

基于电子鼻和GC-MS分析不同干燥方式香蕉果干的风味品质差异及判别预测模型建立

陈尊旭^{1,2}, 肖雯丽^{1,2}, 梁浩斌^{1,2}, 康晶玲^{1,2}, 马路凯^{1,2}, 钟玉鸣^{1,2}, 肖更生^{1,3}, 王琴^{1,2}, 刘祎帆^{1,2*}

(1. 仲恺农业工程学院轻工食品学院, 广东广州 510225) (2. 广东省普通高校药食同源食品精深加工工程技术研究中心, 广东广州 510225) (3. 广东省农业科学院蚕业与农产品加工研究所, 广东广州 510640)

摘要: 为探究热风干燥 (HAD)、真空冷冻干燥 (VFD) 和热泵干燥 (HPD) 三种不同干燥方式的香蕉果干风味品质差异, 建立基于风味品质指标的干燥方式预测判别模型。该研究使用电子鼻、气相色谱-质谱联用 (GC-MS) 分析不同干燥方式香蕉果干的风味品质, 通过 ROAV 法确定关键贡献风味物质, PCA 和 LDA 进行数据降维与特征提取作为数据集, 建立用于干燥方式判别预测的反向传播神经网络 (BPNN) 模型。实验结果显示, 电子鼻采样表明 HAD 组在 W3C 传感器处响应值区别于另外两组; ROAV 法鉴别出 17 种关键贡献风味物质, 其中酯类 11 种, 聚类热图结果显示 VFD 和 HPD 两组相似性更高。基于 LDA 监督降维的反向传播神经网络 (LDA-BPNN) 模型, 其判别准确度 ($R^2=0.844\ 4$) 优于 PCA-BPNN ($R^2=0.766\ 9$) 与单一 BPNN ($R^2=0.703\ 6$), 结果将 HAD 组与其余两组完全区分。研究明确了不同干燥方式香蕉果干的风味特征, 基于风味品质的 LDA-BPNN 模型对香蕉果干干燥方式具有良好预测性能, 有助于推进香蕉果干干燥工艺选择及品质提升, 以为相关应用提供技术参考。

关键词: 香蕉果干; 电子鼻; 气相色谱-质谱联用; 相对气味活性值; 机器学习; 反向传播神经网络; 预测模型

文章编号: 1673-9078(2026)5-322-335

DOI: 10.13982/j.mfst.1673-9078.2026.5.0229

Flavor Differences in Dried Banana Chips Processed using Different Drying Methods using Electronic Nose and GC-MS

CHEN Zunxu^{1,2}, XIAO Wenli^{1,2}, LIANG Haobin^{1,2}, KANG Jingling^{1,2}, MA Lukai^{1,2}, ZHONG Yuming^{1,2},
XIAO Gengsheng^{1,3}, WANG Qin^{1,2}, LIU Huifan^{1,2*}

(1.College of Light Industry and Food Science, Zhongkai University of Agriculture and Engineering, Guangzhou 510225, China)(2. Guangdong Higher Education Institutes Medicinal-Edible Food Deep Processing Engineering Research Center, Guangzhou 510225, China)(3.Sericultural & Agri-Food Research Institute, Guangdong Academy of Agricultural Sciences, Guangzhou 510640, China)

Abstract: To investigate differences in flavor quality among dried banana chips processed using hot air drying (HAD), vacuum freeze drying (VFD), and heat pump drying (HPD), and to establish predictive discrimination models for drying methods based

引文格式:

陈尊旭,肖雯丽,梁浩斌,等.基于电子鼻和GC-MS分析不同干燥方式香蕉果干的风味品质差异及判别预测模型建立[J].现代食品科技,2026,42(5):322-335.

CHEN Zunxu, XIAO Wenli, LIANG Haobin, et al. Flavor differences in dried banana chips processed using different drying methods using electronic nose and GC-MS [J]. Modern Food Science and Technology, 2026, 42(5): 322-335.

收稿日期: 2025-02-20; 修回日期: 2025-04-23; 接受日期: 2025-04-26

基金项目: 广东省重点领域研发计划项目 (2023B0202050001); 国家自然科学基金项目 (32302087); 广东省普通高校药食同源食品精深加工工程技术研究中心 (2024GCZX002)

作者简介: 陈尊旭 (1999-), 男, 硕士研究生, 研究方向: 食品加工与安全, E-mail: 11986258306@qq.com

通讯作者: 刘祎帆 (1990-), 女, 博士, 教授, 研究方向: 天然产物开发, E-mail: lm_zkng@163.com

on flavor quality indicators, this study analyzed flavor characteristics using an electronic nose (E-nose) and gas chromatography-mass spectrometry (GC-MS). Relative odor activity values (ROAVs) were used to identify key aroma-active compounds. Principal component analysis (PCA) and linear discriminant analysis (LDA) were applied for dimensionality reduction and feature extraction, and a backpropagation neural network (BPNN) model was constructed for drying method discrimination and prediction. The results demonstrated that E-nose analysis revealed a distinctive response of HAD samples at the W3C sensor compared with the other drying methods. Seventeen key aroma compounds, including 11 esters, were identified based on ROAV analysis. Cluster heatmap analysis indicated higher flavor similarity between the VFD and HPD samples. Among the established models, the LDA-BPNN model achieved the highest discrimination performance ($R^2=0.844\ 4$), outperforming the PCA-BPNN ($R^2=0.766\ 9$) and the standalone BPNN model ($R^2=0.703\ 6$), and completely distinguishing HAD samples from the other groups. The flavor profiles of dried banana chips produced using different drying methods were systematically characterized, and an LDA-BPNN model based on flavor quality indicators demonstrated strong predictive performance for drying method discrimination. These findings provide a technical reference for optimizing drying processes and improving the quality of dried banana chip products.

Key words: dried banana chips; electronic nose; gas chromatography-mass spectrometry; relative odor activity value; machine learning; backpropagation neural network; predictive model

香蕉 (*Musa* spp.) 是芭蕉科 (Musaccac) 车前属 (*Musa* L.) 的多年生草本植物, 中国是世界上产量仅次于印度的第二大香蕉产国, 但我国香蕉以鲜食为主, 加工率不到 10%, 加工利用程度远低于柑橘等其他大宗贸易水果^[1]。香蕉后熟较快且质地松软, 鲜果贮运销售环节易损伤腐烂导致损耗严重, 针对香蕉的深加工与高值化开发技术是促进产业发展、提高农民收入的必要途径。香蕉果干是香蕉主要加工产品。目前, 香蕉果干的主要干燥处理方式包括传统晒干、热风干燥、真空冷冻干燥以及热泵干燥等。当前香蕉果干的研究集中在干燥过程中活性成分鉴定^[2]、质构变化^[3]以及干燥动力学建模^[4]等, 针对不同干燥方式对风味品质的影响及分类预测研究较为少见, 尤其是针对香蕉品种和加工方式的分类预测。近年来基于气相色谱-质谱联用 (Gas Chromatography-Mass Spectrometry, GC-MS) 与电子鼻技术在风味研究领域广泛应用, 张帅等^[5]在 6 个品种香蕉后熟过程检测到 36 种挥发性物质, 酯类成分是关键贡献风味物质; GC-MS 与气相色谱-嗅觉分析仪 (Gas Chromatography Olfactometry, GC-O) 联用, 被应用于分别对市售香蕉香精和新鲜香蕉果酱的 43 种和 26 种香气活性成分进行了定量并进行差异分析, 鉴定出商业香蕉香精中的 5 种新成分^[6]; Angela 等^[7]使用监督式学习分类器基于香蕉理化指标测定进行成熟度阶段预测的机器学习模型。

机器学习是一种越来越常用的研究工具, 计算机科学的进步使得模型训练与的难度降低, 从而使得利用人工智能解决复杂问题成为可能^[8]。近年来, 机器学习方法逐渐在农产品加工领域得到广泛应用, 例如基于图像的随机森林 (Random Forest, RF) 分类器的

训练用于农产品的无损检测和分类^[9], 用于分析图像特征以对农业原料进行分类的 K 均值聚类算法^[10], 以及农产品采后品质预测^[11]。

本研究采用电子鼻、GC-MS 分析不同干燥方式香蕉果干的风味品质指标, 探究不同干燥方式香蕉果干的风味差异, 基于电子鼻传感器响应值与 ROAV 分析的筛选关键贡献风味物质, 建立联用不同特征降维方式的机器学习模型, 对香蕉果干干燥方式进行判别预测, 以期对香蕉果干的干燥工艺选择, 提升产品品质与确保食品真实性提供技术参考。

1 材料与方法

1.1 材料与试剂

选取无霉变病虫害和机械损伤等引起腐烂现象的香蕉果指。10 个品种的香蕉原料均从广东省广州市当地农贸市场收集, 详细信息见表 1。

试剂, HPLC 氯仿 (货号 40064966), 北京沃凯生物科技有限公司; HPLC 吡啶 (货号 H1823082), 上海阿拉丁生化科技股份有限公司; 甲氧胺盐酸盐 (货号 P1126864), 上海泰坦科技股份有限公司; BSTFA (1% TMCS, 货号 65339), 美国 Regis Technologies; HPLC 甲醇 (货号 184268), 美国 Fisher Chemical; HPLC 乙腈 (货号 184866), 美国 Fisher Chemical; 核糖醇 (货号 P1069993), 上海泰坦科技股份有限公司, 正构烷烃混标 (C10-C25, 货号 1069335HE), 英国 Laboratory of the Government Chemist。

1.2 仪器与设备

DHG-2050B 电热鼓风干燥箱, 郑州生元仪器有限

公司; SCIENTZ-10N/B 压盖型冷冻干燥机, 宁波新芝生物科技股份有限公司; L3.5 热泵干燥机, 广东威而信实业有限公司; PEN3 电子鼻系统 / 气味分析仪, 德国 Air Sense 公司; Wonbio-96c 冷冻研磨仪, 上海万柏生物科技有限公司; 5977B 气相色谱 - 质谱联用仪, 美国 Agilent 8890B; 122-5532G DB-5MS 色谱柱 (40 m×0.25 mm×0.25 μm), 美国 Agilent 公司。

表 1 10种香蕉样品信息

Table 1 Sample information of banana varieties			
品种	编号	分类 ^[12]	原料产地
香蕉	ba	香牙蕉 (<i>Musa AAA Cavendish</i>)	广东广州
鸳鸯蕉	Mdp	香牙蕉 (<i>Musa AAA Cavendish</i>)	广东广州
火龙蕉	Fdb	香牙蕉 (<i>Musa AAA Cavendish</i>)	广东广州
皇帝蕉	Eb	贡蕉 (<i>Musa AA Pisang Mas</i>)	广东广州
佳丽蕉	Ca	贡蕉 (<i>Musa AA Pisang Mas</i>)	广东广州
贵妃蕉	Pp	粉蕉 (<i>Musa ABB Pisang Awak</i>)	广东广州
苹果蕉	Ab	粉蕉 (<i>Musa ABB Pisang Awak</i>)	广东广州
芭蕉	Bb	粉蕉 (<i>Musa ABB Pisang Awak</i>)	广东广州
过山蕉	Gb	龙牙蕉 (<i>Musa AAB Sikl</i>)	广东广州
牛奶蕉	Mb	大蕉 (<i>Musa ABB</i>)	广东广州

1.3 实验方法

1.3.1 样品制备

不同品种香蕉剥皮后取果肉横切切成厚薄一致的片状, 厚度 5 mm。将香蕉片于烘盘中均匀铺开, 置于电热鼓风干燥箱中进行热风干燥 (Hot Air Drying, HAD), 在 70 ℃条件下烘干至恒重; 香蕉片经 -20 ℃下预冻 12 h 后, 在冷阱温度 -40 ℃、真空度 10 Pa 条件下进行真空冷冻干燥 (Vacuum Freeze Drying, VFD) 至恒重^[13]; 将香蕉片摆入烘盘于热泵干燥机设备室中进行热泵干燥 (Heat Pump Drying, HPD), 设置温度为 45 ℃烘干至恒重^[14]。

1.3.2 电子鼻信号采集

取不同干燥方式的不同品种香蕉果干 10 g, 剪碎后置于顶空瓶内, 保证顶空瓶中干燥无水汽, 常温常压密封静置 45 min, 达到气体饱和状态。设置洗气时间为 90 s, 测定时间为 60 s, 采样间隙时间为 10 s; 气体流速 400 mL·min⁻¹。电子鼻传感器阵列包含 10 个金属氧化物传感器, 每个传感器对不同的特定气体成分具有不同的特异性和选择性, 表 2 列出了特异性检测的目标成分。每个不同干燥方式的不同品种香蕉果干取 3 个样本, 共 90 个样本, 每个样本的电子鼻响应值重复测定 3 次后取平均值, 以减少误差。对电子鼻数据进行主成分分析 (Principal Components Analysis, PCA)。

表 2 特异性检测目标成分

Table 2 Specific detection of target components

传感器名称	性能描述
W1C	对芳香族敏感
W3C	对氨及芳香成分敏感
W5C	对烯烃及芳香分子敏感
W1W	对硫化物敏感
W2W	对有机硫化物敏感
W5S	对氮氧化合物敏感
W6S	对氢化物敏感
W1S	对甲烷敏感
W2S	对乙醇及部分芳香族敏感
W3S	对烷烃和脂肪族敏感

1.3.3 GC-MS测定及定性定量分析

按照一式三份进行取样, 共 90 个样本。精确称取 50 mg 样本于 2 mL 离心管混合 0.5 mL 甲醇 - 水溶液 [CH₃OH:H₂O=4:1 (V/V), 含 0.02 mg·mL⁻¹ 的内标核糖醇], 于 -20 ℃研磨机中研磨 (50 Hz, 3 min)。加入 200 μL 的氯仿, -20 ℃下研磨 (50 Hz, 3 min) 后超声提取 30 min。低温离心 15 min (13 000 g, 4℃), 取上清液于玻璃衍生瓶中, 氮气吹干。向玻璃瓶中加入 80 μL 甲氧胺盐酸吡啶溶液 (15 mg·mL⁻¹), 涡旋震荡 2 min 后于震荡培养箱中 37 ℃脎化反应 90 min。取出后再加入 80 μL 的 BSTFA (含 1% TMCS), 涡旋震荡 2 min 后于 70 ℃反应 60 min。取出样本, 室温放置 30 min, 进行 GC-MS 代谢组学分析。样品经 DB-5MS 色谱柱分离, 进样口温度 300 ℃, 载气为高纯氦气, 载气流量 1 mL·min⁻¹, 升温程序: 初始温度 60 ℃, 平衡 0.5 min, 然后以 8 ℃·min⁻¹ 的速度升至 310 ℃, 维持 6 min。

质谱信息与 NIST、Fiehn 以及 MS-DIAL 公共库代谢数据库进行匹配, 根据质谱匹配度鉴定代谢物。根据各挥发性成分的峰面积比值计算出各组分的相对含量。

1.3.4 ROAV分析

采用 ROAV 分析法^[15]确定香蕉果干挥发性成分中的中关键贡献风味物质, 查询挥发性化合物的嗅觉阈值^[16], 参照公式 (1) 计算各样品中各挥发性化合物组分 OAV, 确定最大风味贡献组分, 并将其 ROAV 值定为 100, 其他组分的 ROAV 按照公式 (2) 计算:

$$OAV = \frac{C_i}{T_i}$$

(1)

式中:

- OAV——气味活性值;
- C_i——目标化合物的相对含量, %;
- T_i——目标化合物的嗅觉阈值, mg·kg⁻¹。

$$ROAV = \frac{C_I}{C_{MAX}} \times \frac{T_{MAX}}{T_I} \times 100 \quad (2)$$

式中:

$ROAV$ ——相对气味活度值;

C_I ——目标化合物的相对含量, %;

T_I ——目标化合物的嗅觉阈值, $\text{mg} \cdot \text{kg}^{-1}$;

C_{MAX} ——该香蕉果干气味贡献最大组分的相对含量, %;

T_{MAX} ——该香蕉果干气味贡献最大组分的嗅觉阈值, $\text{mg} \cdot \text{kg}^{-1}$ 。

1.3.5 反向传播神经网络 (Back Propagation Neural Network, BPNN) 模型设计

BPNN 及其变体是神经网络模型在实际应用中大多采用的形式^[17]。BPNN 由输入层、若干隐含层和输出层组成, 每个层包含若干神经元个数。本研究中 BP-ANN 模型的输入层由风味品质指标神经元组成, 输出层神经元设定为香蕉果干干燥方式。测试样本总数为 90 个, 随机分为 2 个子集: 训练集: 测试集比例为 2:1。隐含层神经元由 BPNN 经验公式 (3) 计算:

$$N = \sqrt{n + m} + a \quad (3)$$

式中:

N ——隐含层神经元个数;

n ——输入层神经元 (输入特征) 个数;

m ——输出层神经元 (输出特征) 个数;

a ——介于 1~10 之间的常数。

1.3.6 模型建立与评价

对样本原始数据采用 PCA 及线性判别分析 (Linear Discriminant Analysis, LDA) 进行特征降维; 提取的主成分作为 BPNN 的输入特征, 建立基于特征降维和机器学习的风味品质香蕉果干不同干燥方式分类模型, 流程见图 1。本研究使用两个参数——测试集的判定系数 (R^2)、均方根误差 (Root Mean Square Error, RMSE)、平均绝对误差 (Mean Absolute Error, MAE) 与平均相对误差 (Mean Bias Error, MBE)——来评估模型的性能, 当所选预测模型的 R^2 最接近 1 且 RMSE、MAE 与 MBE 相对较小时, 模型更准确^[18]。参数计算公式如 (4)~(7) 所示:

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^n (y'_i - y_i)^2}{\sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2} \quad (4)$$

$$RMSE = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (y'_i - y_i)^2} \quad (5)$$

$$MAE = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n |y_i - y'_i| \quad (6)$$

$$MBE = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (y_i - y'_i) \quad (7)$$

式中:

R^2 ——判定系数;

$RMSE$ ——均方根误差;

MAE ——平均绝对误差;

MBE ——平均相对误差;

n ——样本集个数;

y' ——训练集或测试集的预测结果;

y ——训练集或测试集的实际结果;

$\bar{y}$ ——数据集中所有样品的实际值的平均值。

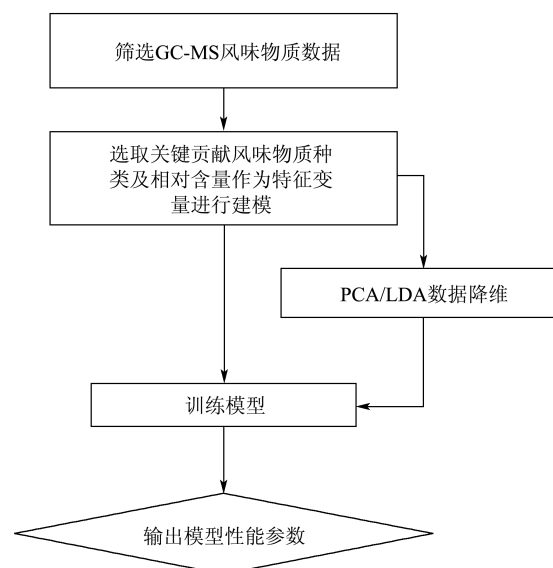


图 1 模型流程图

Fig.1 Model flow chart

1.4 数据处理

每个样品进行 3 次重复测定, 结果用平均值表示。使用 SPSS 26.0 for Windows (Armonk, NY, USA) 进行显著性及方差分析。使用 Origin 2021 软件 (美国马萨诸塞州汉普顿)、R 4.3.0 (R Statistical Calculation Foundation, Vienna, Austria) 的 pheatmap 包进行作图, MASS 包进行模型建立中的数据降维, 采用 Matlab R2024a (美国马萨诸塞州纳蒂克) 进行 BPNN 的模型构建。

2 结果与讨论

2.1 基于电子鼻的风味差异分析

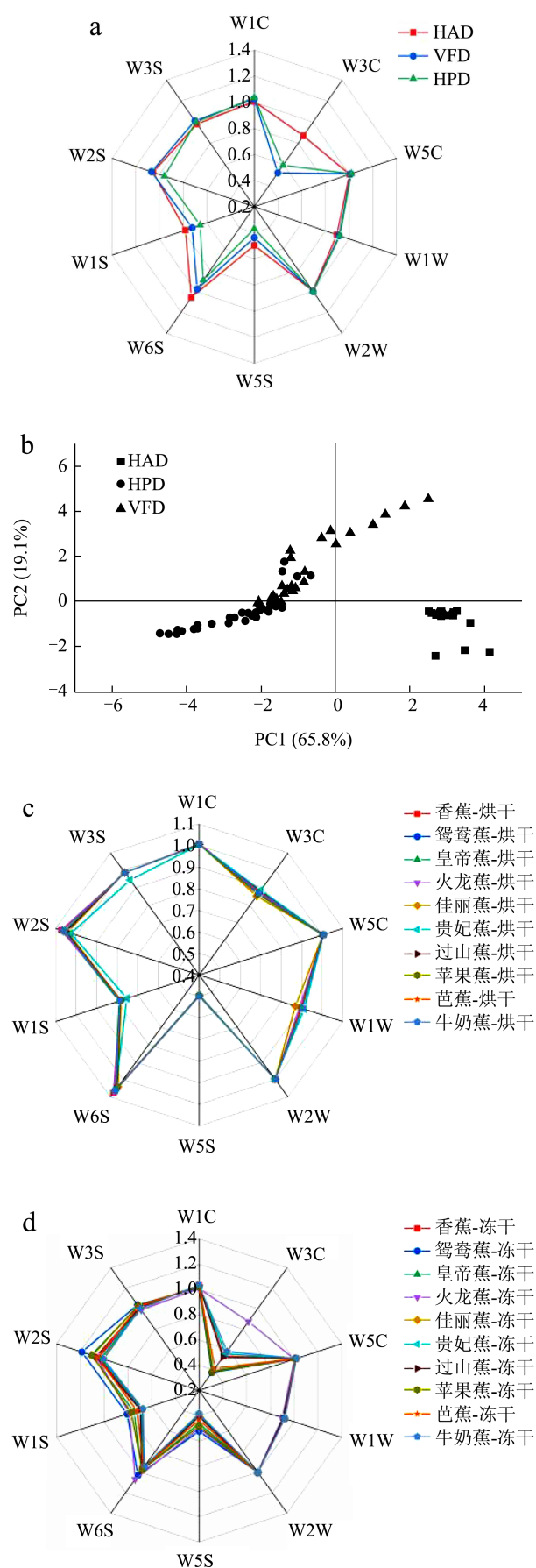
为了明确三种干燥方式香蕉果干的电子鼻数据的差异, 计算并据此绘制同一干燥方式的电子鼻传感器响应值数据 (图 2)。挥发性化合物含量直接影响传感器响应信号的最大值^[19]。传感器的最大响应值不同, 表明挥发性化合物的含量不同。从三组雷达图 (图 2a) 轮廓上看, 对于 W3C 传感器的最大响应值,

HAD 组与 VFD、HPD 两组之间存在明显差异, 这表明样品中氮及芳香成分的含量可能不同, 并且 HAD 组中的相应含量高于 VFD、HPD 两组。三个不同干燥方式组电子鼻数据 PCA 结果 (图 2b) 显示, HAD、VFD 与 HPD 三组在风味上可以明显区分, 尤其是 HAD 与 HPD 两组在 PC1 方向上有显著区别。PC1 和 PC2 两个主成分合计贡献率为 85.7%, 能够相对全面地反映三组香蕉果干在风味上的差异^[20]。

利用电子鼻技术分析 HAD 组的风味特性, 如雷达图 (图 2c) 所示, 不同品种的烘干香蕉果干电子鼻雷达传感器 W2S 和 W6S 的响应值较高, 说明 HAD 组的主要风味物质为醇类和芳香类化合物, 以及有机酸。而 W5S 的响应值较低, 说明含氮氧化合物在 HAD 组中含量较少。HAD 组 PCA 结果 (图 2f) 显示, PC1 和 PC2 两个主成分合计贡献率为 59.6%, 能够较好地反映烘干香蕉的整体风味特征。此外, 除贵妃蕉-烘干与其他品种的风味在 PC2 上有区别, 不同品种的烘干香蕉果干在风味上整体较为接近。

如图 2d 所示, 传感器 W2S 响应值最高, 说明 VFD 组主要风味物质为醇类及芳香类等, 其次是 W3S、W1C、W5C、W2W 和 W6S 响应值, 说明 VFD 组风味物质中烷烃和脂肪族、烯烃类、有机硫化物及有机酸物质也具有较大占比; W5S 响应值最低, 说明 VFD 组风味物质中含氮氧化合物成分较少。值得一提的是火龙蕉-冻干 W3C 响应值相比其他所有品种更高, 说明其风味物质成分中氮及芳香成分具有更高的比例。其电子鼻响应值 PCA 结果 (图 2g) 显示, PC1 和 PC2 的贡献率分别为 57.4% 和 26.5%, 总体贡献率为 83.9%, 说明 PC1 和 PC2 可非常全面地反映冻干香蕉风味的完整数据, 其中佳丽蕉-冻干、牛奶蕉-冻干、贵妃蕉-冻干、过山蕉-冻干与香蕉-冻干的风味特性更加相近, 其余不同品种可较明显区分, 火龙蕉-冻干与其他所有品种香蕉果干在 PC2 方向上都有显著区分。

HPD 组的风味特性电子鼻测定结果如图 2e 所示, W2S、W3S、W1C、W5C、W2W 和 W6S 响应值较高, 说明热泵香蕉干主要风味物质由醇类及芳香类等、烷烃和脂肪族、烯烃类、有机硫化物及有机酸物质等构成; 其中不同品种香蕉热泵处理后风味差异主要体现在 W2S、W1S 和 W6S 响应值, W5S 响应值最低, 说明热泵香蕉干风味物质中含氮氧化合物成分较少。对其电子鼻响应值进行 PCA 结果 (图 2h) 显示, PC1 和 PC2 的贡献率分别为 75.2% 和 16.5%, 总体贡献率为 91.7%, 说明 PC1 和 PC2 可解释极大部分热泵香蕉风味数据, 其中火龙蕉-热泵与其他所有品种香蕉的热泵样品有显著区分。



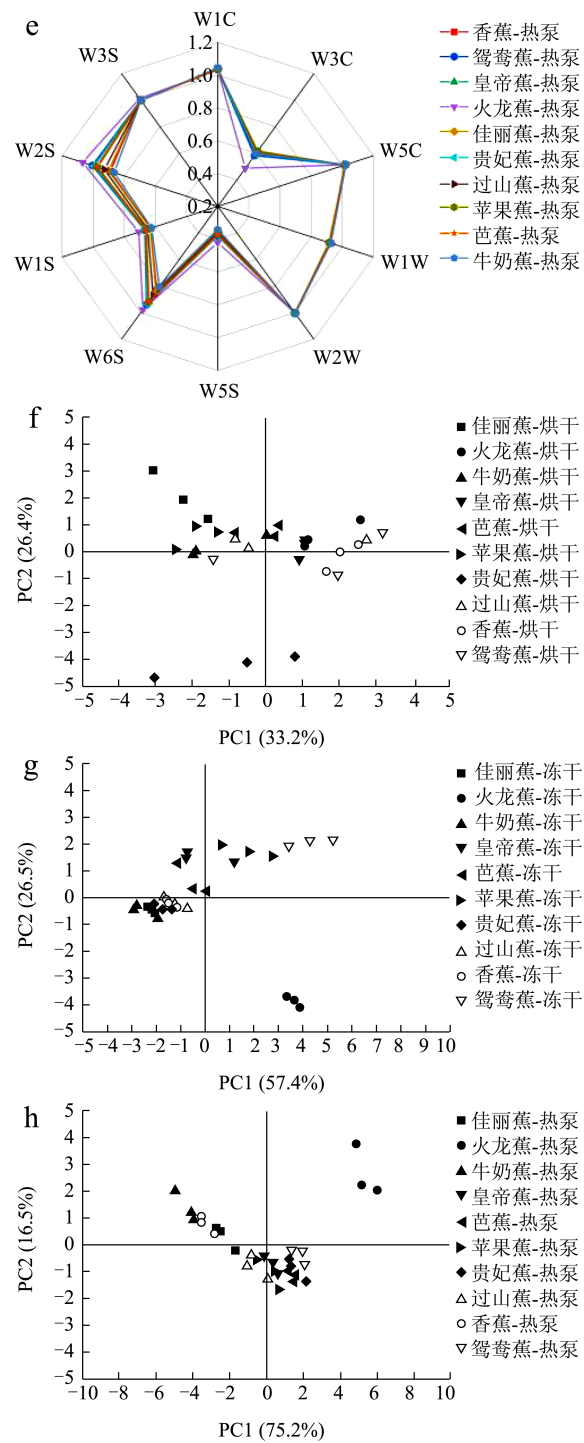


图 2 不同干燥方式以及不同品种的香蕉果干电子鼻信号及其 PCA 结果

Fig.2 Electronic nose signals and their PCA results of dried banana chips with different drying methods and different varieties

注：(a) 不同干燥方式香蕉果干电子鼻信号，(b) 不同干燥方式香蕉果干电子鼻信号 PCA 结果，(c~e) 不同品种烘干、冻干、热泵香蕉果干电子鼻信号，(f~h) 不同品种烘干、冻干、热泵香蕉果干电子鼻信号 PCA 结果。

2.2 挥发性成分定性定量分析

对 GC-MS 结果挥发性化合物进行定性定量分析，绘制相对含量热图（图 3a），对不同品种不同干燥方式的香蕉果干进行层次聚类分析（Hierarchical Clustering Analysis, HCA），结果显示 HAD 组与 VFD、HPD 两组之间由较好的区分，这与电子鼻检测结果相吻合，说明其中挥发性化合物的种类与含量对香蕉果干的风味形成与区分至关重要。

图 3b~3d 分别显示 HAD、VFD 与 HPD 三组不同干燥方式的香蕉果干的挥发性物质种类及相对含量的组成与三组之间的差别，三组香蕉果干中相对含量最高的挥发性化合物组分都为杂环化合物，分别为 36.61%、37.34% 及 36.95%，三组杂环化合物相对含量相近；醇类化合物次之，分别为 17.8%、26.4% 及 20.71%，VFD 组中醇类物质相对含量略高于其他两组；HAD 和 HPD 组挥发性化合物中酯类物质相对含量再次之，分别为 16.01% 及 14.34%，而 VFD 组酯类化合物相对含量（9.56%）低于胺类化合物（10.72%）；HAD 组酮类化合物相对含量（13.18%）高于 VFD（5.82%）和 HPD 组（9.53%）；此外酚类、醚类、醛类、酸类、及烃类在三组中相对含量组成大致相近。经过不同干燥方式处理后，香蕉果干挥发性物质中含有较多的杂环化合物、胺类和醇类，其产生原因可能是香蕉中富含还原糖和氨基酸，在干燥过程的中美拉德反应中转化为含氮化合物，脂类物质发生水解生成酸类和醇类^[21]，不同水分活度等因素影响风味化合物的形成，这也是不同干燥方式香蕉果干风味化合物的含量与种类差异来源。

由挥发性化合物种类韦恩图（图 3e）可知 HAD、VFD、HPD 三组香蕉果干 GC-MS 结果共鉴定出 239 种挥发性化合物，其中胺类 27 种，醇类 17 种，酚类 15 种，醚类 2 种，醛类 7 种，酸类 17 种，烃类 27 种，酮类 24 种，杂环化合物 45 种，酯类最多，数量为 58 种。其中 HAD 与 VFD、HPD 两组挥发性物质成分差异较大。HAD 拥有 143 种挥发性化合物，其中独特挥发性物质 47 种；HAD 拥有 143 种挥发性化合物，其中独特挥发性化合物 47 种；VFD 组挥发性物质种类 175 种，其中特有成分 22 种，而 HPD 组挥发性物质种类 156 种，其中特有成分仅 9 种。Kumar 等^[22]利用 GC-MS 技术分析 11 种香蕉挥发性物质，发现香蕉中主要香气成分为酯类、烃类、醇类、醛类、酮类、酸类、醚类，主要的挥发性物质是酯类。



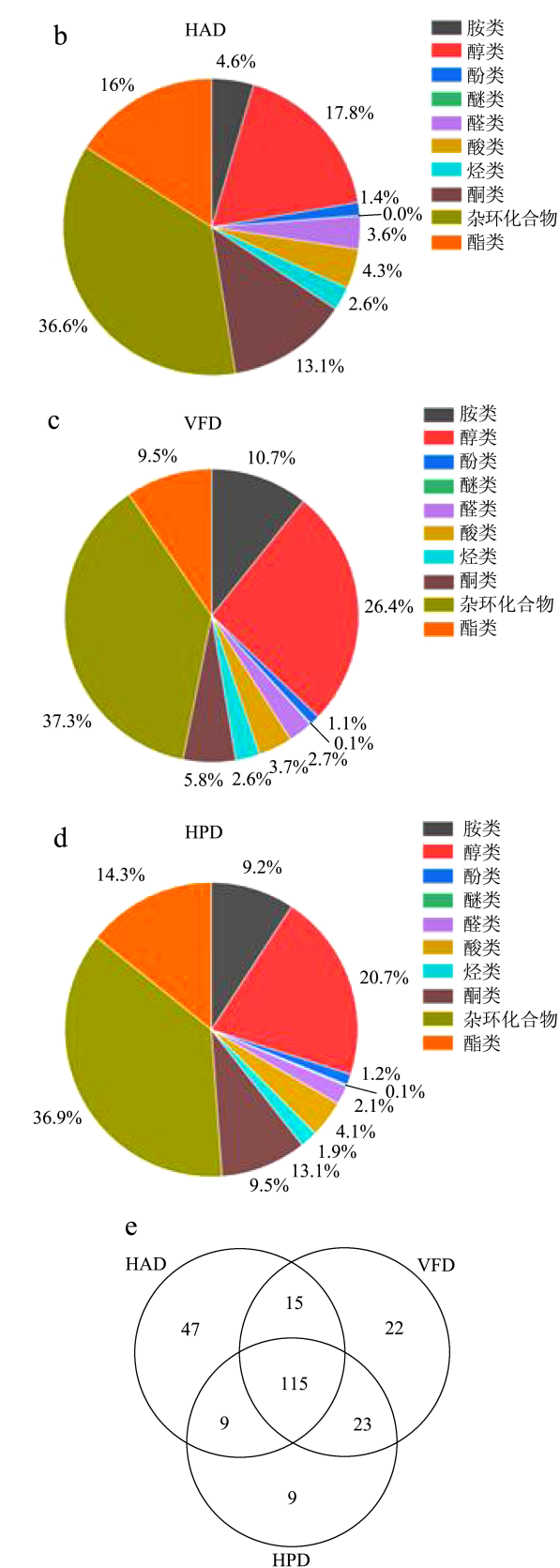


图 3 挥发性物质种类和相对含量结果

Fig.3 Results of types and relative contents of volatile substances

注：(a~d) 挥发性物质相对含量，(e) 挥发性物质种类数量韦恩图。

2.3 关键香气成分ROAV分析

通过筛选 10 个不同品种在 3 种处理下所产生的风味物质，通过查阅资料以及比对上海交通大学在线风味数据库 (<https://mffi.sjtu.edu.cn>)，比较各个品种在不同处理条件下的风味表现。HAD、VFD、HPD 三组香蕉果干 GC-MS 结果共鉴定出 34 种香气物质 (图 4a)，其中胺类 3 种，醇类 3 种，酚类 2 种，醛类 4 种，酸类 3 种，烃类 1 种，酮类 4 种，杂环化合物 3 种，酯类 11 种。由图 4c 可知，三种干燥方式的香蕉果干有 18 种共有的风味物质。进一步使用 ROAV 法，在 34 种香气物质共筛选 17 种关键贡献风味物质 (ROAV > 1)，如图 4b 所示，醇类 1 种，醛类 3 种，酸类 2 种，酮类 3 种，杂环化合物 2 种，酯类 6 种。酯类是香蕉果干中种类最多的关键贡献风味物质，这与先前的研究是一致的^[23]。HAD、VFD、HPD 三组关键风味贡献物质数量分别为 10 种、11 种和 12 种，其中 6 种共有 (图 4d)。

HAD 组关键贡献风味物质以异戊酸异戊酯、糠硫醇和 3-甲基-4-庚酮为主。异戊酸异戊酯又称苹果油，在香蕉和苹果等水果中广泛存在，具有甜的果香，同时是菠萝蜜风味最佳阶段的标志性香气物质之一^[24]；糠硫醇呈现焙烤香，是美拉德反应产物^[25]，3-甲基-4-庚酮具有类似水果的芳香气味，三者共同组成了 HAD 组的香气表现。VFD 组主要含有吡啶、2,3-戊二酮、苯乙醛，吡啶是具有辣味的杂环化合物；2,3-戊二酮是酵母代谢产物^[26]，具有黄油味奶油味；苯乙醛对果干中花香的呈现具有重要贡献，被描述为花香、蜂蜜、玫瑰、樱桃味^[27]。HPD 组中呋喃酮与 1-(3,4,5,6-四氢-2-吡啶基)乙酮呈强烈的焦糖香气、水果香味及果酱味^[28]；亚麻酸有微弱的脂肪味；棕榈酸乙酯、亚油酸乙酯呈现果香。甲基丙烯酸乙酯 (辣味)、异硫氰酸苯甲酯 (辣味)、5-甲基糠醛 (焦糖、香辛料的甜香气)、2-甲基苯甲醛 (樱桃味、花香甜味)、丙酸 2-甲基丁酯 (甜美果味、朗姆酒的味道)、棕榈酸 (脂肪气味) 同时是 HPD 和 VFD 两组中的主要风味构成。

对于 Mb 品种香蕉，其聚类结果显示，相比相同干燥方式的不同品种香蕉果干，Mb-HAD 与相同品种的不同干燥方式的样本更加接近，这可能与其独特的类别有关，Mb 是 10 个香蕉品种中唯一的大蕉类，故而与其他品种 HAD 组香蕉果干之间有差异。因此香蕉品种的分类也有可能是其果干关键贡献风味物质差异的重要因素。

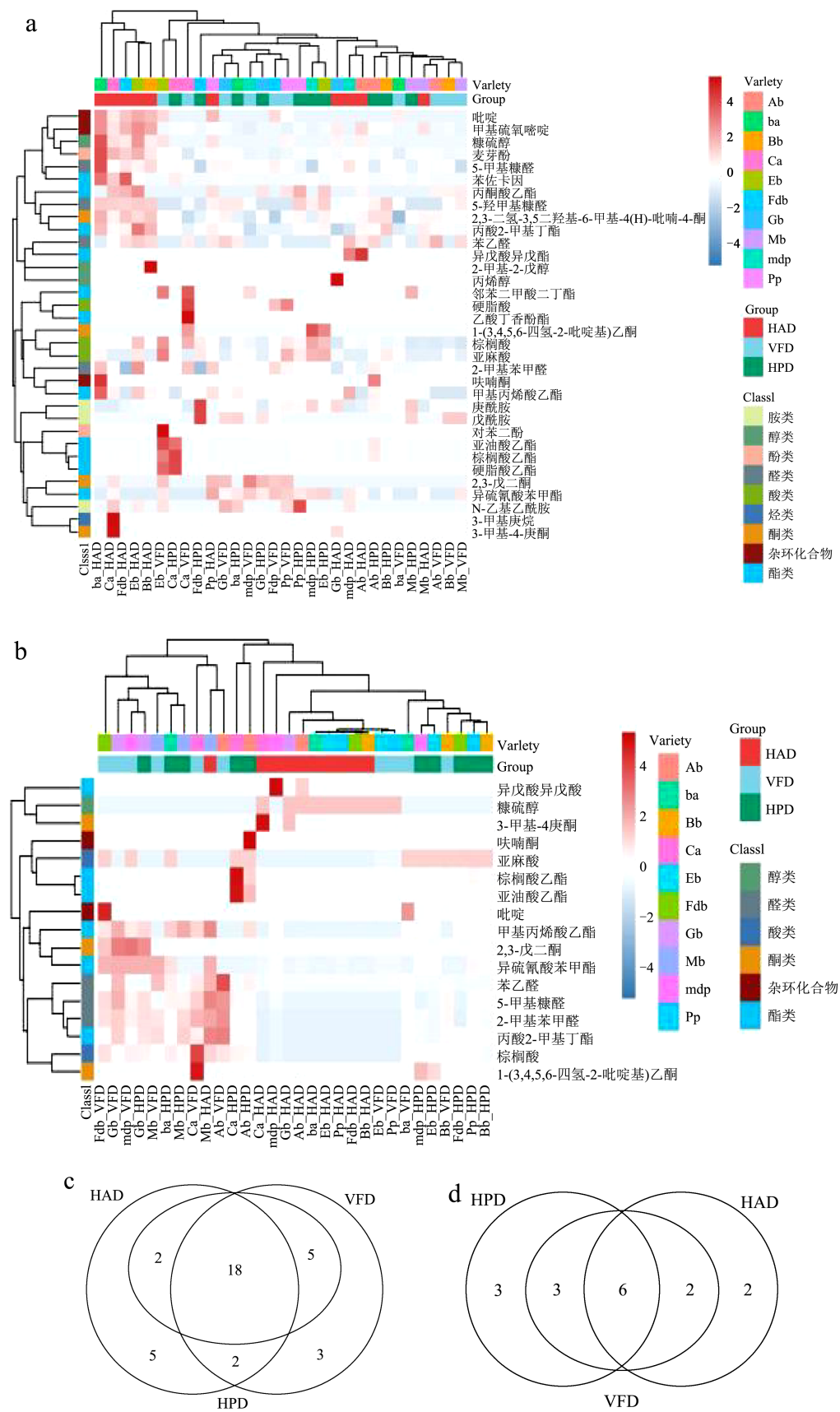


图 4 风味物质鉴定结果

Fig.4 Flavor substance identification results

注:(a) 风味物质相对含量,(b) 关键贡献风味物质 ROAV 值,(c) 风味物质种类数量韦恩图,(d) 关键贡献风味物质种类数量韦恩图。

2.4 关键贡献风味物质及电子鼻关联性分析

为探究香蕉果干关键贡献风味物质与电子鼻不同传感器的响应机制，将所有筛选出的 ROAV>1 挥发性物质与 10 个传感器的数据进行偏最小二乘分析 (Partial Least Squares, PLS)。结果如图 5 所示，各风味物质与电子鼻传感器在载荷图中的距离代表了两者的关联程度，距离越近则代表相应风味物质含量与传感器响应值的关联程度越高，坐标轴的方向异同代表关联的正负性。W5S/W1S/W6S/W3C/W2S 分布于第四象限，其中 W2S 与苯乙醛、3-甲基-4-庚酮、异戊酸异戊酯和 2,3-戊二酮靠近，这 4 个风味物质普遍呈现花香、果香和奶油香气，说明 W2S 一定程度上充当了花果香、奶油香的香气特征传感器。W3S/W5C/W1C/W1W/W2W 分布在第二象限，W3S 和 W2W 两个传感器与棕榈酸乙酯、亚麻酸乙酯、1-(3,4,5,6-四氢-2-吡啶基)乙酮距离相近，是识别香蕉果干中果香与焦糖气味的香气特征传感器，刘志禹等^[28]对紫金蝉茶鲜叶的挥发性物质与电子鼻关联性分析，同样总结出 W1W/W2W 传感器对蜜糖香气的识别作用，表明电子鼻对香气特征相应敏感性。然而其他电子鼻传感器响应值与挥发性物质含量之间并没有明显关联，说明关键贡献风味物质含量与电子鼻的单一数据不能相互涵盖，单一的数据无法完全总结不同干燥方式香蕉果干风味品质的信息。因此在后续机器模型建模，将把关键贡献风味物质含量与电子鼻信号一同作为输入特征，用以进行干燥类别的判别预测。

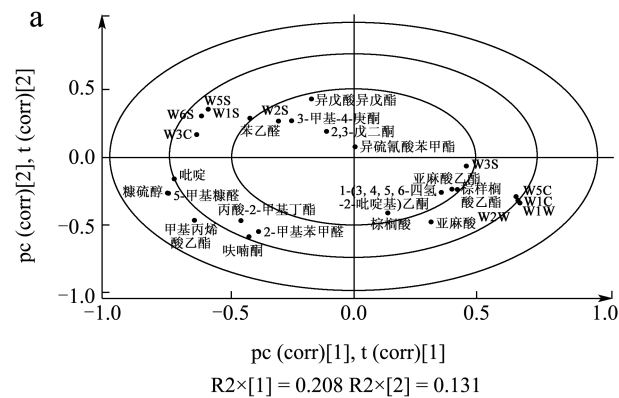


图 5 关键贡献风味物质含量与电子鼻的关联性
Fig.5 Correlation between the content of key flavor substances and electronic nose

2.5 特征提取

特征提取是指通过减少原始输入数据的维度或重新组合原始特征，从而简化数据以便于后续的处理和应用。PCA 和 LDA 都是常见的数据降维与特征提取

手段。PCA 是特征提取中常用的降维方法，它基于正交属性空间，通过线性变换选取能代表样本大部分信息的主成分^[29]。LDA 是一种监督学习方法，既是分类器又是降维技术，通过最大化数据的组间方差和最小化组内方差的方式实现多组分类，增加组间样本的可分离性，被广泛应用于特征选择和模式分类^[30]。对不同干燥方式香蕉果干的关键贡献风味物质含量与电子鼻数据进行 PCA (图 6a) 与 LDA (图 6b)，前 2 个主成分累计贡献率分别为 45.00% 与 100%。

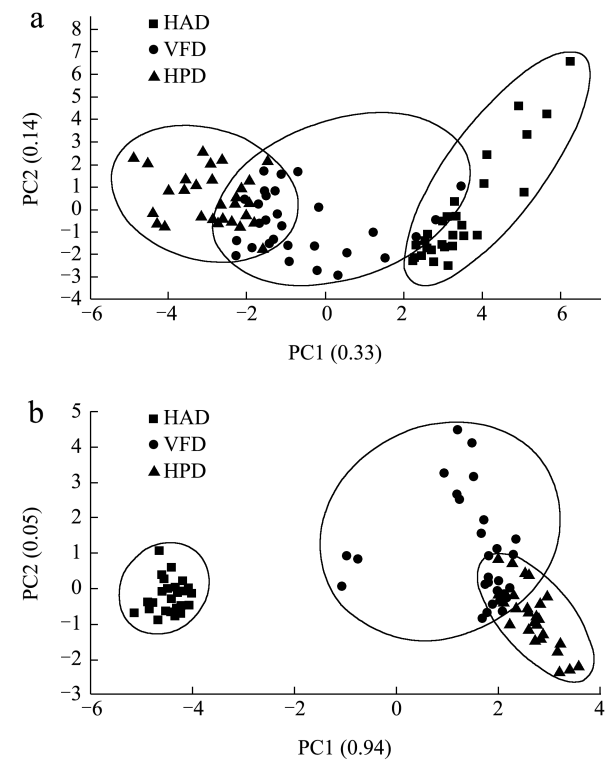


图 6 不同干燥方式的香蕉果干关键贡献风味物质含量与电子鼻信号的 PCA 与 LDA 结果
Fig.6 The PCA and LDA results of the key contribution flavor content and electronic nose signal of dried banana chips with different drying methods

由图 6a 可知，三种不同干燥方式香蕉果干样本 PCA 结果中 VFD 组与另外两组均有重叠区域，根据重叠区域大小可知 VFD 与 HPD 两组在风味品质方面区分度更低；HAD 与 HPD 两组则成功被区分，说明 HAD 与 HPD 两组的风味品质差异显著，各自具有独特风味。LDA 结果如图 6b 所示，HAD 组同时与 VFD 及 HPD 两组相互区分开，并且值得注意的是，与 PCA 结果相比，LDA 结果中组内样本的离散程度较小，VFD 与 HPD 两组重叠区域更小，说明 LDA 在区分三种不同干燥方式香蕉果干的风味品质方面更加准确。

采用 PCA 与 LDA 对不同干燥方式香蕉果干的关键贡献风味物质含量与电子鼻数据进行特征提取，分别得到 27 与 2 个主成分，其风味品质各主成分的方差贡献率如表 3 所示，其中 PCA 前 11 个主成分累计方差贡献率达到 90% 以上（90.20%），已涵盖不同干燥

方式香蕉果干风味品质的绝大部分信息；而 LDA 仅 2 个主成分累计方差贡献率已达到 100.%，完整综合了所有风味品质信息，故分别选择前 11 个（PC1-PC11）与 2 个（LD1-LD2）主成分进行分析与后续预测模型建立。

表 3 不同干燥方式香蕉果干关键贡献风味物质及电子鼻数据降维主成分

Table 3 Principal components of dimensionality reduction of key contributing flavor substances and electronic-nose data of dried banana chips by different drying methods

主成分序号	PCA		LDA	
	方差贡献率/%	累计方差贡献率/%	方差贡献率/%	累计方差贡献率/%
1	33.00	33.00	94.55	94.55
2	14.00	45.00	5.45	100.00
3	9.70	54.80	—	—
4	6.80	61.60	—	—
5	6.20	67.80	—	—
6	5.20	73.00	—	—
7	4.50	77.50	—	—
8	3.90	81.40	—	—
9	3.60	84.90	—	—
10	3.10	88.00	—	—
11	2.20	90.20	—	—
12	1.80	92.00	—	—
13	1.50	93.50	—	—
14	1.40	94.90	—	—
15	1.20	96.10	—	—
16	0.93	96.98	—	—
17	0.71	97.69	—	—
18	0.50	98.20	—	—
19	0.48	98.68	—	—
20	0.40	99.10	—	—
21	0.31	99.39	—	—
22	0.27	99.65	—	—
23	0.15	99.81	—	—
24	0.10	99.91	—	—
25	0.09	99.99	—	—
26	0.00	99.99	—	—
27	0.00	100.00	—	—

表 4 不同降维处理构建BPNN模型性能验证

Table 4 Performance verification of BPNN model constructed by different dimensionality reduction processing

降维	分类模型	神经元数量	训练集				测试集			
			R^2	RMSE	MAE	MBE	R^2	RMSE	MAE	MBE
无	BPNN	10	0.796 2	0.375 0	0.291 0	0.136 3	0.703 6	0.407 4	0.368 0	0.194 7
PCA	BPNN	10	0.822 0	0.348 1	0.138 8	0.022 8	0.766 9	0.381 2	0.267 0	0.135 8
LDA	BPNN	10	0.913 8	0.248 6	0.119 9	0.009 3	0.844 4	0.296 6	0.179 2	0.024 0

2.6 香蕉果干干燥方式的判别模型建立与验证

分别采取 PCA 与 LDA 将不同干燥方式香蕉果干的香气品质原始数据降至 11 维与 2 维。使用原始数据集以及 PCA 与 LDA 进行降维与特征提取后的数据集, 分别构建 BPNN 机器学习模型, 输入层数量分别 27、11、2, 隐含层神经元数量均为 10, 输出层数量均为 1, 进行训练与测试, 模型参数设置及性能如表 4 所示。由三个模型性能参数可知, 对比单个 BPNN 模型而言, 经过降维处理的数据集一定程度上去除了不利于分类预测的冗余数据, 降低了样本中的噪声, 减轻模型迭代工作量的同时起到提高精度的作用, 故而在 BPNN 模型中预测效果更好。三者性能与精度由高到低分别

为: LDA-BPNN > PCA-BPNN > BPNN。LDA 属于监督式学习, 相比 PCA 而言, 在降维过程中会将样本标签纳入考虑, 在特征提取阶段目的性更加明确, 更加注重样本的组间差异。

在训练集与测试集中, 各个模型预测值与真实值的对比如图 7 所示, 由图可知预测值与真实值的曲线差异不大, RMSE 均小于 0.5, 表明预测结果与实际观测值非常接近, 预测模型的准确性较高, 模型精确度与泛化能力强^[31]。由曲线重合情况可以发现, 预测值与真实值变化趋势符合, 其中降维后的模型 PCA-BPNN 与 LDA-BPNN 对 HAD 组的预测精确度相较于其他两组更优, 这与 PCA 与 LDA 的数据降维情况相符合, HAD 组与 VFD、HPD 两组相比在模型中具备更高的识别精度。

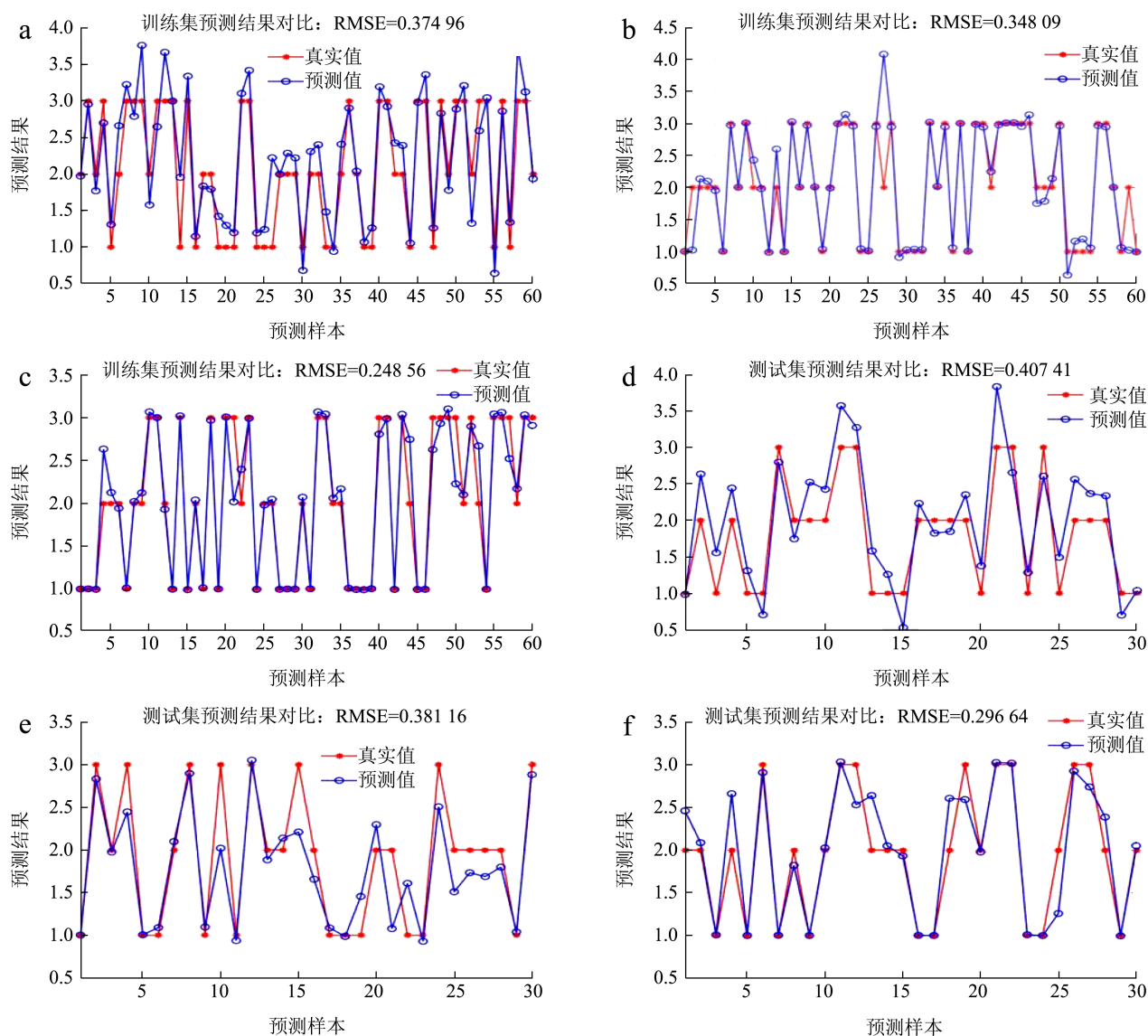


图 7 各模型预测效果

Fig.7 Prediction results of each model

注:(a) BPNN 训练集预测结果;(b) PCA-BPNN 训练集预测结果;(c) LDA-BPNN 训练集预测结果;(d) BPNN 测试集预测结果;(e) PCA-BPNN 测试集预测结果;(f) LDA-BPNN 测试集预测结果。真实值 1 为 HAD, 2 为 VFD, 3 为 HPD。

3 结论

本研究采用电子鼻、GC-MS 分析不同干燥方式香蕉果干的风味品质差异,揭示 HAD、VFD 及 HPD 三种干燥方式对香蕉果干风味特性的差异化影响,并基于风味品质指标建立了干燥方式判别模型。电子鼻响应值雷达图显示 HAD、VFD 和 HPD 组轮廓大致相同,但其中 HAD 组 W3C 传感器响应值区别于 VFD 和 HPD 两组,表明其氨及芳香成分含量更高;ROAV 分析不同干燥方式香蕉果干关键贡献风味物质共 17 种,其中酯类化合物 11 种,是香蕉果干的主要风味物质。聚类热图显示 HAD 组与其他两组区别较为显著,VFD 和 HPD 两组有混淆;不同组别在物质种类含量上有明显的差异,并且具有不同香气特征描述。HAD 组关键贡献风味物质以异戊酸异戊酯和糠硫醇为主,呈现浓郁的果香与焙烤香;VFD 组以苯乙醛和 2,3-戊二酮为主,体现花香与奶油香;HPD 组则依赖呋喃酮与棕榈酸乙酯主导呈现焦糖与果酱香气。

使用 PCA 和 LDA 两种方式对电子鼻响应值和关键贡献风味物质含量进行数据降维与特征提取,并分别作数据集为构建 BPNN 模型输入层,建立 27-10-1 结构 BPNN 模型、11-10-1 结构 PCA-BPNN 模型和 2-10-1 结构 LDA-BPNN 模型。LDA 对干燥方式香蕉果干风味品质指标降维提取效果优于 PCA, LDA 结果将 HAD 组与其余两组完全区分,并且前两个主成分方差贡献率已经达到 100.00%;不同特征降维方式的机器学习模型,根据性能参数判断准确率与精确度由高到低排序为 LDA-BPNN ($R^2=0.844\ 4$)>PCA-BPNN ($R^2=0.766\ 9$)>BPNN ($R^2=0.703\ 6$),这些模型可以较好地香蕉果干干燥方式进行判别预测。

研究结果表明,基于 GC-MS 与电子鼻技术的风味特性分析,结合监督式降维与机器学习,可有效提取与干燥工艺强关联的特征信号,提升分类模型的泛化能力。基于香蕉果干风味品质特性的判别预测模型,在香蕉果干的干燥方式识别上具有较高的准确性,为香蕉果干的干燥工艺选择以及品质提升提供了数据上的支撑,也为确保果蔬产品的食品真实性起到参考作用。

参考文献

- [1] 孙健,何雪梅,唐雅园,等.香蕉加工研究进展[J].热带作物学报,2020,41(10):2022-2033.
- [2] DEBOCH M W, MEZGEBE A G. Development of banana chips: Analysis of nutritional and sensory characteristics of banana chips as influenced by frying conditions [J]. International Journal of Agricultural Research, Innovation and Technology, 2024, 13: 1-5.
- [3] 王俊涛,滕建文,韦保耀,等.渗透-微波真空干燥对软香蕉干质构

调控及贮藏稳定性的影响[J].中国调味品,2020,45(7):17-22.

- [4] ANURAG A, CHAUHAN N, SINGH A, et al. Drying characteristics of dried banana chips (*Musa paradisiaca* L.) under different types of dryers and pretreatments [J]. Journal of Pharmacognosy and Phytochemistry, 2016, 5: 384-390.
- [5] 张帅,吴水金,林宝妹,等.福建6个香牙蕉品种(品系)后熟过程中挥发性风味成分的变化[J].中国果树,2023,11:61-69.
- [6] JORDÁN M J, TANDON K S, SHAW P E, et al. Aromatic profile of aqueous banana essence and banana fruit by Gas Chromatography-Mass Spectrometry (GC-MS) and Gas Chromatography-Olfactometry (GC-O) [J]. Journal of Agricultural and Food Chemistry, 2001, 49: 4813-4817.
- [7] VACARO DE SOUZA A, MARQUES DE MELLO J, FERREIRA DA SILVA FÁVARO V, et al. Software for classification of banana ripening stage using machine learning [J]. Revista Brasileira de Fruticultura, 2024, 46: e836.
- [8] GIOVANNA N, MIGUEL R, AMEEN ABU H, et al. Evaluating pointwise reliability of machine learning prediction [J]. Journal of Biomedical Informatics, 2022, 127: 103996.
- [9] MUTALIB S, HASBULLAH N H, ABDUL-RAHMAN S, et al. Herbal plant analysis based on leaf features using K-Means clustering [J]. IOP Conference Series: Earth and Environmental Science, 2022, 1019: 12026.
- [10] ROPELEWSKA E, ETIN N, GÜNAYDN S. Non-destructive discrimination of vacuum-dried banana using image processing operation and machine learning approach [J]. Food and Bioprocess Processing, 2023, 141: 36-48.
- [11] ZHANG J, CHEN C, WU C, et al. Storage quality prediction of winter jujube based on particle swarm optimization-backpropagation-artificial neural network (PSO-BP-ANN) [J]. Scientia Horticulturae, 2024, 331: 112789.
- [12] 张展伟.香蕉栽培品种分类[J].果农之友,2010,4:9.
- [13] 陈铭中,钟旭美,孔令开,等.生鲜香蕉和真空冷冻干燥香蕉粉的品质与挥发性组分的研究[J].食品与发酵工业,2022,48(20):161-168.
- [14] WU L, CHEN S, LI Y, et al. Effect of heat pump drying temperature on moisture migration characteristics and quality of instant *Tremella fuciformis* [J]. Current Research in Food Science, 2024, 9: 100825.
- [15] CHEN G, ZHU G, XIE H, et al. Characterization of the key differential aroma compounds in five dark teas from different geographical regions integrating GC-MS, ROAV and chemometrics approaches [J]. Food Research International (Ottawa, Ont.), 2024, 194: 114928.
- [16] 李智宇,王凯,冒德寿,等.化合物嗅觉阈值汇编:原书第二版[M].北京:科学出版社,2018.
- [17] DRGAN V, VENKO K, SLUGA J, et al. Merging counter-propagation and back-propagation algorithms: overcoming the limitations of counter-propagation neural network models [J]. International Journal of Molecular Sciences, 2024, 25(8): 4156.
- [18] HUANG Y, TIAN J, YANG H, et al. Detection of wheat saccharification power and protein content using stacked models integrated with hyperspectral imaging [J]. Journal of the Science of Food and Agriculture, 2024, 104(7): 4145-4156.

- [19] 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.
- [20] TALLAPALLY M, SADIQ A S, MEHTAB V, et al. GC-MS based targeted metabolomics approach for studying the variations of phenolic metabolites in artificially ripened banana fruits [J]. LWT, 2020, 130: 109622.
- [21] LI L, BELLOCH C, FLORES M. The maillard reaction as source of meat flavor compounds in dry cured meat model systems under mild temperature conditions [J]. Molecules, 2021, 26: 223.
- [22] KUMAR P S, SHUPRAJHAA T, SUBRAMANIYAN P, et al. Comparing physico-chemical characteristics, antioxidant properties, glycemic response, and volatile profiles of eleven banana varieties [J]. International Journal of Food Science & Technology, 2023, 58: 2893-2908.
- [23] 贺书珍,张彦军,徐飞,等.菠萝蜜果实成熟过程中香气成分组成及变化规律研究[J].热带作物学报,2015,36(9):1614-1619.
- [24] 王蓓,韩兆盛,杨智杰,等.6类常见食品中含硫化物风味特征及形成机理研究进展[J].食品科学技术学报,2022,40(6):13-25.
- [25] 管少华,李玉环.啤酒风味物质的标准含量及其来源——双乙酸和2,3-戊二酮[J].酿酒,1993,6:45-48.
- [26] 张宇航,谷梦雅,徐梦婷,等.基于顶空固相微萃取-气相色谱-质谱对笔尖单瓣茉莉花不同开放阶段香气成分差异分析[J].食品科学,2024,45(19):94-103.
- [27] 陈庆华,耿哲.新的手性源5-(1-Meng氧基)-3,4-二氯-2(5H)-呋喃酮的合成及结构[J].化学学报,1993,51(6):624-662.
- [28] 刘志禹,杨树恩,厉彦超,等.基于电子鼻和HS-SPME-GC-MS的不同叮咬程度的紫金蝉茶鲜叶品质分析及判别[J].安徽农业大学学报,2024,51(6):1072-1079.
- [29] 唐维川,孔祥凯,王婷,等.基于主成分分析法评价酱香型白酒的不同轮次基酒[J].现代食品科技,2021,37(7):269-277.
- [30] ESTEKI M, MEMARBASHI N, SIMAL-GÁNDARA J. Classification and authentication of tea according to their geographical origin based on FT-IR fingerprinting using pattern recognition methods [J]. Journal of Food Composition and Analysis, 2022, 106: 104321.
- [31] KAR K, KORNBLITH S, FEDORENKO E. Interpretability of artificial neural network models in artificial intelligence versus neuroscience [J]. Nature Machine Intelligence, 2022, 4: 1065-1067.