

反向传播神经网络优化铁皮石斛叶复合软糖配方及风味分析

卢周炼^{1,2}, 刘瑞玲², 陈慧芝², 沈超怡², 房祥军², 缪文华¹, 韩延超^{2*}, 郜海燕^{2*}

(1. 浙江海洋大学食品与药学学院, 浙江舟山 316000) (2. 全省生鲜食品智慧物流与加工重点实验室, 农业农村部果品采后处理重点实验室, 农业农村部蔬菜采后保鲜与加工重点实验室(部省共建), 中国轻工业果蔬保鲜与加工重点实验室, 浙江杭州 310021)

摘要: 为实现铁皮石斛叶高值化利用, 本研究以铁皮石斛叶汁、苹果汁和梨汁为主要原料, 开发具有良好感官品质与风味特征的复合软糖。构建以混合果汁比、果胶、蔗糖及柠檬酸添加量为自变量的4因素试验体系, 采用经遗传算法优化的反向传播(Genetic algorithm-backpropagation, GA-BP)神经网络与响应面法对软糖配方进行建模与优化, 并利用电子鼻和气相色谱-离子迁移谱(GC-IMS)分析其挥发性风味特征。数据显示, GA-BP模型预测性能优于响应面模型($R^2=0.984$)。最佳配方为: 混合果汁比3:1:1(质量比), 果胶添加量6.0%(质量分数), 蔗糖添加量38.0%(质量分数), 柠檬酸添加量0.6%(质量分数)。电子鼻分析表明, GA-BP组风味物质丰富协调, 主成分PC1和PC2累积贡献率达95.28%。GC-IMS鉴定出53种挥发性化合物, 其中醛类、醇类及含硫化合物关键风味物质, 并在GA-BP组中显著富集, 使软糖呈现更清新且层次更丰富的香气特征。本研究以GA-BP神经网络为核心为铁皮石斛叶复合软糖配方优化提供了技术支撑, 揭示铁皮石斛叶在食品开发的应用潜力。

关键词: 铁皮石斛叶; 模糊综合评价; GA-BP神经网络; 复合软糖; 气相色谱-离子迁移谱(GC-IMS)

DOI: 10.13982/j.mfst.1673-9078.2027.6.0485

Formulation Optimization and Flavor Analysis of *Dendrobium officinale* Leaf Composite Gummies Based on Backpropagation Neural Network

LU Zhoulian^{1,2}, LIU Ruiling², CHEN Huizhi², SHEN Chaoyi², FANG Xiangjun², MIU Wenhua¹, HAN Yanchao^{2*}, GAO Haiyan^{2*}

(1.College of Food and Pharmacy, Zhejiang Ocean University, Zhoushan 316000, China)

(2.Zhejiang Key Laboratory of Intelligent Food Logistic and Processing, Key Laboratory of Fruit Postharvest Processing, Ministry of Agriculture and Rural Affairs, Key Laboratory of Postharvest Preservation and Processing of Vegetables, Ministry of Agriculture and Rural Affairs (Co-built by the Ministry and the Province, Key Laboratory of Fruit and Vegetable Preservation and Processing of China Light Industry, Hangzhou 310021, China)

Abstract: To achieve the high-value utilization of *Dendrobium officinale* leaves, a compound gummy candy with desirable sensory quality and flavor characteristics was developed using *Dendrobium officinale* leaf juice, apple juice, and pear juice as the main raw materials. A four-factor experimental system was established using mixed juice ratio, pectin content, sucrose content, and citric acid content as independent variables. A genetic algorithm-optimized backpropagation neural network (genetic algorithm-backpropagation, GA-BP) combined with response surface methodology was employed to model and optimize the gummy formulation, while an electronic nose and gas chromatography-ion mobility spectrometry (GC-IMS) were applied to characterize its volatile flavor profile. The results showed that the GA-BP model exhibited superior predictive performance compared with the response surface model ($R^2=0.984$). The optimal formulation consisted of a mixed juice ratio of 3:1:1 (m/m), 6.0% pectin, 38.0% sucrose, and 0.6% citric acid. Electronic nose analysis indicated that the GA-BP group exhibited a richer and more harmonious flavor profile, with the cumulative contribution rates of PC1 and PC2 reaching 95.28%. GC-IMS identified 53 volatile

收稿日期: 2026-03-30; 修回日期: 2026-06-01; 接受日期: 2026-06-01

基金项目: 浙江省“三农九方”科技协作计划(2024SNJF034); 浙江省“尖兵领雁+X”科技计划(2025C011101)

作者简介: 卢周炼(2001-), 女, 硕士研究生, 研究方向: 供应链保鲜, E-mail: luzhoulian0213nini@163.com

通讯作者: 韩延超(1986-), 男, 博士, 研究员, 研究方向: 食品物流保鲜与品质调控, E-mail: hanhanzhixing@126.com; 共同通讯作者: 郜海燕(1958-), 女, 博士, 研究员, 研究方向: 食品物流保鲜与品质调控, E-mail: spsghy@163.com

compounds, among which aldehydes, alcohols, and sulfur-containing compounds were identified as key flavor contributors and were significantly enriched in the GA-BP group, resulting in a fresher and more layered aroma profile. This study provides technical support for the formulation optimization of *Dendrobium officinale* compound gummy candies and further demonstrates the application potential of *Dendrobium officinale* leaves in functional food development.

Keywords: *Dendrobium officinale* leaves; fuzzy comprehensive evaluation; GA-BP neural network; compound gummy candy; Gas chromatography-ion mobility spectrometry (GC-IMS)

铁皮石斛 (*Dendrobium officinale*) 是兰科石斛属中的一种多年生附生草本植物。它是珍贵的药食两用植物, 富含多糖、氨基酸、矿物质元素、多酚和维生素等成分, 具有抗氧化和抗炎活性^[1-3]。《中国药典》仅允许使用这些石斛属的茎部作为药用, 其生物量相当可观的叶片则大多被弃置, 造成大量资源浪费。然而, 铁皮石斛叶中含有与茎相似的活性成分^[4]。凝胶软糖是由一种或多种胶凝剂构成的凝胶型糖果, 具有口感柔软、Q 弹有韧性的糖果种类, 深受消费者的喜爱^[5]。王元川等^[6]以铁皮石斛为原料, 开发出一款口感得到改善、便于携带、具有功能性的软糖, 为其高效利用且贴近当代年轻人消费观念的理念提供了新思路。

一款食品的感官品质决定了消费者受喜爱度, 但是大多数软糖的感官品质是受评价人员的主观影响。这种方法往往因评价时的个体口味偏差、情绪等多种主观因素难以把握食品品质变化和打分尺度, 导致分数无法准确反映食品对应的感官级别程度^[7]。模糊数学法用于处理模糊性和主观性现象的一种科学分析方法^[8]。人工神经网络是一种模拟大脑神经网络结构, 通过网络中神经元连接矩阵反映输入与输出的非线性关系, 而反向传播 (Backpropagation, BP) 神经网络是运用广泛的模型之一^[9]。BP 神经网络是基于误差反向传播算法训练的一种多层前馈神经网络, 具有较强的非线性映射、自学及自适应能力, 能弥补传统响应面法在处理复杂的非线性关系方面的不足^[10]。遗传算法 (Genetic Algorithms, GA) 是基于自然选择和与遗传定律的全局寻优算法, 具有较强的全局搜索能力, 可通过选择、交叉和变异等操作在更大范围内搜索最优参数组合来提高模型优化能力^[11]。孙嘉等^[12]利用 BP 神经网络模型结合遗传算法应用 Halloumi 奶酪的生产工艺优化, 实现不同目标下多工艺参数的优化。杨涛涛等^[13]利用模糊数学综合评价和神经网络对软糖的口感进行预测。

铁皮石斛叶味甘涩, 不宜直接作为原料。而苹果和梨味甜、清爽多汁, 富含维生素、膳食纤维和天然多酚。将苹果、梨进行复配还能改善铁皮石斛叶带来的涩味和不适的草药味。本研究以铁皮石斛叶汁、苹果汁、梨汁、果胶、蔗糖、柠檬酸为主要原料, 通过单因素和响应面试验, 得到最佳制作工艺。又以模糊综合评价获得的感官评分作为优化目标, 利用 GA-BP 神经网络构建以各配方参数为输入变量的工艺预测模型。最后对两个工艺条件的软糖进行挥发性风味物质分析。

1 材料与方法

1.1 材料与仪器

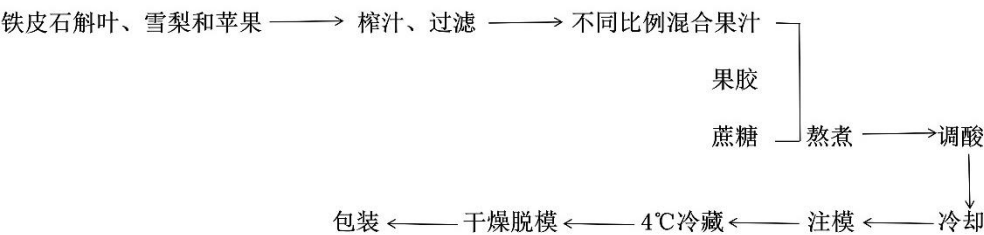
铁皮石斛叶, 浙江寿仙谷有机国药养生园; 苹果与雪梨, 浙江省杭州市上城区有果儿水果店; 食品级蔗糖, 广西来宾东糖凤凰有限公司; 食品级果胶, 中源生物科技; 食品级柠檬酸, 河南万邦化科技有限公司。

PEN3 电子鼻, 德国 AIRSENSE 公司; YP6002 电子天平, 上海衡际科学仪器有限公司; KS-520 榨汁机, 广州市祈和电器有限公司; C22-IH02K 电磁炉, 浙江苏泊尔股份有限公司; Flavour Spec® 气相离子迁移谱, 德国 G.A.S. 公司; PAL3-RSI 系列 II 静态顶空自动进样装置, 瑞士 CTC Analytics AG 公司。

1.2 试验方法

1.2.1 工艺流程

铁皮石斛叶和苹果梨复合软糖制作流程图如下, 主要步骤为:



- (1) 原料处理，将铁皮石斛叶、苹果、梨用流动水冲洗干净，去除表面的污渍、果蒂、果核等不可食部分。
- (2) 榨汁与过滤，将水果、铁皮石斛叶分别放入榨汁机中榨汁，然后于 200 目过滤网过滤，于 95 ℃ 杀菌，冷却备用。
- (3) 胶体配备，果胶粉中加入 2 倍纯净水，在沸腾的水浴锅中搅拌溶化。
- (4) 熬煮，将果胶溶液和铁皮石斛汁、雪梨汁、苹果汁混合液，加入蔗糖边熬煮边搅拌 10 min，最后加入柠檬酸。
- (5) 注模，将软糖溶液倒入洗净的模具，放入 4 ℃ 冰箱冷却，使软糖逐渐凝固成型。
- (6) 脱模干燥，待果浆完全凝固后，从模具中脱出，将脱模后的软糖放入烘箱，在 45 ℃ 的条件下干燥。

1.2.2 单因素实验

1.2.2.1 果胶添加量

在其他因素不变的情况下，即蔗糖添加量 40 wt.%，柠檬酸添加量 0.6 wt.%，铁皮石斛叶汁、雪梨汁、苹果汁（3:1:1，100 g），果胶添加量为 4 wt.%、5 wt.%、6 wt.%、7 wt.%、8 wt.%，设置 5 水平进行单因素实验，并对得到的产品进行感官评定，每个样品设置 3 组平行测定。

1.2.2.2 蔗糖添加量

在其他因素不变的情况下，即柠檬酸 0.6 wt.%，果汁配比（3:1:1，100 g），果胶 6 wt.%，蔗糖添加量为 30 wt.%、35 wt.%、40 wt.%、45 wt.%、50 wt.%，设置 5 水平单因素进行实验，并对得到的产品进行感官评定，每个样品设置 3 组平行测定。

1.2.2.3 柠檬酸添加量

在其他因素不变的情况下，即蔗糖 40 wt.%，果汁配比（3:1:1，100 g），果胶 6 wt.%，柠檬酸添加量为 0.4 wt.%、0.5 wt.%、0.6 wt.%、0.7 wt.%、0.8 wt.%，设置 5 水平单因素进行实验，并对得到的产品进行感官评定，每个样品设置 3 组平行测定。

1.2.2.4 铁皮石斛叶汁、雪梨汁、苹果汁复配比

在其他因素不变的情况下，即蔗糖 40 wt.%，柠檬酸 0.6 wt.%，果胶 6 wt.%，铁皮石斛叶汁、雪梨汁、苹果汁复配比为 1:3:3、1:1:1、3:1:1、5:1:1、1:5:5，设置 5 水平进行单因素实验，并对得到的产品进行感官评定，每个样品设置 3 组平行测定。

参考李爽等^[14]的方法，感官评定小组由 20 位训练有素的专家组成，按表 1 的标准进行评分，每次品尝完一种样品后均用清水漱口，以确保感官评价的准确性。感官评价满分为 100 分，每个指标取所有结果的平均值。

表 1 复合软糖感官评分标准

Table 1 Sensory Scoring Criteria for Compound Gummy candies		
评定指标	评分标准	评分
组织形态 (30 分)	未见任何塌陷现象，软硬适中，无气泡	24~30
	出现轻微坍塌变形，稍微偏硬或偏软，无气泡	16~23
	形态塌陷变形，太硬或太软，有气泡	0~15
口感 (30 分)	黏度合适，不粘牙，咀嚼性好	24~30
	口感较爽滑，略黏，咀嚼性较好	16~23
	干涩，有颗粒感，不耐嚼	0~15

色泽 (20分)	颜色呈现均匀的淡草绿色, 清晰透亮, 有光泽	16~20
	颜色呈现均匀的淡草绿色, 色泽比较均匀透亮	10~15
	颜色不均匀, 透光性差	1~9
滋味 (20分)	香气浓郁和谐, 酸甜适中	16~20
	无异味, 香气较明显, 味道偏酸或偏淡	10~15
	香气过重, 过酸或过甜	1~9

1.2.3 响应面试验设计

采用 Box-Behnken 对单因素实验结果进行响应面优化设计（表 2）。以感官评分作为评价指标，构建 4 因素 3 水平响应面分析方案。

表 2 响应面试验因素与水平设计

Table 2 Test Factors and Horizontal Design of Response Surface				
水平	因素			
	混合果汁	果胶添加量/%	蔗糖添加量/%	柠檬酸添加量/%
-1	1:1:1	5	35	0.5
0	3:1:1	6	40	0.6
1	5:1:1	7	45	0.7

1.2.4 模糊数学综合评价

1.2.4.1 数据集与模糊评价矩阵的建立

模糊综合评价能够对多个感官指标进行加权整合，从而较全面地表征产品综合品质。

感官评定小组由 20 位训练有素的成员组成，根据表 1 的标准，对响应面试验所得复合软糖样品进行感官评分，建立模糊数学模型。

（1）评价因素集 A ，是构成复合软糖口感评价因素指标的集合，根据感官评分标准，即 a_1 =组织形态， a_2 =口感， a_3 =色泽， a_4 =滋味。

$$A = a_1, a_2, a_3, a_4 \tag{1}$$

（2）评语集 V 是对每个评价因素的评分，评价采用 6 分制，其中 $v_1 \sim v_6$ 表示 1~6 分。

$$V = v_1, v_2, v_3, v_4, v_5, v_6 \tag{2}$$

（3）模糊评价矩阵 R_q 是第 q 号样品的矩阵。其中 r_{mn} 表示其中一个样品矩阵中元素第 m 个感官指标、 n 评语的归一化结果（如 r_{11} 表示组织形态指标中 1 分的票数）。

$$R_q = \begin{bmatrix} r_{11} & r_{12} & r_{13} & r_{14} & r_{15} & r_{16} \\ r_{21} & r_{22} & r_{23} & r_{24} & r_{25} & r_{26} \\ r_{31} & r_{32} & r_{33} & r_{34} & r_{35} & r_{36} \\ r_{41} & r_{42} & r_{43} & r_{44} & r_{45} & r_{46} \end{bmatrix} \tag{3}$$

（4）加权重集 Y ，即综合评价过程中不同指标的重要程度，元素的总和为 1。为了计算权重比，从感官评价人员中随机请 6 位专家依据以往大量感官评定经验，对复合软糖中的混合果汁比例、果胶添加量、蔗糖添加量与柠檬酸添加量的重要程度占比进行评分（分值为 0~100，0 为不重要，100 为重要）。对四项感官指标结果进行归一化处理，得到各评价指标权重占比，即为加权重集 Y 。在加权重集中，元素的总和为

$$Y = y_1, y_2, y_3, y_4, y_5, y_6 \tag{4}$$

1.2.4.2 建立综合评价模型

利用模糊变换最佳算子 $M(, +)$ 建立模糊综合评价模型^[15]。样品评价结果向量 b_q 计算公式如下：

$$b_q = \sum_{i=1}^p a_i r_{mi}, n = (1, 2, 3, 4, 5, 6) \tag{5}$$

式中：
 q ——样品序号；
 p ——评价指标数目；

r_{mn} ——矩阵第 m 行第 n 列元素;
 a_i ——加权重集中第 i 个元素。

将行向量 b_q 与评价分列向量 $V=(1,2,3,4,5,6,)$ T 相乘得到综合评价分 P_q 。

1.2.5 BP 神经网络预测模型

在 PyCharm 上采用 Python V3.9 建立 BP 神经网络，进行复合软糖配方的优化预测。该网络结构由输入层、隐藏层和输出层三部分组成，输入层设置 4 个神经元：混合汁配比、果胶添加量、蔗糖添加量和柠檬酸添加量，模糊综合评价分数作为输出层，构建的 4×C×1 的 3 层 BP 神经网络结构如下（图 1）。隐藏层神经元数量是影响 BP 神经网络性能的重要参数^[16]，其决定了网络对输入输出间非线性关系的表达与学习能力。神经元数量过少会导致网络拟合能力不足，而过多则易引起模型复杂度增加、泛化能力差等现象。目前，隐藏层单元数可根据参考式（6），比较 $C=4\sim20$ 时的网络模型所预测结果的均方根误差，得到最佳单元数进行训练。隐藏层采用双曲正切（tanh）函数作为激活函数；输出层选用线性激活函数。将响应面试验所得数据用于训练模型，其中 30%用于测试集与验证集^[17]。

$$C=\sqrt{g+h}+\beta$$

(6)

式中：
 g ——输入层神经元数;
 h ——输出层神经元数;
 β ——[1,18]之间的常数。

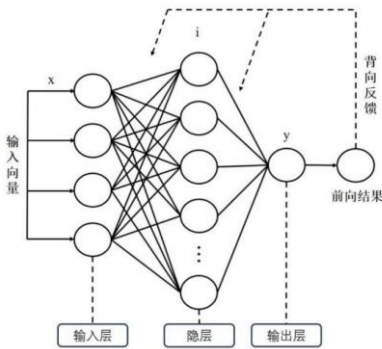


图 1 BP 神经网络结构示意图

Fig.1 Schematic diagram of the BP neural network structure

1.2.6 电子鼻

参考王燕君^[18]的方法，将软糖切成约 2 mm 小块，称取 5 g 样品置于 50 mL 离心管中，以封口膜密封后置于 35 ℃ 恒温水浴中平衡 30 min。将进样针插入密封离心管，顶空抽取后进样于传感器，每个样品设置 3 组平行测定。参数设定为：采样时间 1 s；传感器清洗时间 60 s；进样时间 5 s；进样流量 400 mL·min⁻¹；信号采集时间 80 s。传感器阵列如表 3 所示。

表 3 电子鼻传感器阵列

Table 3 Sensors array of electronic nose

传感器编号	传感器代码	敏感物质	传感器编号	传感器代码	敏感物质
1	W1C	芳烃化合物	6	W1S	烷类
2	W5S	氮氧化合物	7	W1W	硫化合物
3	W3C	氨，芳香分子	8	W2S	醇类，部分芳香族化合物
4	W6S	氢化物	9	W2W	芳烃化合物，硫的有机化合物
5	W5C	烯烃、芳族，极性分子	10	W3S	烷类和脂肪族

1.2.7 GC-IMS 测定复合软糖挥发性风味物质

参考刘春晖等^[19]的方法，取 3 g 样品置于 20 mL 顶空瓶中，于 60 ℃ 孵育 15 min，每个样品设置 3 组平行测定。进样参数为：孵育温度 60 ℃；孵育时间 20 min；孵化转速 500 r·min⁻¹；进样体积 500 μL，采用不分流模式；进样针温度 85 ℃。色谱条件为：柱温 60 ℃；进样口温度 85 ℃；载气为高纯氮气（N₂，≥99.999%），气体流速变化

程序为 0~2 min 保持 $2.00 \text{ mL}\cdot\text{min}^{-1}$, 2~8 min 升至 $10.00 \text{ mL}\cdot\text{min}^{-1}$, 8~12 min 升至 $100.00 \text{ mL}\cdot\text{min}^{-1}$, 12~30 min 保持 $100.00 \text{ mL}\cdot\text{min}^{-1}$ 。离子迁移谱条件为: 电离源为氙源 (3H); 迁移管长度 53 mm; 迁移管温度 45°C ; 电压 2 700 V; 漂移气为 N_2 ($\geq 99.999\%$); 流速 $75 \text{ mL}\cdot\text{min}^{-1}$; 在正离子模式下采集数据。

1.3 数据处理与分析

本研究采用 Design Expert13 设计响应面试验与数据分析; SPSS 进行显著性检验; Origin2022 绘制图表; Python V3.9 软件构建神经网络预测模型, 通过 ChiPlo (https://www.chiplot.online/gene_cluster.html) 绘制挥发性成分聚类热图。

2 结果与分析

2.1 单因素实验结果分析

2.1.1 混合汁对复合软糖品质影响

从图 2A 可知, 在混合汁中比例为 3:1:1 (质量比) 时感官评分最高。而铁皮石斛汁添加量占比大, 口感较涩; 添加量太少, 难以体现铁皮石斛叶汁的口感, 所以二者感官评分均较低。

2.1.2 果胶添加量对复合软糖品质影响

从图 2B 中可知, 果胶添加量为 6% (质量分数) 时感官评分最高。果胶过多不利于成型, 过少则质地黏稠、咀嚼性差, 均影响品质。这是由于其通过氢键、疏水作用及钙离子桥联形成三维网络, 能实现凝胶与增稠, 并结合水分提升稳定性与质构^[20]。

2.1.3 蔗糖添加量对复合软糖品质影响

从图 2C 中可知, 蔗糖添加量为 40% (质量分数) 时感官评分显著高于其他组, 这是因为高甲氧基果胶需较高可溶性固形物以形成氢键并提高凝胶效果^[21]。而蔗糖过低使口感偏酸, 过高则过甜腻, 二者都不利于凝胶形成, 均导致感官评价得分降低。

2.1.4 柠檬酸添加量对复合软糖品质影响

从图 2D 可知, 感官评分最高的是柠檬酸添加量为 0.6% (质量分数)。因为高甲氧基果胶需在酸性 (pH 值 2.8~3.5)、高糖高温条件下形成凝胶, 酸过多口感偏酸, 过少则难以形成三维网络结构、易粘牙黏手, 因此确定 0.6% (质量分数) 为最佳添加量。

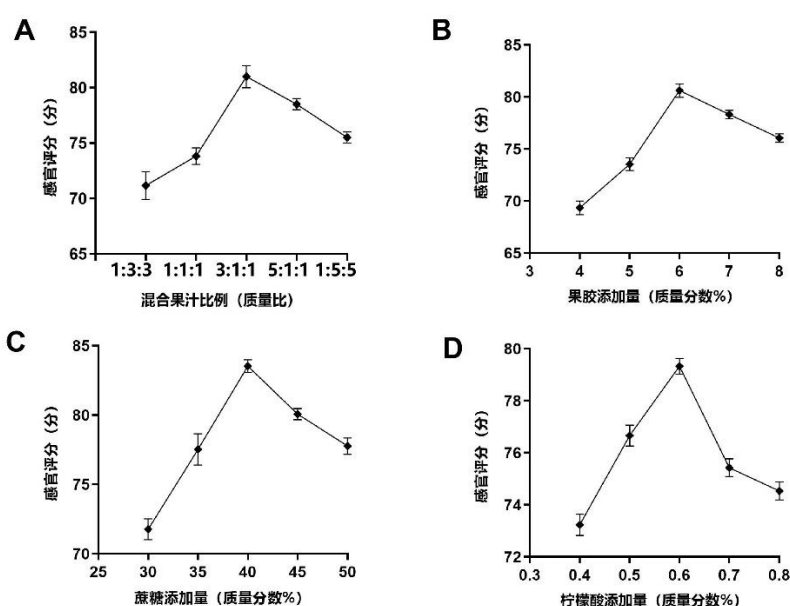


图 2 各单因素对复合软糖感官评分的影响

Fig.2 shows the effects of each single factor on the sensory scores of compound gummy candies

2.2 响应面试验结果与分析

基于上述单因素试验结果，设置自变量：混合果汁比例（A）、果胶添加量（B）、蔗糖添加量（C）和柠檬酸添加量（D），感官评分为响应值，采用 Box-Behnken 试验预测。

2.2.1 方差分析

通过 Design-Expert 13 对响应面试验数据进行回归分析，所得模型的方差分析结果如表 4 所示，回归方程为： $Y=-373.750\ 26+8.377\ 40A+31.353\ 75B+12.213\ 58C+476.066\ 67D-0.237\ 500AB+0.015\ 000AC-7.625\ 00AD-0.083\ 75BC-2.500\ 00BD-1.350\ 00CD-0.615\ 677A^2-3.209\ 58B^2-0.139\ 383C^2-323.770\ 83D^2$ 。

模型 $P<0.000\ 1$ ，极显著，而失拟值 $P=0.428\ 8>0.05$ ，无显著性差异，表明可信度较高。由 $F=38.66$ 可知，感官评分被各因素影响的程度为：混合果汁比>蔗糖添加量>果胶添加量>柠檬酸添加量。同时，该回归模型的总相关系数 $R^2=0.974\ 8$ ， $R^2_{adj}=0.906\ 9$ 则表明该模型有较为精确的拟合程度，可用于软糖感官评分的分析与优化。

2.2.2 响应面分析

当响应面图对应的等高线越接近于椭圆形，说明两因素之间有明显的交互作用；反之等高线越接近于圆形，则说明两因素之间的交互作用较弱。在图 3A~C 中可以看出，混合果汁比例与果胶添加量、蔗糖添加量、柠檬酸添加量的响应面等高线均接近于椭圆形，交互十分明显，说明混合果汁比例是影响感官品质的主导因素。而从图 3D、E 可以看出，果胶添加量、柠檬酸添加量与蔗糖添加量的响应面等高线呈现接近于圆形，交互作用比较弱。因此，推测是由于苹果梨复合果汁本身已提供较稳定的糖酸基础，而高甲氧基果胶体系对糖度与 pH 存在适宜成胶区间，加之铁皮石斛叶汁具有轻微苦涩感，使蔗糖与柠檬酸在设定范围内主要表现为局部微调效应。

利用回归方程与 3D 曲面图分析，得出复合软糖的最佳工艺条件：果汁比 2.78:1:1（质量比），果胶 6.02%（质量分数）、蔗糖 39.82%（质量分数）、柠檬酸 0.6%（质量分数），感官评分 87.794。考虑到实际生产要求，将最佳工艺条件调整为果汁比 3:1:1（质量比），果胶 6%（质量分数）、蔗糖 40%（质量分数）、柠檬酸 0.6%（质量分数）。

表 4 响应面试验方差分析结果

Table 4 Results of variance analysis of response surface						
变异来源	平方和	自由度	均方	F 值	P 值	显著性
模型	180.10	14	12.86	38.66	<0.000 1	**
A	2.80	1	2.80	8.43	0.011 6	*
B	0.157 6	1	0.157 6	0.473 5	0.502 6	ns
C	0.412 6	1	0.412 6	1.24	0.284 2	ns
D	0.053 3	1	0.053 3	0.160 3	0.694 9	ns
AB	0.902 5	1	0.902 5	2.71	0.121 8	ns
AC	0.090 0	1	0.090 0	0.270 5	0.611 1	ns
AD	9.30	1	9.30	27.96	0.000 1	**
BC	0.701 4	1	0.701 4	2.11	0.168 6	ns
BD	0.250 0	1	0.250 0	0.751 4	0.400 7	ns
CD	1.82	1	1.82	5.48	0.034 6	*
A ²	39.34	1	39.34	118.24	<0.000 1	**
B ²	66.82	1	66.82	200.83	<0.000 1	**
C ²	78.76	1	78.76	236.72	<0.000 1	**
D ²	68.00	1	68.00	204.36	<0.000 1	**
残差	4.66	14	0.332 7			
失拟值	3.57	10	0.356 6	1.31	0.428 8	ns
净误差	1.09	4	0.273 0			
总离差	184.76	28				

注：*表示有显著差异（ $P<0.05$ ）；**表示有极显著差异（ $P<0.001$ ）；ns 表示不显著。

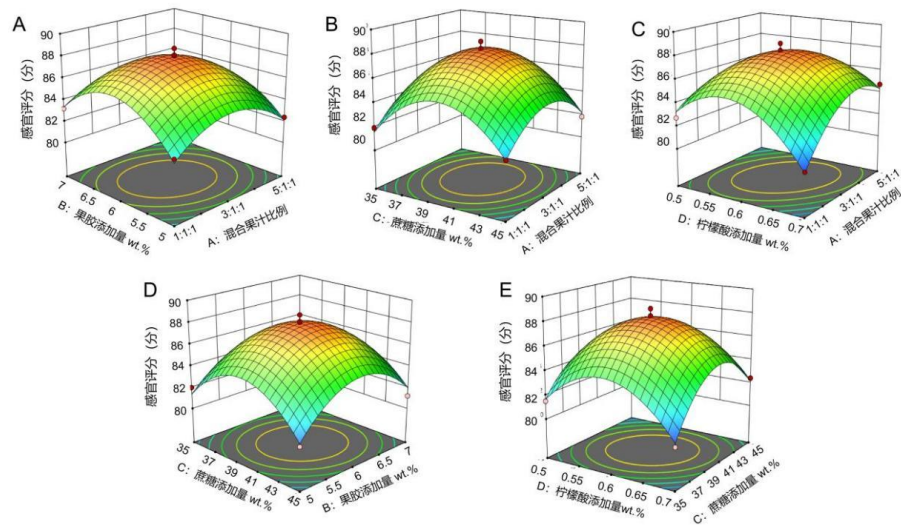


图 3 不同物质添加量对感官评分交互影响的响应面图

Fig.3 Response surface plot of the interactive effects of different additive amounts on sensory scores

2.3 模糊数学综合评价结果

此前的感官评价 100 分制用于感官指标初始评分，而模糊综合评价将用于综合品质评价。6 位评价专家的复合软糖感官指标权重投票归一化结果如表 5 所示，每项指标权重值经过平均后取整得到各因素所占权重比例：组织形态 31%，口感 32%，色泽 15%，滋味 22%。加权重集 $Y=\{0.31,0.32,0.15,0.22\}$ 。

表 5 复合软糖感官指标权重结果

Table 5 Weight Results of Sensory Indicators of Composite Gummy candies								
水平	得分统计						平均值/ 10^{-2}	权重%
	I	II	III	IV	V	VI		
组织形态	0.32	0.33	0.35	0.28	0.3	0.29	31.16	31.00
口感	0.27	0.29	0.32	0.34	0.33	0.37	32.00	32.00
色泽	0.12	0.18	0.15	0.18	0.13	0.16	15.33	15.00
滋味	0.23	0.24	0.22	0.21	0.20	0.23	22.16	22.00

注：I~VI表示 6 位专业人员的序号。

表 6 样品 1 口感评价结果

Table 6 Taste Evaluation Results of Sample 1							
Yy	感官指标	I	II	III	IV	V	VI
票数统计	组织形态	0	1	2	4	3	0
	口感	0	0	2	3	4	1
	色泽	0	1	2	5	3	0
	滋味	0	0	1	4	5	0

注：I~VII表示感官评价分数 1~6。

根据表 6 及式 (3)，得到归一化矩阵 R_1 ：

$$R_1 = \begin{bmatrix} 0 & 0.1 & 0.2 & 0.4 & 0.3 & 0 \\ 0 & 0 & 0.2 & 0.3 & 0.4 & 0.1 \\ 0 & 0.1 & 0.2 & 0.5 & 0.5 & 0 \\ 0 & 0 & 0.1 & 0.4 & 0.5 & 0 \end{bmatrix} \quad (7)$$

根据式 (5)，把加权重集 Y 与 R_1 相乘，得到评价结果向量 $b_1=(0, 0.04, 0.178, 0.383, 0.376, 0.032)$ ，接着与评价分列向量 $V=(1, 2, 3, 4, 5, 6)$ T 相乘得到综合评价分 $P_1=4.23$ ，剩余的样品综合评价得分 P_q 根据

以上方法计算可获得。

2.4 GA-BP 神经网络预测模型

2.4.1 确定 BP 神经网络隐藏层神经元个数

为了确定隐藏层神经元个数,比较 $C=2\sim 20$ 下模型训练后的均方根误差。如图 4 所示,当 C 大于 16 后趋于稳定,虽然 18 个隐藏层神经元时误差达到最小,但考虑到模型误差、网络复杂度及模型稳定性等问题,最终选择 16 个隐藏层神经元构建 BP 神经网络模型,网络的结构为 $4\times 16\times 1$ 。

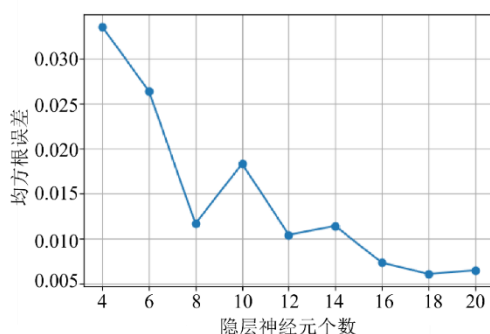


图 4 隐藏层神经元个数对均方根误差的影响

Fig.4 Effect of the Number of Hidden Layer Neuron Number on Root Mean Square Error

2.4.2 GA-BP 神经网络模型训练

将响应面试验获得的数据用于 BP 神经网络模型训练,并与 GA 遗传算法联用能在食品加工工艺、配方优化等方面高效寻求最优解,并尽可能提高 BP 神经网络的性能,降低网络的不稳定性^[22]。将混合果汁配比、果胶、蔗糖和柠檬酸添加量 4 个因素作为输入向量,隐藏层设 16 个神经元,输出层为模糊综合评价分数,训练迭代次数为 60 000,并进行 3 次平行验证实验。

该模型 RMSE 为 0.057, R^2 为 0.984,表明模型具有较高的预测准确性,且实验因素与感官评分之间的非线性关系。如图 5A 所示,随着迭代次数增加,训练误差(MSE)在循环次数超过 3 896 次后,逐渐收敛并趋近于零,未出现明显震荡或发散现象;当 5 731 次迭代模型达到最佳训练性能, MSE 为 0.003 7,表明该模型稳定可靠。图 5B 的误差直方图显示,大部分测试样本误差接近于零,整体分布较为均匀且未发现明显系统性偏差,说明模型的复合软糖配方优化可靠性高,不存在明显异常拟合现象。图 5C 显示了实际值和预测值之间的拟合情况, $R^2=0.984$,高于传统响应面模型的 0.974 8,表明该 BP 神经网络模型在预测准确性上优于响应面模型。

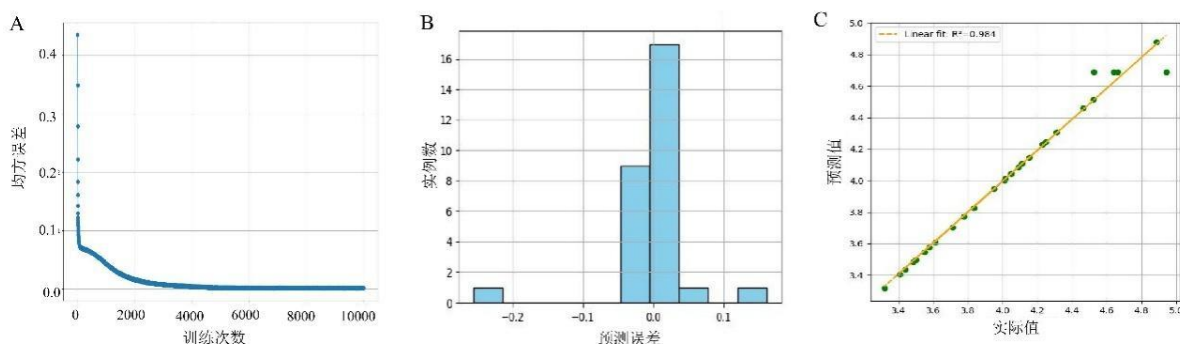


图 5 BP 神经网络模型训练结果

Fig.5 Training results of BP neural network model

注: A.训练次数与均方误差曲线; B.样品误差直方图; C.预测值与实际值线性回归曲线。

2.4.3 遗传算法优化复合软糖配方

利用遗传算法与 BP 神经网络结合确定复合软糖的最优配方。由图 6 可知,模型初始适应度为 0.14,经 224 代迭代后降至 0.02 以下并趋于稳定,表明算法可有效优化网络权重并降低预测误差,具有可靠性与收敛性。模型

预测的最优配方：果汁比 3.24:1:1，果胶 5.93%，蔗糖 38.06%，柠檬酸 0.633%，预测的感官评分为 5.074。结合实际复合软糖最优配方调整为：果汁比 3:1:1，果胶 6.0%，蔗糖 38.0%，柠檬酸 0.6%。在此配方下进行验证实验，得到实际的感官评分为 5.047 ± 0.41 ，与预测值基本一致，可见 GA-BP 神经网络模型能很好对复合软糖配方进行优化，合理性和准确性较高。

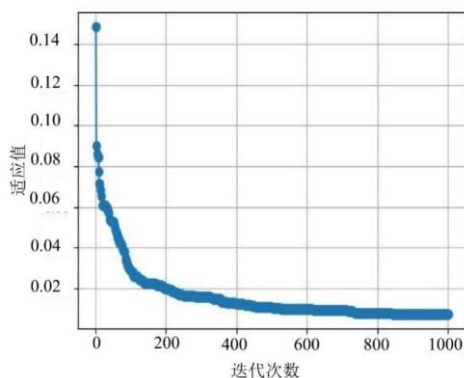


图 6 迭代寻优结果

Fig.6 Iterative optimization results

2.5 电子鼻差异分析

电子鼻有具有一定专一性气体传感器阵列，结合先进的模式识别算法实现对复杂挥发性成分的识别与区分^[23]。传感器响应值与挥发性化合物含量呈正关系，响应值越高说明对应挥发性组分浓度越大。从雷达图整体轮廓（图 7A）可见，未添加铁皮石斛叶汁对照组（Control）在 W1W、W3C 和 W6S 的响应值偏低，表明其挥发性风味物质种类及丰度相对有限。添加铁皮石斛叶汁响应面优化组（BBD）在传感器 W1S、W2S 及 W5C 的响应强度较 Control 组显著增强，说明其在增强果香和甜香方面效果明显。而 GA-BP 神经网络预测组（GA-BP）在 W1W、W3C 和 W6S 等传感器上显著高于其他两组，表明其在特征风味物质的综合调控方面表现更优。主成分分析（PCA）主要用于对多变量数据进行降维和综合评价，能够直观展示不同样品在整体和个体的相似性与差异性^[24]。如图 7B 所示，其中 PC1 贡献率为 85.32%，PC2 为 9.96%，累计贡献率达到 95.28%。PCA 进一步佐证上述结论，GA-BP 组在 PC1 正向区域形成相对独立且高度集中的分布，其主成分贡献主要来源于与芳香族化合物、醇类及含硫有机化合物相关的传感器变量，表明这些挥发性成分是与 Control 组存在差异的重要因子。

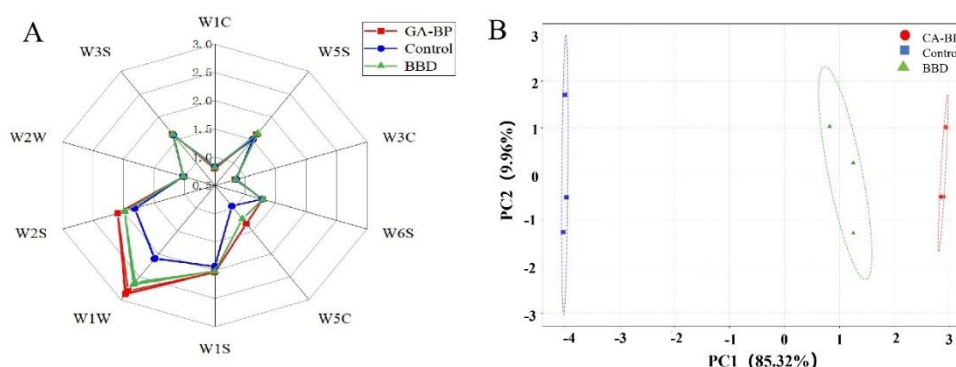


图 7 传感器雷达图 (A) 和复合软糖电子鼻 PCA 图 (B)

Fig.7 Sensor radar diagram (A) and PCA diagram (B) of the composite gummy electronic nose

2.6 GC-IMS 差异谱图分析

为进一步从化学层面揭示电子鼻所发现的风味差异，采用 GC-IMS 测定不同配方复合软糖的挥发性特征成分。图 8A 三维地形图中，每个点代表一种挥发性化合物，颜色深浅度表示峰值强度，红色越深，峰值强度越高，表明化合物的相对含量越高^[25]。其中，X 轴表示 VOCs 在复合软糖中的离子漂移时间，Y 轴表示保留时间，Z 轴表

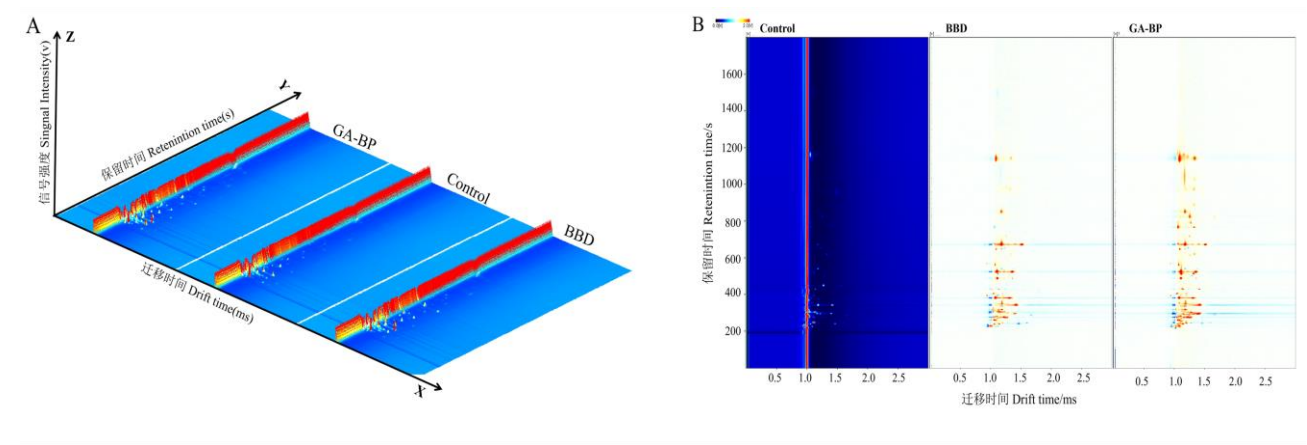


图 8 复合软糖挥发性成分三维地形图 (A) 和差异图 (B)

Fig.8 3D surface topography (A) and differential map (B) of volatile compounds in composite gummy samples

在图 8B 中，VOC 信号的保留时间主要在 0 到 1 200 s 之间，漂移时间在 0.5 到 2.0 s 之间。以未添加铁皮石斛叶汁对照组（Control）为参照，添加铁皮石斛叶汁响应面优化组（BBD）与 BP 神经网络预测组（GA-BP）谱图为扣除参照后的显示，通过差值谱图的形式能直观看到不同样品特征峰的差异，颜色表示各个化合物的信号强度。浓度高于参照样品用红色表示，低于参考样品时用蓝色表示^[27]。由图 8B 可观察到，三组复合软糖的挥发性物质得到有效分离，且差异显著。Control 组的挥发性成分信号强度明显低于 BBD 组和 GA-BP 组，而 GA-BP 组又略强于 BBD 组。利用 GC-IMS 共识别出 53 种挥发性物质，其中包括 23 种醛类，7 种醇类，8 种酮，1 种酯类，2 种酸，1 种呋喃，4 种芳香族化合物，4 种硫化物，1 种胺类，1 种烯烃类及 1 种含氧环状化合物。

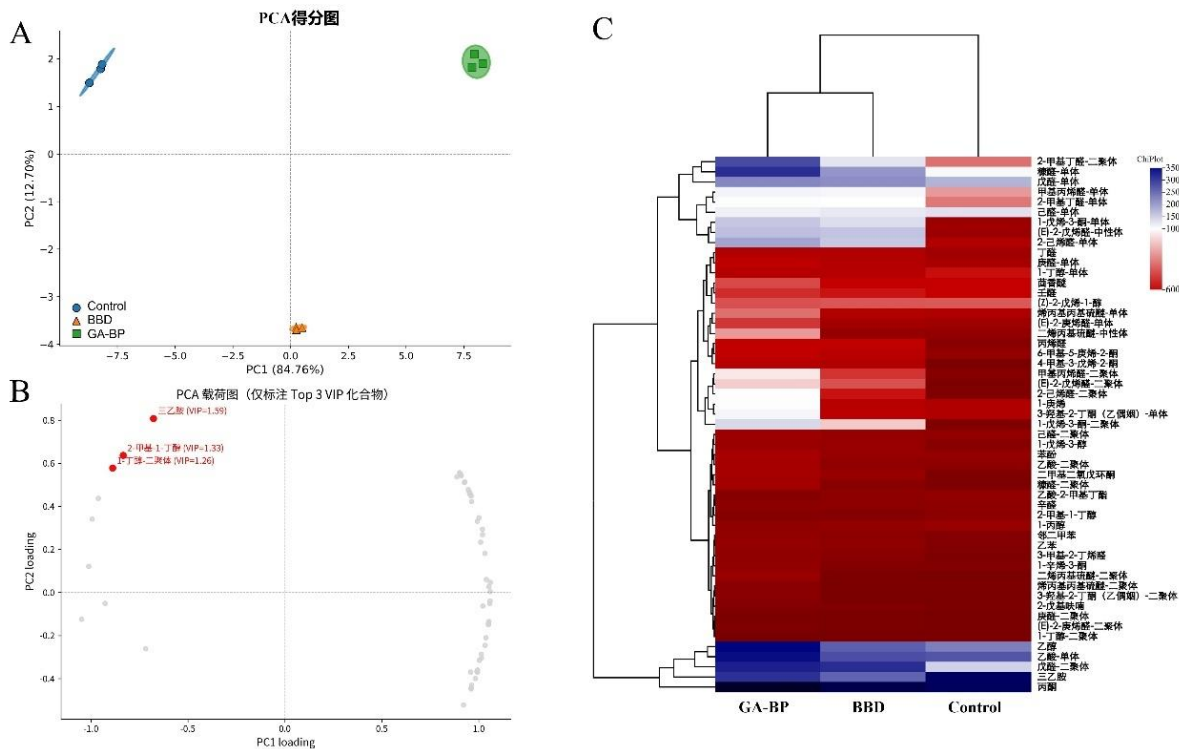


图 9 复合软糖挥发性成分 PCA 得分图 (A)、载荷图 (B) 和聚类热图 (C)

Fig.9 PCA score plot (A), loading plot (B) and clustering heatmap (C) of volatile components in compound gummy candies

注：GA-BP 添加铁皮石斛叶汁的反向传播神经网络预测组；Control 未添加铁皮石斛叶汁对照组；BBD 添加铁皮石斛叶汁的响应面优化。

如图 9A 所示，主成分累计贡献率达到 97.46%，其中 PC1 和 PC2 分别为 84.76%和 12.70%，表明所建立的模

型能够较好反映不同复合软糖样品挥发性风味成分的整体差异。载荷图(图 9B)结果显示, VIP 值大于 1 的差异挥发性成分共有 22 种, 包括醛类、醇类、酮类、酸类、烃类、醚类、含硫化合物、酚类及胺类等多种化合物; 其中醛类化合物数量占比最高, 为 11.32%, 其次为含硫化合物。

为进一步明确不同样品挥发性成分的分布特征及差异规律, 基于各挥发性成分峰体积绘制聚类热图进行可视化分析。如图 9C 所示, Control 组整体信号强度较低, 香气物质分布较为分散, 风味层次相对单一, 以基础果香为主。而 BBD 组和 GA-BP 组的醛类化合物占比明显提高, 其次是醇类, 呈现出高丰度和强响应信号, 而又以 GA-BP 组的挥发性成分响应强度和信号强度最高。醛类提供青草香和清新植物气息, 其中己醛为主要特征风味物质, 可增强软糖的清新感^[28]。这些醛类化合物来源于脂肪酸在脂氧合酶(LOX)途径生成的一系列短链醛类化合物, 是绿色植物中最典型的“青草香”物质基础^[29]。此外, 醛类还可被乙醇脱氢酶(ADH)催化还原为醇类^[30]。醇类具有花果香气特征^[31], 可通过一系列生化反应生成醛、酮等物质^[32]。醇类气味又相对柔和, 可在一定程度上缓冲醛类带来的尖锐青香。此外, 丙烯基甲基硫化物、二丙烯基硫化物等含硫化合物虽整体丰度较低, 也能显著影响整体风味^[33]。在 GA-BP 组中表现出较高的响应信号, 这些含硫挥发物可在低浓度条件下赋予产品轻微的草本和药香气味, 如 1-戊烯-3-醇及含硫挥发物信号有所增强, 说明该组在细微风味物质的构建上更具优势, 有助于提升整体香气复杂度。

3 结论

本研究以铁皮石斛叶为功能性原料, 复配苹果汁和梨汁研制一种复合软糖产品。通过 Box-Behnken 响应面试验与 GA-BP 神经网络相结合, 对其复合软糖配方进行系统优化, GA-BP 神经网络模型预测得到的最佳配方: 果汁比 3:1:1 (质量比), 果胶 6.0% (质量分数), 蔗糖 38.0% (质量分数), 柠檬酸 0.6% (质量分数)。复合软糖实际感官评分为 5.047 ± 0.41 , 与模型预测高度一致, 表明该模型在复合软糖配方优化中具有较高的准确性。电子鼻和 GC-IMS 分析结果表明, 醛类和含硫化合物是复合软糖风味形成的重要贡献成分, 添加铁皮石斛叶汁丰富了复合软糖的挥发性风味物质组成, 提高了醛类、醇类及部分含硫化合物的相对丰度, 使产品香气更加协调、层次更加丰富。综上, 本研究为铁皮石斛叶资源的高值化利用及凝胶糖果的品质优化提供了理论依据和技术参考。

参考文献

- [1] SUI B, SUN Y, WANG J, et al. Complexes of *Dendrobium officinale* anthocyanins and polysaccharides: Structural characteristics, stability, antioxidant properties, and bioavailability [J]. Food Bioscience, 2025, 72: 107449.
- [2] DAI J, WANG W, HE F, et al. Discovery of anti-inflammatory molecules from *Dendrobium officinale* based on activity labelled molecular networking and its alleviation effect on ulcerative colitis [J]. Food Research International, 2025, 203: 115888.
- [3] XU L, ZENG X, LIU Y, et al. Inhibitory effect of *Dendrobium officinale* polysaccharide on oxidative damage of glial cells in aging mice by regulating gut microbiota [J]. International Journal of Biological Macromolecules, 2023, 247: 125787.
- [4] WANG Y-H. Traditional uses, chemical constituents, pharmacological activities, and toxicological effects of *Dendrobium* leaves: A review [J]. Journal of Ethnopharmacology, 2021, 270: 113851.
- [5] 许佳隽,刘雨杰,林爱珍,等.魔芋寡糖及 5-羟色氨酸复配软糖的研制及品质分析[J].食品安全质量检测学报,2025,16(18):192-202.
- [6] 王元川,高雪梅,杨宝君,等.响应面法优化铁皮石斛软糖配方及其抗氧化活性分析[J].食品工业科技,2023,44(13):197-206.
- [7] TORRICO D D, MEHTA A, BORSSATO A B. New methods to assess sensory responses: a brief review of innovative techniques in sensory evaluation [J]. Current Opinion in Food Science, 2023, 49: 100978.
- [8] 林子沁,吕芳娥,王宏宇,等.基于模糊数学感官评价法优化燕麦怀山药复合饮料配方[J].保鲜与加工,2025,25(10):67-74.
- [9] 迟雷,王静雨,侯俊超,等.基于人工神经网络和遗传算法的普鲁兰酶重组大肠杆菌高密度发酵工艺优化[J].食品科学,2021,42(10):73-78.
- [10] 王强,冯玲然,余晓斌.基于 BP 神经网络和遗传算法优化番茄红素发酵培养基[J].食品与生物技术学报,2019,38(2):111-119.
- [11] KUMAR A, PATHAK A K, GURIA C. NPK-10:26:26 complex fertilizer assisted optimal cultivation of *Dunaliella tertiolecta* using response surface methodology and genetic algorithm [J]. Bioresource Technology, 2015, 194: 117-129.
- [12] 孙嘉,郑远荣,刘振民,等.基于反向传播神经网络和遗传算法的新鲜 Halloumi 奶酪生产工艺优化[J].食品与发酵工业,2024,50(1):133-143.

- [13] 杨涛涛,周星宇,钱善华,等.应用 GA-BP 神经网络建立明胶软糖口感的预测模型[J].中国食品学报,2022,22(7):238-247.
- [14] 李爽,李庆龙,王旭易,等.无糖银菊软糖配方优化及其抗氧化活性分析[J].林产工业,2025,62(7):68-76.
- [15] 郭睿,杨玲,郭旭凯.基于 GC-IMS 与模糊综合评判的 3 种黄酒比较分析[J].中国食品学报,2025,25(12):307-319.
- [16] DENG Y, XIAO H, XU J, et al. Prediction model of PSO-BP neural network on coliform amount in special food [J]. Saudi journal of biological sciences, 2019, 26(6): 1154-1160.
- [17] 闫旭,徐森生.基于 GA-BP 神经网络的造纸输送机 CST 故障诊断模型研究[J].造纸科学与技术,2025,44(6):82-88.
- [18] 王燕君.木瓜红枣复合软糖加工工艺研究[D].杨凌:西北农林科技大学,2025.
- [19] 刘春晖,龙运忠,刘未未,等.GC-IMS 分析不同杀菌方式对铁皮石斛饮料中挥发性物质的影响[J].食品与生物技术学报,2025,44(1):88-98.
- [20] 李晓璐,唐蓉,范明明,等.罗伊氏黏液乳杆菌透明质酸软糖加工工艺与稳定性研究[J].食品工业,2025,46(3):71-78.
- [21] 于佳鑫,厉欣颖,吴涛.海参多肽铁凝胶软糖的制备方法[J].农产品加工,2026,9:31-36.
- [22] 谭显鑫,吴馨怡,金山,等.基于 GA-BP 神经网络优化复配保水剂对冷冻预制烤鱼冻结品质特性的影响[J/OL].食品与发酵工业: 1-11 [2026-05-10].
- [23] SUN H, HUA Z, YIN C, et al. Geographical traceability of soybean: An electronic nose coupled with an effective deep learning method [J]. Food Chemistry, 2024, 440: 138207.
- [24] FU L, TIAN J, LIU L, et al. Analysis of Volatile Components in Tremella fuciformis by Electronic Nose Combined with GC-MS [J]. Journal of Food Quality, 2022, 2022(1): 9904213.
- [25] MIAO X, ZHANG R, JIANG S, et al. Volatile flavor profiles of douchis from different origins and varieties based on GC-IMS and GC-O-QTOF/MS analysis [J]. Food Chemistry, 2024, 460: 140717.
- [26] LI J, XU Y, DU W, et al. Comparative analysis of aroma compounds in Chinese traditional dry-rendered fat by HS/GC-IMS, SPME/GC-MS, and SPME/GC-O [J]. Journal of Food Composition and Analysis, 2022, 107: 104378.
- [27] MENG L, NIE Y, WU S, et al. Effects of variety and cultivation on volatile organic compounds in Dictyophora rubrovolvata: Insights from integrated GC-IMS, GC-MS and E-nose and Multivariate Data Analysis [J]. Food Chemistry: X, 2026, 33: 103516.
- [28] ZHAO Q, YOUSAF L, XUE Y, et al. Changes in flavor of fragrant rice during storage under different conditions [J]. Journal of the Science of Food and Agriculture, 2020, 100(8): 3435-3444.
- [29] WANG J, YUAN C, GAO X, et al. Characterization of key aroma compounds in Huangjiu from northern China by sensory-directed flavor analysis [J]. Food Research International, 2020, 134: 109238.
- [30] 薛靖侨,张晓颖,李斌,等.基于 GC-MS/GC-IMS 联用技术的不同品种草莓特征香气物质解析[J].食品工业科技,2026,47(16):313-322.
- [31] YUN J, CUI C, ZHANG S, et al. Use of headspace GC/MS combined with chemometric analysis to identify the geographic origins of black tea [J]. Food Chemistry, 2021, 360: 130033.
- [32] XIA D, TAN X, WANG L, et al. GC-MS Coupled with Rate-All-That-Apply (RATA) to Analyse the Volatile Flavor Substances of Yellow Wine during Fermentation [J]. Foods, 2023, 12(10):1992.
- [33] PAN X, ZHANG S, XU X, et al. Volatile and non-volatile profiles in jujube pulp co-fermented with lactic acid bacteria [J]. LWT, 2022, 154: 112772.