

化学计量学方法在果蔬领域的应用

高攀, 柴春祥*

(天津商业大学生物技术与食品科学学院, 天津市食品生物技术重点实验室, 天津 300134)

摘要: 果蔬富含维生素、矿物质和膳食纤维等营养物质, 是人们补充营养必不可少的食品之一。但果蔬在加工储存过程中存在农药残留、营养成分损失、品质下降等一系列问题, 如何保证果蔬的食用安全和食用品质一直是果蔬研究领域的焦点。测定果蔬的营养理化指标是评价果蔬品质的有效手段, 然而过多的指标通常会产生大量繁杂冗余的数据, 需要专门的工具对数据进行分析处理。化学计量学方法是进行数据处理的有效手段, 近年来在果蔬领域已得到广泛应用。本文综述了主成分分析、偏最小二乘和人工神经网络等化学计量学方法在果蔬品质差异评价、果蔬农药残留检测、果蔬理化分析、果蔬保鲜效果优劣及果蔬生产工艺优化等方面的应用, 讨论了各种方法的优缺点, 为化学计量学方法在果蔬领域中的应用提供参考。

关键词: 果蔬; 主成分分析; 偏最小二乘; 人工神经网络

Application of chemometrics methods in fruit and vegetable field

GAO Pan, CHAI Chun-Xiang*

(Tianjin Key Laboratory of Food Biotechnology, College of Biotechnology and Food Science,
Tianjin University of Commerce, Tianjin 300134, China)

ABSTRACT: Fruits and vegetables are one of the essential foods for people to enhance nutrition, which are rich in nutrients such as vitamins, minerals, and dietary fiber. However, there were a series of safety issues in the processing and storage of fruits and vegetables, such as pesticide residue, loss of nutritional components, quality decline. How to ensure the food safety and quality of fruits and vegetables had always been the focus of research in the field of fruits and vegetables. The nutritional and physicochemical indicators of fruits and vegetables were means to evaluate their quality. But a amount of complex and redundant data was generated through too many indicators, which required specialized tools to analyze and process. Chemometrics is an effective method for data processing. In recent years, it has been used in the field of fruits and vegetables. This paper summarized the applications of principal component analysis, partial least squares, and artificial neural networks in the evaluation of fruit and vegetable quality differences, pesticide residue detection, physicochemical analysis, preservation effect, and production process optimization, and discussed the advantages and disadvantages of various methods, which provides references for the application of chemometrics methods in the field of fruits and vegetables.

KEY WORDS: fruits and vegetables; principal component analysis; partial least squares; artificial neural network

*通信作者: 柴春祥, 博士, 教授, 主要研究方向为食品加工与贮藏。E-mail: ccxiang@tjcu.edu.cn

*Corresponding author: CHAI Chun-Xiang, Ph.D, Professor, School of Biotechnology and Food Science & Tianjin University of Commerce, 409 Guangrong Road, Beichen District, Tianjin 300134, China. E-mail: ccxiang@tjcu.edu.cn

0 引言

果蔬营养成分丰富,是人体必需的维生素、膳食纤维、矿物质及碳水化合物等的重要来源之一。维生素能够调节人体的代谢活动,缺少维生素会引起一些疾病,如缺少维生素 D (vitamin D, VD)易患佝偻病和骨软化病等;膳食纤维能够抑制胆固醇的吸收,预防高血压和高血脂症,在治疗和预防糖尿病方面有特殊功效^[1-2]。总之,食用果蔬可以减少一些慢性疾病的发生^[3]。而且,果蔬营养价值高,具有宜人的风味,深受广大消费者喜爱。

随着我国果蔬产业的迅速发展和人民生活水平的不断提高,人们对果蔬的消费观念和 demand 发生了转变,从简单的数量满足,发展到对果实外观、风味、营养及食用安全的追求,以至果蔬安全成为大家关注的重点。由于农药的使用导致果蔬上存在农药残留,采收、运输和处理过程中果蔬组织结构的破坏、营养物质损失及果蔬品质的下降,给果蔬带来了安全隐患。针对果蔬安全问题,需要一些安全检测方法测定果蔬生理生化指标,但这些指标测量时,产生大量试验数据,处理过程烦琐复杂。然而,化学计量学方法是分析大量数据常用的工具或手段。

化学计量学是 20 世纪 70~80 年代兴起的一门交叉学科。它是化学与统计学、数学、计算机科学交叉所产生的化学学科分支^[4-6]。随着化学分析仪器的的发展,可以获得到所测样品的大量数据,但样品的数据分析及如何从中提取有效的信息是一大难题^[7]。然而,化学计量学方法可以设计优化实验,挖掘与处理、分辨与解析试验数据,从复杂样品中获取隐含的信息,成为解决这一难题的有效手段。化学计量学方法包括主成分分析(principal component analysis, PCA)、聚类分析(cluster analysis, CA)等的定性判别,偏最小二乘法(partial least squares, PLS)、人工神经网络(artificial neural network, ANN)及支持向量机(support vector machine, SVM)等的定量预测^[8]。这些统计分析方法在果蔬品质综合评价、产地溯源及质量评估等方面的研究颇多,有研究者利用单因素指标对果蔬的贮藏时间进行判别和划分,综合果蔬的颜色、果形、硬度等指标进行 PCA 或 CA,对预测果蔬的品质和安全贮藏期尤为重要^[9-10];还有研究者通过对不同产地来源的果蔬特征性指标进行分析表征,结合化学计量学方法,建立能够区分果蔬产地来源的预测模型,进而实现果蔬的产地溯源^[11-13]。总之,化学计量学方法能简化果蔬样本复杂的数据结构,揭示果蔬所隐藏的信息,为果蔬评价标准体系的建立和安全提供科学的指导依据。

本文主要对 PCA、PLS 及 ANN 在果蔬品质差异评价、果蔬农药残留检出、果蔬成分含量分析等方面的应用进行总结,讨论了各种方法的优缺点,阐述了化学计量学方法应用在果蔬领域存在的问题,并对未来的发展进行展望,

以期对果蔬领域的实际应用提供参考。

1 主成分分析

PCA 是将多指标简化为少量综合指标的一种统计分析方法,从而简单地反映不同样品间的差异^[14]。其优点是可以利用样品信息构建模型,用少数样品变量尽可能多地反映原来变量的信息,而新变量与原变量之间满足线性组合关系,处理过程方便又不影响结果的准确性^[15]。针对果蔬测定数据量大,冗余信息多的特点,使用 PCA 降维分析可以减少无效数据的堆积,尽可能的提取主要特征信息^[16]。

1.1 果蔬品质评价中的应用

果蔬品质评价的指标包括可溶性糖、可溶性固形物(soluble solids content, SSC)及维生素 C (vitamin C, VC)含量等营养品质指标和果形、颜色、单果重等外观指标。这些指标检测分析时,产生大量数据,而 PCA 是处理大量数据的方法之一。PCA 是一种简化评价体系的方法,这种方法起到数据降维的作用,可以全面客观地评价果实的综合品质。

公丽艳等^[17]测定了 30 个苹果品种果皮颜色、固酸比和糖酸比等 17 项理化指标,利用 PCA 对这些理化指标降维处理,提取 6 个主成分,累积方差贡献率为 83.56%,这 6 个主成分在分析不同苹果品种品质差异的过程中占主要作用,反映了苹果原始数据的信息,通过绘制 PCA 得分图,发现 PC₁、PC₅得分图中,固酸比值、果皮颜色及口感不同的苹果分别在第二、四区间,直观地看到苹果分子不同区间,不同品质的苹果被区分出来。陈妹娟等^[18]测定了 11 个榴莲品种的 23 个指标,通过 PCA 提取了 5 个主成分,选出了品质最佳的榴莲品种。由此可见,PCA 可为分析判别果蔬品质评价提供客观支撑,表现出了较好的分类效果。靳荣线等^[19]测定了 14 个等级香菇的水分、粗多糖及总灰分含量等 7 项指标,这些营养指标分析产生的数据量大,利用 PCA 简化评价指标,提取 2 个主成分,用总灰分和粗多糖含量这 2 个具有代表性的指标对香菇营养品质分析,其累积方差贡献率为 67.11%,反映了香菇原始数据的信息,结果表明,1、2、3 级香菇总灰分、粗多糖、氨基酸含量较高、含水量低。值得注意的是,在果蔬品质评价时,果蔬的多项指标数据是通过投影到低维空间的过程,有助于区分样本间差异信息的变量特征会丢失,导致类内的样本判别出现错误,从而影响分类准确率。

1.2 果蔬农药残留检测的应用

农药在果蔬种植中起到防治病虫害的作用,但由于农药不能完全被果蔬吸收,仍有部分农药(如毒死蜱、啉霉胺等)残留在果实表面,危害人体健康。目前,常见的果蔬农药残留检测方法有很多,其中近红外光谱技术等果蔬农药残留方面应用较广泛。但此方法在分析果蔬农药残留

检测过程中产生大量的数据, 数据处理过程烦琐, PCA 是解决这一问题的方法之一。近年来, PCA 发展迅速, 能对有效的信息数据进行解析, 解决农药残留检测过程中的干扰, 能为快速检测分析提供更方便有效的处理手段。

陈淑一等^[20]用近红外光谱仪对有无喷洒毒死蜱的苹果和梨进行扫描, 收集表面涂抹毒死蜱农药的苹果和梨光谱信息, 这些光谱中包含的样本信息量多, 给光谱数据的分析带来诸多困难, 光谱经均值中心化等预处理, 通过 PCA 降维, 提取两个主成分, 累计方差贡献率为 85%, 经 PCA 模型的主成分载荷图发现, 这两个主成分在 1350~1500 nm 波段处有明显的特征峰, 可以清晰地看到它们被分在不同区域, 将苹果、梨这两类不同的水果类型区分出来, 但不能将表面是否涂有毒死蜱的苹果或梨区分开来。张令标等^[21]应用可见/近红外高光谱成像技术扫描涂有苯胺基嘧啶类杀菌剂的番茄, 这些杀菌剂的稀释浓度梯度为 1:20、1:100、1:500, 收集番茄表面苯胺基嘧啶类杀菌剂的光谱信息和图像信息。由于这些光谱信息和图像信息含有的数据量大, 且数据分析的过程复杂, 建立 PCA 识别算法对高光谱原始数据进行降维, 提取 4 个主成分图像, 累计贡献率达 95%, 结果发现, 番茄表面嘧霉胺农药的浓度为 1:20、1:100 的识别率均为 100%。

在苹果、梨及番茄农药残留检测时, 获得的光谱中含有大量信息, 光谱数据分析处理过程烦琐, 而 PCA 是最为广泛的数据降维方式。但 PCA 这种数据降维方式通常针对一种果蔬农药残留的数据进行处理, 若同时涉及到苹果和梨两种水果类型的农药残留时, PCA 数据降维方法不再准确, 只能区分出不同的水果品种, 不能将水果表面是否存在农药残留的信息展现出来。

1.3 果蔬保鲜效果的应用

果蔬种类多, 富含多种营养成分, 但大多数果蔬在采摘后呼吸代谢旺盛, 水分易流失, 降低了果蔬的营养和商业价值, 需要适宜的保鲜方式延缓品质劣变过程。果蔬保鲜结果的好坏主要依据食品安全国家标准规定的方法, 其中测定的指标包含感官指标和营养品质指标, 这些指标测定时, 产生的测定结果数据量大, 不易对果蔬保鲜效果进行评价。利用 PCA 这一数据处理工具对果蔬的多品质指标进行数据降维, 减少果蔬分析过程中的数据量, 主成分得分判定果蔬的保鲜效果。

安容慧等^[22]探究食品袋、 ϵ -聚赖氨酸 + P0 薄膜包装等 4 种保鲜方式对上海青品质的影响, 测定叶绿素、VC 和可溶性糖含量等 10 个指标, 通过 PCA 对这些保鲜过程中的营养指标数据进行降维处理, 提取 2 个主成分, 累积贡献率达 90.001%, 结果表明 ϵ -聚赖氨酸 + P0 薄膜包装的上海青综合品质最佳, 保鲜效果提升 50%。同样, 徐锦洋等^[23]采用 PCA 对 4 种自发气调袋贮藏的方竹鲜笋保鲜效果进行分析, 发现 PE20 自发气调袋在贮藏期间更能保持方竹鲜

笋的品质。可见利用 PCA 既实现对蔬菜指标中数据的降维, 又能消除大量数据中的冗余信息, 分析判别保鲜过程中综合品质最优的蔬菜。史江莉等^[24]探究‘突尼斯软籽’石榴气调贮藏的最优气体组合, 测定果皮颜色、呼吸速率、籽粒含水量及果皮花色苷等 21 个指标, 这 21 个理化指标分析时产生的数据量大, 分析过程复杂, 需要数据降维工具进行处理。通过 PCA 降维处理后, 提取 3 个主成分, 累计贡献率达 87.67%, 其中果皮花色苷、呼吸速率、籽粒含水量和 L^* 在评判保鲜效果时占主导作用, 能够反映样本所有指标的信息, 结果发现‘突尼斯软籽’石榴综合得分最高的气体成分比例是 7% O_2 + 4% CO_2 。

在果蔬领域研究中, 常对苹果、石榴及香菇等研究对象尽可能测定更多的指标, 收集更多信息, 以达到对它们的全面综合认识。然而, 过多的指标数据无法在分析判别过程中发挥作用, 反而大量的数据会造成解决问题的障碍, PCA 这种数据降维方式引入到果蔬品质评价、果蔬农药残留检测及果蔬保鲜效果的应用中, 可以从众多理化指标中解析出主要的信息, 减少数据处理的冗余, 简化评价过程。但 PCA 是将多维的指标数据经过投影, 转化为少数的几个综合性指标, 反映原始变量的大部分信息, 并不能代表原始变量所有的信息。

2 偏最小二乘法

PLS 是一种具有降维、进行指标重要性分析及实现判别的多元数据统计分析方法^[25]。PLS 与 PCA 都是运用降维的概念, 将果蔬大量的生理生化指标数据转化为少数具有代表性的指标进行分析。但与 PCA 相比, PLS 能够在果蔬指标存在多重相关性的条件下回归建模, 并对不同类别果蔬样本进行分离, 而 PCA 在果蔬品质评价指标的筛选方面应用较为广泛, 不适用于区分不同类别的果蔬样本^[26]。

2.1 果蔬品质评价中的应用

为了满足消费者对果蔬品质评价快速无损检测的要求, 光谱技术被广泛应用于果蔬品质评价中。光谱技术可直接获取果蔬内部的信息, 但由于果蔬的成分、组织结构复杂, 获取的果蔬光谱信息含有大量数据, 且数据分析过程复杂, 而 PLS 在数据处理分析方面具有独特优势, 逐渐被应用于果蔬品质评价的数据降维中。

赵娟等^[27]采集 1000~2400 nm 范围内全贮藏期苹果的近红外光谱, 测定 SSC、硬度和失重率, 由于苹果全贮藏期内的光谱数据信息规模大, 建立 PLS 品质得分预测模型, 预测集相关系数(correlation coefficient of prediction set, R_p) 为 0.8962、预测集均方根误差(root mean square error of prediction set, RMSEP) 为 0.0434, 实现苹果出库品质的综合评价。同样, LI 等^[28]研究发现, 采集 500~1010 nm 范围内低温贮藏期李子的可见/近红外光谱信息, 根据果实颜色、SSC、硬度等构建综合评价指标体系, 建立 PLS 模型,

模型的 R^2 、RMSEP 为 0.8212、38.9, 实现了贮藏期李子品质的综合评定。由此可见, PLS 同近红外光谱法结合, 分析苹果、李子的品质是可行的。它可以同时考虑理化值与光谱数据之间的基本关系, 构建 PLS 品质得分预测模型, 降低了品质指标和光谱数据处理过程的数据量, 进而实现果蔬品质的分析判别。吴海清等^[29]采集卫青萝卜的近红外光谱数据, 测定 SSC、水分含量和糠心指数, 这些光谱数据和理化指标分析产生的数据种类多, 数据量大, 通过 PLS 构建光谱数据与品质指标模型, 可简化数据处理过程, 结果表明卫青萝卜 SSC、水分含量 R^2 分别为 0.8236、0.8740, 糠心模型的准确率为 94.44%。可见 PLS 作为强有力的数据降维工具, 构建的 PLS 模型对卫青萝卜水分含量、是否糠心具有较好的预测效果, 而 SSC 的预测效果较差。但需要注意的是, PLS 模型中的光谱数据是全光谱, 过于复杂冗余的数据量会影响模型预测的准确性和稳定性, 在以后的研究中还需进一步优化改善。

2.2 果蔬农药残留检测的应用

由于光谱分析法的成熟, 应用光谱技术对果蔬农药残留含量的检测成为热门, 但仅用光谱分析具有一定的局限性。将 PLS 与光谱分析结合, 对果蔬农药残留定性或定量的检测, 建立稳定可靠的分析检测模型具有重要的意义。与传统的检测方法(如色谱法等)和 PCA 相比, PLS 可以提供一个相对合理和较高预测精度的回归模型。

陈文等^[30]探究西瓜杀螟硫磷的农药残留量, 利用表面增强拉曼光谱技术采集不同浓度杀螟硫磷的拉曼信号, 预处理后结合 PLS、PCA 对光谱原始数据降维, 西瓜中杀螟硫磷农药的最低检出限为 0.1 $\mu\text{g/g}$, 构建 PLS 预测模型的校正模型 R 、校正集均方根误差(root mean square error, RMSE) 为 0.9987、0.182, 验证模型 R 、验证集 RMSE 为 0.9968、0.292。根据 GB 2763—2016《食品安全国家标准 食品中农药最大残留限量》可知瓜果类的最高残留限量为 0.5 mg/kg ^[31], 而西瓜杀螟硫磷农药的最低检出限低于 0.5 mg/kg , 表明该预测模型满足西瓜中杀螟硫磷农药残留检测的要求, 具有较高的预测可靠性。杨平等^[32]运用 PLS 建立了马铃薯中不同 Pb 元素含量的激光诱导击穿光谱(laser-induced breakdown spectroscopy, LIBS)预测模型, 结果显示, 通过 13 点平滑、均值中心化数据处理的 PLS 定量模型能有效地预测马铃薯中 Pb 的含量, 模型的 R 、RMSEP 为 0.9963、11.5。可见 PLS 能预测马铃薯中 Pb 农药残留, 且构建的 PLS 预测模型准确性高。

由于西瓜、马铃薯组织结构复杂, 导致数据预测的误差较大, 一般在结合数学统计方法建模前, 须对西瓜、马铃薯的原始光谱数据进行合适的预处理。目前, PLS 在果蔬农药残留检测的应用中, 需要有足够代表性的样品校正集来应对未知待测样本所有的预期变化。但需要注意的是, 果蔬农药残留的研究报道中, PLS 大多是围绕单一的农药

残留进行预测^[33]。

2.3 果蔬成分含量分析中的应用

果蔬中水分、SSC 含量等理化分析主要依靠传统的实验室化学检测方法, 在检测时需对样本进行一系列预处理, 处理过程比较烦琐, 并且产生大量的数据。而 PLS 在果蔬成分含量分析中是运用降维的思想, 可以分析处理大量繁杂的数据, 从海量数据中找出果蔬样本未知的、可能有用的、隐藏的信息。

GIOVANELLI 等^[34]采用 PLS 建立了苹果中 SSC 含量的定量模型, 模型的校正标准偏差(root mean square error for calibration, RMSEC)和交叉验证均方差(root mean square error of cross validation, RMSECV)均为 0.40 °Brix。这些数据证明了该模型的高预测能力, 其性能优于文献中描述的各种水果的其他类似模型^[35]。杨运来^[36]采用高光谱技术采集鲜切生菜的高光谱数据, 测定水分含量, 引入 PLS 建立水分含量预测模型, 该模型的 R^2 为 0.9653、RMSE 为 0.134, 通过 K-最邻近算法识别结果发现鲜切生菜水分含量实测集预测正确识别率为 100%。同样, 赵茂程等^[37]采集了青梅 550~1000 nm 的高光谱信息, 根据青梅 pH 构建了 PLS 预测模型, 模型预测集的 R 为 0.7925、RMSE 为 0.0706, 实现了青梅酸度的分析。由于收集的苹果漫反射光谱数据、鲜切生菜及青梅高光谱数据信息量大、维数高, 波段之间具有较高的相关性, 大量冗余信息存在于光谱数据中, 不但影响分类效果和分类精度, 而且计算量大大增加。PLS 作为一种降维工具, 能够简化高维的光谱数据、降低数据维度, 减少模型的输入指标, 去除与分析结果不相关的信息。这不仅简化了预测模型, 还提高了其稳定性。但 PLS 很少单独用来建立模型预测果蔬成分含量, 而是与光谱技术(如高光谱技术)结合使用, 它可用于创建能够预测特性(如水分含量)的模型。

3 人工神经网络

ANN 是基于人脑突触神经元模拟开发的一种具有科学性的建模技术^[38]。该模型具有操作简单、预测精度高、自适应性好等优点^[39]。其中反向传播神经网络(backpropagation algorithm, BP)是应用最广泛的神经网络模型之一, 其优点是可对大量的样本信息进行并行处理, 具有很强的自我学习能力及适应力。近年来, ANN 在国内外果蔬成分分析、农药残留预测及果蔬干燥工艺优化等方面具有显著的优势, 促进了食品工业的发展。

3.1 果蔬成分分析中的应用

研究报道, 基于光谱原理的无损检测技术在果蔬成分分析中得到了广泛应用, 但获取的样本数据冗余是该技术的一大难题, 严重影响检测模型的运算效率。ANN 作为一种安全、可靠且能分析处理大量数据的预测技术已应用

到果蔬领域中,根据果蔬的成分指标建立简化的 ANN 预测模型,预测速度快,操作简便,能够实现对果蔬成分分析的预测。

孟庆龙等^[40]用紫外/可见光纤光谱仪采集开阳枇杷的反射光谱和测定糖度,经标准正态变量变换(standard normal variate, SNV)处理原始反射光谱后,用竞争性自适应重加权算法筛选特征变量,然后以全光谱及特征变量作为输入参数,枇杷糖度作为输出参数,经过函数计算再进入具有不同隐层结构的多个网络进行训练,来实现开阳枇杷糖度 BP 神经网络预测模型的运算,该模型 R_c 、 R_p 为 0.92、0.91, RMSEC、RMSEP 为 0.55%、0.56%,结果显示 BP 神经网络模型具有较好的预测性能。此外,张敏等^[41]以苹果、马铃薯及洋葱等 30 种果蔬为试验对象,测定 SSC、含水率、密度、硬度及热导率,将果蔬的含水率、SSC、密度及硬度作为输入层,热导率作为输出层,建立 BP 神经网络预测模型。然后,将获得的预测模型结果与实际结果进行比较,结果显示,预测热导率值平均相对误差为 1.11%, R^2 为 0.968,表明该模型具有较高的精度和可靠性。但利用神经网络构建的开阳枇杷糖度或果蔬热导率预测模型运算时,需要对试验结果进行优化,提高预测模型的精度。

3.2 果蔬农药残留检测的应用

由于农药具有致畸、致癌、致突变性,农药残留在我国的食物安全问题中尤为突出。在果蔬农药残留检测的研究中,前人提出了多种有效的检测方法,如气相色谱法和质谱法。但该方法操作复杂,不适合大规模检测果蔬中农药残留^[42]。还有研究者利用图像技术检测农药残留,但这种方法需要预先配置实验参数,用于准确检测果蔬中是否存在农药残留,实验结果不稳定^[43]。因此,研究人员提出了一种基于 ANN 的果蔬农药残留检测方法,更好地拟合果蔬样本的数据,在存在不确定和测量误差时提供准确的预测。

周佳俊等^[44]探究柑橘上农药残留的情况,以农药的相对分子质量、气温、降水量及 pH 等为输入参数,氟啶胺农药残留量为输出参数,通过资料查询和试验获得柑橘上虱螨脲、甲基硫菌灵、吡唑醚菌酯和丙硫唑农药残留量和模型参数,构建 BP 神经网络模型,对柑橘中氟啶胺残留进行预测,发现氟啶胺农药残留的实测值与预测值的相对误差为 0.92%~18.93%,绝对误差为 0.001~0.153 mg/kg, R^2 为 0.96205。吴泽鑫^[45]用乐果溶液均匀喷洒番茄表面后,采集番茄整果样品的近红外光谱数据,通过不同预处理方法、PCA 提取 3 个主成分因子的特征向量,以此为输入参数,有无乐果农药残留为输出参数,利用传递函数和具有不同隐层结构的多个网络进行训练,建立番茄乐果农药残留的 BP 网络模型,模型的 R 、训练误差 MSE 为 0.9711、0.0153,识别率达到 96%。

这些研究很好地将神经网络模型与氟啶胺、乐果农药残留结合起来,并且构建的预测系统对果蔬上的农药残留显示出较高预测精度,说明 ANN 应用到果蔬农药残留的预测中是可行的。但 ANN 在处理大量数据时,容易出现数据过度拟合的现象。因此,在果蔬农药残留检测中,要对检测数据进行非线性处理,防止数据过度拟合,提高试验预测精度。

3.3 果蔬干燥过程的预测及工艺优化的应用

干燥是通过减少采后损失来保存食品的一种成本效益高的方法^[46]。建模和优化是干燥过程中最关键的步骤,有助于提高干燥效率,保持产品的质量属性。但干燥是极其复杂,高度非线性的过程^[47],很难判断果蔬干燥及工艺优化时的干燥状态和优化参数^[48],且一般的算法模型很难准确地分析其干燥特性^[49]。因此,很多人在不同干燥条件下建立了 ANN 或 BP 预测模型,该模型广泛应用于食品干燥领域。

SUN 等^[50]探究神经网络模型的适用性,利用低场核磁共振技术(low field nuclear magnetic resonance, LF-NMR)检测胡萝卜、香蕉和杏鲍菇的 LF-NMR 信号,建立单一果蔬和混合物种的水分含量预测模型,结果表明,所有含水率预测模型均具有优异的 R^2 和 RMSE。但单一果蔬模型的 R^2 、RMSE 优于混合物种,且混合果蔬的融合数据降低了 BP-ANN 预测模型的整体性能。尽管如此,混合物种的 BP-ANN 模型仍具有许多优点,如应用范围广、可同时用于多种样品的含水率预测。由此可见,LF-NMR 与神经网络结合,构建的混合样本 BP-ANN 模型具有良好的适用性。BHAGYA 等^[51]探究柠檬酸浓度、微波功率、真空度对火龙果片理化特性的影响,结果表明,ANN 作为一种强有力的数据处理工具,能准确预测火龙果微波真空干燥过程的工艺参数,其微波功率为 450 W、真空为 9 kPa、柠檬酸浓度为 1.35%。可以看出 ANN 在火龙果干燥工艺优化方面具有较好的预测能力,能够处理大量的数据,得到最优的工艺参数,为食品加工提供可靠的数据参考。但由于果蔬复杂的组织结构,ANN 模型并不通用,而是根据果蔬的属性构建不同的 ANN 预测模型进行不同类别的研究。

4 其他化学计量学方法在果蔬领域的应用

CA 是通过计算样品间的欧氏距离,根据样品相似性进行分组,直观地对相似组分信息综合比较,更加全面评价果蔬品质特性的一个分类过程^[52-54]。张维等^[55]采用 CA 对不同地区的 26 个红心猕猴桃品质指标进行分析,发现这些红心猕猴桃根据品质的差异被分为 3 类。同样,史卫东等^[56]采用 CA 对 29 份菜心品种的表型性状进行分析,结果显示,CA 作为一种简化分类的数据工具,将其分为 3 个类群,结果清晰且简便可靠,可为菜心品种的评价提供基

本信息。可见 CA 能对数据组进行简化, 将猕猴桃、菜心品种按照样品的相似程度分类, 更直观地看出聚集成每一类样本的特征。

支持向量机(support vector machine, SVM)是一种有效的分类与预测算法, 通常适合小样本、非线性及高维的数据模型, 分类性能的好坏取决于模型参数的选择^[57-58]。周金东等^[59]用可见-近红外光谱技术采集贮藏期蓝莓的光谱数据, 光谱中包含的蓝莓信息量繁多, 经 Savitzky-Golay 卷积平滑预处理后构建 SVM 模型, 实现蓝莓综合贮藏品质的精准预测, 模型的预测准确率为 94.59%。可见 SVM 适用于蓝莓的综合品质评价。但在蓝莓品质评价中, 采用的是单一的 SVM 模型, 存在一定的局限性。在今后的研究

中, 可将果蔬的光谱信息(如可见-近红外等)与多种优化模型结合, 通过对比在处理条件和参数相同的情况下不同模型的建模效果和检测精度, 筛选出一种判别率高, 运行稳健的数学模型。

5 不同化学计量学方法的特点

随着信息数据化的发展, 有效、全面且快速地对复杂数据进行提取与处理, 对果蔬成分含量分析、果蔬农药残留等方面的应用至关重要。化学计量学方法在处理来自果蔬生理生化指标或质谱等现代化分析方法所获得的庞大、繁杂数据中发挥着重要作用^[60]。表 1 简要介绍了各种化学计量学方法的优缺点。

表 1 不同化学计量学方法的优缺点
Table 1 Advantages and disadvantages of different chemometrics methods

化学计量学方法	优点	缺点
PCA	快速显示样本间的差异性与相似性	不适合区分不同的样本类
PLS	变量之间存在多重共线性时, 可建立高精度的预测模型	不同类别样本区域间的分离不够, 可能会导致分类错误
ANN	非线性, 数据拟合性能好, 可解决线性回归误差较大的问题	采样数据要求高
CA	物以类聚, 反映品种间的相似性	数据需预处理, 避免变量不同尺度的影响
SVM	具有优秀的泛化性能、算法计算复杂度低和稀疏性好	模型开发困难, SVM 模型在训练时需要大量的计算

PCA 可消除评价指标之间的相关影响, 减少指标选择工作量, 但不能用于区分不同样本类别。CA 可以将数据组简化, 更直观地看到各数据分成的每一簇的特征, 且 CA 可以作为其他算法的预处理步骤, 对模型的构建具有良好的促进作用^[61-62]。PLS 与 PCA 相比, PLS 结合了 PCA 的优点, 可以同时实现果蔬数据结构的简化, 建立高精度的预测模型。但 PLS 在分析果蔬的变量和测定的指标时, 所选择的主成分中仍包含所有的自变量, 可能会导致预测结果的错误。

SVM 相比于其他分类学习模型具有优秀的泛化性能、算法计算复杂度低和稀疏性好的优点^[63]。但 SVM 的局限性在于约束优化规划, 测定数据要相对较小, 且 SVM 模型在训练时需要大量的计算。有研究发现 LS-SVM 克服了这一局限性, 具有良好的预测, 与 SVM 相比具有更快的执行时间^[64]。ANN 的主要优点是其非线性, 这能更好地拟合数据, 在果蔬样品存在不确定数据和测量误差时提供准确的预测。但目前采用 ANN 建立果蔬农药残留预测模型相关研究较少, 该方法还需进一步完善, 以提供更多可参考的实验数据。

6 结束语

化学计量学方法可以最大限度地挖掘出不同果蔬定性或定量的信息, 对繁杂数据分析处理, 在果蔬领域的应

用具有巨大的潜力, 如果蔬农药残留的检测、果蔬保鲜效果的预测及果蔬成分含量分析等。但在果蔬指标分析过程中, 数据处理运行效率较慢、模型预测精度不理想、模型稳定性不强等问题仍需探讨。因此, 未来可从以下几个方面进行分析:

(1) 化学计量学方法对果蔬领域的研究仅局限于单一的数据降维处理方式, 在实际的应用过程中会存在一些不足, 如单一算法构建的模型预测精度低、样本判别结果差等。因此, 可以综合考虑多种算法联合使用或在其他条件相同情况下同时构建多种预测模型, 如遗传算法-SVM 等, 提高预测模型的准确性, 使模型更加有效地对果蔬领域的各个方面进行预测和判别。

(2) 在果蔬农药残留检测的应用中, 化学计量学方法主要集中分析果蔬表面是否存在农药残留, 而对农药残留的定量或定性判别分析研究较少。在未来, 应该更加侧重光谱分析法(如拉曼光谱法等)与 PCA、PLS 及 ANN 等数学模型结合, 如拉曼图谱以神经网络作为非线性模型构建工具, 可使农药残留含量的定量分析更精准。

参考文献

- [1] DAGFINN A, EDWARD G, PAOLO B, *et al.* Fruit and vegetable intake and the risk of cardiovascular disease, total cancer and all cause mortality a systematic review and dose-response meta-analysis of prospective studies [J]. *Int J Epidemiol*, 2017, 46(3): 1029-1056.

- [2] HOSSEINI B, BERTHON BS, WARK P, *et al.* Effects of fruit and vegetable consumption on risk of asthma, wheezing and immune responses: A systematic review and meta-analysis [J]. *Nutrients*, 2017, 9(4): 341–366.
- [3] 孙元琳, 崔嘉航, 蔡文强, 等. 果蔬膳食纤维生理功能及其作用机制研究进展[J]. *山西农业科学*, 2022, 50(11): 1489–1496.
SUN YL, CUI JH, CHAI WQ, *et al.* Research progress on physiological function and mechanism of dietary fiber in fruits and vegetables [J]. *J Shanxi Agric Sci*, 2022, 50(11): 1489–1496.
- [4] 陈峰, 李鹤东, 王亚棋, 等. 化学计量学方法在食品分析中的应用[J]. *食品科学技术学报*, 2017, 35(3): 1–15.
CHEN F, LI HD, WANG YQ, *et al.* Applications of chemometrics in food analysis [J]. *J Food Sci Technol*, 2017, 35(3): 1–15.
- [5] 陈瀑, 戴嘉伟, 李敬岩, 等. 近红外光谱分析中的化学计量学方法进展[J]. *化学试剂*, 2023, 45(6): 1–8.
CHEN P, DAI JW, LI JY, *et al.* Progress of chemometric methods in near infrared spectroscopy [J]. *Chem Reagents*, 2023, 45(6): 1–8.
- [6] 张芳, 周昊, 徐寸发, 等. 红外光谱结合化学计量学在食品检测中的应用[J]. *安徽农业科学*, 2018, 46(12): 23–26.
ZHANG F, ZHOU H, XU CF, *et al.* Application of infrared spectroscopy combined with chemometrics in food detection [J]. *J Anhui Agric Sci*, 2018, 46(12): 23–26.
- [7] ANDERSON NT, WALSH KB. Review: The evolution of chemometrics coupled with near infrared spectroscopy for fruit quality evaluation [J]. *J Near Infrared Spec*, 2022, 30(1): 3–17.
- [8] EFENBERGER-SZMECHTYK M, NOWAK A, KREGIEL D. Implementation of chemometrics in quality evaluation of food and beverages [J]. *Crit Rev Food Sci*, 2018, 58(10): 1747–1766.
- [9] AURSAND M, STANDAL IB, AXELSEN DE. High-resolution ^{13}C nuclear magnetic resonance spectroscopy pattern recognition of fish oil capsules [J]. *J Agric Food Chem*, 2007, 55(1): 38–47.
- [10] WANG HP, CHEN P, DAI JW, *et al.* Recent advances of chemometric calibration methods in modern spectroscopy: Algorithms, strategy, and related issues [J]. *Trend Anal Chem*, 2022, 153: 116648.
- [11] FARNHAM IM, JOHANNESSON KH, SINGH AK, *et al.* Factor analytical approaches for evaluating groundwater trace element chemistry data [J]. *Anal Chim Acta*, 2003, 490: 123–138.
- [12] 李守强, 田世龙, 李梅, 等. 主成分分析和隶属函数法综合评价 15 种(系)马铃薯的营养品质[J]. *食品工业科技*, 2020, 41(6): 272–276.
LI SQ, TIAN SL, LI M, *et al.* Comprehensive evaluation of nutritional quality of 15 potato varieties by principal component analysis and membership function method [J]. *Sci Technol Food Ind*, 2020, 41(6): 272–276.
- [13] TOKALIOGLU S. Determination of trace elements in commonly consumed medicinal herbs by ICP-MS and multivariate analysis [J]. *Food Chem*, 2012, 314(4): 2504–2508.
- [14] POEKAEW P, CHAMPRASERT P. Adaptive PCA: An event-based data aggregation using principal component analysis for WSNs [Z].
- [15] 孔令琦, 宋佳琪, 陈林林, 等. 食用油掺伪鉴别技术及模型建立的研究进展[J]. *食品安全质量检测学报*, 2022, 13(19): 6132–6139.
KONG LQ, SONG JQ, CHEN LL, *et al.* Research progress of edible oil adulteration identification technology and model establishment [J]. *J Food Saf Qual*, 2022, 13(19): 6132–6139.
- [16] 吴江, 黄富荣, 黄才欢, 等. 近红外光谱结合主成分分析和 BP 神经网络的转基因大豆无损鉴别研究[J]. *光谱学与光谱分析*, 2013, 33(6): 1537–1541.
WU J, HUANG FR, HUANG CH, *et al.* Study on near infrared spectroscopy of transgenic soybean identification based on principal component analysis and neural network [J]. *Spectrosc Spect Anal*, 2013, 33(6): 1537–1541.
- [17] 公丽艳, 孟宪军, 刘乃侨, 等. 基于主成分与聚类分析的苹果加工品质评价[J]. *农业工程学报*, 2014, 30(13): 276–285.
GONG LY, MENG XJ, LIU NQ, *et al.* Evaluation of apple quality based on principal component and hierarchical cluster analysis [J]. *Trans Chin Soc Agric Eng*, 2014, 30(13): 276–285.
- [18] 陈妹姑, 林兴娥, 李新国, 等. 基于主成分分析和聚类分析的榴莲品质综合评价[J]. *食品工业科技*, 2023, 44(7): 278–286.
CHEN MG, LIN XE, LI XG, *et al.* Comprehensive evaluation of durian quality based on principal component analysis and cluster analysis [J]. *Sci Technol Food Ind*, 2023, 44(7): 278–286.
- [19] 靳荣线, 李峰, 邹明, 等. 基于主成分分析法的不同等级香菇品质评价[J]. *中国瓜菜*, 2022, 35(8): 50–56.
JIN RX, LI F, ZOU M, *et al.* Evaluation of *Lentinula edodes* quality based on principal component analysis [J]. *China Cucur Veget*, 2022, 35(8): 50–56.
- [20] 陈淑一, 赵全明, 董大明. 对比主成分分析的近红外光谱测量及其在水果农药残留识别中的应用[J]. *光谱学与光谱分析*, 2020, 40(3): 917–921.
CHEN SY, ZHAO QM, DONG DM. Application of near infrared spectroscopy combined with comparative principal component analysis for pesticide residue detection in fruit [J]. *Spectrosc Spect Anal*, 2020, 40(3): 917–921.
- [21] 张令标, 何建国, 刘贵珊, 等. 基于可见/近红外高光谱成像技术的番茄表面农药残留无损检测[J]. *食品与机械*, 2014, 30(1): 82–85.
ZHANG LB, HE JG, LIU GS, *et al.* Detection of pesticide residue on cherry tomatoes by hyperspectral image technology [J]. *Food Mach*, 2014, 30(1): 82–85.
- [22] 安容慧, 王馨渝, 韩颖, 等. 基于主成分分析法评价薄膜结合 ϵ -聚赖氨酸对采后上海青保鲜效果的影响[J]. *江西农业学报*, 2022, 34(3): 46–52.
AN RH, WANG XY, HAN Y, *et al.* Evaluation of fresh-keeping effect of film combined with ϵ -polylysine on postharvest pakchoi (*Brassica rapa*) based on principal component analysis [J]. *Acta Agric Jiangxi*, 2022, 34(3): 46–52.
- [23] 徐锦洋, 王瑞, 张妮, 等. 基于主成分分析法研究自充气调包装对方竹笋保鲜效果的影响[J]. *食品工业科技*, 2023, 44(5): 322–330.
XU JY, WANG R, ZHANG N, *et al.* Study on the effects of modified atmosphere packaging on the freshness of *Chimonobambusa quadrangularis* shoot based on principal component analysis [J]. *Sci Technol Food Ind*, 2023, 44(5): 322–330.
- [24] 史江莉, 全瑞冉, 王森, 等. 低温气调贮藏对‘突尼斯软籽’石榴果实品质影响的主成分分析[J]. *河南农业大学学报*, 2022. DOI: 10.16445/j.cnki.1000-2340.20220830.002
SHI JL, TONG RR, WANG S, *et al.* Effect of cold controlled atmosphere storage on fruit quality of ‘Tunisia’ soft-seed pomegranate based on principal component analysis [J]. *J Henan Agric Univ*, 2022. DOI:

- 10.16445/j.cnki.1000-2340.20220830.002
- [25] WIJAYA W, PANG S, LABUZA TP, *et al.* Rapid detection of acetamidiprid in foods using surface-enhanced Raman spectroscopy (SERS) [J]. *J Food Sci*, 2014, 79 (4): T743–T747.
- [26] STRIEGEL L, CHEBIB S, DUMLER C. Durian fruits discovered as superior folate sources [J]. *Front Nut*, 2018, 5: 114.
- [27] 赵娟, 沈懋生, 浦育歌, 等. 基于近红外光谱与多品质指标的苹果出库评价模型研究[J]. *农业机械学报*, 2023, 54(2): 386–395.
- ZHAO J, SHEN MS, PU YG, *et al.* Out-of-warehouse evaluation and prediction model of apple based on near-infrared spectroscopy combined with multiple quality indexes [J]. *J Agric Mach*, 2023, 54(2): 386–395.
- [28] LI M, LV WB, ZHAO R, *et al.* Non-destructive assessment of quality parameters in ‘Friar’ plums during low temperature storage using visible/near infrared spectroscopy [J]. *Food Control*, 2017, 73: 1334–1341.
- [29] 吴海清, 张卫华, 甄润英, 等. 基于近红外技术和偏最小二乘判别法对卫青萝卜内部品质的快速判别[J]. *农产品加工*, 2021, (19): 70–73.
- WU HQ, ZHANG WH, ZHEN RY, *et al.* Identification of green radish internal quality based on near-infrared spectroscopy and partial least square-discriminant analysis [J]. *Farm Prod Process*, 2021, (19): 70–73.
- [30] 陈文, 朱莉娅, 韩宇, 等. 表面增强拉曼光谱技术应用于西瓜中杀螟磷农药残留的检测[J]. *食品科技*, 2018, 43(1): 320–325.
- CHEN W, ZHU LY, HAN Y, *et al.* Application of surface-enhanced Raman spectroscopy to the detection of fenitrothion pesticide residues in watermelon [J]. *Food Sci Technol*, 2018, 43(1): 320–325.
- [31] 佚名. 国家卫生计生委农业部食品药品监管总局联合发布(GB 2763—2016)《食品安全国家标准 食品中农药最大残留限量》等 107 项食品安全国家标准[J]. *中国茶叶加工*, 2016, (6): 61.
- ANONYMOUS. Jointly released by the National Health and Family Planning Commission, the Ministry of Agriculture, and the Food and Drug Administration (GB 2763—2016) 107 national food safety standards including the *National food safety standard-Maximum residue limit of pesticides in food* [J]. *China Tea Process*, 2016, (6): 61.
- [32] 杨平, 姚明印, 黄林, 等. LIBS 检测污染马铃薯中的 Pb 及偏最小二乘定量分析模型[J]. *光电子·激光*, 2015, 26(1): 141–148.
- YANG P, YAO MY, HUANG L, *et al.* Detection of Pb in potato by LIBS and the partial least square quantity analysis model [J]. *J Optoelectron·Laser*, 2015, 26(1): 141–148.
- [33] 翟晨, 彭彦昆, 李永玉, 等. 基于拉曼光谱的苹果中农药残留种类识别及浓度预测的研究[J]. *光谱学与光谱分析*, 2015, 35(8): 2180–2185.
- ZHAI C, PENG YK, LI YY, *et al.* Research on identification and determination of pesticides in apples using Raman spectroscopy [J]. *Spectrosc Spect Anal*, 2015, 35(8): 2180–2185.
- [34] GIOVANELLI G, SINELLI N, BEGHI R, *et al.* NIR spectroscopy for the optimization of postharvest apple management [J]. *Postharvest Biol Technol*, 2014, 87: 13–20.
- [35] JHA SN, RUCHI G. Non-destructive prediction of quality of intact apple using near infrared spectroscopy [J]. *J Food Sci Technol Mys*, 2010, 47: 207–213.
- [36] 杨云来. 基于高光谱技术建立鲜切生菜品质监测模型及应用研究[D]. 乌鲁木齐: 新疆农业大学, 2020.
- YANG YL. Establishment and application of quality model of fresh-cut lettuce on hyperspectral technology [D]. Urumqi: Xinjiang Agricultural University, 2020.
- [37] 赵茂程, 杨君荣, 陆丹丹, 等. 基于高光谱成像的青梅酸度检测方法[J]. *农业机械学报*, 2017, 48(9): 318–323.
- ZHAO MC, YANG JR, LU DD, *et al.* Detection methods of greengage acidity based on hyperspectral imaging [J]. *J Agric Mach*, 2017, 48(9): 318–323.
- [38] 姜鹏飞, 郑杰, 陈瑶, 等. 人工神经网络在水产领域中的应用[J]. *食品与发酵工业*, 2021, 47(19): 288–295.
- JIANG PF, ZHENG J, CHEN Y, *et al.* Application of artificial neural network in aquaculture [J]. *Food Ferment Ind*, 2021, 47(19): 288–295.
- [39] RICARDO M, VLADIMIR K, ALVES JHGM, *et al.* Nonlinear wave ensemble averaging in the gulf of Mexico using neural networks [J]. *J Atmos Ocean Technol*, 2019. DOI: 10.1175/JTECH-D-18-0099
- [40] 孟庆龙, 冯树南, 谭涛, 等. 基于 BP 神经网络快速无损检测开阳枇杷糖度[J]. *食品研究与开发*, 2022, 43(13): 135–140.
- MENG QL, FENG SN, TAN T, *et al.* Nondestructive detection of the sugar content of Kaiyang loquat based on BP neural network [J]. *Food Res Dev*, 2022, 43(13): 135–140.
- [41] 张敏, 钟志友, 杨乐, 等. 基于 BP 神经网络的果蔬热导率预测模型[J]. *农业机械学报*, 2010, 41(10): 117–121.
- ZHANG M, ZHONG ZY, YANG L, *et al.* Prediction on model of thermal conductivities of fruit and vegetables based on BP neural networks [J]. *J Agric Mach*, 2010, 41(10): 117–121.
- [42] 薛龙, 黎静, 刘木华. 基于高光谱图像技术的水果表面农药残留检测试验研究[J]. *光学学报*, 2008, 28(12): 2277–2280.
- XUE L, LI J, LIU MH. Detecting pesticide residue on navel orange surface by using hyperspectral imaging [J]. *Acta Opt Sin*, 2008, 28(12): 2277–2280.
- [43] 李文秀, 徐可欣. 蔬菜农药残留检测的红外光谱法研究[J]. *光谱学与光谱分析*, 2004, 24(10): 1202–1204.
- LI WX, XU KX. Investigation on the detection of pesticide residue in vegetable based on infrared spectroscopy [J]. *Spectrosc Spect Anal*, 2004, 24(10): 1202–1204.
- [44] 周佳俊, 龚道新, 蒋紫烟, 等. 基于 BP 神经网络的柑橘农药残留预测[J]. *湖南农业大学学报*, 2022, 48(5): 572–577.
- ZHOU JJ, GONG DX, JIANG ZY, *et al.* Prediction of pesticide residues in citrus using BP neural network [J]. *J Hunan Agric Univ*, 2022, 48(5): 572–577.
- [45] 吴泽鑫. 基于近红外光谱的番茄有机磷农药残留快速检测方法研究[D]. 武汉: 华中农业大学, 2010.
- WU ZX. The rapid detection of tomatoes organophosphorus pesticide residual based on near-infrared spectroscopy [D]. Wuhan: Huzhong Agricultural University, 2010.
- [46] MAHAYOTHEE B, KOMONSING N, KHUWIJTJARU P, *et al.* Influence of drying conditions on colour, betacyanin content and antioxidant capacities in dried red-fleshed dragon fruit (*Hylocereus polyrhizus*) [J]. *Int J Food Sci Technol*, 2019. DOI: 10.1111/ijfs.13958
- [47] AGHBASHLO M, HOSSEINPOUR S, MUJUMDAR AS. Application of artificial neural networks (ANNs) in drying technology: A comprehensive review [J]. *Dry Technol*, 2015, 33(12): 1397–1462.
- [48] SADEGHI E, MOVAGHARNEJAD K, HAGHIGHI AA. Mathematical modeling of infrared radiation thin layer drying of pumpkin samples under natural and forced convection [J]. *J Food Process Pres*, 2019, 43(12): e14229.1–e14229.19.

- [49] KUMAR D, TARAFDAR A, KUMAR Y, *et al.* Intelligent modeling and detailed analysis of drying, hydration, thermal, and spectral characteristics for convective drying of chicken breast slices [J]. *J Food Process Eng*, 2019, 42(5): e13087.1–e13087.14.
- [50] SUN Q, ZHANG M, YANG PQ. Combination of LF-NMR and BP-ANN to monitor water states of typical fruits and vegetables during microwave vacuum drying [J]. *LWT*, 2019, 116: 0023–6438.
- [51] BHAGYA RG, DASH KK. Microwave vacuum drying of dragon fruit slice: Artificial neural network modelling, genetic algorithm optimization, and kinetics study [J]. *Comp Electron Agric*, 2020, 178: 105814.
- [52] 王建芳, 高山, 牟德华. 基于主成分分析和聚类分析的不同品种燕麦品质评价[J]. *食品工业科技*, 2020, 41(13): 85–91.
WANG JF, GAO S, MOU DH. Quality evaluation of different varieties of oat based on principal components analysis and cluster analysis [J]. *Sci Technol Food Ind*, 2020, 41(13): 85–91.
- [53] BERRUETA LA, ALONSO RM, HEBERGER K. Supervised pattern recognition in food analysis [J]. *J Chromatogr A*, 2007, 1158(1–2): 196–214.
- [54] PATRAS A, BRUNTON NP, DOWNEY G, *et al.* Application of principal component and hierarchical cluster analysis to classify fruits and vegetables commonly consumed in Ireland based on *in vitro*, antioxidant activity [J]. *J Food Compos Anal*, 2011, 24(2): 250–256.
- [55] 张维, 付复华, 罗赛男, 等. 湖南红心猕猴桃品种品质评价及综合分析[J]. *食品与发酵工业*, 2021, 47(5): 201–210.
ZHANG W, FU FH, LUO SN, *et al.* Quality analysis and evaluation of Hunan red kiwifruit varieties [J]. *Food Ferment Ind*, 2021, 47(5): 201–210.
- [56] 史卫东, 罗海玲, 康红卫, 等. 基于主成分分析与聚类分析的菜心品种评价[J]. *安徽农业科学*, 2020, 48(24): 46–49, 52.
SHI WD, LUO HL, KANG HW, *et al.* Evaluation of Chinese flowering cabbage variety by principal component analysis and cluster analysis [J]. *J Anhui Agric Sci*, 2020, 48(24): 46–49, 52.
- [57] MALEGORI C, MARQUES EJM, FREITAS ST, *et al.* Comparing the analytical performances of Micro-NIR and FT-NIR spectrometers in the evaluation of acerola fruit quality, using PLS and SVM regression algorithms [J]. *Talanta*, 2017, 165: 112–116.
- [58] 盛立哲, 季仁东, 王晓燕, 等. 基于荧光光谱的苹果汁品种产地分类研究[J]. *光散射学报*, 2022, 34(3): 244–248.
SHENG LZ, JI RD, WANG XY, *et al.* Discrimination of apple juice according to the variety of apple based on fluorescent spectroscopy [J]. *J Lig Scatter*, 2022, 34(3): 244–248.
- [59] 周金东, 冯国红, 朱玉杰, 等. 基于二维相关光谱的蓝莓贮藏品质综合评价研究[J]. *食品与发酵工业*, 2023. DOI: 10.13995/j.cnki.11-1802/ts.032772
ZHOU JD, FENG GH, ZHU YJ, *et al.* Comprehensive evaluation of blueberry storage quality based on two-dimensional correlation spectroscopy [J]. *Food Ferment Ind*, 2023. DOI: 10.13995/j.cnki.11-1802/ts.032772
- [60] MUNCK L, NØRGAARD L, ENGELSEN SB, *et al.* Chemometrics in food science a demonstration of the feasibility of a highly exploratory, inductive evaluation strategy of fundamental scientific significance [J]. *Chem Intell Lab*, 1998, 44(1–2): 31–60.
- [61] PRAMOD K, PRABHAKAR S, VATSA P. A comprehensive review on freshness of fish and assessment: Analytical methods and recent innovations [J]. *Food Res Int*, 2020, 133: 1–17.
- [62] 于翠翠, 陈锋, 马路凯, 等. 基于主成分与聚类分析综合评价西藏不同产地茼蒿的品质[J]. *食品安全质量检测学报*, 2022, 13(19): 6312–6319.
YU CC, CHEN F, MA LK, *et al.* Comprehensive evaluation of the quality of *Brassica rapa* L. ssp. *rapa* from different regions in Tibet based on principal component and cluster analysis [J]. *J Food Saf Qual*, 2022, 13(19): 6312–6319.
- [63] PIARULLI S, SCIUTTO G, OLIVERI P, *et al.* Rapid and direct detection of small microplastics in aquatic samples by a new near infrared hyperspectral imaging (NIR-HSI) method [J]. *Chemosphere*, 2020, 260: 123–128.
- [64] LEE LC, LIONG CY, JEMAIN AA. Partial least squares-discriminant analysis (PLS-DA) for classification of high-dimensional (HD) data: A review of contemporary practice strategies and knowledge gaps [J]. *Analyst*, 2018, 143(15): 3526–3539.

(责任编辑: 于梦娇 郑 丽)

作者简介



高攀, 硕士研究生, 主要研究方向为食品加工与贮藏工程。
E-mail: gpan_1114@163.com



柴春祥, 博士, 教授, 主要研究方向为食品加工与贮藏。
E-mail: ccxiang@tjcu.edu.cn