陈亮吉, 温青纯, 尚静, 等. 机器学习在基于风味分析的食品检测领域的研究进展 [J]. 食品工业科技, 2026, 47(17): 539−547. doi: 10.13386/j.issn1002-0306.2025060341

CHEN Liangji, WEN Qingchun, SHANG Jing, et al. Progress in Research on Machine Learning in the Field of Food Detection Based on Flavour Analysis[J]. Science and Technology of Food Industry, 2026, 47(17): 539−547. (in Chinese with English abstract). doi: 10.13386/j.issn1002-0306.2025060341

· 专题综述 ·

# 机器学习在基于风味分析的食品检测领域的研究进展

陈亮吉[1], 温青纯[1], 尚　静[1,2], 周　芳[1], 王万颖[1], 孟庆龙[1,2,*]

（1.贵阳学院食品科学与工程学院, 贵州贵阳 550005;
2.贵州省农产品无损检测工程研究中心, 贵州贵阳 550005）

**摘　要:** 随着人们生活水平的提高，食品风味对食品品质及消费决策的影响愈发显著。基于风味分析的食品检测传统方法存在主观性强、重复性差等局限，而机器学习（Machine Learning，ML）技术在该领域展现出独特优势。本文综述了基于风味分析的食品检测中常用的 ML 算法，包括传统 ML 算法如支持向量机、随机森林等，以及卷积神经网络、循环神经网络等深度学习算法。同时探讨了 ML 在基于风味分析的食品品质预测、食品种类识别等方面的应用。研究表明，ML 在基于风味分析的食品检测领域应用效果良好，能有效构建预测模型、提升食品分类和真伪鉴别效率。尽管如此，ML 在基于风味分析的食品检测领域仍有改进空间，未来可通过优化算法、融合技术等推动其进一步发展，为食品行业的创新与质量提升提供有力支持。

**关键词:** 机器学习, 食品风味, 算法应用, 品质检测, 食品分类, 数据融合

**中图分类号:** TS201.2　　**文献标识码:** A　　**文章编号:** 1002−0306(2026)17−0539−09

**DOI:** 10.13386/j.issn1002-0306.2025060341

本文网刊:

# Progress in Research on Machine Learning in the Field of Food Detection Based on Flavour Analysis

**CHEN Liangji[1], WEN Qingchun[1], SHANG Jing[1,2], ZHOU Fang[1], WANG Wanying[1], MENG Qinglong[1,2,*]**

（1.School of Food Science and Engineering, Guiyang University, Guiyang 550005, China;
2.Research Center of Nondestructive Testing for Agricultural Products of Guizhou Province, Guiyang 550005, China）

**Abstract:** With improvements in living standards, the influence of food flavour on food quality and consumer decision-making has become increasingly important. While traditional detection methods are subject to limitations (e.g., strong subjectivity and poor repeatability), machine learning (ML) technology has demonstrated unique advantages in this field. This review focuses on common ML algorithms used in the field of flavour analysis-based food detection, including traditional ML (e.g., support vector machine and random forest) and deep learning (e.g., convolutional neural network and recurrent neural network) algorithms. Moreover, it explores ML applications in flavour analysis-based food quality prediction and food type recognition. ML has reportedly achieved good results in the field of flavour analysis-based food detection, effectively constructing prediction models and improving the efficiency of food classification and authenticity identification. Nevertheless, ML application in the field of flavour analysis-based food detection could still be improved. Further ML development could be promoted by optimizing algorithms, integrating technologies, establishing standard systems, and building high-quality databases, which could strongly support innovation and quality improvement in the food industry.

**Key words:** machine learning; food flavor; algorithm application; quality detection; food classification; data fusion

**收稿日期:** 2025−06−26

**基金项目:** 贵州省高层次人才项目（ZKHT-GCC[2023]022）; 大学生创新创业训练项目（S2024109760226）。

**作者简介:** 陈亮吉（2000−）, 男, 硕士研究生, 研究方向: 农产品无损检测, E-mail: 13693483159@163.com。

*** 通信作者:** 孟庆龙（1989−）, 男, 博士, 教授, 研究方向: 农产品无损检测, E-mail: scumql@163.com。

随着人们生活水平的不断提高，对食品的要求也越来越高。食品风味作为影响食品品质的重要因素，受到了广泛关注。食品风味是指人以口腔为主的感觉器官对食品产生的综合感觉，它不仅影响着食品新产品的开发，还对消费者的偏好以及购买欲起着重要的作用[1]。从味觉角度上来看，其包括酸、甜、苦、咸等基本味觉，以及鲜味等复杂味觉[2]。当然，嗅觉以及食品的质地口感等也是影响食品风味的因素。这些因素相互交织，形成了独特的食品风味，使消费者在食用过程中产生愉悦或特殊的体验，并且这种风味也是区别不同食品种类的关键特征之一，是食品品质的重要体现[3]。

正是因为食品风味对食品以及消费者有如此大的影响，所以能够准确测定食品风味，对改善风味质量以及提升食品生产质量十分重要[4]。传统检测方法主要是通过感官分析以及借助电子鼻、电子舌一类设备或二者结合来测定，但是这些方法都具有一定的局限性。例如，在感官分析中，经过训练的感官小组成员会使用统一的“参考对象”标准来对风味进行分析，大多会以描述性感官评价为主的静态感官分析，但是却忽略了食物中香气物质和滋味物质在口腔中经过咀嚼、唾液作用等过程而呈现的风味属性变化[5]。电子鼻用于气味检测时存在检测效果参差不齐、仪器体积大且价格昂贵、模型通用性和普及性不足等问题[6]。随着计算技术的快速发展，以及食品风味数据库的积累，基于机器学习（Machine Learning，ML）所进行的风味分析技术，逐渐走进人们的视野[7]。与传统方法相比，ML 具有更独特的优势，例如可靠性高、客观性强、准确性佳、成本效益良好且耗时更短等[8]。

ML 是基于计算机且属于人工智能的一项分支，旨在模拟或者实现人类学习行为，从而使其能够获取新的知识或技能，重新组织已有的知识结构，进而不断改善自身的性能。ML 算法通过大量已知数据的模型训练，完成数据本质规律的挖掘，并利用学习到的规律实现未知数据的自动处理与分析，从而实现对未知数据进行归纳与分类[9]。ML 主要分为四大类：监督学习、无监督学习、半监督学习及强化学习。监督学习的核心在于，在开始计算前，已对输入与输出数据进行了标注或预分类。通过持续优化目标函数，监督学习算法能够掌握一种函数，该函数可预测与新的输入相对应的输出。而无监督学习则采用未标注的数据集，其算法的目标在于探索数据内部隐含或未被明确指出的模式[10]。近年来，ML 模型在基于风味分析的食品检测研究领域的应用呈现出蓬勃发展且逐年递增的良好态势，为该领域带来了前所未有的创新活力与发展机遇[11]。

本文对近年来食品领域常用的 ML 模型进行了综述，并重点探讨了 ML 在基于风味分析的食品检测领域中的应用，以此说明 ML 在该领域的重要性，为 ML 在食品检测领域的应用提供一定的理论参考和新思路。

## 1 常用的 ML 算法

近年来，在食品科学领域中，人工智能因具备强大的数据分析与建模能力，其应用占比逐渐增加，同时使传统方法的能力得到显著提升。在风味分析这一关键领域，ML 能够在大量的食品风味数据中提取出一些有效的数据，让研究者了解到导致食品产生特定风味的物质或原因[12]。图 1 是从 Web of Science 中检索生成的，以“ML 和风味”为主题，时间范围设定为 2021~2025 年，共检索到 372 篇参考文献。该图通过将这些文献的标题和摘要进行叠加可视化，并筛选出部分所需关键词后生成，相同的颜色代表相关性较强（结果由荷兰莱顿大学 VOS viewer 1.6.20 版本生成）。研究结果表明，近年来（2021 年至今），ML 在基于食品风味分析的食品检测领域中常用的传统算法模型主要有支持向量机（Support Vector Machine，SVM）、随机森林（Random Forest，RF）、主成分分析（Principal Component Analysis，PCA）以及 K-最近邻（K-Nearest Neighbors，KNN）；而具有更强学习能力的深度学习主要是卷积神经网络（Convolutional Neural Network，CNN）、循环神经网络（Recurrent Neural Network，RNN）以及反向传播神经网络（Back-Propagation Neural Network，BPNN），并且逐渐成为基于风味分析的食品检测领域的关键信息处理工具，其具体算法示意图见图 2。

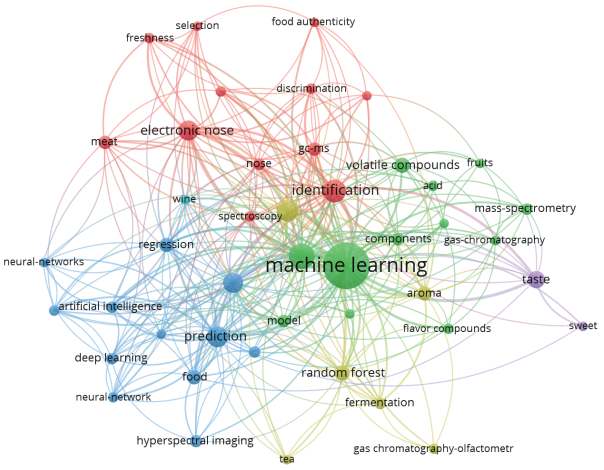



图 1 ML 在基于风味分析的食品检测领域应用的最新研究进展

Fig.1 Recent advancements in the application of ML in the field of flavour analysis-based food detection

### 1.1 传统的机器学习

1.1.1 支持向量机 SVM 是在统计理论和数学基础上发展起来的一种传统 ML 算法。它应用范围广，稳定性高，多用于处理分类和回归任务[13]。它通过将样本映射到一个高维特征空间中，在这个空间中构造最优分类超平面，从而使得后续样本进入时，SVM 能够分辨出样本属于超平面的哪一边（图 2a）。SVM

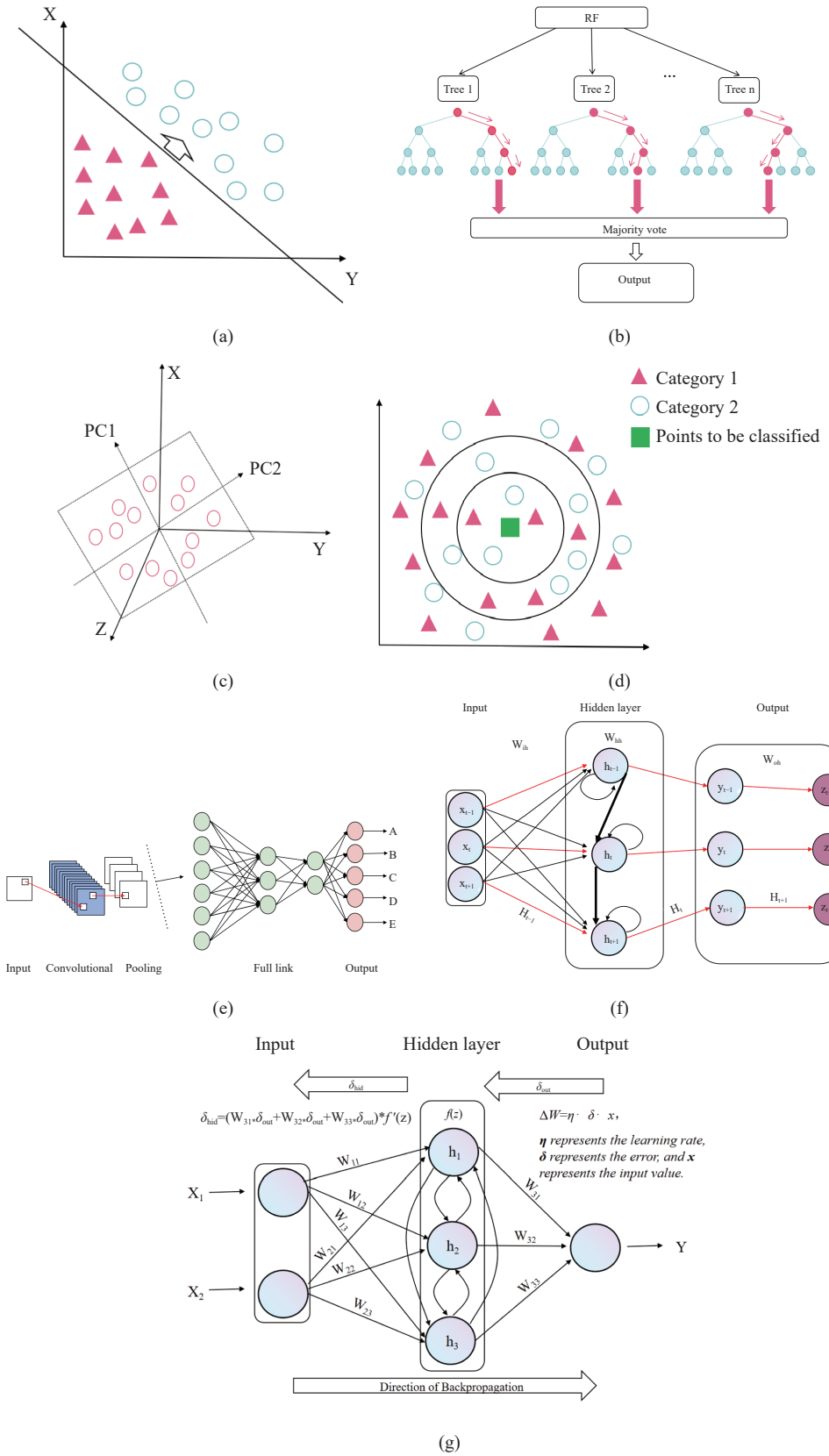



图 2　ML 算法示意图

Fig.2　Schematic diagrams of ML algorithms

注：(a)SVM[9]，(b)RF[15]，(c)PCA[18]，(d)K-NN[21]，(e)CNN[23]，(f)RNN[28]，(g)BPNN[31]。

在食品领域已经在质量检测与分类、安全检测，以及食品包装检测等方面均有应用[14−16]。HU 等[17] 利用荧光高光谱技术快速无损检测铁观音茶叶掺假研究。实验制备不同掺假情况的 288 个样本，基于 SVM 构建判别模型。研究表明，二类判别模型中，7 点 SG 平滑预处理结合竞争性自适应重加权算法（Competitive Adaptive Reweighted Sampling，CARS）特征选择的 SVM 模型效果最佳，准确率达 100%；六

类判别模型里，标准正态变量变换（Standard Normal Variate Transformation, SNV）预处理结合 RF 特征选择的 SVM 模型最优，总体准确率 94.27%，但对 40% 掺假率茶叶检测准确率较低。综合来看，荧光高光谱成像技术结合 SVM 可有效识别不同掺假程度的铁观音茶叶，二类判别模型效果更优。

1.1.2 随机森林 RF 是一种基于决策树（Decision Tree, DT）的集成学习算法。它由多个决策树组成，这些 DT 的输出（例如分类任务中的类别预测，回归任务中的数值预测）是通过某种方式组合起来的，最终形成预测结果（图 2b）[18]。刘艳群等[19] 致力于实现小麦粉灰分含量的快速准确测定，该研究运用 RF 回归模型，选取磨粉时间以及电导率作为特征变量，经算术平均法得出最终小麦粉灰分含量。在后续重复测量实验中，结果差异小于 0.01 g/100 g，因此该实验方法准确度较高，并且实验平均测定时间仅需 24 min，显著提高了测定效率。此外，RF 模型的一大优势在于其对异常值和缺失数据具有良好的容忍性，同时能有效处理大量特征，防止过拟合现象的发生，从而进一步提升预测准确性[20]。

1.1.3 主成分分析 PCA 作为一项常用的 ML 技术，主要用于降维操作和提取数据特征。其核心原理是通过正交变换将相关指标转化为方差递减的主成分。而 PCA 的根本目标，在于降低数据维度的同时，尽可能完整地保留数据里蕴含的关键特征信息。基于这一特性，PCA 在数据可视化、ML 预处理等多个关键环节中发挥着至关重要的作用[21]。WANG 等[22] 利用 PCA 分析不同烘焙程度大米挥发性风味化合物的信号强度，旨在突出样本间差异。结果显示，第一主成分（PC1）贡献率达 66%，第二主成分（PC2）为 28%，累积贡献率高达 94%，表明 PCA 能捕捉到样本挥发性成分的绝大部分信息。而通过 PCA，不同烘焙阶段的大米样本能够被准确区分，且各样本间的结果呈现良好的重复性，与风味指纹图谱的结果相契合，有力地证明了 PCA 在鉴定食品风味物质方面的有效性和可靠性。

1.1.4 K-最近邻算法 KNN 是一种监督学习算法，可以使用邻居的数目（K）来执行分类任务，是基于监督学习的最简单的 ML 算法，主要用于解决分类问题（图 2d）[23]。QIN 等[24] 利用猕猴桃的硬度以及成熟度之间的关系，研究开发基于柔性触觉传感的智能柔性机械臂系统用于猕猴桃成熟度分类，通过柔性传感器采集 40 个分 4 级样本的抓取压力数据，经 PCA 降维至 2 维后用 KNN 和 SVM 建模，其中 KNN 最优 K 值 7-9、准确率 97.5%（优于 SVM 的 96.25%），训练耗时 0.12 s、单样本测试 0.08 s；系统通过柔性机械爪无损检测，理论产能 100 个/min，目标损耗< 5%，对损伤样本误判率约 5%。但是，作为最简单的 ML 算法，KNN 的主要局限性在于其存储需求和计算成本较高，且在运用时，还需要与其他深度学习算法结合使用[25]。

## 1.2 深度学习

深度学习（Deep Learning, DL）是隶属于神经网络中的特殊类别，其具备多个隐藏层的深层神经网络架构，而正是这些隐藏层架构的存在，赋予了它强大的功能特性，能够在数据应用中精准捕捉到极为复杂的数据特征与模式[26]。作为 ML 的一个分支，DL 的核心在于运用神经网络，从海量数据集中自主学习规律与知识。而在对大量数据的处理过程中，DL 会不断优化网络内部的参数，从而实现对数据的高效解析和利用[27]。

1.2.1 卷积神经网络 CNN 是一种广泛用于图像和序列数据处理的 DL 算法，在特征提取和模式识别方面表现出色，可用于分析风味分子的结构和相互作用。这种网络在许多任务都有极高的效率[28]，比如异物检测、食材变质检测以及食材分类等[29−31]。CNN 是一种经典而广泛应用的网络结构。它通过卷积层（Convolutional Layer）、池化层（Pooling Layer）和全连接层（Fully-Connected Layer）等组件自动提取数据中的特征（图 2e）。LIU 等[32] 利用高光谱成像技术采集 4 个成熟阶段共 600 个库尔勒香梨样本的光谱数据，经乘法散射校正（Multiplicative Scatter Correction, MSC）、SNV 预处理，结合 1~4 阶段的糖含量特征参数（8.06%~13.615%），通过 SPA 筛选出 8 个关键波长（糖含量预测 RMSE=1.22954）。实验中构建的 CNN-S 模型成熟度分类测试集准确率达 92%，优于 AlexNet、ResNet 及 BPNN 等传统方法。结果表明该技术可高效无损检测香梨成熟度，为智慧农业提供支撑，但未来需扩大样本量及多环境验证。

1.2.2 循环神经网络 RNN 是用于处理序列数据的一种人工神经网络，其中层的节点之间的连接形成沿着变量序列的有向图，它是按照时间序列或者序列顺序逐个处理数据（图 2f）[33]。LEE 等[34] 开发了一种基于 RNN 的创新技术，用于自动识别感染区域并提取相关特征以进行疾病分类。研究表明，相较于传统的 CNN 方法，这种 RNN 方法展现出更强的泛化能力，尤其在处理未见过的疾病样本时表现突出。该研究指出，将 RNN 方法融入深度学习框架，不仅能够显著提升分类准确性，还为理解植物疾病提供了新的视角，有助于解答一些未知的问题。RNN 具有处理序列数据能力强、模型参数共享以及能够处理长度各异的序列等优点，但是由于其梯度消失和梯度爆炸以及长期记忆问题等局限性问题，长短期记忆网络（Long Short-Term Memory, LSTM）和门控循环单元（Gated Recurrent Unit, GRU）等改进的 RNN 架构应运而生[35]。

1.2.3 反向传播神经网络 BPNN 是一种广泛应用于模式识别和分类问题的人工神经网络。它通过模拟人脑神经元的连接方式，利用多层感知器（Multilayer Perceptron, MLP）结构来处理输入数据，主要包括两个阶段：前向传播和反向传播（图 2g）。这种算法

的优点在于其强大的分类能力和较高的准确性，尤其在处理复杂的非线性问题时表现出色[36]。LIU 等[37]选取相似无损的香梨，经冲击损伤系统制造不同损伤样本，室温储存并定期测失重率。采用广义回归神经网络（Generalized Regression Neural Network，GRNN）、SVR、偏最小二乘回归(Partial Least Squares Regression，PLSR）和 BPNN 四种模型，以损伤面积和储存天数为输入、失重率为输出构建预测模型，用决定系数（$R^2$）和均方根误差（RMSE）评估。结果显示，BPNN 模型预测香梨失重率精度最高，其 $R^2$=0.9929、RMSE=0.2138。实际验证中，其预测香梨失重率为 $R^2$=0.9377、RMSE=0.7138。研究表明，BPNN 模型是预测受损香梨失重率的最优模型，且受损香梨失重率随储存时间延长、损伤程度增加而增大。

## 2　ML 在基于风味分析的食品检测领域的应用

### 2.1　ML 在基于风味分析的食品品质预测方面的应用

在基于风味分析的食品检测领域中，ML 技术还可以与电子鼻[38]、电子舌[39] 以及近红外光谱（Near-Infrared Spectroscopy，NIRS）[40] 等分析手段相结合，从而对食品风味成分的结构数据进行深度解析，实现对食品风味特点和品质水平的精准预测。并且 ML 技术通过对这些数据的深入挖掘与分析，在获得相应数据库的同时，也会建立对应的预测模型，从而有效地预测或判断食品的风味特点、新鲜度和质量等级等，为食品行业的生产环节、品质控制等提供有力的支撑。

2.1.1　基于风味化合物预测食品风味　通过精准检测食品中蕴含的特有化学物质，ML 能够对食品风味进行有效预测。这种方法突破了传统食品风味检测手段的局限性，为该领域开辟了一条全新且高效的道路。CHANG 等[41] 的研究表明，NIRS 结合 ML 对咖啡进行风味预测，采用径向基函数（Radial Basis Function，RBF）核的集成 SVM 模型及采用 ResNet101 结构的深度卷积神经网络（Deep Convolutional Neural Network，DCNN）模型，能够达到 70% 的准确率和召回率，这项研究提出一种新的、客观的通过 ML 预测食品风味的方法，不仅可用于预测咖啡中的复杂风味，还广泛适用于食品和饮料科学或工业中的其他风味预测。

其次，由于原料和加工工艺的不同，食品的品质和风味也有很大的差异，因此，LI 等[42] 根据理化参数和闪速气相色谱的电子鼻分析结果，建立了人工神经网络（Artificial Neural Network，ANN）分析模型。因快速 GC 电子鼻能更好地反映食醋样品的风味特征，具有较好的拟合、预测和判别能力，经快速 GC 电子鼻训练的神经网络模型的训练正确率和预测正确率分别为 98.6% 和 96.7%。研究表明，使用闪速 GC 电子鼻训练的 ANN 分类模型有效且易于实现，具有低计算成本和高准确度。两种评价体系适用于不同的食醋质量评估，结合使用能更全面反映其质量特征。

在预测风味的过程中，还能将 ML 与代谢组学相结合，以此筛选出影响食品感官特征的代谢物因素。SUN 等[43] 综合运用代谢组学、感官评估和 ML 技术，分析不同产地番荔枝的风味化合物。建立 14 种模型，大多数模型能较准确预测番荔枝甜度和喜好度，其中基于 RBF（含 $\sigma$ 参数调优）的 SVM 模型——Radial Sigma SVM 模型综合表现最佳。并且借助贝叶斯 A 模型和神经网络模型确定 27 种关键代谢物，结果表明，酒泉产的番荔枝更受消费者喜爱。而在预测消费者偏好上，Radial Sigma SVM 模型最优，筛选出的咖啡酸等代谢物能够显著影响番荔枝的甜度、酸度、风味强度以及喜好度等感官特征，并且还能区分不同产地的番荔枝。

2.1.2　结合风味分析预测食品品质　茶是一种具有独特韵味和鲜明特色的饮品，其风味会受到多种因素影响，而存放时间便是其中极为关键的一项。在茶叶的储藏过程中，随着时间的流逝，茶叶内部会发生一系列复杂且微妙的化学反应。YANG 等[44] 基于电子舌建立了一维卷积神经网络（1-D CNN）模型，用以区分普洱茶的储藏时间来分析普洱茶的品质水平。实验结果显示，该模型的性能优于传统 ML 方法，如 BPNN、SVM 和极限学习机（Extreme Learning Machine，ELM），测试集准确率达到 98.80%，精密度为 98.2%，召回率为 98%，F1 评分达到了 0.98。研究表明，将 DL 与迁移学习结合，能够显著提升电子舌的识别性能，同时也为其他传感和检测领域提供新思路，具有良好的应用前景。

鱼类食品脱离适宜低温环境时，其富含的营养物质会促使微生物大量繁殖，最终导致食品变质并且会伴随着令人不悦的异味。SUN 等[45] 将近红外高光谱成像系统与 ML 相结合，以嗅觉和味觉两个角度分析鲑鱼肌肉样品产生异味的可能性，从而精准预测鲑鱼异味。研究中提取了与异味相关的光谱信息，结合 DCNN 建立了一维神经网络模型，准确度达到了 91.11%。随后，利用 RF 预测与鲑鱼异味最相关的化学物质，结果达到预期效果。该研究展示了 ML 在食品异味研究中的潜力，对生产者和研究者具有重要意义，但仍需建立相应的数据库和稳健模型以应对年份和季节等特定条件对检测的影响。

目前，水果品质评价仍需要更便捷有效的方法[46]。XU 等[47] 将电子鼻与 ML 技术相结合，构建线性判别分析（Linear Discriminant Analysis，LDA）、KNN 和 PLSR 模型来检测荔枝采后品质。实验表明：机械损伤会加速荔枝果皮褐变：重度组褐变指数（Browning Index，BI）增速最快，且风味流失明显，表现为可溶性固形物（Total Soluble Solids，TSS）和可滴定酸含量（Titratable Acid，TA）下降，而冷藏组 BI 缓慢上升但 TSS/TA 稳定。研究结果表明：LDA

能有效区分损伤后 1~4 d 的样本(第 4 d 区分效果最佳),并通过综合特征提取来区分冷藏时间(准确率为 91.43%);KNN 算法通过 k 值寻优(k=5 时验证集准确率最高),其 10 折交叉验证准确率达 89.7%;PLSR 在褐变预测方面具有较高的准确性($R^2$>0.8),但对于 TSS/TA 的预测效果差($R^2$<0.4)。研究证实,ML 与电子鼻技术融合可作为荔枝流通期间品质监管的高效工具,其核心优势是通过算法优化解析复杂感官数据。同时指出,针对不同品种及检测目标,需动态调整传感器筛选与特征工程方法,以最大化模型检测效能。

综上所述,将 ML 技术与多种风味分析仪器联用,应用于食品风味与品质预测具备可行性。凭借 ML 强大的计算能力,能够构建多种高效、准确的数据预测模型,进而为食品风味调控以及新产品创新提供坚实的理论支撑。表 1 举例了近年来 ML 在基于风味分析仪器和分子的化学结构预测食品风味的应用研究。

## 2.2 ML 在基于风味分析的食品类别和真伪检测中的应用实践

2.2.1 基于风味分析鉴别食品类别 食物品种品质直接关联着人体健康[48]。高品质的食物品种通常意味着其营养成分更为丰富且均衡。但是如果依靠传统方法对食品进行分类,不仅耗时耗力,准确性也无法保障。

ZHOU 等[49]结合多种技术与 ML 算法分析 8 种果酒挥发性成分以实现果酒分类。运用 HS-SPME-GC-TOF/MS 和 HS-GC-IMS 技术,鉴定出 281 种挥发性香气化合物,其中以酯类和醇类成分为主,且不同果酒之间的化合物种类及含量呈现出显著差异。在 ML 方面,通过 PCA 和 PLS-DA 等算法对数据进行处理,可筛选出能够有效区分果酒类型的关键差异化合物。研究使用了神经网络(Neural Network, NN)、RF、SVM、KNN、逻辑回归(Logistic Regression, LR)等多种 ML 模型以筛选出关键特征。这些关键特征的应用显著提升了模型的预测精度,如 LR 和 KNN 模型采用 TOF/MS 关键特征时,样本识别率可达到 100%。智能感官评估结果显示,挥发性化合物在果酒风味区分过程中占据核心地位,但电子鼻易受乙醇挥发的影响。总体而言,该研究为果酒行业的质量控制、产品创新以及产地认证提供了有力支持,有效地推动了行业的规范化发展进程。

HUANG 等[50]利用 GC-IMS 检测草莓挥发性有机化合物(VOCs),结合 ML 技术对其成熟阶段和品种分类。草莓的 VOCs 在成熟阶段和品种间差异显著,如(E)-2-己烯醛成熟时含量下降。PCA 降维可视化发现,前三个主成分解释 57.3% 方差,成熟阶段可分但品种间分离不佳。因此构建 5 种模型进行评估,其中 NN 模型经 5 折交叉验证优化。实验表明,NN 在双分类中准确率为 96.67%,单成熟度与 SVM 均为 96.67%,单品种与 Xgboost 均为 98.33%,性能最优且为检测手段选择提供参考。

SABILLA 等[51]将 ML 算法与肉类风味物质分析相结合,通过电子鼻系统实现了对牛肉、鸡肉、猪肉及其不同部位的分类检测,同时利用 GC-MS 对实验结果加以验证。研究对比了 MLP、KNN 和 SVM 等多种分类方法,结果显示,SVM 表现最优,准确率达到 90.36%,但所有算法的误差率均超过±10%。而在深度神经网络(Deep Neural Network, DNN)的应用中,未经优化的基本 DNN 模型在六分类任务中准确率为 96.02%;而通过 PCA 进行降维处理并优化模型参数后,三分类任务的准确率提升至 98.88%,较先前研究提高了 2.68 个百分点;六分类任务的准确率亦达到 96.90%。

2.2.2 基于风味分析鉴别食品真伪 随着食品市场的日益繁荣,各类食品琳琅满目,但与此同时,食品造假现象也屡见不鲜。因此,食品在真假方面的辨别也是一个人们十分关注的问题,LEI 等[52]结合电子鼻、电子舌和 GC-MS 技术,运用 RF、BPNN 等 ML 算法,对熊胆粉及其掺伪品进行定性定量评估。结果表

表 1 ML 模型在基于风味分析的食品检测领域中的应用举例

Table 1 Examples of application of ML model in the field of flavour analysis-based food detection

| 研究目的 | 输入数据来源 | ML算法模型 | 参考文献 |
|---|---|---|---|
| 预测咖啡风味 | NIRS | SVM、RF、DCNN | [41] |
| 评估食醋品质和风味 | GC电子鼻 | ANN | [42] |
| 预测对番荔枝的喜爱度 | 代谢组学、感官评估 | PCA、SVM、RF | [43] |
| 检测普洱茶的存放时间 | 电子舌 | DCNN、ELM、SVM、BPNN | [44] |
| 养殖鲑鱼的异味预测 | 近红外光谱成像 | PLS、SVM、ELM、CNN | [45] |
| 检测荔枝采后品质 | 电子鼻 | LDA、KNN和PLSR | [47] |
| 对8种果酒分类 | HS-SPME-GC-TOF/MS和HS-GC-IMS | PCA、KNN和RF等 | [49] |
| 对草莓成熟阶段和品种分类 | GC-IMS | PCA、NN、SVM | [50] |
| 不同肉类及其部位的分类 | 电子舌 | MLP、KNN和SVM | [51] |
| 鉴别熊胆粉及其常见掺伪品 | 电子鼻、电子舌和GC-MS | RF、BPNN、KNN、SVM | [52] |
| 检测山茶油掺假 | FTIR光谱、电子鼻、GC-MS | PCA、BPNN | [53] |
| 检测蜂蜜掺假 | 超快速气相色谱 | RF、SVR | [54] |

明：RF 在模型中表现最优，定性分类准确率 100%，定量预测牛磺熊去氧胆酸（Tauroursodeoxycholic Acid, TUDCA）时 $R^2$ 和 RMSE 良好；BPNN 定性分类在训练集和验证集的准确率 100%，测试集准确率为 92.3%，定量预测测试子集 $R^2$ 为 0.77；KNN 表现差，分类错误率高，回归任务 $R^2$ 低、RMSE 高；SVM 分类训练子集好，但测试和验证错误率分别为 15.4% 和 12.5%，回归测试子集表现最差。实验数据显示，GC-MS 鉴定出 87 种挥发性化合物，熊胆粉有 54 种及 31 种独特成分，部分成分含量与掺伪品差异显著（$P$<0.05）。该研究为熊胆粉鉴定和质量控制提供了有效支持。

WANG 等[53] 通过构建 TES 框架，融合了 Transformer 编码器与 SVM 回归器，前者提取并降维电子鼻数据特征，后者用 RBF 核函数预测，并结合傅里叶变换红外光谱（Fourier Transform Infrared Spectroscopy, FTIR）技术进行辅助分析，为模型性能评估提供了有力支持。经实验验证，SVM 处理高维数据欠佳，Transformer 编码器处理序列数据有优势但单独使用不足，TES 结合二者优势，在各数据集上 MAE、RMSE 低且 $R^2$ 达到 0.9019 以上。检测实验中，TES 模型表现最优，准确率与运行时间平衡良好，运行时间约 4 s。实验数据显示，对电子鼻数据进行了 PCA，虽然 PC1 和 PC2 累计方差超 85%，但样本重叠无法定量分析；FTIR 显示不同掺假物及纯油光谱存在差异；气相色谱表明山茶油富含油酸，其脂肪酸组成差异影响 FTIR，利于食用油分类和掺假检测，为山茶油掺假检测提供有效支持。

PUNTA-SÁNCHEZ 等[54] 提出将超快速气相色谱（UF-GC）与 ML 结合检测蜂蜜掺假的新方法。UF-GC 可快速分析蜂蜜挥发性化合物，研究借助 RStudio 及多个 R 包处理数据、构建模型，用 $R^2$、RMSE 和 RPD 评估回归模型，以准确率评估分类模型。经 Boruta 特征选择，6 种回归模型表现良好，SVR 综合最佳但与最小绝对收缩和选择算子（Least Absolute Shrinkage and Selection Operator, LASSO）、PLS 差异不显著。PCA 显示 PC1 和 PC2 能区分橙花蜜（Orange Blossom Honey, OB）和向日葵蜜（Sunflower Honey, SF）蜂蜜，基于 Boruta 特征，SVM 和 RF 对蜂蜜植物来源分类准确率达 100%。单独处理 OB 和 SF 蜂蜜样本，回归模型性能提升，$R^2$ 达到 0.95。研究表明，SVR 和 LASSO 等模型可有效检测蜂蜜掺假，单独处理样本能提高性能，LASSO 单独预测潜力大，该方法适用于实验室和食品安全部门筛查。

综上所述，将 ML 技术与 GC-MS 等风味分析手段相结合，应用于食品分类以及真伪鉴别的领域中是切实可行的。不仅能够显著提升分辨食品种类的效率，快速且精准地对食品进行分类，极大地节约人力与时间成本，还能通过对食品风味的深入分析和精准把控，帮助食品在生产环节及时发现问题，从而有效优化产品质量，为消费者提供更高品质的食品。

## 3　总结与展望

本文通过列举近几年 ML 在基于风味分析的食品检测领域的应用实例，表明 ML 在基于风味分析的食品检测领域实现了多方面的突破。食品的风味不仅会影响新产品的研发，还会直接影响到消费者的购买决策。传统检测方法如感官评价和电子鼻、电子舌技术等，均会受到人为主观性以及设备局限性的影响，相比之下，ML 可以通过对风味数据的挖掘与建模，更快、更准确地了解食品的风味特点，大大提升对食品品质检测的效率以及准确性。从算法体系来看，传统 ML 与 DL 形成多层次技术矩阵。传统 ML 算法如 SVM、RF 可以在分类与回归任务中展现出稳健性，可通过构建高维特征空间的最优超平面或集成决策树提升预测精度；PCA 等降维技术则能有效压缩数据维度，保留关键风味信息。DL 算法如 CNN、RNN 则凭借多层非线性架构，自动捕获风味数据中的时空特征与复杂模式，尤其是在处理图像、光谱及序列数据时表现出更强的特征表达能力。在技术融合层面，ML 与电子鼻、电子舌和红外光谱等检测手段的结合使用将成为主要发展方向，并且通过整合多源数据（如挥发性化合物信号、光谱特征等），可构建相对应的风味分析模型，实现对食品新鲜度、品质等级及掺伪程度的精准预测。

目前，ML 在基于风味分析的食品检测领域取得了阶段性进展。传统 ML 算法（如 SVM 和 KNN）能够对小规模食品风味数据进行初步分类。DL 的基础神经网络架构在果酒、草莓等食品品类识别方面已初显成效。此外，将 ML 与 GC-MS、电子鼻等风味分析技术相结合，已实现对部分食品品类和真伪的识别。然而，该领域仍面临诸多困难。在算法层面，传统的 SVM 和 KNN 效率较低，处理大规模、高维数据时易陷入局部最优。DL 算法泛化能力不足，且依赖大量高成本的标注数据。在技术集成层面，ML 与光谱、色谱数据之间的特征融合方法尚不成熟，难以挖掘数据中的潜在关联。此外，食品风味分析缺乏统一的标准体系。不同研究采用不同的数据收集和处理方法，高质量的风味数据库稀缺。数据完整性和准确性不足，导致模型对数据的依赖性较高。为解决这些问题，应从四个方面着手。一是优化算法，将并行计算和增量学习引入传统算法，并改进核函数。对于 DL 算法，优化网络架构（如添加针对食品风味数据的注意力模块），并结合迁移学习以降低对数据的依赖。二是深化技术集成，结合化学和生物学知识设计，高效的数据融合算法，探索数据与感官特性之间的深层次联系。三是建立统一的标准体系，与行业合作，制定风味分析和数据处理规范。四是构建高质量数据库，通过数据清洗等手段确保数据质量，最终推动 ML 在基于风味分析的食品检测领域

取得更大突破。总之，ML 在基于风味分析的食品品质预测、食品分类领域、食品造假方面以及食品品质评估等食品检测研究领域中占据着重要地位。可以预见的是，未来 ML 会持续为食品行业带来新的发展动力，在保障食品安全、提升食品品质等方面发挥关键作用，推动整个食品行业不断向前发展。

© The Author(s) 2026. This is an Open Access article distributed under the terms of the Creative Commons Attribution License (https://creativecommons.org/licenses/by-nc-nd/4.0/).

## 参考文献


［1］ 宋焕禄. 食品挥发性风味分析技术概论[J]. 食品与发酵科技, 2023, 59(4): 1−6. ［SONG Huanlu. Introduction to volatile flavor analysis technology of food[J]. Food and Fermentation Science & Technology, 2023, 59(4): 1−6.］

［2］ WEI Guozheng, DAN Meiling, ZHAO Guohua, et al. Recent advances in chromatography-mass spectrometry and electronic nose technology in food flavor analysis and detection[J]. Food Chemistry, 2023, 405: 134814.

［3］ 夏延斌. 食品风味化学[M]. 北京: 化学工业出版社, 2008: 15−35. ［XIA Yanbin. Food flavor chemistry[M]. Beijing: Chemical Industry Press, 2008: 15−35.］

［4］ 苏礼君, 李健, 孔建磊, 等. 机器学习技术在食品风味分析中的研究进展[J]. 食品工业科技, 2024, 45(18): 19−30. ［SU Lijun, LI Jian, KONG Jianlei, et al. Progress in research on machine learning for studies on food flavor analysis[J]. Science and Technology of Food Industry, 2024, 45(18): 19−30.］

［5］ 田怀香, 郑国茂, 于海燕, 等. 气味与滋味间相互作用对食品风味感知影响研究进展[J]. 食品科学, 2023, 44(9): 259−269. ［TIAN Huaixiang, ZHENG Guomao, YU Haiyan, et al. Research progress on the effect of the interaction between odor and taste on food flavor perception[J]. Food Science, 2023, 44(9): 259−269.］

［6］ 刘洋, 贾文珅, 马洁, 等. 电子鼻技术在肉与肉制品检测中的研究进展和应用展望[J]. 智慧农业(中英文), 2021, 3(4): 29−41. ［LIU Yang, JIA Wenshen, MA Jie, et al. Research progress and application prospect of electronic nose technology in the detection of meat and meat products[J]. Smart Agriculture, 2021, 3(4): 29−41.］

［7］ BOUYSSET C, BELLOIR C, ANTONCZAK S, et al. Novel scaffold of natural compound eliciting sweet taste revealed by machine learning[J]. Food Chemistry, 2020, 324: 126864.

［8］ 范丽丽, 赵宏伟, 赵浩宇, 等. 基于深度卷积神经网络的目标检测研究综述[J]. 光学 精密工程, 2020, 28(5): 1152−1164. ［FAN Lili, ZHAO Hongwei, ZHAO Haoyu, et al. Survey of target detection based on deep convolutional neural networks[J]. Optics and Precision Engineering, 2020, 28(5): 1152−1164.］

［9］ 刘凡平. 神经网络与深度学习应用实战[M]. 北京: 电子工业出版社, 2018: 240−251. ［LIU Fanping. Neural network and deep learning application in actual combat[M]. Beijing: Publishing House of Electronics Industry, 2018: 240−251.］

［10］ TSENG Y J, CHUANG P J, APPELL M. When machine learning and deep learning come to the big data in food chemistry[J]. ACS Omega, 2023, 8(18): 15854−15864.

［11］ ZENG Xiangquan, CAO Rui, XI Yu, et al. Food flavor analysis 4.0: A cross-domain application of machine learning[J]. Trends in Food Science & Technology, 2023, 138: 116−125.

［12］ 李帅, 柴春祥, 刘建福. 机器学习算法在食品气味表征中的应用[J]. 中国食品学报, 2024, 24(8): 486−501. ［LI Shuai, CHAI Chunxiang, LIU Jianfu. Application of machine learning algorithms in food odor characterization[J]. Journal of Chinese Institute of Food Science and Technology, 2024, 24(8): 486−501.］

［13］ CORTES C, VAPNIK V. Support-vector networks[J]. Machine Learning, 1995, 20(3): 273−297.

［14］ AZARMDEL H, JAHANBAKHSHI A, MOHTASEBI S S, et al. Evaluation of image processing technique as an expert system in mulberry fruit grading based on ripeness level using artificial neural networks (ANNs) and support vector machine (SVM)[J]. Postharvest Biology and Technology, 2020, 166: 111201.

［15］ YE Weixin, YAN Tianying, ZHANG Chu, et al. Detection of pesticide residue level in grape using hyperspectral imaging with machine learning[J]. Foods, 2022, 11(11): 1609.

［16］ KHORRAMIFAR A, RASEKH M, KARAMI H, et al. Determining the shelf life and quality changes of potatoes (*Solanum tuberosum*) during storage using electronic nose and machine learning[J]. PLoS One, 2023, 18(4): e0284612.

［17］ HU Yan, KANG Zhiliang. The rapid non-destructive detection of adulteration and its degree of tieguanyin by fluorescence hyperspectral technology[J]. Molecules, 2022, 27(4): 1196.

［18］ 马舒岑, 史建琦, 黄滟鸿, 等. 基于最小不满足核的随机森林局部解释性分析[J]. 软件学报, 2022, 33(7): 2447−2463. ［MA Shucen, SHI Jianqi, HUANG Yanhong, et al. Minimal-unsatisfiable-core-driven local explainability analysis for random forest[J]. Journal of Software, 2022, 33(7): 2447−2463.］

［19］ 刘艳群, 肖付刚, 陈彩虹. 基于随机森林回归模型的小麦粉灰分含量快速测定[J]. 食品与机械, 2024, 40(9): 79−83. ［LIU Yanqun, XIAO Fugang, CHEN Caihong. Study on rapid determination method of ash content in wheat flour based on stochastic forest regression model[J]. Food & Machinery, 2024, 40(9): 79−83.］

［20］ NYITRAINÉ SÁRDY Á D, LADÁNYI M, VARGA Z, et al. The effect of grapevine variety and wine region on the primer parameters of wine based on 1H NMR-spectroscopy and machine learning methods[J]. Diversity, 2022, 14(2): 74.

［21］ CHAUDHARI V, DUMKA A. Handbook of research on artificial intelligence and knowledge management in asia's digital economy[M]. US: IGI Global Scientific Publishing, 2023: 300−316.

［22］ WANG Ziyan, DOU Boxin, MA Chunmin, et al. Evaluation of volatile flavor compounds in rice with different degrees of roasting based on GC-IMS and PCA analysis[J]. Food Science and Technology, 2023, 43: e100222.

［23］ SUYAL M, GOYAL P. A review on analysis of K-nearest neighbor classification machine learning algorithms based on supervised learning[J]. International Journal of Engineering Trends and Technology, 2022, 70(7): 43−48.

［24］ QIN Leqin, ZHANG Junchang, STEVAN S, et al. Intelligent flexible manipulator system based on flexible tactile sensing (IFMSFTS) for kiwifruit ripeness classification[J]. Journal of the Science of Food and Agriculture, 2024, 104(1): 273−285.

［25］ HALDER R K, UDDIN M N, UDDIN M A, et al. Enhancing K-nearest neighbor algorithm: A comprehensive review and performance analysis of modifications[J]. Journal of Big Data, 2024, 11(1): 113.

［26］ 孙志军, 薛磊, 许阳明, 等. 深度学习研究综述[J]. 计算机应用研究, 2012, 29(8): 2806−2810. ［SUN Zhijun, XUE Lei, XU Yangming, et al. Overview of deep learning[J]. Application Research of Computers, 2012, 29(8): 2806−2810.］

［27］ 胡越, 罗东阳, 花奎, 等. 关于深度学习的综述与讨论[J]. 智能系统学报, 2019, 14(1): 1−19. ［HU Yue, LUO Dongyang, HUA Kui, et al. Overview on deep learning[J]. CAAI Transactions on Intelligent Systems, 2019, 14(1): 1−19.］
［28］ LECUN Y, BENGIO Y, HINTON G. Deep learning[J]. Nature, 2015, 521(7553): 436−444.
［29］ RONG Dian, XIE Lijuan, YING Yibin. Computer vision detection of foreign objects in walnuts using deep learning[J]. Computers and Electronics in Agriculture, 2019, 162: 1001−1010.
［30］ SONWANI E, BANSAL U, ALROOBAEA R, et al. An artificial intelligence approach toward food spoilage detection and analysis[J]. Frontiers in Public Health, 2022, 9: 816226.
［31］ CIOCCA G, NAPOLETANO P, SCHETTINI R. CNN-based features for retrieval and classification of food images[J]. Computer Vision and Image Understanding, 2018, 176: 70−77.
［32］ LIU Jiale, MENG Hongbing. Research on the maturity detection method of Korla pears based on hyperspectral technology[J]. Agriculture, 2024, 14(8): 1−18.
［33］ SHERSTINSKY A. Fundamentals of recurrent neural network (RNN) and long short-term memory (LSTM) network[J]. Physica D: Nonlinear Phenomena, 2020, 404: 132306.
［34］ LEE S H, GOËAU H, BONNET P, et al. Attention-based recurrent neural network for plant disease classification[J]. Frontiers in Plant Science, 2020, 11: 601250.
［35］ KOMARIAH K S, SIN B K. Enhancing food ingredient named-entity recognition with recurrent network-based ensemble (RNE) model[J]. Applied Sciences, 2022, 12(20): 10310.
［36］ ZWEIRI Y H, SENEVIRATNE L D, ALTHOEFER K. Stability analysis of a three-term backpropagation algorithm[J]. Neural Networks, 2005, 18(10): 1341−1347.
［37］ LIU Yang, TANG Yurong, ZHANG Hong, et al. Model for estimating the weight-loss ratio of damaged Korla fragrant pears[J]. International Journal of Agricultural and Biological Engineering, 2024, 17(1): 261−266.
［38］ YE Zhengyi, LIU Yuan, LI Qiliang. Recent progress in smart electronic nose technologies enabled with machine learning methods[J]. Sensors, 2021, 21(22): 7620.
［39］ KANAGA RAJ D R, da SILVA FERREIRA M V, BRAUNGER M L, et al. Exploration of an impedimetric electronic tongue and chemometrics for characterization of black tea from different origins[J]. Journal of Food Composition and Analysis, 2023, 123: 105535.
［40］ GONZALEZ VIEJO C, FUENTES S. Digital detection of olive oil rancidity levels and aroma profiles using near-infrared spectroscopy, a low-cost electronic nose and machine learning modelling[J]. Chemosensors, 2022, 10(5): 159.
［41］ CHANG Y T, HSUEH M C, HUNG S P, et al. Prediction of specialty coffee flavors based on near-infrared spectra using machine- and deep-learning methods[J]. Journal of the Science of Food and Agriculture, 2021, 101(11): 4705−4714.
［42］ LI Yu, FEI Chenghao, MAO Chunqin, et al. Physicochemical parameters combined flash GC E-nose and artificial neural network for quality and volatile characterization of vinegar with different brewing techniques[J]. Food Chemistry, 2022, 374: 131658.
［43］ SUN Zhu, ZHAO Wenwen, LI Yaping, et al. An exploration of pepino (*Solanum muricatum*) flavor compounds using machine learning combined with metabolomics and sensory evaluation[J]. Foods, 2022, 11(20): 3248.
［44］ YANG Zhengwei, MIAO Nan, ZHANG Xin, et al. Employment of an electronic tongue combined with deep learning and transfer learning for discriminating the storage time of Pu-erh tea[J]. Food Control, 2021, 121: 107608.
［45］ SUN Dawei, ZHOU Chengquan, HU Jun, et al. Off-flavor profiling of cultured salmonids using hyperspectral imaging combined with machine learning[J]. Food Chemistry, 2023, 408: 135166.
［46］ WANG Xiang, MATETIĆ M, ZHOU Huijuan, et al. Postharvest quality monitoring and variance analysis of peach and nectarine cold chain with multi-sensors technology[J]. Applied Sciences, 2017, 7(2): 133.
［47］ XU Sai, LU Huazhong, SUN Xiuxiu. Quality detection of postharvest *Litchi* based on electronic nose: A feasible way for *Litchi* fruit supervision during circulation process[J]. Hort Science, 2020, 55(4): 476−482.
［48］ 余群力. 食品营养学[M]. 北京: 中国农业大学出版社, 2010: 55-70. ［YU Q L. Food nutrition[M]. Beijing: China Agriculture Press, 2010: 55-70.］
［49］ ZHOU Changlin, YU Yashu, AI Jingya, et al. Fruit wines classification enabled by combing machine learning with comprehensive volatiles profiles of GC-TOF/MS and GC-IMS[J]. Food Research International, 2025, 204: 115890.
［50］ HUANG Jing, ZHANG Xuenan, YANG Hang, et al. Classification of strawberry maturity stages and varieties using neural networks based on volatile organic compounds[J]. Foods, 2025, 14(2): 169.
［51］ SABILLA S I, SARNO R, TRIYANA K, et al. Deep learning in a sensor array system based on the distribution of volatile compounds from meat cuts using GC-MS analysis[J]. Sensing and Bio-Sensing Research, 2020, 29: 100371.
［52］ LEI Kelu, YUAN Minghao, LI Sihui, et al. Performance evaluation of E-nose and E-tongue combined with machine learning for qualitative and quantitative assessment of bear bile powder[J]. Analytical and Bioanalytical Chemistry, 2023, 415(17): 3503−3513.
［53］ WANG Xiaoran, GU Yu, LIN Weiqi, et al. Rapid quantitative authentication and analysis of *Camellia* oil adulterated with edible oils by electronic nose and FTIR spectroscopy[J]. Current Research in Food Science, 2024, 8: 100732.
［54］ PUNTA-SÁNCHEZ I, DYMERSKI T, CALLE J L P, et al. Detecting honey adulteration: Advanced approach using UF-GC coupled with machine learning[J]. Sensors, 2024, 24(23): 7481.