

基于神经网络的菠萝香气成分色谱保留值研究

Quantitative structure-retention relationship studies of aroma components from pineapple based on neural network

秦正龙¹冯长君²QIN Zheng-long¹ FENG Chang-jun²

(1. 江苏师范大学化学与材料科学学院, 江苏 徐州 221116; 2. 徐州工程学院化学化工学院, 江苏 徐州 221008)

(1. College of Chemistry and Materials Science, Jiangsu Normal University, Xuzhou, Jiangsu 221116, China;

2. College of Chemistry & Chemical Engineering, Xuzhou Institute of Technology, Xuzhou, Jiangsu 221008, China)

摘要:为了研究菠萝香气成分色谱保留时间与其结构之间的定量构效关系,在分子拓扑理论基础上,计算了 44 种菠萝香气成分的分子价连接指数(${}^mX_v^v$)、分子形状指数(nK)和电拓扑状态指数(E_1)。优化筛选了分子价连接性指数 ${}^2X_v^v$ 和 ${}^4X_v^v$ 、分子形状指数 1K 和 2K 、电拓扑状态指数的 E_8 和 E_{13} 共 6 个参数,将其作为 BP 神经网络的输入层变量,香气成分的色谱保留时间作为输出层变量,采用 6:3:1 的网络结构,获得了令人满意的 QSRR 神经网络预测模型,模型总相关系数为 0.995,计算得到的色谱保留时间的预测值与试验值吻合较好。结果表明,菠萝香气成分色谱保留时间与 6 种结构参数之间呈现良好的非线性关系,模型能较好地揭示香气成分色谱保留时间的递变规律。

关键词:菠萝;香气成分;分子拓扑参数;定量结构—色谱保留关系;神经网络

Abstract: In order to study chromatographic retention time (RT) of aroma components from pineapple, molecular valence connectivity index (${}^mX_v^v$), molecular shape index (nK) and electrotopological state index (E_1) of 44 aroma components were calculated. ${}^2X_v^v$ and ${}^4X_v^v$ of the molecular valence connectivity indices, and 1K and 2K of the molecular shape indices, E_8 and E_{13} of the electrotopological state indices were optimized. The six parameters were used as input variables of neural network and the chromatographic retention time was used as output variable, and the 6:3:1 network structure was adopted and BP neural network method was used to establish a satisfying QSRR predic-

tion model. The total correlation coefficient was 0.995. The predicted values by the model were in agreement those of the experiment values. A good nonlinear relationship between the chromatographic retention time and the six molecular structure parameters was found. The model could better elucidate the changing rule of chromatography retention time of the aroma components.

Keywords: pineapple; aroma component; molecular topological parameters; quantitative structure-retention relationship; neural network

菠萝富含维生素、氨基酸、蛋白质、脂肪、胡萝卜素、膳食纤维及各种有机酸^[1-2],营养丰富,汁多肉嫩,味香浓郁,酸甜可口,还具有利尿、解暑、降压、预防便秘和抗癌等功效^[3]。由于果品的品质一定程度上决定于果品的香气,因此,近年来对菠萝香味成分的研究引起了人们广泛关注,王花俊等^[4]对菠萝挥发性香味化合物进行了分离鉴定,确认了 44 种成分;魏长宾等^[5]采用聚类分析及主成分分析方法对菠萝的香气成分进行了多样性研究;刘胜辉等^[6]应用顶空固相微萃取和气相色谱—质谱技术,鉴定分析了 6 个菠萝新品种的香气成分;张钰乾^[7]研究了不同品种、不同产地菠萝的特征香气成分。目前,对菠萝香气成分的研究主要集中在分离、鉴定和检测方面,而对其香气成分性质的研究则较少。神经网络是模拟人脑网络结构的一种信息功能处理系统,该方法自适应、自学习能力强,可以构建高质的非线性模型,在药物、环境、食品及智能控制等领域应用广泛^[8-12],但利用神经网络方法研究菠萝挥发性香味组分未见报道。为此拟采用神经网络方法中的误差逆传播多层前馈网络算法,建立文献^[4]中 44 种香气成分色谱保留时间与其分子结构之间的神经网络模型,以期为菠萝的风味特点、质量检验等提供依据。

基金项目:国家自然科学基金资助项目(编号:21075138);江苏省高校品牌专业建设工程资助项目(编号:PPZY201992)

作者简介:秦正龙(1963—),男,江苏师范大学教授。

E-mail: hxxqzl@jsnu.edu.cn

收稿日期:2020-07-30

1 材料与方法

1.1 材料

菠萝挥发性香味化合物的保留时间(RT)取自文献[4]。

1.2 方法

采用 Chemoffice 2005 绘图软件,画出文献[4]中 44 种挥发性香味化合物分子的结构图,然后在 Matlab 中,使用张婷等[13]报道的方法编写计算程序,运算求得分子价连接性指数(${}^mX_c^V$)[14]、分子形状指数(nK)[14]、电拓扑状态指数(E_i)[15],用 Minitab 对所有指数进行最佳变量子集回归,分析筛选与香气成分色谱保留时间相关性最优的变量组合。

2 结果与分析

2.1 多元回归模型的确定

由表 1 可知,随着模型中变量数目的增多, R 、 R^2 和 R_{Adj}^2 持续增大, S 逐渐减小, Q^2 在六元模型处出现最大值。评判一个模型的优劣,常常采用逐一剔除法的 Q^2 值, Q^2 值越大,说明模型的质量越好。所以选用 2K 、 ${}^4X_c^V$ 、 E_8 、 1K 、 E_{13} 、 ${}^2X_p^V$ 为最佳变量组合。

将菠萝中 44 种挥发性香味化合物的色谱保留时间(T_R)与上述优化筛选的 6 个最佳变量组合 2K 、 ${}^4X_c^V$ 、 E_8 、 1K 、 E_{13} 、 ${}^2X_p^V$ 进行多元线性回归,得到 QSRR 模型为:

$$T_R = -4.902 + 28.573^2 X_p^V - 26.415^4 X_c^V - 7.027^1 K + 2.451^2 K - 10.858 E_8 + 1.061 E_{13} \quad (1)$$

$$K = 44, R = 0.947, R^2 = 0.897, R_{\text{Adj}}^2 = 0.879, Q^2 = 0.837, S = 5.614, F = 53.655.$$

用模型(1)给出的计算值与试验值的平均误差为 3.92 min (计算值 1,见表 2)。

2.2 模型(1)的质量检验

为了检验模型(1)的稳定性及预测能力,采用 Jackknifed 检验法进行检验,即每次从 44 个菠萝香气成分中剔除 1 个,用余下的 43 个组分建模,依次建立 44 个方程,

得到 44 个相关系数,其平均值为 0.947,与模型(1)的 R 完全吻合。根据一般的统计标准,所建模型的 $R^2 > 0.8$, $Q^2 > 0.5$,说明所建模型具有良好的预测能力; R_{Adj}^2 与 Q^2 之间的差值 < 0.3 ,即认为没有过拟合现象。模型(1)的 R^2 和 Q^2 分别为 0.897,0.837, R_{Adj}^2 与 Q^2 的差为 0.042, < 0.300 ,说明模型(1)既有良好的稳定性,又有较强的预测能力。

为了判断模型是否存在离域点,以 44 个菠萝挥发性香味化合物的 Jackknifed 相关系数 R 作雷达图(图 1),以 0.93 为圆心,0.01 为间距,44 个 Jackknife 相关系数围绕原始模型(1)的相关系数($R = 0.947$)上下波动,Jackknife 的相关系数为 0.941~0.961,说明模型(1)没有异常的离域点。

2.3 建立神经网络模型

为了使模型的预测精准度进一步提高,使用误差反向传播方法的 3 层网络结构,以前述最好的多元回归模型中的 6 种分子结构参数作为神经网络的输入层单元,挥发性香味成分的色谱保留时间作为输出层单元,最佳隐蔽层的单元数按照许禄等[16]的建议规则求得,其值为 3。因此,网络结构为 6:3:1。为了避免发生过拟合,将菠萝中 44 种挥发性香味物质划分为 3 个集,1 组 5 个数据,其中的第 1、3、4 个数据即为训练集,其相关系数为 0.994,每组的第 2、5 个数据则分别为测试集和验证集,其相关系数分别是 0.997,0.995,总相关系数为 0.995。由神经网络法得到的计算值见表 2(计算值 2),多元回归法与神经网络法试验值和计算值的关系见图 2。综上,神经网络法更优。

2.4 结果分析

色谱保留时间的长短,决定于化合物分子和固定相之间的相互作用,相互之间的作用力越强,则色谱保留时间越长。相互之间的作用力主要有取向力、诱导力、色散力及氢键。分子价连接性指数将化合物结构图中各种子结构碎片中非氢原子点价进行加权计算而得,其子图可分为链、簇(星)、簇—链和环 4 类,产生对应的各类连接

表 1 T_R 与 ${}^mX_c^V$ 、 nK 、 E_i 的回归结果[†]
Table 1 Regression results of ${}^mX_c^V$, nK , E_i and T_R

序号	R	R^2	R_{Adj}^2	Q^2	S	F	参数
1	0.696	0.485	0.473	0.401	11.778	39.523	${}^2X_p^V$
2	0.800	0.640	0.623	0.567	9.961	36.499	E_{13} ${}^2X_p^V$
3	0.864	0.747	0.728	0.675	8.457	39.428	1K E_{13} ${}^2X_p^V$
4	0.922	0.849	0.834	0.795	6.588	55.398	E_8 1K E_{13} ${}^2X_p^V$
5	0.935	0.875	0.857	0.807	6.103	53.136	${}^4X_c^V$ E_8 1K E_{13} ${}^2X_p^V$
6	0.947	0.897	0.879	0.837	5.614	53.655	2K ${}^4X_c^V$ E_8 1K E_{13} ${}^2X_p^V$
7	0.952	0.905	0.887	0.833	5.452	49.202	${}^4X_p^V$ 2K ${}^4X_c^V$ E_8 1K E_{13} ${}^2X_p^V$

[†] R 为相关系数, R^2 为判定系数, R_{Adj}^2 为调整的判定系数, Q^2 为交叉验证相关系数, S 为估计标准误差, F 是 Fischer 检验值。

表 2 菠萝香气成分的结构参数及色谱保留时间

Table 2 Structural parameter and chromatographic retention time of aroma components from pineapple

化合物	$^2X_p^Y$	$^4X_c^Y$	$^4X_e^Y$	E_8	E_{13}	1K	2K	色谱保留时间/min		
								试验值	计算值 1	计算值 2
1-丁醇	1.077	0.158	0.000	0.000	8.066	4.960	3.960	6.27	9.27	6.52
己酸甲酯	2.033	0.621	0.299	-0.094	0.000	6.904	5.918	7.49	12.29	7.62
己酸乙酯	2.262	0.752	0.350	-0.059	0.000	7.892	6.904	8.78	12.58	14.00
(Z)-[(Z)-3,7-二甲基-1,3,6-辛三烯]	2.669	0.564	0.259	2.616	0.000	4.949	5.041	9.31	13.68	13.16
3-羟基-2-丁酮	1.287	0.000	0.000	-0.185	8.280	3.963	2.052	10.24	19.84	10.96
辛酸甲酯	2.740	0.975	0.564	-0.082	0.000	8.883	7.892	13.49	16.29	12.14
辛酸乙酯	2.969	1.106	0.615	-0.047	0.000	9.875	8.883	14.87	16.56	16.63
糠醛	1.133	0.358	0.084	0.375	0.000	2.026	1.818	15.82	11.40	13.58
α -萜荜油烯	2.146	0.723	0.412	1.121	0.000	2.696	2.492	16.46	20.52	17.83
丙二酸二甲酯	1.329	0.262	0.118	-1.163	0.000	5.372	4.458	17.27	15.75	17.87
3-甲硫基丙酸甲酯	1.780	0.510	0.102	0.711	0.000	5.192	4.215	17.59	9.38	13.23
3-氧代-2-甲基-丁酸甲酯	1.856	0.343	0.083	-0.635	0.000	5.408	3.609	17.76	23.67	19.28
1-甲氧基-4-(1-丙烯基)-苯	2.273	0.907	0.536	0.000	0.000	4.074	3.938	18.24	26.90	18.33
3-(甲硫基)丙酸乙酯	2.533	0.789	0.411	-0.091	0.000	7.249	6.263	18.86	22.01	16.84
2,5-二甲基-4-甲氧基-3(2H)呋喃酮	2.214	0.975	0.393	0.868	0.000	5.181	2.617	19.57	8.56	19.55
癸酸甲酯	3.448	1.329	0.814	-0.075	0.000	10.868	9.875	19.69	20.75	19.21
壬酸甲酯	3.323	1.283	0.740	-0.043	0.000	10.868	9.875	20.93	18.78	18.45
3-羟基-己酸乙酯	2.223	0.711	0.282	-0.346	9.050	7.853	5.528	21.14	22.88	21.02
γ -戊内酯	2.119	0.865	0.249	-0.444	0.000	4.438	2.473	22.33	28.76	22.33
γ -己内酯	2.059	0.870	0.368	-0.031	0.000	4.648	2.375	22.63	17.70	19.96
5-乙酰基-己酸乙酯	3.117	1.109	0.475	-0.476	0.000	10.110	7.936	24.65	25.18	24.91
己酸	1.851	0.526	0.232	-0.682	8.140	5.918	4.937	26.60	28.40	25.67
γ -十二酸内酯	4.207	1.938	1.145	0.001	0.000	10.313	7.131	28.34	30.04	28.45
辛酸	2.558	0.880	0.497	-0.670	8.270	7.892	6.904	31.96	32.56	32.57
(3-甲基-2-丙烯氧)-4-(1-丙烯基)苯	3.662	1.172	0.703	1.278	0.000	6.288	6.201	36.39	38.29	36.22
棕榈酸乙酯	5.798	2.520	1.615	-0.032	0.000	17.841	16.843	36.47	34.34	37.62
(2-甲基-2-乙基-3-羟基-)己基丙酸酯	4.309	1.388	0.718	-0.183	9.769	12.818	7.967	36.95	41.04	36.89
7-己基-二十烷	8.889	4.250	2.936	0.000	0.000	26.000	23.040	37.53	45.26	37.65
4-(2-丙烯基)-苯酚	2.159	0.799	0.495	0.000	8.899	3.352	3.181	38.30	37.39	39.99
十四醇	4.613	1.953	1.256	0.000	8.610	14.960	13.960	39.15	31.93	41.17
苯甲酸	1.671	0.581	0.330	-0.879	8.385	2.729	2.527	40.13	39.58	40.39
硬脂酸乙酯	6.505	2.874	1.865	-0.030	0.000	19.836	18.838	40.87	38.78	40.33
4-(2-丙烯基)-苯酚	2.159	0.799	0.495	0.000	8.899	3.352	3.181	42.10	37.39	39.99
1-二十醇	6.734	3.014	2.006	0.000	8.692	20.960	19.960	43.35	45.34	42.49
十六醇	5.320	2.306	1.506	0.000	8.643	16.960	15.960	44.01	36.41	41.93
十四酸	4.679	1.940	1.247	-0.656	8.457	13.853	12.858	45.53	46.09	45.04
3-氧代-4-甲基-戊酸乙酯	2.603	0.558	0.268	-0.491	0.000	7.279	5.294	45.82	29.54	44.77
4-乙基-5-甲基噻唑	2.768	1.339	0.507	0.000	0.000	3.723	2.355	46.46	40.40	48.23
十五酸	5.033	2.117	1.372	-0.655	8.475	14.850	13.853	48.05	48.34	47.99
十六酸	5.386	2.294	1.497	-0.654	8.491	15.846	14.850	51.29	50.58	51.67
硬脂酸	6.094	2.648	1.747	-0.653	8.517	17.841	16.843	60.98	55.08	61.04
6-十八烯酸	5.728	2.347	1.500	-0.677	8.499	15.910	16.584	62.74	64.33	63.65
油酸	5.728	2.347	1.493	-0.664	8.508	15.910	16.584	63.08	64.38	62.67
9-十八烯酸	5.728	2.347	1.493	-0.664	8.508	15.910	16.584	63.12	64.38	62.67

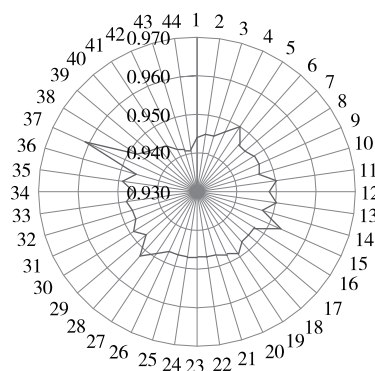
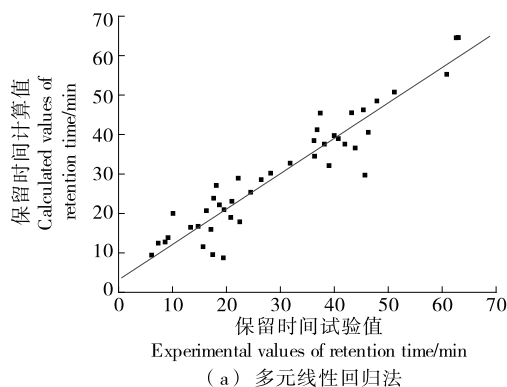
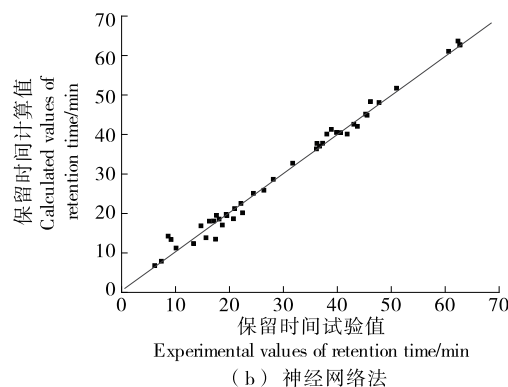


图1 相关系数的雷达图

Figure 1 Radar chart of correlation coefficient



(a) 多元线性回归法



(b) 神经网络法

图2 两种方法试验值与计算值的关系

Figure 2 The relationship between experimental and calculated values of RT of the two methods

分子中所含原子种类有关,而且与分子大小、形状等密切相关。因此, $^2X_p^V$ 、 $^4X_c^V$ 、 1K 、 2K 与分子间力,也就是与色谱保留时间显著相关。电拓扑状态指数反映分子中成键原子的种类、价态信息、固有特征、电子状态、拓扑环境及电性作用等。进入模型(1)中的 E_8 对应 $>C=$ 结构基团,分子中不含 $>C=$,其值为零。 $>C=$ 可能是弱极性基团(如 $>C=C$),也可能是强极性基团(如 $>C=O$)。 E_{13} 对应 $-OH$ 结构基团,是强极性基团。因此,这些基团之间存在取向力、诱导力、色散力以及氢键,即 E_8 和 E_{13} 的数值大小揭示了这4种力的强弱,故与色谱保留时间高度相关。模型(1)的 $R^2=0.897$,优于目前建模的相关性要求: $R^2>0.80$ 。即模型(1)中 $^2X_p^V$ 、 $^4X_c^V$ 、 1K 、 2K 、 E_8 、 E_{13} 共同揭示了影响色谱保留时间的本质因素。而神经网络模型的 R^2 由原来的0.897提高到0.995,说明色谱保留时间与6个拓扑指数之间并非是简单的线性关系,而是复杂的非线性关系。因此,预测能力有大幅度提升。

3 结论

分子拓扑指数 $^2X_p^V$ 、 $^4X_c^V$ 、 1K 、 2K 、 E_8 、 E_{13} 共同揭示了影响44种菠萝香气成分的色谱保留时间的结构因素:成键原子的种类、价态、拓扑环境、电性以及分子大小与形状等;这些结构因素与固定相产生取向力、诱导力、色散力以及氢键,从而决定色谱保留时间的长短。据此所建立的线

性指数。进入模型(1)中的 $^2X_p^V$ 是针对3个非氢原子组成的链, $^4X_c^V$ 是针对5个非氢原子组成的簇。由表2可知,其揭示了分子所含非氢原子类型、分子大小(如非氢原子数、分子表面积等)、形状(如直链、分枝等)以及折叠性(或柔韧性)等^[17]。 1K 是一级分子形状指数,不仅反映显示分子的大小,而且呈现分子结构的复杂程度;如表2中 γ -己内酯与己酸的碳氧原子数相同,前者结构复杂为环状,后者结构简单为直链,其数值依次为4.648,5.918。 γ -己内酯分子为环状,分子体积小,原子的空间密度大;而己酸分子为直链,体积大,相应空间密度小。对应 2K (为二级分子形状指数)依次为2.375,4.937,说明 2K 反映分子中原子的空间密度,且为负相关。分子间力不仅与

性QSRR模型,经判定系数、调整的判定系数、交叉验证相关系数等统计指标诊断及相关系数雷达图检验,具有良好的稳定性和较强的预测能力。神经网络模型与多元线性回归模型相比,较大幅度提升了判定系数,其给出的计算值与相应试验值更为吻合,呈现了良好的非线性关系。当然,分子价连接性指数($^mX_p^V$)、分子形状指数(nK)、电拓扑状态指数(E_i)3类拓扑参数还不能完全揭示影响44种菠萝香气成分色谱保留时间的全部结构因素,可以通过引入空间立体参数、量子化学参数等,实现对分子结构更全面、更精准的特征,以期得到更好的预测结果。

参考文献

- [1] 姜永超,李柳基,袁源,等.不同酿酒酵母对菠萝果汁发酵特性的比较[J].食品科技,2018,43(11):90-97.
- [2] 刘延波,王娜,赵志军,等.响应面法优化菠萝梨酒的发酵工艺[J].食品研究与开发,2020,41(8):124-129,159.
- [3] 张庆庆,郑天柱,汤文晶,等.红曲菠萝酒发酵及香气成分的分析[J].食品工业科技,2015,36(19):209-301,317.
- [4] 王花俊,张峻松,刘利锋.菠萝挥发性成分的GC-MS分析[J].食品研究与开发,2009,30(12):134-137.
- [5] 魏长宾,刘胜辉,陆新华,等.菠萝果实香气成分多样性研究[J].热带作物学报,2016,37(2):418-426.

(下转第155页)

- [14] 曹继璇, 张颖, 姜湘琴, 等. 减压结合 1-甲基环丙烯处理通过调控中华寿桃能量代谢控制其采后冷害[J]. 食品与发酵工业, 2020, 46(12): 213-219.
- [15] 侯忠友, 孙海长, 罗晓琴, 等. 以色列 AGRO 与国内超市气调袋在小白杏上的对比试验初报[J]. 新疆林业, 2015(2): 18-20.
- [16] LIZ S Patiño, DIEGO A Castellanos, ANÍBAL O. Influence of 1-MCP and modified atmosphere packaging in the quality and preservation of fresh basil[J]. Postharvest Biology and Technology, 2018, 136(10): 57-65.
- [17] 卢继霞, 郭瑞宇, 王成, 等. 基于固体颗粒尺寸分布的微孔滤膜堵塞机理分析[J]. 机械工程学报, 2018, 54(20): 145-151.
- [18] 张四普, 牛佳佳, 韩立新, 等. 1-MCP 结合微孔、打孔气调袋对‘富士’苹果贮藏品质的影响[J]. 食品工业科技, 2020, 41(9): 278-284, 290.
- [19] 范宽秀, 谢国芳, 刘珊珊, 等. 1-MCP 结合 PE 袋对金刺梨贮藏品质的影响[J]. 食品科技, 2019, 44(2): 71-76.
- [20] 牛佳佳, 袁云凌, 鲁云凤, 等. 冷藏条件下不同保鲜处理对金桃猕猴桃果实品质的影响[J/OL]. 河南农业科学. (2020-10-20) [2020-11-19]. <http://kns.cnki.net/kcms/detail/41.1092.s.20201020.1424.038.html>.
- [21] 谢丽娟, 刘东红, 张宇环, 等. 近红外光谱技术定量测定杨梅汁可溶性固形物[J]. 光谱学与光谱分析, 2007(7): 1 332-1 335.
- [22] 鲁兴凯, 张秀英, 张丹, 等. 西南冷凉高地‘红富士’苹果不同采收时间和套袋对果实品质的影响[J]. 果树学报, 2017, 34(2): 196-203.
- [23] 杨绍琼, 陈伟强, 邓成菊, 等. 云南河口地区香蕉黑星病与炭疽病发生规律的再研究[J]. 农业热带科学, 2015, 35(2): 45-50.
- [24] 樊航宏, 薛瑾瑾, 李志英, 等. 水杨酸法测定蔬菜水果中过氧化氢酶活性[J]. 海南师范大学学报, 2016, 29(1): 61-64.
- [25] 贾艳萍, 张鹏, 曹森, 等. 1-MCP 处理对葡萄保鲜的影响[J]. 中国食品学报, 2016, 16(12): 185-192.
- [26] 朱世江, 马丽艳, 刘少群. 不同套袋对香蕉主要品质和耐贮性的影响[J]. 农业工程学报, 2009, 25(7): 304-307.
- [27] 刘和平, 补建华, 胡桂兵. 套袋对‘双肩玉荷包’荔枝果实品质的影响[J]. 热带农业科学, 2016, 36(5): 7-12.
- [28] XU Fang-xu, LIU Shi-yang, LIU Ye-fei, et al. Effectiveness of lysozyme coatings and 1-MCP treatments on storage and preservation of kiwifruit [J]. Food Chemistry, 2019, 288: 201-207.

(上接第 33 页)

- [6] 刘胜辉, 孙伟生, 陆新华, 等. 6 个菠萝品种成熟果实香气成分分析[J]. 热带作物学报, 2015, 36(6): 1 179-1 185.
- [7] 张钰乾. 菠萝芳香物质组成及影响因子研究[D]. 南宁: 广西大学, 2013: 11-43.
- [8] 曹明宇, 杨志豪, 罗凌, 等. 基于神经网络的药物实体与关系联合抽取[J]. 计算机研究与发展, 2019, 56(7): 1 432-1 440.
- [9] 胡欣颖, 李洪军, 李少博, 等. 对比研究响应面法和 BP 神经网络一粒子群算法优化调理松板肉加工工艺[J]. 食品与发酵工业, 2019, 45(24): 179-187.
- [10] 万赐晖, 贾文坤, 王纪华, 等. 基于人工神经网络算法的电子鼻系统在食品无损检测中的应用[J]. 食品与机械, 2016, 32(10): 221-225.
- [11] 石佳超, 罗坤, 樊建人, 等. 基于 CMAQ 与前馈神经网络的区域大气污染物浓度快速响应模型[J]. 环境科学学报, 2018, 38(11): 4 480-4 489.
- [12] 杨志锐, 郑宏, 郭中原, 等. 基于网中网卷积神经网络的红枣缺陷检测[J]. 食品与机械, 2020, 36(2): 140-145, 181.
- [13] 张婷, 梁逸曾, 赵晨曦, 等. 基于分子结构预测气相色谱程序升温保留指数[J]. 分析化学, 2006, 34(11): 1 607-1 610.
- [14] 秦文斌, 冷检, 秦正龙, 等. 金莲花挥发性组分色谱保留值的构效关系研究[J]. 日用化学工业, 2014, 44(12): 680-682.
- [15] 孙运佳, 张荣荣, 施宇靖, 等. 新型苯并噻(噁)唑酮衍生物抑制黄瓜炭疽菌活性的 QSAR 研究[J]. 化学研究与应用, 2016, 28(6): 818-823.
- [16] 许禄, 邵学广. 化学计量学方法[M]. 北京: 科学出版社, 2004: 287.
- [17] 冯长君. 物质构效学与应用[M]. 徐州: 中国矿业大学出版社, 2017: 3.

(上接第 147 页)

- [21] 戈子龙, 张泽金, 周爱梅, 等. 基于高通量测序与培养方法分析新鲜佛手与老香黄中的细菌多样性[J]. 食品与发酵工业, 2020, 46(3): 250-256.
- [22] 翁佩芳, 李微微, 吴祖芳, 等. 水产品鲈鱼 (*Pneumatophorus japonicus*) 细菌多样性及优势微生物分析[J]. 海洋与湖沼, 2013, 44(3): 788-795.
- [23] 叶萍萍. 微冻鲮鱼保鲜技术研究[D]. 扬州: 扬州大学, 2011: 11-24.
- [24] 郑振霄, 周聃, 冯俊丽, 等. 冷海水保藏下鲈鱼 (*Pneumatophorus japonicus*) 菌相变化规律及优势腐败菌的分离鉴定[J]. 现代食品科技, 2016, 32(4): 81-86.
- [25] ZHAO Chao-min, YUE Zhen-feng, WU Hui, et al. Determination of the origin of progesterone in butter by gas chromatography/combustion/isotope ratio mass spectrometry (GC/C/IRMS) [J]. Analytical Methods, 2014, 6(17): 6 760.
- [26] 高乾坤, 焦琳舒, 杜贺超, 等. 高通量测序分析不同产地带鱼冷藏时微生物群落多样性[J]. 食品科学, 2018, 39(18): 127-132.