控从离线滞后

评估向实时精准预警转变提供技术支撑.

参 考 文 献

[1] 林孟琰，钟蔚，吴美宏．卷烟工厂废气治理路径探析[J]．厦门科技，2022，28(3)：60-62．

[2] 闫凤越，李伟芳，魏静东，等．典型异味源的感官特性及特征污染物筛选[J]．环境科学研究，2018，31(9)：1645-1650．

[3] 翟增秀，王亘，李伟芳，等．异味污染关键致臭物质精准识别研究进展[J]．科技导报，2022，40(4)：35-41．

[4] ANTONSSON E，CORDES J，STOFFELS B，et al．Odor emission measurements：the role of n-butanol as a reference material and origins of large inter-laboratory variability[J]．Atmospheric Environment，2024，327：120509．

[5] 孟洁，王静，王亘，等．基于异味走航监测技术的指纹谱构建方法——以某石化企业为例[J]．北京工业大学学报，2023，49(12)：1282-1294．

[6] 崔莹，王志杰，成兆文，等．填埋场垃圾恶臭异味气体特征及控制研究进展[J]．能源环境保护，2024，38(6)：59-67．

[7] 周珏，赵灿明，黄超，等．超市异味VOCs成分分析及健康风险评估[J]．环境科学学报，2024，44(2)：343-354．

[8] ZHU J J，YANG M Q，REN Z J．Machine learning in environmental research：common pitfalls and best practices[J]．Environmental Science & Technology，2023，57(46)：17671-17689．

[9] 贺子君，黄川，江远琰．基于臭气测定值的渗滤液恶臭浓度机器学习预判模型[J]．环境科学学报，2024，44(4)：440-448．

[10] 里奥·范海默特．化合物嗅觉阈值汇编[M]．北京：科学出版社，2018．

[11] 倪兴婷，孙细珍，刘怀臣，等．浓香型白酒异嗅味-糠味物质解析[J]．中国酿造，2024，43(7)：41-49．

[12] 陈臣，袁佳杰，杨仁琴，等．食品风味协同作用研究进展[J]．食品安全质量检测学报，2020，11(3)：663-668．

[13] YAN L C，WU C D，LIU J M．Visual analysis of odor interaction based on support vector regression method[J]．Sensors，2020，20(6)：1707．

[14] ZARRA T，GALANG M G K，BELGIORNO V，et al．Environmental odour quantification by IOMS：parametric vs．non-parametric prediction techniques[J]．Chemosensors，2021，9(7)：183．

[15] CAO T T，ZHENG Y H，SHANG B，et al．Fast prediction of odor concentration along pig manure chain based on machine learning：monitoring 20 instead of over 100 odorous substances[J]．Computers and Electronics in Agriculture，2025，233：110146．

[16] 吴传东，刘杰民，刘实华，等．气味污染评价技术及典型垃圾处理工艺污染特征研究进展[J]．工程科学学报，2017，39(11)：1607-1616．

[17] 何西旺，杨亮亮，冉仁杰，等．基于多评价标准的代理模型综合比较研究[J]．机械工程学报，2022，58(16)：403-419．

[18] RAYMAEKERS J，ROUSSEEUW P J，VERDONCK T，et al．Fast linear model trees by PILOT[J]．Machine Learning，2024，113(9)：6561-6610．