

机器学习算法在食品气味表征中的应用

李 帅, 柴春祥*, 刘建福

(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 食品气味的客观表征对于食品生产工艺优化及品质评价具有重要意义。然而,食品气味形成机理复杂、成分繁杂,加之气味的评价过程易受环境、心理及感知方式等多种因素的影响,使得在表征食品气味时需要处理大量高维复杂的信息,这要求借助具有强大数据处理能力的工具。伴随人工智能、计算机科学以及大数据技术的快速发展,机器学习具备了强大数据处理能力。因此,使用机器学习表征食品气味已成为可能,此过程的实现主要依赖机器学习算法。本文概述各类机器学习算法在食品气味客观表征中的应用情况,总结使用机器学习算法对食品气味进行表征的优势和待解决的问题,并展望机器学习算法应用于食品气味表征的未来发展方向。

关键词 食品; 气味表征; 机器学习; 算法

文章编号 1009-7848(2024)08-0486-16 **DOI:** 10.16429/j.1009-7848.2024.08.043

气味是消费者关注的食品属性之一,在一定程度上直接决定消费者对食品的接受程度。食品的气味属性包括气味类型和气味强度。气味的客观表征有助于评测食品品质,挑选合格产品,以提高在售食品质量,减少食品劣质问题。食品气味客观表征已成为食品科学领域研究的热点。

目前,食品气味表征一般使用感官评定的方法。由于人们对气味的感知过程受环境、心理及气味分子的物化性质等多种因素的影响^[1],感官评定不可避免地具有主观性和个体差异性^[2-3]。研究人员一直在探索食品气味的客观表征方法,构建食品气味的科学表征体系。已有学者通过气相色谱-质谱联用技术(Gas chromatography mass spectrometry, GC-MS)解析水果^[4]、水产品^[5]、白酒^[6]、香料^[7]、坚果^[8]等各类食品中的挥发性组分,用挥发性组分成分含量描述食品气味。结合气相色谱嗅觉闻技术(Gas chromatography olfactory technology, GC-O)、香气遗漏试验及香气混合物重构试验,有研究者进一步确定了食品挥发性组分中的关键致香成分,选取具有代表性的香气成分评价食品气味^[9-10]。也有不少研究者通过电子鼻技术(Elec-

tronic nose, EN)建立了反映食品整体风味信息的风味指纹图谱,实现了食品新鲜度^[11]、成熟度^[12]等品质的预测。

上述食品气味表征的研究中,不论是通过GC-MS对食品风味物质进行解析,还是通过电子鼻对食品风味轮廓进行描述,都不能直观地表征食品的气味类型。食品气味成分复杂多样,且存在相互作用^[13],人们对于气味感知过程的研究还不深入,不能直接以食品中挥发性成分的含量或电子鼻响应值表征食品的气味强度。食品气味包含大量信息,食品气味的科学表征需借助具有强大数据处理能力的工具。机器学习(Machine learning, ML)能够应对高维、复杂的大数据集,通过对数据的学习将食品气味信息与人们感知联系起来,建立食品气味属性的表征模型,实现食品气味类型和强度的客观表达。图1为使用ML表征食品气味的研究方法。ML可从数据中提取知识,它是统计学、人工智能和计算机科学交叉的研究领域,也被称为预测分析或统计学习^[14],其起源于上世纪50年代初,历经70多年发展,诞生了各具特色的多种算法^[15]。ML已广泛应用于医学^[16]、计算机科学^[17]、生物学^[18]、化学^[19]等各学科领域,近年来更是在食品掺假识别^[20]、食品分级分类^[21]、食物搭配和食谱开发^[22-23]等食品科学领域应用极多。

由图1可知,使用机器学习表征食品气味的关键在于建立表征气味的机器学习模型,而该模型的核心是其算法。应用于食品气味表征的各种机器学

收稿日期: 2023-08-17

基金项目: “十三五”国家重点研发计划项目(2021YFD2100204-03);天津市农业科技成果转化与推广项目(201901090)

第一作者: 李帅,男,硕士生

通信作者: 柴春祥 E-mail: ccxiang@tjcu.edu.cn

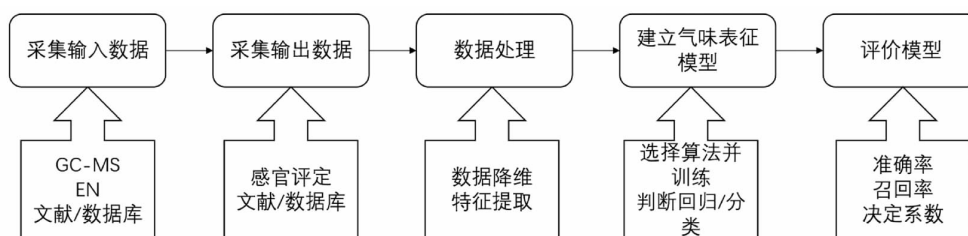


图 1 通过机器学习对食品气味进行表征的研究方法

Fig.1 A research approach to characterizing food odors through machine learning

习算法可分为传统机器学习算法 (Traditional machine learning algorithms, TMLA) 和人工神经网络 (Artificial neural network, ANN)。TMLA 主要包括: 主成分分析 (Principal component analysis, PCA)、偏最小二乘 (Partial least squares, PLS)、随机森林 (Random forest, RF)、支持向量机 (Support vector machine, SVM)、梯度提升算法 (Gradient boosting, GBoost) 等。ANN 主要包括: 反向传播神经网络 (Back-propagation neural network, BP-NN)、多层感知机 (Multilayer perceptron, MLP)、卷积神经网络 (Convolutional neural network, CNN)、自编码器 (Autoencoder, AE) 等。本文旨在梳理各类机器学习算法在食品气味表征中的应用情况, 以期为此领域的研究提供一些参考。

1 传统机器学习算法在食品气味表征中的应用

1.1 主成分分析 (PCA)

食品气味纷繁多样, 且由许多包含大量信息的各种气味分子产生。在表征食品气味时, 人们需要筛选高维复杂的食品气味数据。主成分分析 (PCA) 是一种最古老的多元统计分析技术, 其中心目的便是将数据降维, 以排除变量中相互重叠的信息。使用 PCA 进行食品气味表征的步骤一般包括数据标准化处理、计算协方差矩阵以及计算本征值和本征矢量, 最后选择所需要的主成分进行分析和应用。

食品气味研究者从特征变量展开 PCA 分析并绘制 2 维或 3 维主成分得分图以可视化高维复杂的气味数据, 探究食品中挥发性成分与食品气味感官描述之间的相关性。例如 Benet 等^[24]发现具备不同风味的 2 种火腿能够清楚地分散于主成分得分图中 2 个不同的椭圆置信区间, 进一步发现肌内脂

肪含量较高的火腿的总体风味与 2-甲基-3-咪唑和愈创木酚的相对含量呈正相关关系, 证明了猪肉火腿的感官风味与其挥发性成分之间存在强相关性。González Álvarez 等^[25]同样使用 PCA 研究了葡萄酒风味与其挥发性成分之间的相关性。发现 1 号和 3 号葡萄酒的香气特征与 2-苯基乙醇和辛酸最为相关, 而 5 号葡萄酒香味则与异戊醇和甲硫醇最为相关。这些研究表明食品中挥发性成分与其最终的感官风味存在强相关性, 为 PCA 表征食品气味提供了依据。

PCA 提取出的主成分可用于建立气味得分函数, 进行食品气味评价。宫雪等^[26]比较了不同酿造酵母酿造的葡萄酒的感官品质。其使用 PCA 提取出葡萄酒电子鼻数据的前 2 个主成分建立主成分综合模型, 以模型得分对具有不同香味的葡萄酒进行排序。结果与专业评定人员的品尝结果高度一致, 只有 2 个样品的排列顺序发生颠倒。孟祥忍等^[27]使用 PCA 提取出 5 种卤煮牛肉的风味化合物的前 3 个主成分用以评价牛肉风味强度, 评价结果与感官评定结果相关性系数为 0.9, 两者呈现较好的一致性。

PCA 作为一种无监督学习方法, 在食品气味表征中单独使用的情况较少, 更多的是作为数据前处理工具, 进一步结合其它机器学习算法对食品气味进行表征。Rugard 等^[28]表征了不同气味化合物的气味类型, 其使用 PCA 对 1 024 位的气味指纹信息进行降维, 并结合凝聚层次聚类分析 (Agglomerative hierarchical clustering, AHC) 和 K 均值聚类算法 (K-means clustering algorithm, K-means) 把带有不同气味描述符的化合物分为不同的簇, 成功得出了不同气味化合物的气味类型。Szulczynski 等^[29]将数据降维后所得的主成分作为输入变量, 建

立了甲醛、丁酸、蒎烯 3 种物质的混合物的气味强度和愉悦度的主成分回归 (Principal component regression, PCR) 模型,各样本中模型的决定系数 R^2 均大于 0.8。

PCA 在实现数据降维的同时又能够保留大部分原始变量的有效信息,其作为一种强力的数据处理手段可用于全部食品的气味成分与其气味属性相关性分析、气味数据降维以及特征提取。然而,PCA 假设变量之间的关系是线性的,真实的数据却不总是这样,在处理维度和复杂度过高的气味数据集时,需要根据具体情况引入适合的函数予以校正。另外,目前 PCA 大多选择定量数据表征食品气味,如果能将定性数据(例如颜色)加入到分析过程中,则能够提取更多有效信息,这样可提升食品气味表征的准确性。基于食品混合数据作主成分分析并进一步建立食品气味表征模型的研究思路值得探究。

1.2 偏最小二乘(PLS)

偏最小二乘法(PLS)是以上述 PCA 为数学基础发展起来的一种多元统计方法,常用于分析变量之间的相关性,并可建立回归预测模型。PLS 集合了 PCA 和多元线性回归 (Multiple linear regression, MLR) 的思想,具有较强实用性,已有不少研究者将其用于食品气味表征中。

PLS 模型的气味表征性能很大程度上取决于人工特征选取的优良,不同的研究者往往会采取不同的特征选取方式。Bueno 等^[30]建立了羊肉风味的 PLS 回归预测模型,其计算出烤羊肉挥发性成分的香气活性值(Aroma activity value, OAV),对挥发性成分和羊肉风味进行相关性分析得其偏最小二乘相关系数,选取相关系数大于 0.8 的挥发性成分的 OAV 加和的平均值作为特征值。模型的解释方差和均方根误差分别为 0.842 和 0.227。Guo 等^[31]在表征苹果汁气味强度时则采取了不同的数据筛选策略。其选取 OAV 值大于 0.5 的 19 个挥发性成分,几何平均值大于 10% 的 8 个气味描述符,成功建立了苹果汁 7 种气味的 PLS 表征模型,其中香蕉味的 PLS 模型最优,能够解释 93.4% 的观察方差和 84.5% 的交叉验证差异。Aznar 等^[32]使用 PLS 建立红酒香味表征模型。没有像前两者一样以 OAV 值作为输入变量,而是自行设定了一个相关系数阈

值将具有同样生化性能的挥发性成分归类在一起,最终提取 6 类成分建立模型,所建 PLS 模型的预测标签与真实标签相关系数范围为 0.62~0.81。Ojha 等^[33]在建立葡萄酒气味阈值的预测模型时则进行了复杂的特征提取工作,其从前人研究成果中收集整理了葡萄酒的共有气味分子及其对应的阈值,使用 Dragon software version 6 计算气味分子的 2D、3D 描述符,并将描述符数据集中标准偏差小于 0.0001 和相互之间相关系数大于 0.95 的成对描述符之一剔除,再使用遗传算法逼近函数(Genetic function approximation, GFA)和交叉验证进一步提取描述符,获得最优数据集以建立 PLS 模型,模型的决定系数 R^2 达 0.923。随后其使用相同的研究方法又建立了红茶和咖啡气味阈值的 PLS 预测模型^[34],同样取得了较好效果。

偏最小二乘(PLS)引入潜变量后可大大降低原自变量个数,剔除冗余数据,特别适合自变量个数多于试样个数的食品气味表征。研究者已通过 PLS 建立起羊肉、苹果汁以及红酒的气味表征模型,证明 PLS 可用于基于 GC-MS 解析出的挥发性成分表征肉类及饮料的气味,然而所建立的 PLS 气味表征模型的性能很大程度上取决于特征的选取。不同研究者的研究对象不同,数据集的大小不同,表征的气味属性不一致,难以指出哪一种特征选取方式更好。目前多数研究者都选择 OAV 值大于某个阈值的关键香气成分作为输入特征,而这实际上会丢失那些 OAV 值小但对气味属性具有较大贡献的成分。食品气味研究者可探究特征工程 (Feature engineering, FL) 对 PLS 气味表征能力的具体影响,改良 FL 以提升 PLS 气味表征能力

1.3 随机森林(RF)

随机森林(RF)最早由 Breiman^[35]于 2001 年提出,是一种使用预测变量的二进制拆分来确定预测结果的机器学习算法。RF 模型简单,易于实践,已广泛应用于乳制品生产中的气味分析^[36]、人体嗅觉机理研究^[37],近年来则进一步开始使用 RF 进行食品气味表征。

RF 在食品气味表征中通常作为一种强大的分类器使用,预测食品的气味类型。蒋丹凤等^[37]基于 RF 建立了 34 种香料的气味表征模型。与 K 最近邻分类(K-nearest neighbor algorithm, KNN)和梯

度提升决策树 (Gradient boosting decision tree, GBDT)两个算法作比较后,发现 RF 性能最优,准确率和 F1 值分别达 0.936 和 0.903。Zhang 等^[38]表征了 598 个不同结构化合物的气味类型,其将数据集中的气味标签归类为辛辣的、芳香的、无臭的等 12 种,同样使用 RF 的方法建模,模型对气味的识别准确率达(93.40±0.31)%。

相较于 PLS,RF 具备一定的自动筛选特征的能力。Li 等^[39]在使用 RF 建立分子气味图谱识别模型时发现所使用的特征分子并不一定是与感官描述强相关的分子类型,进一步还发现 RF 只需要选择前 5 个特征即可获得与使用了所有 4 884 个特征的模型相似的性能,这一点在 Vigneau 等^[40]表征葡萄酒的“甜椒味”和“皮革味”时体现得更加明显。Vigneau 等^[40]发现在所建的 RF 模型中,使用前 3 个最重要变量比使用所有变量的模型预测误差要小。例如在“甜椒味”属性得分的 RF 表征模型中,使用前 3 种挥发性化合物的模型的均方根差(Root mean square error, RMSE_{cv})为 0.259,而使用了所有挥发性化合物的模型的 RMSE_{cv} 上升至 0.362。两者都证明了 RF 在模型训练过程中只需选择一个较小的特征集即可较为准确地表征出食品气味属性。

RF 能够处理包含大量数据的变量集合,非常适合研究数量众多同时又携带海量特征信息的食品分子与其气味之间的关系。RF 最大的优势体现在可以通过遍历特征选取最优属性进行树节点分裂,不容易丢失利于分类的重要变量,使其能够捕捉到那些单独存在时贡献较小而与其它变量相互作用时贡献较大的气味信息。然而,使用众多决策树遍历特征的过程涉及树深度、树的最大特征变量等多个参数,需要挖掘快速便捷的参数搜索算法以提升 RF 在食品气味表征中的实用性。

1.4 支持向量机(SVM)

从根本上讲,SVM 通过推出一个最佳分离超平面来解决定性分类或定量回归问题^[41]。然而,食品气味信息庞大冗杂,人们对气味属性的描述更是复杂多变。因此气味的特征信息与其气味属性之间往往并不具备一对一的良好线性关系^[41]。这使得食品气味的表征多数时候都要面对线性不可分情况。所以在使用 SVM 表征食品气味时,需要引入核函

数将样本数据投影到高维空间使其线性可分。

SVM 虽然在食品风味分析领域已有较多应用,但多数是通过风味差异对食品进行分类和分级^[42-44],不过也有研究者使用支持向量回归算法(Support vector regression, SVR)进行食品气味强度的回归预测。Yan 等^[45]通过 SVR 建立了乙酸乙酯、乙酸丁酯和正戊醛等 9 种气味化合物的二元混合物的气味强度表征模型。除甲苯和乙苯混合物的模型外,其余模型的决定系数 R^2 在训练集中均高于 0.87,在测试集中均高于 0.81。甲苯和乙苯混合物气味强度表征准确性较差的原因可能是感官评定结果的不准确性,因为 SVR 对数据集中的噪声较为敏感。

特征选择同样是 SVM 模型性能的关键影响因素,而与 PLS 表征气味的情况不同,不少研究者已经着眼于不同特征提取算法与 SVM 的组合对最终食品气味表征准确性的影响,不再使用具备主观性的人工特征选取。Liu 等^[46]在表征单体香料的留香强度时,分别使用 PCA、lasso 算法、AE 等算法进行特征提取。相比于原始 260 维数据的 SVM,降维后的 SVM 的表征准确率均有所下降,而 AE+SVM 模型在将数据降低至 63 维的同时,准确率仅下降了 0.56%,具备最佳的模型性能。朱红梅^[47]在基于分子质谱数据表征气味时,同样发现在不同特征提取算法与 SVM 的组合中,AE+SVM 效果最优,对其所建气味感知空间的识别准确度达 0.8565,相比于 PCA+SVM 和 LDA+SVM 分别大约高出 25% 和 35%。而 Liu 等^[48]和 Bonah 等^[49]则在其研究中发现遗传算法(Genetic algorithm, GA)与 SVM 组合效果最优。以上研究说明 AE 和 GA 两种算法的引入能够提升 SVM 表征食品气味的准确性,值得借鉴。

支持向量机(SVM)直接用于食品气味表征的研究还较少,而从理论上讲,其能够处理绝大多数食品的电子鼻数据和质谱数据,尤其在基于小样本数据集的气味类型分类中具备一定优势。然而,由于需要通过核函数变换特征空间以应对食品气味的非线性情况,要求选择最佳的核函数及其参数,一般都选择高斯函数建立径向基函数(Radial basis function, RBF)分类器,因为 RBF 的参数少,易于优化。同时,SVM 对核函数参数和惩罚参数非常敏感,在算法训练过程中需要设置合理的参数。最后,将多种算法与 SVM 组合以不断提升 SVM 表征

食品气味的准确性是目前使用 SVM 识别气味感知的发展趋势。

1.5 梯度提升算法(GBoost)

GBoost 作为一种新兴的非参数机器学习算法,既可以用于连续值的回归分析也可用于离散值的归类。已有部分研究者将其应用于食品气味分析中^[50-51],而使用梯度提升算法直接表征食品气味属性的研究还极少。

Chacko 等^[52]基于 Keller 提出的分子数据库表征气味的感官评定结果,其依据语义描述符出现的频率及分布均匀性筛选出“sweet”“musky”2 个气味描述符进行气味表征模型的建立。包括 GBoost、自适应梯度提升(Adaptive boosting, AdaBoost)、极限梯度提升(Extreme gradient boosting, XGBoost)等 6 种模型,并进一步探究了是否使用 Boruta 算法进行特征选取对模型性能的影响。结果发现,未进行特征选取前“sweet”最优算法为 AdaBoost,“musky”最优算法为 GBoost;而在进行特征选取后,RF 对“sweet”的表征准确率大幅提升,F1 值达到 0.85,“musky”最优算法仍为 GBoost,这说明特征工程对算法的表现具有决定性的影响,某个算法表征食品气味的能力并不具备一定的优劣属性。

研究者在表征食品气味时都希望获得完整数据,而多数情况下数据集都是有所遗漏的。针对此问题, Lee 等^[53]专门探究了缺失数据的不同处理方法对最终模型气味表征能力的影响。对缺失数据采取插补和直接删除 2 种处理方式,结果发现不论采取何种插补方式建立何种模型,其确定系数 R^2 均高于直接移除了此变量的模型,平均绝对误差 MAE 均低于移除了该变量的模型,证明了直接删除某一缺失率高的变量会造成气味表征不准确。Lee 等^[53]进一步探究了不同插补方法对模型表征准确率的影响,在所建 126 个模型中,表征准确率排名前 5 的模型使用最多的方法是多变量插入(Multivariate imputation, MI)和 K 最近邻插补(K-nearest neighbor, KNN),最优的表征模型是 XGBoost 和极度随机树(Extreme random tree, ERT)。

GBoost 可以插入任何损失函数,模型易于优化,灵活多变,可塑性极强。只是训练速度较慢,因为该算法不能实现并行训练。GBoost 目前在食品气味表征中的应用还较少。

1.6 食品气味表征中传统机器学习算法的比较

上述传统机器学习算法已成功应用到肉类、饮料甚至数目繁多的单体香料等各类食品的气味表征之中。表 1 为食品气味表征中各传统机器学习算法的比较。总体而言在使用传统机器学习算法对食品气味进行表征的研究中,PCA 是使用最多的方法,其操作便捷,容易实现,且能将高维数据可视化,广泛应用于数据降维和特征挖掘。在建模时,多数研究者倾向于使用偏最小二乘(PLS)、随机森林(RF)和支持向量机(SVM)3 种方法。PLS 集合了 PCA、PCR 及 MLR 3 种思想于一体,相比于其它线性回归方法具有一定优势,较多的应用于基于食品挥发性成分的气味表征模型建立中。只是其模型性能很大程度上取决于特征变量的选择。RF 和 SVM 两者都能够较好的处理食品气味表征中的非线性情况,非常适合研究包含大量信息且互相之间存在相互作用的气味分子。然而,模型的算法较 PLS 复杂一些,涉及多个参数,训练成本较高。梯度提升算法(GBoost)的使用很少,不过该方法具备许多优点,因此在食品气味表征中仍然存在一定的潜力和研究价值。

传统机器学习算法在一定程度上已经可以实现食品气味属性的客观表征,通过多元算法的联用和组合以提升气味表征准确性和模型计算效率是其发展趋势,其最大的局限性在于模型性能很大程度上取决于人工特征工程设计的优良。

2 神经网络在食品气味表征中的应用

ANN 的核心思想是以数据为驱动,通过各种线性和非线性变换,利用各类有监督和无监督的组合训练方式完成特征提取和转换任务,实现复杂样本数据的关系拟合^[54]。ANN 与传统机器学习算法相比主要具备以下 3 点优势:1)具备更强大的数据处理能力,能够应对容量更大、维度更高的气味数据集;2)具备自动学习数据特征的能力,例如使用 CNN 对食品气味的电子鼻数据进行自动的特征提取^[21]。3)能够将数据的时空信息纳入模型之中,而 Smyth 等^[55]很早就提出进行食品气味分析时应该考虑时间维度的变化。基于 ANN 强大的学习能力和各种优势,已经涌现出不少使用其进行食品气味表征的研究。

表 1 食品气味表征中传统机器学习算法的比较

Table 1 Comparison of traditional machine learning algorithms in food odor characterization

算法名称	优点	缺点	适用场景
PCA	无监督方式,无需训练,应用较为简单快捷	处理的数据类型单一 处理高维非线性数据集能力弱	GC-MS 解析出的挥发性成分降维,挖掘关键贡献成分;探究食品挥发性成分与其风味的相关性;电子鼻数据阵列降维,挖掘特征传感器;大数据集的降维处理,为 ML 建模奠定基础
PLS	引入潜变量,降低共线性,剔除冗余信息	需要有监督的训练;模型性能依赖特征选择	仪器数据与气味感官评定间的相关性分析;基于 GC-MS 的气味表征模型的建立;分子结构-气味表征模型的建立
RF	遍历特征,不易丢失关键气味信息;能够自动选取最优特征;不需要数据的标准化、归一化处理;可用于较大的气味数据集	涉及多个参数,且需要把握训练时间,适时剪枝	基于 GC-MS,EN 以及小中型数据集的气味类型预测;人体嗅觉机理研究
SVM	结构风险最小化,既能分类也能回归	涉及核函数,模型对核函数参数敏感;模型性能受特征选择影响大;大规模数据集处理效率较低	基于 GC-MS,小型数据集的气味类型分类、气味强度回归
GBoost	模型灵活多变,易于优化	不能并行训练,训练时间较长	在气味表征中使用极少,有待开发

2.1 反向传播神经网络(BP-NN)

BP-NN 是较为经典的一种神经网络,其引入反向传播算法(Back propagation, BP),通过预测结果与真实值之间的误差不断调整网络的各个参数以提升模型性能。

Yang 等^[56]在对羊奶香味强度进行 Fisher 判别后,又建立了 BP-NN 表征模型,BP-NN 的识别准确率为 100%,而 Fisher 模型则会出现误判。Kim 等^[57]则专门表征了浓缩咖啡的鼻后香气(Retronasal aroma, RA),结果显示所建网络能够识别咖啡的烘烤味、酱香味、土腥味及甜味等 4 种不同的鼻后香味,对烘烤味的识别效果最好, R^2_c 为 0.86, RM-SE_c 为 0.42。Zou 等^[58]在预测绿茶的苦味和涩味时,建立了基于电子鼻传感器响应值的 MLR、PLSR 及 BP-NN 3 个气味识别模型,结果表明 BP-NN 模型的识别能力最强,模型的回归系数在校正集和预测集中分别高达 0.981 和 0.923。

上述研究中 BP-NN 的结构比较简单,而在乳产品、饮料等食品中已经展现出比某些传统机器学习算法更强的气味表征能力。食品气味信息繁杂,

许多研究者都倾向于使用具有更多隐藏层的深层神经网络来提取更多有效特征以更加准确地表征食品气味。然而,误差在反向传播的过程中会不断衰减,经过多层网络的传递后会变得很小,使得 BP 算法并不能用来训练深层网络。这使得 BP-NN 在食品气味表征中的应用受到很大局限。

2.2 多层感知机(MLP)

MLP 在经典 ANN 基础上增加了若干隐藏层,以提升模型学习能力,网络深度和结构复杂度进一步提升,属于一种深度学习网络(Deep learning network, DLN)。相较于经典 ANN,能够处理食品气味中更高维度的数据和更加复杂的情况。

Kiani 等^[59]在表征藏红花香气强度时,使用 PCA 对所得 11×990 的电子鼻数据矩阵进行降维,由载荷分析(Load analysis, LA)将 11 个传感器分为强相关、较相关、弱相关 3 类。随后其以 R^2 和 RMSE 为指标对所建的 MLP 网络和径向基函数网络(Radial basis function network, RBFN)的表征能力作比较。结果发现 MLP 的总体表征能力比 RBFN 强,例如在使用了所有传感器数据的模型

中:MLP的 R^2 和RMSE分别为0.98和0.91,RBFN的则分别为0.925和2.7。这可能是由于MLP隐藏层中的双曲正切S型函数(Tangent-sigmoid function)比RBF更具有鲁棒性。同时发现随着神经元数目增加,网络的表征能力会增强。Bo等^[60]表征出了不同气味分子的果香、花香和木香等不同类型的气味。同样使用LA进行特征扫描,剔除重复数据,进一步通过负载分布(Load distribution, LD)选择特征变量。最后建立了基于分子描述符的MLP-Des表征模型和基于分子指纹的MLP-Fin表征模型,2种模型又包含二元气味的表征模型和多元气味的表征模型。2个模型的结构相同,只是二元MLP模型比多元MLP模型多了一个全连接层,除输出层使用Sigmoid激活函数外,其余层都使用ReLU激活函数。结果显示MLP-Fin模型在识别有无气味时表现最佳,准确率和AUC指标分别达0.98和0.99。在混合香味识别中,MLP-Fin同样具有最好的判别能力。

因为增加了网络的深度而提高了模型学习能力,MLP能够在高维复杂的气味信息中找到原

始数据与食品气味属性之间的映射关系,能够较为准确地表征食品气味属性。然而,一味地增加网络深度会导致网络训练时间延长,计算效率下降,甚至出现过度拟合。

2.3 卷积神经网络(CNN)

卷积神经网络(CNN)是一种著名的深度学习体系结构,其创造灵感来自于生物体的自然视觉感知机制。LeCun等^[61]于1990年构建了最为经典的LeNet-5网络模型,开创了CNN现代框架。经过30多年的研究和发展,以LeNet-5为模板,已经分化出多种多样的CNN网络,广泛应用于语音^[62]、图像^[63]等信息的识别以及食品品质的无损检测^[64]中,同时也是食品气味表征领域中使用最多的一种神经网络模型。即便研究目标是建立其它类型的神经网络,也往往会引入“卷积”的思想,因为CNN具备强大的自动提取特征的能力。

为了提升CNN对食品气味表征的准确性和模型的综合性能,多数研究者都会对CNN进行优化并与其它网络组合。Bi等^[65]在建立花生油气味的CNN表征模型时揉和了GoogLeNet和SqueezeNet

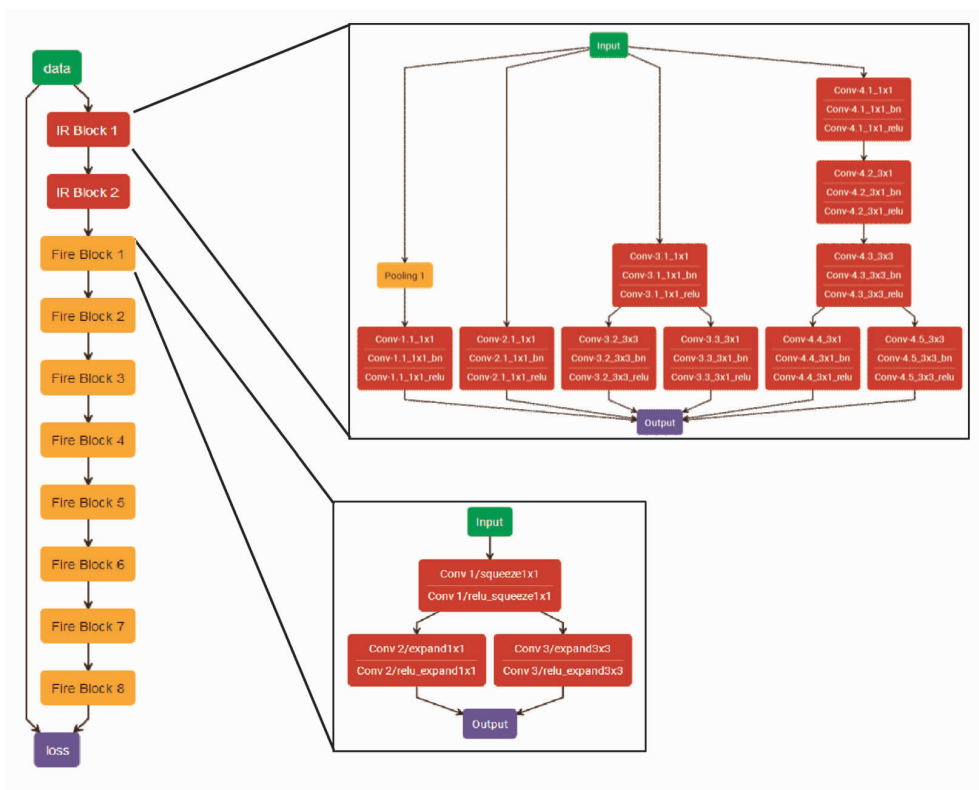


图2 基于GoogLeNet和SqueezeNet的CNN模型^[64]

Fig.2 CNN model based on GoogLeNet and SqueezeNet^[64]

2 个网络。所建模型包含 2 个 IR 模块和 8 个 Fire 模块,IR 模块代表 GoogLeNet,负责提取特征和纵向压缩,可提升模型泛化能力;Fire 模块代表 SqueezeNet,可减小特征尺寸并使用多个 remu 函数激活网络。模型结构如图 2。为防止模型过拟合,其还引入了批归一化处理 and L2 算法。结果显示所建模型在 20 次迭代中是收敛的,对花生油气味的识别准确率 92.94%,错判率 0.88%,漏判率 2.65%,误判率 3.53%,在与 PLSR 模型对比后进一步证明了所建模型的优越性。

神经网络模型对其神经元之间的权重和偏置是极为敏感的,直接关系到模型最终的气味表征能力。Sharma 等^[66]在使用 CNN 表征分子气味时,将预先训练过的 VGG16 和 Xception 2 个网络中的训练参数引入其所建的基础 CNN 模型中。结果发现新的 VGG16-CNN 模型表征准确率由原来的 55.5% 上升至 97.8%,新的 Xception-CNN 模型表征准确率则上升至 98.3%。在随后与前人所建模型比较中进一步证明了所建 VGG16-CNN 和

Xception-CNN 模型具有更高的表征准确率。这简化了探讨网络参数的过程同时又提升了模型性能,值得借鉴。

在对气味属性进行表征时,CNN 掌握的信息越多,越能够准确地表征出气味。Liu 等^[67]将分子空间信息纳入研究范围,建立了 1 200 个化合物气味强度的 3D 维度的图卷积神经网络表征模型 (Three-dimensional graph convolutional network, 3DGCN)。模型结构主要包含 2 个图卷积层、1 个图聚合层,2 个全连接层,如图 3。以邻接矩阵、特征矩阵及相对位置矩阵的方式实现气味分子图像化以作为输入,通过 ReLu 和 tanh 2 个函数使分子信息的标量特征和矢量特征相互转化以实现卷积,以 s2s、max、sum、age 4 种方式进行池化以获得不同输出。同 RF、SVR、MLP 等 5 种模型对比后发现加入了分子拓扑空间因素的 3DGCN 模型的气味表征能力最优。3DGCN 的 R^2 均在 0.7 以上,其它模型的 R^2 都在 0.65 以下,以 s2s 进行池化的 3DGCN 模型效果最佳。

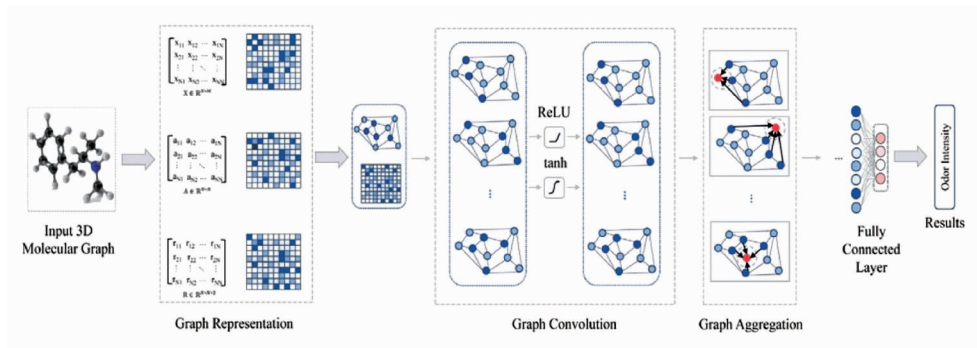


图 3 3DGCN 模型的基础结构^[66]

Fig.3 Infrastructure of the 3DGCN model^[66]

Wang 等^[68]将分子图像进一步升维成包含更多信息的超图(Hypegraph),并将气味分子之间的相互作用以及人体嗅觉感官神经元的相互作用考虑到模型的建立之中,引入横向注意抑制机制,建立了超图-卷积神经网络(Hypergraph-CNN)以提取分子结构图像信息;同时将注意力因子分解机制引入深度神经网络(Deep neural network, DNN)中以提取分子特征描述符信息,综合两个特征信息表征对应分子的气味属性。结果显示相较于传统的图神经网络(Graph neural network,

GNN)和深度神经网络(Deep neural network, DNN),其所建的 Hypergraph-CNN 模型性能最优,预测精确度 0.6552,召回率 0.7701,F1 值 0.7081,ROC 曲线面积 0.8656,4 个指标均比其它模型高。

CNN 由于具备强大的自动提取特征的能力、泛化能力以及较高的计算效率而广泛应用于各类食品以及气味分子的气味表征中。同时已有研究证明,相比于传统的文本型数据和数字型数据,图像型数据包含更多有效信息^[69]。将原始数据转化为图像再输入 CNN 中有助于提高其食品气味表

征能力^[70-72]。随着 CNN 各种优化算法的开发,如反卷积和空间变换,以及与其它网络的联用,将使得其在食品气味表征中越来越具有应用价值。

2.4 自编码器(AE)

自编码器(AE)作为典型的无监督深度学习模型,旨在通过将网络的期望输出等同于输入样本,实现对输入样本特征的学习^[73]。

自编码器(AE)可以学习到数据的隐藏特征,并可以使用学习到的新特征重构原始输入变量,在食品气味表征模型的建立过程中,更多的是充当“特征提取器”的作用。Nozaki 等^[74]使用自编码器表征化学品的气味感官描述时,专门比较了 PCA 与 AE 的数据降维效果。结果发现不论是感官数据还是质谱数据,AE 对数据降维后的平均重构误差 (Mean reconstruction error, MRE) 都比 PCA 的要小,尤其在质谱数据中,MRE 差值最高时接近 50,而其最终所建模型的决定系数也比传

统 PLSR 高出 0.15。

将 AE 与各种深度学习方式融合,建立复杂度更高的模型以提升气味表征准确率和模型的泛化能力已成为一种趋势。Wen 等^[75]结合电子鼻技术和 CNN,并借用自编码器原理表征槟榔、山楂等的气味。其编码和解码 2 个部分都使用 CNN 方式进行,在编码环节卷积 2 次,池化 2 次以提取特征;在中间层加入一个 Softmax 分类器输出气味标签;最后在解码环节转置卷积 2 次,解池化 2 次,返回原始输入变量,其过程如图 4 所示。如此可以回溯输入特征,探索模型学习过程中聚焦于哪些特征并有望通过改进单点编码器解决 1 对多的分类问题。最后将其所开发的模型 (Odor labeling convolutional encoder-decoder, OLCCE) 同 LDA、MLP、CNN-SVM 等模型作对比,发现所建 OLCCE 模型具有最高的平均表征准确率,达 92.57%。

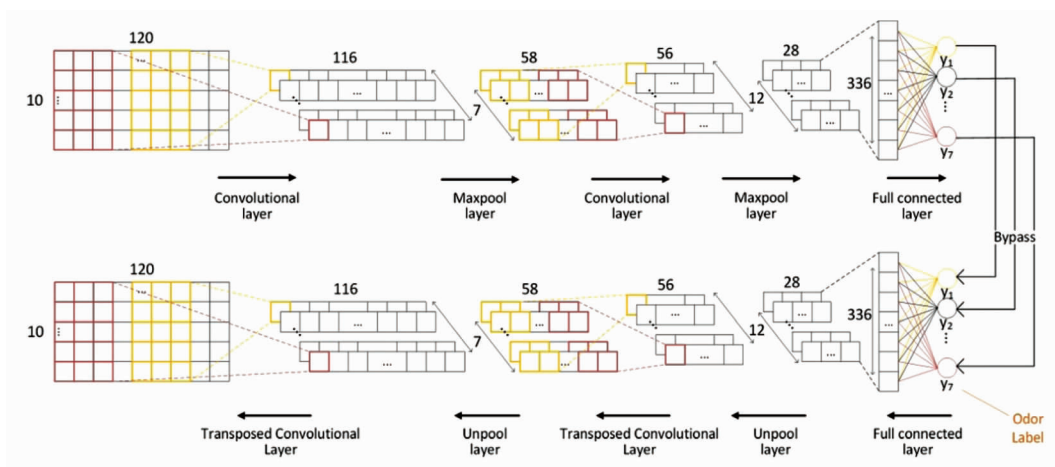


图 4 OLCCE 模型的基础结构^[73]

Fig.4 Infrastructure of the OLCCE model^[73]

自编码器(AE)能够高效地学习到各类食品的各种气味信息的抽象特征,其对数据的降维能力强于传统的主成分分析(PCA),已成为食品气味表征领域中的热门技术。然而,在使用 AE 时有可能出现提取到的特征只是原始输入的恒等表示的情况,需要对 AE 进行算法改进以避免此问题,例如稀疏编码器和去噪编码器的开发。

2.5 其它网络

除上述 4 种神经网络外,也有研究者尝试引入其它网络对食品气味进行表征,以提高模型的

计算效率和表征准确率。Xiong 等^[76]在建立食品腐败性气味的识别模型时,将 CNN 自动提取特征的优势和尖峰神经网络 (Spiking neural network, SNN) 结构简单、计算效率高的特点结合,开发了残差卷积-尖峰神经网络模型 (Residual convolutional spiking neural network, RCSNN)。结果发现 RCSNN 模型在变质食品混合气味数据集和腐烂水果气味数据集中的平均识别准确率分别达 $(88.57 \pm 5.11)\%$ 和 $(84.50 \pm 10.82)\%$, 高于传统的 SVM、线性判别分析 (Linear discriminant analysis,

LDA)等传统机器学习模型。同时在参数大小和计算效率上又优于经典的 ResNet-18 网络 (包含 18 层的 CNN)。Guo 等^[7]基于深度学习框架,建立了 44 个气味分子的气味描述符强度表征模型。其基本原理是利用 CNN 自动提取电子鼻信号的时空特征 (Spatiotemporal characteristics, SC),以多个同胞长短期记忆网络 (Long short-term memory, LSTM)输出具有相似性的一组气味描述符及其强度,其不同于传统的一个模型输出一个气味标签或一个模型输出多个气味标签,而是一个模型输出一个类似的气味标签的集合。这既减少了模型训练时间同时又因为考虑到了气味描述符之间的相关性而提高了气味表征准确度。在随后与传统的 BP-NN、CNN 及 PCA-RF 模型比较中得到了验证。这为研究人员提供了一种克服深度神经网络最为人们所诟病的需要长时间训练成本的缺点的思路。

尖峰网络 (SNN) 和长短期记忆网络 (LSTM) 目前在食品气味表征中应用不多。然而,两者具备许多优势,尤其适合处理电子鼻的时间序列信息,进一步可将食品气味数据的时空特征纳入考量,在食品气味表征中具有极大的应用潜力和研究价

值。

2.6 食品气味表征中神经网络算法的比较

上述神经网络算法已成功应用到肉类、水果、食用植物油、饮料、香料等各类食品的气味表征中。表 2 为食品气味表征中各神经网络算法的比较。神经网络 (ANN) 因其优秀的学习能力和兼容性,被广泛应用于食品气味表征中,已经开发出多种优化方式和组合模型,取得了较多研究成果。经典的 BP-NN 网络结构简单,易于理解,并且容易实现,特别适合基于小型数据快速建立准确率较高的食品气味表征模型。MLP、CNN 等深度神经网络具备更加强大的数据学习能力,适合构建基于大数据集的食品气味表征模型。然而,已经探明的食品及其气味分子的数量非常有限^[78],并且参数众多、复杂度过高的模型容易产生过度拟合、模式崩溃等问题。AE 作为一种无监督学习网络,发展潜力巨大,尤其是其优秀的特征提取能力,在一定程度上弥补了 PCA 面对容量过大、维度过高的数据集时稍显乏力的缺点。SNN、LSTM 虽然可以将时序信息纳入模型训练,使得气味表征准确率进一步提升,但是模型难以训练,不易实现。

表 2 食品气味表征中神经网络算法的比较

Table 2 Comparison of neural network algorithms in food odor characterization

算法名称	优点	缺点	适用场景
BP-NN	训练时间短,容易实现,通常简单的 3 层网络结构就能完成一些气味的表征	不适用于建立基于大数据集的深层网络气味表征模型	中小型气味数据集 气味类型识别
MLP	因增加了网络深度而提高了模型的表征能力	网络层数增多; 容易过拟合	高维复杂的气味数据集 气味类型识别 气味强度预测
CNN	极强的特征提取能力;尤其适用于处理气味图像信息	结构复杂,包括卷积层、池化层等多层网络;参数较多,训练过程较长	特征提取 网络融合 气味指纹图谱识别 气味分子结构图像处理
AE	无监督学习方式,无需标签,发展潜力巨大;特征提取能力极强	有时需要改进算法以避免出现特征提取失败的情况	特征提取
SNN	结构简单,计算效率高 记忆数据,动态响应 能够适应多元学习任务 时序信息处理能力强	难以训练	处理气味数据的时空信息,尤其是电子鼻时间序列
LSTM	长期记忆 时序信息处理能力强	结构复杂,参数众多	处理气味数据的时空信息 实现多标签的分组输出

神经网络算法在实现食品气味属性的客观表征中具备极大的潜力,尤其是像 CNN、AE 以及 LSTM 这样的深度学习方式,或能自动提取特征,或能纳入更多信息。从长远发展而言,联合多种神经网络的优势,使用端到端的深度学习方式表征食品气味更加具有发展前途。

3 讨论

总体而言,在食品气味表征中,传统机器学习算法多用于基于 GC-MS 和电子鼻检测出的数据建立模型,模型结构简单,实现容易,学习过程清楚透明,最大的局限在于模型性能取决于特征工程设计的优劣。神经网络算法多用于基于文献统计或公共数据库的大型气味分子数据集建立模型,模型结构复杂,实现困难,最大的局限在于学习过程的不透明。机器学习算法应用于食品气味表征领域已经展现出极大的应用潜力和开发价值,其主要具备以下优势:1)同使用 GC-MS 解析食品气味成分和通过电子鼻呈现食品风味图谱相比,机器学习算法的引入可以连接气味数据信息与人们感知,实现气味类型和气味强度等具体感官属性的客观表达。2)机器学习算法能够应用于各种食品对象,从宏观的食品混合物到微观的食品分子,其都能够将两者的信息纳入输入,具备广泛适用性。3)机器学习算法多种多样,各种算法又灵活多变,具备极强的可塑性,可根据所研究食品的具体情况选择、改进和组合以满足期望的气味表征效果。4)使用机器学习算法建立气味表征模型后,可使用模型预测出其它食品的气味属性,快速便捷,且可避免人工感官评定的主观性和个体差异性。5)机器学习算法在反向设计具备特定气味属性的食品、香精香料以及实现气味远程模拟等方面应用潜力巨大,值得挖掘。

机器学习算法用于食品气味表征已取得一定成果,而目前还存在一些难题尚待解决:1)食品气味形成机理及其与人们的交互作用还不清楚。2)目前在食品气味表征中应用的大多数算法都是有监督的。3)机器学习算法在理论上能够用于全部食品的气味表征,然而目前使用机器学习算法进行食品气味表征的研究所涵盖的食品对象不同,数据采集方式不同,特征提取方法不同,最

终的表征结果和效果亦不同,有待进一步研究。4)目前食品的气味标签(包括气味类型和气味强度)多通过感官评定的方式赋予,而人工划分标签的过程不可避免地具有主观性、个体差异性和局限性。

综上所述,未来食品气味研究者在使用机器学习算法表征食品气味时应把握以下研究趋势:1)将食品气味形成机制和气味与人们的交互作用引入到用于食品气味表征的机器学习模型的构建过程中以更加科学客观地表征食品气味是此领域重要的发展趋势。2)食品气味研究者有必要关注无需样本标签的无监督学习模型,又或是无需所有样本标签的半监督学习模型,将无监督的机器学习算法应用于食品气味表征中以克服大规模样品标签人工标注的困难是此领域未来发展趋势之一。3)比较不同特征选取方法和不同算法对食品气味表征模型性能最终的影响,从而明晰不同特征工程和不同机器学习算法应用于食品气味表征过程中的优劣属性,进而开发具有优越性、通用性的食品气味表征模型是此领域未来发展趋势之一。4)在训练食品气味表征模型之前,以更加科学、更加具有说服力的机器学习算法或是其它数据处理手段赋予食品气味标签,更加科学合理地表征食品气味是此领域未来发展趋势之一。5)完善前人关于气味分子收集的工作,建立起完整、均匀且详尽的气味分子大数据集。结合深度学习在线平台和大数据分析手段,实现端到端的深度学习方式在食品气味表征中大规模的应用是此领域未来发展趋势之一。6)将使用机器学习算法客观表征食品气味的研究同食品原料搭配、新食谱开发的相关研究结合,以促进食谱生成,提高食谱质量,最终提升消费者对食品的感官体验是此领域未来的应用场景之一。

4 结语

食品气味成分复杂多样,且存在相互作用,食品气味信息庞大冗杂。如何处理这些食品气味信息,科学表征食品气味一直是食品气味研究的重点。本文总结了机器学习算法在食品气味表征中的应用情况,阐述了食品气味表征中各种机器学习算法的优缺点和适用场景,提出了使用机器学

习算法表征食品气味所面临的挑战和未来发展趋势。期望食品气味表征更加科学合理、客观准确。

参 考 文 献

- [1] FIRESTEIN S. How the olfactory system makes sense of scents[J]. *Nature*, 2001, 413(6852): 211–218.
- [2] GU S, ZHANG J, WANG J, et al. Recent development of HS–GC–IMS technology in rapid and non-destructive detection of quality and contamination in agri-food products[J]. *TrAC Trends in Analytical Chemistry*, 2021, 144: 116435
- [3] 陈建设, 刘源, 师锦刚. 食品感官科学研究: 挑战与可能[J]. *食品科学*, 2022, 43(19): 1–7.
CHEN J S, LIU Y, SHI J G. Food sensory research: Challenges and possibilities[J]. *Food Science*, 2022, 43(19): 1–7.
- [4] LU C, ZHANG Y Y, ZHAN P, et al. Characterization of the key aroma compounds in four varieties of pomegranate juice by gas chromatography–mass spectrometry (GC–MS), gas chromatography–olfactometry (GC–O), odor activity value (OAV), aroma recombination, and omission tests[J]. *Food Science and Human Wellness*, 2023, 12(1): 151–160.
- [5] ZHANG X J, GAO P, XIA W S, et al. Characterization of key aroma compounds in low-salt fermented sour fish by gas chromatography–mass spectrometry, odor activity values, aroma recombination and omission experiments[J]. *Food Chemistry*, 2022, 397: 133773.
- [6] QIN D, DUAN J W, LI H H, et al. Characterization and comparison of the aroma-active compounds on different grades of sesame-flavor Baijiu by headspace solid-phase microextraction and gas chromatography–olfactometry–mass spectrometry[J]. *Food Science and Human Wellness*, 2023, 12(1): 79–88.
- [7] 项攀, 申洪涛, 陈芝飞, 等. GC–O–MS结合OAV表征苔青香料关键香气化合物[J]. *食品工业*, 2022, 43(3): 264–269.
XIANG P, SHEN H T, CHEN Z F, et al. Characterization of key aroma compounds in moss fragrance by GC–O–MS and OAV[J]. *The Food Industry*, 2022, 43(3): 264–269.
- [8] 李欢康, 杨佳玮, 刘文玉, 等. 不同工艺核桃油挥发性物质比对及关键香气成分表征[J]. *食品科学*, 2021, 42(16): 185–192.
LI H K, YANG J Y, LIU W Y, et al. Comparison of volatile components and characterization of key aroma components of walnut oil produced by different processes[J]. *Food Science*, 2021, 42(16): 185–192.
- [9] 刘雅冉, 李俊龙, 谷佩珊, 等. 发酵型枸杞酒关键香气物质分析[J]. *食品科学*, 2024, 45(5): 126–136.
LIU Y R, LI J L, GU P S, et al. Analysis of key aroma substances in fermented wolfberry wine[J]. *Food Science*, 2024, 45(5): 126–136.
- [10] 曹雪颖, 牛云蔚, 张超, 等. 基于全二维气相色谱–质谱法分析中国名优红茶中特征香气成分[J]. *中国食品添加剂*, 2024, 35(2): 272–282.
CAO X Y, NIU Y W, ZHANG C, et al. Analysis of characteristic aroma components in Chinese famous black tea based on full two-dimensional gas chromatography–mass spectrometry[J]. *China Food Additives*, 2024, 35(2): 272–282.
- [11] 张欣, 陈双宜, 谷惠文, 等. 基于电子鼻技术的荆州鱼糕贮藏过程新鲜度预测[J]. *轻工学报*, 2022, 37(3): 17–25.
ZHANG X, CHEN S Y, GU H W, et al. Prediction of freshness of Jingzhou fish cake during storage based on electronic nose technology[J]. *Journal of Light Industry*, 2022, 37(3): 17–25.
- [12] DU D D, WANG J, WANG B, et al. Ripeness prediction of postharvest kiwifruit using a mos e-nose combined with chemometrics[J]. *Sensors*, 2019, 19(2): 419.
- [13] SCHIFFERSTEIN H N J, KUDROWITZ B M, BREUER C. Food perception and aesthetics – linking sensory science to culinary practice[J]. *Journal of Culinary Science & Technology*, 2022, 20(4): 293–335.
- [14] MULLER A, GUIDO S. An introduction to machine learning with python[M]. Beijing: O’Reilly, 2017: 1–4.
- [15] LOETSCH J, KRINGEL D, HUMMEL T. Machine learning in human olfactory research[J]. *Chemical Senses*, 2019, 44(1): 11–22.
- [16] MAINALI S, DARSIE M E, SMETANA K S. Machine learning in action: Stroke diagnosis and outcome prediction[J]. *Frontiers in Neurology*, 2021,

- 12: 734345.
- [17] HANDA A, SHARMA A, SHUKLA S K. Machine learning in cybersecurity: A review[J]. *Wiley Interdisciplinary Reviews –Data Mining and Knowledge Discovery*, 2019, 9(4): e1306.
- [18] GREENER J G, KANDATHIL S M, MOFFAT L, et al. A guide to machine learning for biologists[J]. *Nature Reviews Molecular Cell Biology*, 2022, 23(1): 40–55.
- [19] UNKE O T, CHMIELA S, SAUCEDA H E, et al. Machine learning force fields[J]. *Chemical Reviews*, 2021, 121(16): 10142–10186.
- [20] DA COSTA N L, DA COSTA M S, BARBOSA R. A review on the application of chemometrics and machine learning algorithms to evaluate beer authentication[J]. *Food Analytical Methods*, 2021, 14(1): 136–155.
- [21] YE Z Y, LIU Y, LI Q L. Recent progress in smart electronic nose technologies enabled with machine learning methods[J]. *Sensors*, 2021, 21(22): 7620.
- [22] MEI H. *Big data*[M]. Singapore: Springer Singapore, 2021: 148–164.
- [23] AL-RAZGAN M, TALLAB S, ALFAKIH T. Exploring the food pairing hypothesis in saudi cuisine using genetic algorithm[J]. *Mathematical Problems in Engineering*, 2021, 2021: 3627715.
- [24] BENET I, DOLORS GUARDIA M, IBANEZ C, et al. Low intramuscular fat (but high in PUFA) content in cooked cured pork ham decreased malodorous reaction volatiles and pleasing aroma attributes[J]. *Food Chemistry*, 2016, 196: 76–82.
- [25] GONZÁLEZ ÁLVAREZ M, GONZÁLEZ-BARREIRO C, CANCHO-GRANDE B, et al. Relationships between Godello white wine sensory properties and its aromatic fingerprinting obtained by GC-MS[J]. *Food Chemistry*, 2011, 129(3): 890–898.
- [26] 宫雪, 刘宁, 李二虎, 等. 基于电子鼻的葡萄酒感官评价模型的构建[J]. *中国酿造*, 2014, 33(5): 67–71.
- GONG X, LIU N, LI E H, et al. Model for wine sensory evaluation based on electronic nose[J]. *China Brewing*, 2014, 33(5): 67–71.
- [27] 孟祥忍, 高子武, 王恒鹏, 等. 主成分分析法构建循环卤煮牛肉挥发性风味强度评价模型[J]. *食品与机械*, 2022, 38(10): 29–36.
- MENG X R, GAO Z W, WANG H P, et al. Construction of evaluation model of volatile flavor intensity of cyclic stewed beef based on principal component analysis[J]. *Food & Machinery*, 2022, 38(10): 29–36.
- [28] RUGARD M, JAYLET T, TABOUREAU O, et al. Smell compounds classification using UMAP to increase knowledge of odors and molecular structures linkages[J]. *PLoS One*, 2021, 16(5): e0252486.
- [29] SZULCZYNSKI B, NAMIESNIK J, GEBICKI J. Determination of odour interactions of three-component gas mixtures using an electronic nose[J]. *Sensors*, 2017, 17(10): 2380.
- [30] BUENO M, CAMPO M M, CACHO J, et al. A model explaining and predicting lamb flavour from the aroma-active chemical compounds released upon grilling light lamb loins[J]. *Meat Science*, 2014, 98(4): 622–628.
- [31] GUO J, YUE T L, YUAN Y H, et al. Characterization of volatile and sensory profiles of apple juices to trace fruit origins and investigation of the relationship between the aroma properties and volatile constituents[J]. *LWT—Food Science and Technology*, 2020, 124: 109203.
- [32] AZNAR M, LÓPEZ R, CACHO J, et al. Prediction of aged red wine aroma properties from aroma chemical composition. Partial least squares regression models[J]. *Journal of Agricultural and Food Chemistry*, 2003, 51(9): 2700–2707.
- [33] OJHA P K, ROY K. Chemometric modeling of odor threshold property of diverse aroma components of wine[J]. *Rsc Advances*, 2018, 8(9): 4750–4760.
- [34] OJHA P K, ROY K. PLS regression-based chemometric modeling of odorant properties of diverse chemical constituents of black tea and coffee[J]. *Rsc Advances*, 2018, 8(5): 2293–2304.
- [35] BREIMAN L. Random forests[J]. *Machine Learning*, 2001, 45(1): 5–32.
- [36] YAKUBU H G, KOVACS Z, TOTH T, et al. Trends in artificial aroma sensing by means of electronic nose technologies to advance dairy production—A review [J]. *Critical Reviews in Food Science and Nutrition*, 2022, 63(2): 234–248.
- [37] 蒋丹凤, 温腾腾, 吴黎明, 等. 基于随机森林的气味感知分类研究[J]. *电子测量技术*, 2022, 45(9): 99–103.
- JIANG D F, WEN T T, WU L M, et al. Research

- on classification of odor perception based on random forest[J]. *Electronic Measurement Technology*, 2022, 45(9): 99–103.
- [38] ZHANG X Y, ZHANG K, LIN D R, et al. Artificial intelligence deciphers codes for color and odor perceptions based on large-scale chemoinformatic data[J]. *GigaScience*, 2020, 9(2): g1aa011.
- [39] LI H Y, PANWAR B, OMENN G S, et al. Accurate prediction of personalized olfactory perception from large-scale chemoinformatic features[J]. *Giga-science*, 2017, 7(2): 1–11.
- [40] VIGNEAU E, COURCOUX P, SYMONEAUX R, et al. Random forests: A machine learning methodology to highlight the volatile organic compounds involved in olfactory perception[J]. *Food Quality and Preference*, 2018, 68: 135–145.
- [41] KOK Z H, SHARIFF A R M, ALFATNI M S M, et al. Support vector machine in precision agriculture: A review[J]. *Computers and Electronics in Agriculture*, 2021, 191: 106546.
- [42] WANG L, HUANG X Y, YI S S et al. Characterization of the volatile flavor profiles of Zhenjiang aromatic vinegar combining a novel nanocomposite colorimetric sensor array with HS-SPME-GC/MS[J]. *Food Research International*, 2022, 159: 111585.
- [43] JIANG H, HE Y C, CHEN Q S. Qualitative identification of the edible oil storage period using a homemade portable electronic nose combined with multivariate analysis[J]. *Journal of the Science of Food and Agriculture*, 2021, 101(8): 3448–3456.
- [44] JIARPINIJNUN A, OSAKO K, SIRIPATRAWAN U. Visualization of volatome profiles for early detection of fungal infection on storage Jasmine brown rice using electronic nose coupled with chemometrics[J]. *Measurement*, 2020, 157: 107561.
- [45] 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.
- [46] LIU Q, LUO D H, WEN T T, et al. *In silico* prediction of fragrance retention grades for monomer flavors using QSPR models[J]. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, 2021, 218: 104424.
- [47] 朱红梅. 基于机器学习的气味感知识别方法研究[D]. 广州: 广东工业大学, 2022.
- ZHU H M. Research on recognition method of odor perception based on machine learning[D]. Guangzhou: Guangdong University of Technology, 2022.
- [48] LIU T P, ZHANG W T, MCLEAN P, et al. Electronic nose-based odor classification using genetic algorithms and fuzzy support vector machines[J]. *International Journal of Fuzzy Systems*, 2018, 20(4): 1309–1320.
- [49] BONAH E, HUANG X Y, YANG H Y, et al. Detection of *Salmonella Typhimurium* contamination levels in fresh pork samples using electronic nose smellprints in tandem with support vector machine regression and metaheuristic optimization algorithms[J]. *Journal of Food Science and Technology – Mysore*, 2021, 58(10): 3861–3870.
- [50] LIU Y, ZHAUNG Y R, JI B Y, et al. Prediction of laying hen house odor concentrations using machine learning models based on small sample data[J]. *Computers and Electronics in Agriculture*, 2022, 195: 106849.
- [51] MU F L, GU Y, ZHANG J, et al. Milk source identification and milk quality estimation using an electronic nose and machine learning techniques[J]. *Sensors*, 2020, 20(15): 4238.
- [52] CHACKO R, JAIN D, PATWARDHAN M, et al. Data based predictive models for odor perception[J]. *Scientific Reports*, 2020, 10(1): 17136.
- [53] LEE D H, WOO S E, JUNG M W, et al. Evaluation of odor prediction model performance and variable importance according to various missing imputation methods[J]. *Applied Sciences*, 2022, 12(6): 2826.
- [54] 翟肇裕, 曹益飞, 徐焕良, 等. 农作物病虫害识别关键技术研究综述[J]. *农业机械学报*, 2021, 52(7): 1–18.
- ZHAI Z Y, CAO Y F, XU H L, et al. Review of key techniques for crop disease and pest detection[J]. *Transactions of the Chinese Society for Agricultural Machinery*, 2021, 52(7): 1–18.
- [55] SMYTH H, COZZOLINO D. Instrumental methods (spectroscopy, electronic nose, and tongue) as tools to predict taste and aroma in beverages: Advantages and limitations[J]. *Chemical Reviews*, 2013, 113(3): 1429–1440.
- [56] YANG C J, DING W, MA L J, et al. Discrimination and characterization of different intensities of goaty flavor in goat milk by means of an electronic nose[J]. *Journal of Dairy Science*, 2015, 98(1):

- 55–67.
- [57] KIM S Y, KO J A, KANG B S, et al. Prediction of key aroma development in coffees roasted to different degrees by colorimetric sensor array[J]. *Food Chemistry*, 2018, 240: 808–816.
- [58] ZOU G Y, XIAO Y Z, WANG M S, et al. Detection of bitterness and astringency of green tea with different taste by electronic nose and tongue[J]. *PLoS One*, 2018, 13(12): e0206517.
- [59] KIANI S, MINAEI S, GHASEMI-VARNAMKHAZI M, et al. An original approach for the quantitative characterization of saffron aroma strength using electronic nose[J]. *International Journal of Food Properties*, 2017, 20: S673–S683.
- [60] BO W C, YU Y D, HE R, et al. Insight into the structure–odor relationship of molecules: A computational study based on deep learning [J]. *Foods*, 2022, 11(14): 2033
- [61] LECUN Y, BOTTOU L, BENGIO Y, et al. Gradient–based learning applied to document recognition [J]. *Proceedings of the Ieee*, 1998, 86(11): 2278–2324.
- [62] ABDEL-HAMID O, MOHAMED A R, JIANG H, et al. Convolutional neural networks for speech recognition [J]. *Ieee –Acm Transactions on Audio Speech and Language Processing*, 2014, 22(10): 1533–1545.
- [63] ZHU J, FANG L Y, GHAMISI P. Deformable convolutional neural networks for hyperspectral image classification[J]. *Ieee Geoscience and Remote Sensing Letters*, 2018, 15(8): 1254–1258.
- [64] 田有文, 吴伟, 卢时铅, 等. 深度学习在水果品质检测与分级分类中的应用[J]. *食品科学*, 2021, 42(19): 260–270.
- TIAN Y W, WU W, LU S Q, et al. Application of deep learning in fruit quality detection and grading [J]. *Food Science*, 2021, 42(19): 260–270.
- [65] BI K X, ZHANG D, QIU T, et al. GC–MS fingerprints profiling using machine learning models for food flavor prediction [J]. *Processes*, 2020, 8(1): 23.
- [66] SHARMA A, KUMAR R, RANJTA S, et al. SMILES to smell: Decoding the structure–odor relationship of chemical compounds using the deep neural network approach[J]. *Journal of Chemical Information and Modeling*, 2021, 61(2): 676–688.
- [67] LIU Q, LUO D H, WEN T T, et al. POI–3DGCN: Predicting odor intensity of monomer flavors based on three–dimensionally embedded graph convolutional network[J]. *Expert Systems With Applications*, 2022, 199: 116997.
- [68] WANG Y, ZHAO Q L, MA M Y, et al. Decoding structure–odor relationship based on hypergraph neural network and deep attentional factorization machine[J]. *Applied Sciences –Basel*, 2022, 12(17): 8777.
- [69] ARELLANO –COVARRUBIAS A, ESCALONA –BUENDIA H B, GOMEZ–CORONA C, et al. Pairing beer and food in social media: Is it an image worth more than a thousand words?[J]. *International Journal of Gastronomy and Food Science*, 2022, 27: 100483.
- [70] YU D P, GU Y. A machine learning method for the fine–grained classification of green tea with geographical indication using a MOS–based electronic nose[J]. *Foods*, 2021, 10(4): 795.
- [71] RODRIGUEZ GAMBOA J C, DA SILVA A J S, ARAUJO I C, et al. Validation of the rapid detection approach for enhancing the electronic nose systems performance, using different deep learning models and support vector machines[J]. *Sensors and Actuators B: Chemical*, 2021, 327: 128921.
- [72] ZHAO X J, WEN Z H, PAN X F, et al. Mixture gases classification based on multi–label one–dimensional deep convolutional neural network [J]. *IEEE Access*, 2019, 7: 12630–12637.
- [73] 来杰, 王晓丹, 向前, 等. 自编码器及其应用综述 [J]. *通信学报*, 2021, 42(9): 218–230.
- LAI J, WANG X D, XIANG Q, et al. Review on autoencoder and its application[J]. *Journal of Communications*, 2021, 42(9): 218–230.
- [74] NOZAKI Y, NAKAMOTO T. Odor impression prediction from mass spectra[J]. *PLoS One*, 2016, 11(6): e0157030.
- [75] WEN T T, MO Z F, LI J S, et al. An odor labeling convolutional encoder–decoder for odor sensing in machine olfaction[J]. *Sensors*, 2021, 21(2): 388.
- [76] XIONG Y Z, CHEN Y T, CHEN C M, et al. An odor recognition algorithm of electronic noses based on convolutional spiking neural network for spoiled food identification[J]. *Journal of the Electrochemical Society*, 2021, 168(7): 077519.

- [77] GUO J, CHENG Y, LUO D H, et al. ODRP: A deep learning framework for odor descriptor rating prediction using electronic nose [J]. *Ieee Sensors Journal*, 2021, 21(13): 15012–15021.
- [78] PARK D, KIM K, KIM S, et al. FlavorGraph: A large-scale food-chemical graph for generating food representations and recommending food pairings [J]. *Scientific Reports*, 2021, 11(1): 931.

Application of Machine Learning Algorithms in Food Odor Characterization

Li Shuai, Chai Chunxiang*, Liu Jianfu

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

Abstract The objective characterization of food odor is important for the optimization of food production process and quality evaluation. However, the complexity of the food odor formation mechanism and its complicated composition, coupled with the fact that the odor evaluation process is susceptible to a variety of factors such as environmental, psychological and perception modes, make it necessary to deal with a large amount of high-dimensional and complex information in the characterization of food odors, which requires the use of tools with powerful data processing capabilities. Along with the rapid development of artificial intelligence, computer science and big data technology, machine learning has powerful data processing capability, it has become possible to characterize food odors using machine learning, and the implementation of this process relies heavily on machine learning algorithms. In this paper, the application of various machine learning methods in food odor characterization was summarized, and the advantages and problems to be solved in using machine learning methods for food odor characterization were pointed out. Finally, the future development direction of machine learning algorithms applied to food odor characterization was foreseen.

Keywords food; odor characterization; machine learning; algorithms