化学计量学在风味物质研究中的应用

孙灵霞，赵改名*，李苗云，黄现青，柳艳霞，高晓平，张秋会
(河南农业大学食品科学技术学院，河南 郑州 450002)

摘 要：化学计量学在风味物质色谱重叠峰以及气质联用测定结果的处理方面应用广泛，能够解决一些传统的分析方法不能解决的问题，但在风味物质结构和活性关系方面的应用研究较少。本文综述化学计量学中的多元校正和多元分辨、小波变换、化学模式识别、人工神经网络以及遗传算法等方法在风味物质研究中的应用，以期为风味物质的研究提供一定的理论依据。

关键词：化学计量学；风味物质；应用

Application of Chemometrics in Flavor Substance Research

SUN Ling-xia，ZHAO Gai-ming*，LI Miao-yun，HUANG Xian-qing，LIU Yan-xia，GAO Xiao-ping，ZHANG Qiu-hui
(College of Food Science and Technology, Henan Agricultural University, Zhengzhou 450002, China)

Abstract：Chemometics is widely used for processing overlap peak from chromatogram and data from gas chromatography-mass spectrometry (GC-MS), and its application can resolve the problems that can not be resolved by traditional analytical methods. However, the applications of chemometrics in structure-activity relationship of flavor substances are few. In this paper, the applications of chemometrics, such as multivariate calibration and discrimination, wavelet transform (WT), chemical pattern recognition, artificial neural network (ANN) and genetic algorithm (GA) in the study of flavor substances are reviewed, which will provide some references for the study of flavor substances.

Key words：chemometrics；flavor substance；application
中图分类号：TS201.2 文献标志码：A 文章编号：1002-6630(2013)05-0313-05

化学计量学(chemometrics)诞生于70年代初期，由瑞典化学家Wold在为一项基金项目定名时提出[1]。80年代初，化学计量学才在中国起步，现已发展成为一门在国际上有一定影响的独立化学学科分支。化学计量学作为一门新兴的化学分支学科，运用数学、统计学、计算机科学以及其他相关学科的理论和方法，优化化学量测过程，并通过解析化学量测数据以最大限度地获取化学及相关信息，它协助科学家阐明物质的成分、结构与其性能之间的复杂关系。到目前为止，化学计量学已大致形成了分析信息与分析采样、化学实验设计与优化、分析检测理论与信号处理方法、多元校正与多元分辨、化学模式识别、计算机数字模拟法、化学构效关系的研究、数据库检索、人工智能与化学专家系统等10个研究热点[2]。

风味物质成分复杂，在大多数挥发性风味物质分析文献中，常采用气相色谱质谱(gas chromatograph-mass spectrometer，GC-MS)联用技术[3]。此方法通常会获得大量的色谱数据，且样本的谱图数据非常相似，常规的数据处理方法很难对这些“海量”数据进行有效、快速地识别和分析。采用这种方法对风味物质进行分析时将存在背景不能准确扣除、总有重叠峰出现等问题，在这种情况下，如果直接在质谱库中进行搜索，可能会出现错误的判断结果[4]。因此，就需要借助化学计量学的一些方法对风味成分的分析数据进行有效信息的挖掘，以便更加准确地对风味物质进行定性、定量分析。

1 风味物质研究中常用的化学计量学方法

1.1 多元校正和多元分辨方法

在多组分复杂体系的分析中，由于组分信号之间的重叠使无法找到单个测量数据与某一组分之间的对应关系，此时必须使用多元校正和多元分辨方法，即必须同时考虑多个测量数据(称为响应向量或矩阵，Y)与多各组分含量(称为浓度向量或矩阵，X)之间的对应关系，即$Y=BX+E$。多元线性回归(multiple linear regression，MLR)、因子分析(factor analysis，FA)、主成分回归(principal component regression，PCR)和偏最小二乘法(partial least square，PLS)等都是常用的多元校正和分辨方法。近年来在自模式分辨算法的基础上，

收稿日期：2011-12-11
作者简介：孙灵霞(1980—)，女，讲师，博士，主要从事肉品加工与肉品风味形成及控制研究。E-mail：linger198003@163.com
*通信作者：赵改名(1965—)，男，副教授，博士，主要从事肉品加工与质量控制措施研究。E-mail：gmzhao@126.com

发展了大量化学计量学多元分辨技术[2]，如：渐进因子分析(evolving factor analysis，EFA)法[5]、窗口因子分析(window factor analysis，WFA)法、启发渐进式特征投影(heuristic evolving latent projection，HELP)法[6]、子窗口因子分析(sub-window factor analysis，SFA)法[7]、交互移动窗口因子分析(alternative moving window factor analysis，AMWFA)法[8]等，主要用于色谱、光谱等测量过程中重叠信号的解析。

1.2 小波分析

小波分析是以小波变换为数学基础的信号分析技术，20世纪80年代得到迅速发展，目前已成功应用于分析化学信号的平滑滤噪、数据压缩、基线校正与背景扣除、求导运算及重叠信号解析等，其中在色谱数据处理中的应用最为广泛，除平滑滤噪、基线校正和重叠色谱信号分辨以外，该方法可以将光谱背景滤除，也可以将漂移的色谱基线加以校正，从而为正确得到数据矩阵的因子数提供了保障。与传统的化学计量方法相比，用小波变换从重叠的色谱峰中提取各组分信息进行定量分析具有方便、快速、准确的特点[9]。

1.3 化学模式识别

化学模式识别就是借助计算机来揭示隐含于化学量测数据内部规律的一种多元分析技术，它的任务就是要找出同样具有某些共同性质的特征，进而根据这些特征去预报一些未知样本的性质，来判别未知样品属于哪一个模式、哪一类或哪一种。它是通过对分析量测数据隐含信息的提取，实现对物质的分类、识别和构效关系的研究。模式识别方法可分为有管理识别方法、无管理识别方法。有管理识别方法要求有一训练集，在训练集中各样本类别是已知的，将这些训练集中样本的性质及类别教给计算机(称训练计算机)，让计算机通过训练或学习掌握一定的识别规律之后，再去识别未知样；有管理识别方法包括因子分析、线性学习机、*K*-最临近法、单类成分判别分析(soft independent modeling of class analogy，SIMCA)法等。无管理识别方法不需要训练集，包括最小生成树、聚类分析(cluster analysis，CA)等。

1.4 人工神经网络

人工神经网络(artificial neural network，ANN)是在现代神经科学研究成果的基础上，对生物神经系统的结构和功能进行数学抽象、简化和模仿而逐步发展起来的一种新型信息处理系统和计算系统[2]。人工神经网络有多种算法，但可以粗略分为有管理的人工神经网络和无管理的人工神经网络。有管理的人工神经网络的方法主要是对已知试样进行训练，然后对未知试样进行预测，此类方法的典型代表是误差反向传输(back propagation，BP)人工神经网络。无管理方法也称自组织人工神经网络，无需对已知试样进行训练，可用于化合物的分类，如Kohonen神经网络和Hopfield神经网络。人工神经网络在多元校正、实验条件优化、蛋白质结构预测以及动量结构-药代动力学关系(quantitative structure-pharmacokinetics relationship，QSPR)和定量构效关系(quantitative structure-activity relationship，QSAR)研究中都得到了广泛的应用[10]。在诸多算法中，目前应用最多的是BP人工神经网络。

1.5 遗传算法

遗传算法(genetic algorithm，GA)借鉴生物界自然选择和遗传机制，利用选择、交换和突变等算子的操作，随着不断的遗传迭代，使目标函数值较优的变量被保留，较差的变量被淘汰，最终达到最优结果，是一种自适应启发式全球搜索算法[11]。遗传算法的主要特点是直接对结构对象进行操作，不存在求导和函数连续性的限定；具有内在的隐并行性和更好的全局寻优能力；采用概率化的寻优方法，能自动获取和指导优化的搜索空间，自适应地调整搜索方向，不需要确定的规则。因此，遗传算法已被人们广泛地应用于组合优化、机器学习、信号处理、自适应控制和人工生命等领域[12]。目前，遗传算法正和神经网络、模糊推理以及混沌理论等其他智能计算方法相互渗透和结合。遗传算法与BP神经网络相结合，可以解决BP神经网络收敛速度慢、容易陷入局部最小值的问题[13]。

2 化学计量学方法在风味物质研究中的应用

2.1 化学计量学方法在重叠色谱峰解析中的应用

联用色谱仪器通常作为风味物质分析的首选分析仪器，但是联用分析仪器往往对一个样本就能产生极大量的数据，数据的解析和化学信息的有效提取成为研究者面临的一个难点。化学计量学多元校正与多元分辨的复杂多组分解析方法的出现，使得复杂色谱峰体系纯度检验、重叠色谱峰中组分数的确定及纯色谱与纯光谱的获得成为可能。GC-MS联用技术结合化学计量学方法用于解析联用仪器二维数据中的重叠峰，是一种方便准确的方法，可提高定性定量结果。

易伦朝等[14-15]采用AMWFA分析法对3种陈皮挥发油成分的GC-MS数据进行解析和比较分析，得到了满意的结果。熊运海等[16-17]采用GC-MS联用技术并结合化学计量学解析法对丁香、桂皮挥发油混合前后的化学成分进行分析比较，并对不同方式调制的丁香与桂皮挥发油复合物成分进行了分析，取得了较好的定性、定量分析结果。熊运海等[18]采用局部因子分析法对苏叶、苏梗挥发油成分的重叠色谱峰进行解析。胡春弟等[19-21]利用固定尺寸移动窗口渐进因子分析(fixed size moving window evolving factor analysis，FSMWEFA)法和HELP法对桂花挥发油成分进行了解析，结果表明GC-MS联用技术结合

化学计量学方法用于解析复杂体系如挥发油二维数据中的重叠峰可大大提高定性定量结果的可靠性和准确性。陈勇等[22]通过化学计量学解析法对重叠色谱峰进行分辨，能够实现防风挥发油成分的定性、定量分析。吴先伟等[23]采用HELP法对缬草精油和含有缬草精油的混配精油的色谱重叠峰进行解析，同时利用AMWFA分析法直接比较2种精油中的共有组分，发现AMWFA法比HELP法能更快速鉴别出混配精油中的缬草精油。佘金明等[24]利用化学计量学解析法分辨重叠色谱峰分析山柰挥发油成分，比单独使用GC-MS得到的结果更加准确可靠。李国辉等[25]通过HELP法对二维色谱-质谱数据进行解析，实现对赤芍挥发性成分的定性和定量分析。万明珠等[26]采用GC-MS联用技术并运用化学计量学HELP法对重叠色谱峰进行解析，运用“计算机辅助相似性评价系统”软件建立指纹图谱及其共有模式，效果良好。

Jalali-Heravi等[27]采用气质联用技术结合FSMWEFA分析法和HELP法对伊朗天竺葵精油成分进行分析，结果表明气质联用技术结合化学计量学方法是一种能准确分析精油成分的互补方法。Huang Lanfang等[28]通过气质联用技术结合化学计量学方法建立烟叶香气成分中咖啡香的指纹图谱时，采用SFA分析法完成了具有咖啡香气样品的定性和定量分析。Zeng Yingxu等[29]采用气质联用技术结合AMWFA分析法对生长于中国的铁线蓬中的挥发性成分进行了比较分析，发现基于两维数据解析的化学计量学方法能对复杂的精油成分进行快速、准确的分析。

小波变换在风味物质研究中对于色谱重叠峰解析方面的应用较少。Cocchi等[30]采用HS-SPME-GC测定意大利黑醋香气成分，运用小波变换处理测定结果对意大利黑醋进行分类，取得很好的效果。

2.2 化学计量学方法在风味物质指纹分析中的应用

产品风味是依靠所含的多种化学成分发挥作用的，因此仅凭某一种化学成分的定性和定量是无法对其进行正确评价的，因为任何单一的成分或指标成分都难以有效地表征产品的风味特征。指纹分析技术是近十几年来针对复杂介质和含协同作用的样品而发展起来的一项新技术，根据指纹技术应用的仪器分析手段不同，可分别产生气相色谱指纹图、质谱指纹图、气味指纹图和味觉指纹图。由于指纹图谱具有指纹特征分析、宏观推断分析等特点，故适合于分析复杂化学物质组成，可以成为风味特征评价的有效手段。

但是在风味指纹图谱应用中，依靠指纹图谱评价产品质量时，必然遇到指纹图谱判别和识别的问题，所以有必要以化学计量学、数据挖掘技术等方法为基础，建立起风味指纹图谱计算机模式识别系统，评价指纹图谱的相关性，进而判别产品质量[31-32]。化学计量学方法在风味物质指纹分析中应用时通常与色谱及联用技术、电子鼻技术等相结合，从而实现对样品的分类、分级及质量控制。

2.2.1 化学计量学方法在GC-MS指纹分析中的应用

气相色谱及其联用技术是目前风味物质研究中最常用的方法，气相色谱法结合运用化学计量学方法对色谱指纹图谱中含有的大量复杂信息进行分析，可以得到一个可定量的、比人工计算更客观的结果。王志军[33]采用主成分分析(PCA)投影法和欧氏距离聚类分析法对所采集的各色谱、光谱数据进行了化学模式识别在中药材质量控制应用中的初探，取得了较好的效果。黄世杰等[34]以主成分分析的投影判别法优选的7批次代表性烟用$B_{\#}$香精为基础，建立了真实反映烟用$B_{\#}$香精品质的GC-MS指纹图谱，该方法可作为烟用香精质量控制的科学依据。顾赛麒[35]通过固相微萃取-气相质谱联用法检测了4、20℃条件下不同贮藏天数冷却肉挥发性气味物质的变化，突破性地提出了“结合微生物等实验结果，运用PCA法确定表征肉品腐败(或新鲜)的特征性挥发物”这一新理念；并将2种温度条件下菌落总数与GC-MS实验结果进行PLS分析，相关系数分别达0.9774和0.9987，表明可建立不同新鲜度肉样的GC-MS气味指纹图谱来有效监控冷却肉品质。Mildner-Szkudlarz等[36]采用HS-GC-MS及GC-FID测定5种植物油中的挥发性成分，并用PCA法对火焰离子化检测结果进行计算，发现能很好地将不同种类的植物油分开。Cozzolino等[37]采用质谱电子传感器测定两类白酒样品中的挥发性成分，采用PCA、PLS-DA和LDA处理质谱数据，对样品进行聚类分析，发现PLS判别对两类样品的分类准确率达到90%以上。Weldegergis等[38]采用HS-GC/MS分离南非新酿葡萄酒的挥发性物质，并采用FA、PCA和LDA等化学计量学方法分析了葡萄酒挥发性物质的含量与其栽培品种或地理环境之间的关系。

2.2.2 化学计量学方法在气味指纹分析中的应用

气味指纹分析是指样品的气味信息经电子鼻检测后，借以化学计量学、统计学等方法进行处理，产生气味指纹图来鉴别样品质量的一种模式。气味指纹图谱着重研究样品气味成分变化的整体性，是基于整体宏观、非线性的综合分析方法，所表达的质量信息远比测量一种或几种化学成分要丰富的多，更适于具有复杂气味信息产品的鉴别[39]。电子鼻检测中常用的方法有PCA法、最小二乘法以及BP人工神经网络等。

朱丽敏等[31]采用电子鼻结合PCA法对食用油、果汁和鲜奶的特征风味进行研究，发现该技术对样品的分析结果具有满意的灵敏度，线性关系与标准方法吻合性良好。李永宏等[40]利用电子鼻采集商品化檀香的香气，并利用PCA、SMICA法等化学计量学方法处理数据，可以很灵敏地分析样品之间的细微差别。张晓华等[41]采用电子鼻对不同贮藏时间红星苹果的香气进行检测，并运用

化学计量学方法对数据进行处理，结果表明基于化学计量学的电子鼻技术是一种新的检测和分析产品质量的可行性方法。于慧春[42]研究了采用电子鼻结合Fisher线性判别和BP神经网络方法对茶叶、茶水和茶底样品进行分类判别和贮藏时间的预测。孙钟雷[43]根据猪肉的气味特征，建立了一套用于猪肉新鲜度识别的电子鼻系统，确定了遗传算法优化的组合径向基函数神经网络作为猪肉新鲜度的识别方法，识别率达95%，优于其他模式识别方法。顾赛麒[35]通过对电子鼻结果的PCA分析说明了不同贮藏条件下肉样间表征气味差异的变化规律。田怀香等[44]运用电子鼻采集鸡汤与添加不同物质的鸡肉香精的香气轮廓，并通过PCA、统计质量控制分析(statistical quality control，SQC)等多元统计方法进行数据分析，研究表明电子鼻技术可以较好地应用于香精的开发。

Kallithraka等[45]利用电子鼻对酒样的响应值结合PCA法，将33个酒样按产地分成3类，与液相色谱和气相色谱测定值结合PCA分类的结果进行比较，无显著差异。Penza等[46]用电子鼻结合PCA和ANN对不同产地和种类的白酒进行分类判别，分类的准确度达100%，对未知样的预报准确度为78%。Ali等[47]采用电子鼻分析葵花籽油和不同级别的橄榄油中挥发性成分，采用ANN建立模型，对橄榄油、非橄榄油和葵花子油判别的准确度为99%。Zanchettin等[48]研究了小波过滤对电子鼻分析信号的滤噪和数据压缩作用，并通过使用比较两类广泛使用的电子鼻分类器对小波分析处理香气类型的效果进行了验证。O'Sullivan等[49]使用由8个金属氧化物传感器和PLS模式识别法形成的电子鼻分析了不同饲养方式的猪肉在加工过程中的气味变化，结果表明电子鼻不仅可以清晰地区分不同饲养方式的猪肉，也可以评价猪肉加工过程中香气的变化。

2.2.3 化学计量学方法在风味物质QSAR研究中的应用

对QSAR的研究是一个涉及到化学学科的根本性的问题，即如何从物质的化学成分与结构来定量预测其化学特性。目前QSAR的研究要点就是从化合物的结构出发来建造某种数学模型，然后运用这种模型去预测化合物的活性或性质，从而为新分子的设计、评价提供理论依据，几乎所有探索化合物结构-活性关系的分析方法都是以统计学为基础的[50]。风味物质的分子结构与香味之间的关系一直是香味化学研究的热点。由于分子结构的复杂性和鉴定方法的局限性，要在分子结构与香味之间确定一种能准确地预测新化合物香味特征的理论是非常困难的。目前对风味研究较多的是停留在感官分析或风味成分分析，若从构效(性)定性或定量进行研究则能为进一步开发或改善食品风味提供重要价值[51]。

孙宝国等[52]对目前允许使用的肉香味含硫香料分子结构与香味特征进行了归纳总结，发现有机含硫化合物中对于肉香味形成起关键作用的是与碳原子以σ键相连的二价硫原子，如果在其相邻碳原子上连有氧或硫，则它们的协同作用必定导致分子产生肉香味，并且发现它们都含有相同的分子骼架。Guichard[53]综述了蛋白质-风味束缚和释放与风味感觉之间关系的主要研究成果，其中关于β-乳球蛋白的风味束缚性质的研究最为广泛，分子模型和定量构效关系研究结果证实在β-乳球蛋白上存在2个不同的风味物质束缚位点。James等[54]从吡嗪和吡啶出发，采用神经网络方法研究了柿子椒结构与其气味之间的关系。

3 结 语

化学计量学的新原理、新方法、新技术在风味物质研究中不同程度地得到了应用，尤其在风味物质色谱重叠峰以及气质联用测定结果的处理方面应用广泛，解决了一些传统的分析方法不能解决的问题。但在风味物质结构和活性关系方面的应用研究较少，尚待进一步更深入的研究。

参考文献：

[1] 周统武, 蔡娟. 化学计量学的学科现状与发展方向[J]. 中国科技信息, 2009(3): 216-219.

[2] 许禄, 邵学广. 化学计量学方法[M]. 2版. 北京: 科学出版社, 2006.

[3] SHAHIDI F. 肉制品与水产品的风味[M]. 2版. 北京: 中国轻工业出版社, 2001.

[4] GONG Fan, LIANG Yizeng, XU Qingsong, et al. Gas chromatography-mass spectrometry and chemometric resolution applied to the determination of essential oil in *Cortex Cinnamoni*[J]. Journal of Chromatography A, 2001, 905(1/2): 193-205.

[5] MAEDER M, ZILIAN A. Evolving factor analysis, a new multivariate technique in chromatography[J]. Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems, 1988, 3(3): 205-213.

[6] KELLER H R, MASSART D L, LIANG Yizeng, et al. A comparison of the heuristic evoling latent projections and evolving factor analysis methods for peak purity control in liquid chromatography with photodiode array detection[J]. Analytica Chimica Acta, 1992, 267(1): 63-71.

[7] SHEN Hailin, MANNE R, XU Qingsong, et al. Local resolution of hyphenated chromatographic data[J]. Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems, 1999, 45(1/2): 323-328.

[8] ZENG Zhongda, LIANG Yizeng, WANG Yali, et al. Alternative moving window factor analysis for comparison analysis between complex chromatographic data[J]. Journal of Chromatography A, 2006, 1107(1/2): 273-285.

[9] 王学玲, 闫晓薇, 王建林. 小波变换在信号处理中的应用[J]. 福建电脑, 2006(9): 62; 89.

[10] 王清龙, 吕全建. 化学计量学在化学中的应用进展[J]. 郑州牧业工程高等专科学校学报, 2006, 26(3): 45-47.

[11] 王加华, 韩东海. 基于遗传算法的苹果糖度近红外光谱分析[J]. 光谱学与光谱分析, 2008, 28(10): 2308-2311.

[12] 石志标, 孙江波. 基于遗传算法的机器人主动嗅觉研究[J]. 东北电力大学学报, 2011, 31(1): 61-64.

[13] 任亦贺, 骆学雷, 丰水平, 等. 基于主成分分析、遗传算法和神经网络对啤酒感官评价预测的研究[J]. 中国酿造, 2010(2): 50-53.
[14] 易伦朝, 梁逸曾, 曾仲大. GC-MS与交互移动窗口因子分析法(AMWFA)用于3种陈皮挥发油成分的比较分析[J]. 高等学校化学学报, 2006, 27(9): 1626-1630.
[15] 易伦朝, 梁逸曾, 曾仲大, 等. 交互移动窗口因子分析法(AMWFA)用于二维数据重叠色谱峰的比较分析[J]. 高等学校化学学报, 2006, 27(11): 2052-2055.
[16] 熊运海, 王玫, 余莲芳. 丁香与桂皮挥发油混合后化学成分变化分析[J]. 食品科学, 2009, 30(24): 311-315.
[17] 熊运海, 王玫, 余莲芳, 等. 化学计量学法对不同方式调制的丁香与桂皮挥发油复合物成分分析[J]. 食品工业科技, 2010(6): 118-121.
[18] 熊运海, 王玫. GC-MS和化学计量学法对苏叶、苏梗挥发油成分的比较分析[J]. 中药材, 2010, 33(5): 736-741.
[19] 胡春弟, 梁逸曾, 曾茂茂, 等. 不同品种桂花挥发油成分的分析研究[J]. 化学试剂, 2010, 32(3): 231-234.
[20] 胡春弟, 梁逸曾, 李小如, 等. GC-MS结合直观推导式演进特征投影法(HELP)用于桂花挥发油成分的分析[J]. 食品科学, 2009, 30(24): 287-289.
[21] 胡春弟, 梁逸曾, 李晓如. 丹桂挥发油的气相色谱-质谱联用分析[J]. 时珍国医国药, 2009, 20(7): 1582-1584.
[22] 陈勇, 李晓如, 曾笑. 气相色谱-质谱和化学计量学解析法分析防风挥发油成分[J]. 中国医院药学杂志, 2008, 28(6): 500-502.
[23] 吴先伟, 梁逸曾, 陈爱民, 等. 气相色谱/质谱结合化学计量学解析方法用于植物精油成分分析[J]. 分析科学学报, 2009, 25(4): 373-377.
[24] 佘金明, 彭友林, 梁逸曾, 等. 化学计量学解析法与山柰挥发油化学成分的GC-MS分析[J]. 湖南文理学院学报: 自然科学版, 2010, 22(1): 24-27.
[25] 李国辉, 兰正刚, 李晓如. 联用色谱和化学计量学方法分析赤芍挥发性成分[J]. 中南大学学报: 自然科学版, 2007, 38(1): 89-92.
[26] 万明珠, 梁逸曾, 赵晨曦, 等. 温莪术挥发性化学成分分析和指纹图谱研究[J]. 时珍国医国药, 2009, 20(10): 2428-2430.
[27] JALALI-HERAVI M, ZEKAVAT B, SERESHTI H. Characterization of essential oil components of Iranian geranium oil using gas chromatography-mass spectrometry combined with chemometric resolution techniques[J]. Journal of Chromatography A, 2006, 1114(1): 154-163.
[28] HUANG Lanfang, WU Mingjian, ZHONG Kejun, et al. Fingerprint developing of coffee flavor by gas chromatography-mass spectrometry and combined chemometrics methods[J]. Analytica Chimica Acta, 2007, 588(2): 216-223.
[29] ZENG Yingxu, ZHAO Chenxi, LIANG Yizeng, et al. Comparative analysis of volatile components from Clematis species growing in China[J]. Analytica Chimica Acta, 2007, 595(1/2): 328-339.
[30] COCCHI M, DURANTE C, FOCA G, et al. Application of a wavelet-based algorithm on HS-SPME/GC signals for the classification of balsamic vinegars[J]. Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems, 2004, 71(2): 129-140.
[31] 朱丽敏, 倪元颖, SOFFY V. 气味指纹分析技术在食品质控和风味研究的应用[J]. 农产品加工: 学刊, 2005(10): 72-80.
[32] 宁井铭, 张正竹, 方世辉, 等. 指纹图谱技术及其在茶叶品质控制中的应用[J]. 中国茶叶加工, 2009(3): 39-41.
[33] 王志军. 中药指纹图谱建立方法的研究及化学计量学的应用[D]. 上海: 同济大学, 2007.
[34] 黄世杰, 许蔼飞, 王维刚, 等. 主成分分析法在烟用香精质量控制中的应用[J]. 安徽农业科学, 2009, 37(30): 14537-14538; 14601.
[35] 顾赛麒. 气味指纹技术检测不同贮藏条件下冷却肉新鲜度变化[D]. 上海: 上海海洋大学, 2009.
[36] MILDNER-SZKUDLARZ S, JELEN H H, ZAWIRSKA-WOJTASIAK R, et al. Application of headspace-solid phase microextraction and multivariate analysis for plant oils differentiation[J]. Food Chem, 2003, 83(4): 515-522.
[37] COZZOLINO D, SMYTH H E, CYNKAR W, et al. Usefulness of chemometrics and mass spectrometry-based electronic nose to classify Australian white wines by their varieta origin[J]. Talanta, 2005, 68(2): 382-387.
[38] WELDEGERGIS B T, de VILLIERS A, CROUCH A M. Chemometric investigation of the volatile content of young South African wines[J]. Food Chem, 2011, 128(4): 1100-1109.
[39] 陈晓明, 李景明, 李艳霞. 电子鼻在食品工业中的应用研究进展[J]. 传感器与微系统, 2006, 25(4): 8-11.
[40] 李永宏, 毛海舫, 田怀香, 等. 用电子鼻比较罗地亚檀香系列的香气[J]. 香料香精化妆品, 2009(2): 4-7.
[41] 张晓华, 常伟, 李景明, 等. 电子鼻技术对苹果贮藏期的研究[J]. 现代科学仪器, 2007(6): 120-123.
[42] 于慧春. 基于电子鼻技术的茶叶品质检测研究[D]. 杭州: 浙江大学, 2007.
[43] 孙钟雷. 电子鼻技术在猪肉新鲜度识别中的应用[J]. 肉类研究, 2008, 22(2): 50-53.
[44] 田怀香, 肖作兵, 徐霞, 等. 电子鼻技术结合多元统计方法在鸡肉香精开发中的应用[J]. 中国调味品, 2011, 36(6): 61-65.
[45] KALLITHRAKA S, ARVANITOYANNIS I S, KEFALAS P, et al. Instrumental and sensory analysis of Greek wines; implementation of principal component analysis (PCA) for classification according to geographical origin[J]. Food Chem, 2001, 73(4): 501-514.
[46] PENZA M, CASSANO G. Chemometric characterization of Italian wines by thin-film multisensors array and artificial neural networks[J]. Food Chem, 2004, 86(2): 283-296.
[47] ALI Z, JAMES D, O'HARE W T, et al. Application of a radial basis neural network for classification of fresh edible oils[J]. J Therm Anal Calorim, 2003, 71: 147-154.
[48] ZANCHETTIN C, LUDERMIR T B. Wavelet filter for noise reduction and signal compression in an artificial nose[J]. Applied Soft Computing, 2007, 7(1): 246-256.
[49] O'SULLIVAN M G, BYRNE D V, JENSEN M T, et al-A comparison of warmed-over favour in pork by sensory analysis, GC-MS and the electronic nose[J]. Meat Science, 2003, 65(3): 1125-1138.
[50] 郑树林, 郑瑞霞, 李树坤. 定量构效关系在化学计量学发展中的作用[J]. 化学分析计量, 2009, 18(1): 87-88.
[51] 刘晓庚, 陈优生, 曹崇. 清凉化合物及其风味特性[J]. 粮食与油脂, 2008(11): 44-47.
[52] 孙宝国, 丁富新, 郑福平, 等. 含硫香料分子结构与肉香味的关系研究[J]. 精细化工, 2001, 18(8): 456-460.
[53] GUICHARD E. Flavour retention and release from protein solutions[J]. Biotechnology Advances, 2006, 24(2): 226-229.
[54] JAMES D. Neural networks in QSAR and drug design[M]. London: Academic Press, 1996: 83-96.