

# 不同储藏年限绒柄牛肝菌紫外&红外光谱数据融合鉴别研究

张钰<sup>1,2</sup>, 李杰庆<sup>1</sup>, 李涛<sup>3</sup>, 刘鸿高<sup>1</sup>, 王元忠<sup>2</sup>

(1. 云南农业大学农学与生物技术学院, 云南昆明 650201) (2. 云南省农业科学院药用植物研究所, 云南昆明 650200) (3. 玉溪师范学院资源环境学院, 云南玉溪 653100)

**摘要:** 野生食用菌干品长时间储藏会引起微生物增殖、物理及化学变化, 影响其商品品质, 为保证其质量安全, 亟需建立快速有效的方法, 鉴别不同储藏年限野生食用菌。本研究采集 5 个储藏年限, 77 个绒柄牛肝菌子实体的紫外(UV)与傅里叶变换红外(FT-IR)光谱, 采用卷积平滑(SG)、二阶导数(2-D)、标准正态变量(SNV)等方法对光谱进行预处理, 结合偏最小二乘判别分析(PLS-DA), 建立 UV、FT-IR、低级和中级数据融合模型。结果显示: UV 与 FT-IR 光谱最佳预处理分别为 SG+2-D 和 SG+2-D+SNV; UV、FT-IR、低级和中级数据融合模型, 总样品分类错误数分别为 10、6、4、3, 且中级数据融合的  $R^2_{cal}$  平均值最接近于 1、RMSECV 平均值最小, 表明中级数据融合分类效果, 优于 UV、FT-IR 和低级数据融合。采用 UV 与 FT-IR 中级数据融合策略结合 PLS-DA, 能够准确鉴别不同储藏年限牛肝菌样品, 为野生食用菌品质评价提供一种新思路。

**关键词:** 数据融合; 绒柄牛肝菌; 储藏年限; 紫外光谱; 红外光谱

文章编号: 1673-9078(2018)02-218-224

DOI: 10.13982/j.mfst.1673-9078.2018.2.034

## Research on Identification of *Boletus tomentipes* with Different Storage Period by UV and FT-IR Combined with Data Fusion

ZHANG Yu<sup>1,2</sup>, LI Jie-qing<sup>1</sup>, LI Tao<sup>3</sup>, LIU Hong-gao<sup>1</sup>, WANG Yuan-zhong<sup>2</sup>

(1. College of Agronomy and Biotechnology, Yunnan Agricultural University, Kunming 650201, China)

(2. Institute of Medicinal Plants, Yunnan Academy of Agricultural Sciences, Kunming 650200, China)

(3. College of Resources and Environment, Yuxi Normal University, Yuxi 653100, China)

**Abstract:** Long term storage of wild edible mushrooms would cause microbial proliferation and physico-chemical changes, affecting the quality. In order to ensure the security and quality, it was essential to establish a quick and efficient method to identify wild edible mushrooms with different storage periods. Ultraviolet (UV) and fourier transform infrared (FT-IR) spectra of 77 fruit bodies of *B. tomentipes* (5 years of storage) were preprocessed by using Savitzky-Golay (SG) smoothing, second derivative (2-D) and standard normal variate (SNV), and UV, FT-IR, low-level and mid-level data fusion models were established with partial least squares discriminant analysis (PLS-DA). The results showed that the optimal pretreatment of UV and FT-IR spectra were SG+2-D and SG+2-D+SNV, respectively, and the classified individual errors were 10, 6, 4 and 3 in UV, FT-IR, low-level and mid-level data fusion models. The average of  $R^2_{cal}$  in mid-level data fusion model was closest to 1, and the average of RMSECV was minimum, which indicated that the effects of mid-level data fusion model were better than those of other three models. The UV and FT-IR mid-level data fusion strategy combined with PLS-DA could accurately identify the *B. tomentipes* with different storage periods, which provided a novel reference for quality evaluation of wild edible mushrooms.

**Key words:** data fusion; *Boletus tomentipes*; storage period; ultraviolet spectroscopy; fourier transform infrared spectroscopy

收稿日期: 2017-08-24

基金项目: 国家自然科学基金项目(31660591、21667031); 云南省教育厅科学研究基金项目(2016ZZX106); 云南省高校食用菌资源开发与利用重点实验室建设项目资助

作者简介: 张钰(1992-), 男, 在读硕士研究生, 研究方向: 牛肝菌光谱分析

通讯作者: 刘鸿高(1974-), 男, 博士, 教授, 研究方向: 食用菌资源评价改良及利用; 王元忠(1981-), 男, 在读博士研究生, 副研究员, 研究方向: 药用真菌研究

随着食品储藏时间增加,微生物增殖、物理及化学变化等因素,导致其商品品质发生改变<sup>[1]</sup>。野生食用菌生长受季节限制,为整年供应,销售商将采收后的野生食用菌进行加工处理(干燥、脱水等),限制微生物繁殖速度<sup>[2]</sup>。加工处理过程未对野生食用菌进行灭菌处理,储藏较长时间会引起其内部微生物大量繁殖,产生胺类、硫醇、硫化氢和吡啶等化合物,对人体健康造成危害<sup>[1,3]</sup>。挥发性物质是影响野生食用菌风味的关键<sup>[4]</sup>,储藏过程中受温度、光照等因素的影响,挥发性风味物质可能挥发或被氧化,从而影响野生食用菌口感<sup>[5,6]</sup>,使野生食用菌超过最佳食用期限。由此可见,研究不同储藏年限的野生食用菌干品差异对保证其品质具有重要意义。

紫外(UV)光谱与傅里叶变换红外(FT-IR)光谱技术具有准确度高、灵敏可靠和简便快速等特点,广泛应用于中草药和食品鉴别研究<sup>[7-10]</sup>。与单一仪器相比,多源光谱数据融合能够反映更多样品化学信息,更加全面解释样品属性,从不同的层面反映样品间差异<sup>[11]</sup>,可以提高样品分类准确率。Biancolillo等<sup>[12]</sup>采取中级数据融合策略将五种光谱融合,成功鉴别了不同地区的意大利啤酒,提高了样品分类准确率。Sun等<sup>[13]</sup>将近红外与中红外光谱进行数据融合,准确鉴别大黄的真伪品。Dankowska<sup>[14]</sup>将荧光光谱数据与UV数据融合,对可可脂掺假进行有效鉴别。数据融合对不同种类、不同产地和不同部位等方面研究较多,对不同储藏年限样品研究相对较少,因此本文对不同储藏年限绒柄牛肝菌进行研究。

中国有牛肝菌28属,397种,其中199种为可食用物种<sup>[15]</sup>。云南牛肝菌资源丰富,共有224种,可食用物种有144种,可食用牛肝菌种类占全国的72.36%<sup>[16]</sup>。绒柄牛肝菌(*Boletus tomentipes*)隶属于牛肝菌科(Boletaceae),又名毛脚牛肝菌、黑牛肝<sup>[2]</sup>。其子实体富含蛋白质、多糖、核苷类、三萜类等有机化合物,具有抗氧化损伤、抗肿瘤、免疫调节及抗炎作用<sup>[17-22]</sup>,其独特的风味和低糖、低盐、低脂肪等特点被誉为“天然营养健康的多功能食品”,受到越来越多消费者青睐<sup>[23]</sup>。

本研究采集5个储藏年限,77个绒柄牛肝菌子实体的UV与FT-IR光谱,将预处理后的数据进行偏最小二乘判别分析(Partial least squares discriminant analysis, PLS-DA),分别建立UV、FT-IR、低级数据融合与中级数据融合模型,比较四种模型分类正确率,确定最佳分类模型,建立快速鉴别不同储藏年限绒柄牛肝菌的方法,以期对野生食用菌的品质评价提供一种新思路。

## 1 实验部分

### 1.1 实验材料

不同储藏年限绒柄牛肝菌样品分别于2011、2012、2014、2015和2016年采集(表1),均由云南农业大学刘鸿高教授鉴定为绒柄牛肝菌(*Boletus tomentipes* Earle)。样品采集后去除杂质,清水洗净,50℃烘干至恒重。样品粉碎后,过60目筛,保存于自封袋中备用。

表1 不同储藏年限绒柄牛肝菌样品

Table 1 Samples of *Boletus tomentipes* with different storage periods

采集年份	储藏年限	产地	编号
2011	6	玉溪市峨山县	1-1~1-18
2012	5	玉溪市易门县	2-1~2-9
2012	5	玉溪市峨山县	2-10~2-16
2014	3	玉溪市新平县	3-1~3-10
2014	3	玉溪市峨山县	3-11~3-14
2015	2	玉溪市红塔区	4-1~4-19
2016	1	玉溪市江川县	5-1~5-10

### 1.2 仪器与试剂

UV-2550 紫外可见分光光度计(日本岛津公司)、傅里叶红外光谱仪(美国珀金埃尔默公司,配有DTGS检测器)、YP-2型压片机(上海市山岳科学仪器有限公司)、60目不锈钢筛盘(浙江上虞市道墟五四仪器厂)、SY3200-T超声波清洗仪(上海声源超声波仪器设备有限公司)、奥豪斯电子分析天平(梅特勒-托多仪器有限公司)、Milli-Q Academic纯水系统(美国密理博公司)、双圈定性滤纸(杭州沃华滤纸有限公司)、101A-1型电热鼓风恒温干燥箱(上海市崇明实验仪器厂)、氯化钾(分析纯;天津市风船化学试剂科技有限公司)、氯仿(分析纯;云南滇滇药业有限公司)。

### 1.3 紫外光谱的采集

准确称取0.07g样品于25mL试管中,加入8mL氯仿,超声提取30min后过滤得氯仿提取液。紫外光谱扫描范围230~600nm,采样间隔1.0nm,狭缝宽1.0nm。测定前空白氯仿溶液作为参比溶液与测试溶液进行基线校正。然后测定不同样品提取液UV光谱。

### 1.4 红外光谱信息采集

称取样品1.5±0.2mg,氯化钾100±2mg,置于玛瑙研钵中混合研磨成细粉,将细粉倒入模具中压成厚

度均匀的薄片。将仪器分辨率设置为  $4\text{ cm}^{-1}$ ，扫描范围  $4000\sim 400\text{ cm}^{-1}$ ，预热  $30\text{ min}$  后测定光谱，扫描前使用空白片去除背景中二氧化碳和水的干扰，样品重复测定 3 次，取平均光谱。

### 1.5 数据处理

采用 Omnic 8.2 软件对样品 FT-IR 光谱进行吸光度转换、纵坐标归一化、自动基线校正处理，SIMCA13.0<sup>+</sup> 软件对样品 FT-IR 和 UV 光谱进行卷积平滑 (Savitzky-Golay, SG)、标准正态变换 (Standard normal variate, SNV)、正交信号校正 (Orthogonal signal correction, OSC)、多元散射校正 (Multiplicative scatter correction, MSC)、一阶导数 (First-derivative, 1-D) 和二阶导数 (Second-derivative, 2-D) 处理，以及对实验数据进行 PLS-DA。Origin 8.0 软件绘制 UV、FT-IR 光谱图。

## 2 结果与讨论

### 2.1 不同储藏年限牛肝菌 UV 光谱分析

#### 2.1.1 绒柄牛肝菌 UV 光谱

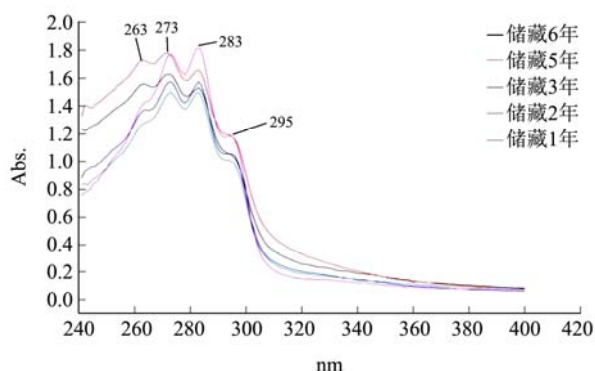


图 1 不同储藏年限绒柄牛肝菌平均紫外光谱

Fig.1 Average UV spectra of *B. tomentipes* with different storage periods

图 1 为 5 个储藏年限绒柄牛肝菌，在  $240\sim 400\text{ nm}$  波长范围的平均 UV 光谱图，在波长  $263$ 、 $273$ 、 $283$  与  $295\text{ nm}$  处有特征吸收峰，不同储藏年限样品的 UV 光谱峰形差异较大，储藏 1 年样品峰形不同于其它四类样品。储藏 2 年与 3 年、5 年与 6 年样品峰形相似，特征吸收峰的吸光度不同。储藏 5 年与 6 年样品的光谱在  $263\text{ nm}$  处的波峰比其它三类样品更明显。表明以氯仿为溶剂的样品提取液中低极性化合物含量可能存在差异。

#### 2.1.2 PLS-DA 分析

PLS-DA 是基于偏最小二乘回归的一种有监督的判别分类方法，利用自变量矩阵  $X$  和分类变量  $Y$  建立

回归模型。 $Q^2$  表示 PLS-DA 模型预测能力的累计百分比， $Q^2$  越大模型预测能力越好<sup>[24]</sup>， $R^2Y$  为主成分累积贡献率。不同方法处理样品原始光谱后，结合 PLS-DA 分析，比较预处理方法对分类的影响，选择最佳预处理方法。由 PLS-DA 模型可知，四个模型前 5 个主成分的  $Q^2$  均为最大值，通过比较不同预处理方法的 PLS-DA 模型前 5 个主成分的  $Q^2$ 、 $R^2Y$  值 (表 2)，确定最佳预处理方法。SG+2-D 处理后前 5 个主成分  $Q^2$ 、 $R^2Y$  最大，分别为  $56.44\%$ 、 $68.22\%$ 。表明选择 SG+2-D 对样品紫外光谱进行预处理，可以改善样品分类效果。

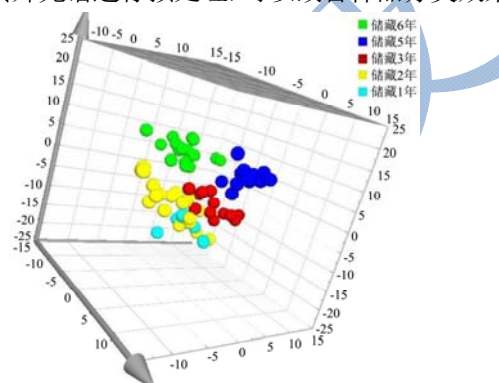


图 2 不同储藏年限绒柄牛肝菌紫外光谱 PLS-DA 得分图

Fig.2 PLS-DA score plot of *B. tomentipes* with different storage periods by UV

牛肝菌样品 UV 光谱经 SG+2-D 预处理后，进行 PLS-DA 分析，图 2 为 UV 光谱 PLS-DA 三维得分图，储藏年限为 1 年、2 年和 3 年的牛肝菌样品无法被区分，表明储藏年限较短样品 (1、2 和 3 年) 相似度较高，其低极性化合物含量可能变化较小。储藏年限较长 (5 和 6 年) 与较短的样品基本能区分，表明随着储藏年限的增加，其低极性化合物含量可能变化较大。

表 2 不同方法预处理紫外光谱后 PLS-DA 模型  $Q^2$  值和  $R^2Y$

Table 2  $Q^2$  and  $R^2Y$  of PLS-DA models of UV spectra with different pretreatment

预处理方法	前 5 个主成分 $Q^2$ 值/%	$R^2Y$ /%
SG	41.19	49.48
SG + SNV	42.82	52.13
SG + 1-D	50.21	61.21
SG + 2-D	56.44	68.22

### 2.2 不同年份绒柄牛肝菌 FT-IR 光谱分析

#### 2.2.1 FT-IR 光谱分析

图 3 为不同储藏年限绒柄牛肝菌的平均 FT-IR 光谱。由图可知，不同储藏年限样品 FT-IR 光谱在  $3353$ 、 $2931$ 、 $1646$ 、 $1545$ 、 $1384$ 、 $1079\text{ cm}^{-1}$  等附近有明显特征吸收峰， $3353\text{ cm}^{-1}$  附近主要为 O-H 与 N-H 伸缩振动吸收峰； $2931\text{ cm}^{-1}$  附近为亚甲基 C-H 反对称的伸缩



振动吸收峰; 1646  $\text{cm}^{-1}$  附近主要为蛋白质酰胺 I 带的 C-O 伸缩振动吸收峰; 1545  $\text{cm}^{-1}$  附近主要为蛋白质酰胺 II 带的 C-O 伸缩振动; 1384  $\text{cm}^{-1}$  附近为亚甲基的弯曲振动; 1079~1031  $\text{cm}^{-1}$  吸收峰为 C-O 和 C-C 伸缩振动<sup>[25]</sup>。以上特征吸收峰反映牛肝菌样品糖类、蛋白质、氨基酸和维生素等化合物<sup>[26]</sup>, 其特征峰的吸收强度和位置的差异, 表明样品间这些物质含量可能存在差异。

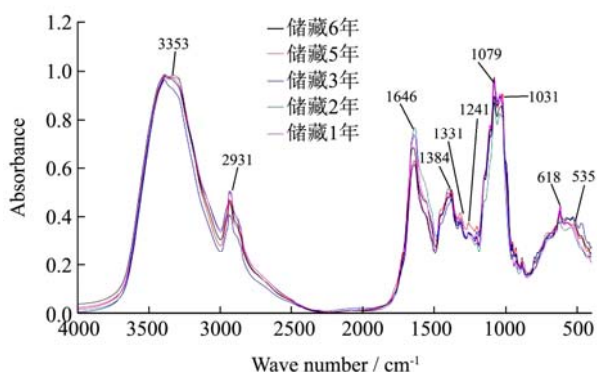


图3 不同储藏年限绒柄牛肝菌的平均红外光谱

Fig.3 Average FT-IR spectra of *B. tomentipes* samples with different storage periods

### 2.2.2 PLS-DA 分析

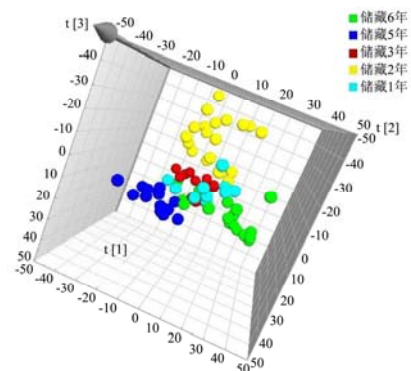


图4 绒柄牛肝菌红外光谱 PLS-DA 得分图

Fig.4 PLS-DA score plot of *B. tomentipes* samples by FT-IR

受仪器噪音、实验环境、样品差异等因素干扰, 原始光谱中包含大量无关信息。采用基线校正、纵坐标归一化、MSC、SNV 和 2-D 对原始光谱进行预处理, 能有效的减少噪音的干扰, 减小基线漂移对模型的影响, 放大和区分重叠谱带的化学信息<sup>[27]</sup>。将预处理后的光谱数据导入 SIMCA-P<sup>+</sup>13.0 软件定性识别, 比较不同预处理方法的分类效果, 选择最佳预处理方法。表 3 为不同方法预处理红外光谱后 PLS-DA 模型  $Q^2$  最大值, 及其对应  $R^2Y$  值。经 SG+1-D 预处理后 PLS-DA 模型前 11 个主成分  $Q^2$  最大, 为 67.87%,  $R^2Y$  为 87.93%。1-D+SNV 预处理后 PLS-DA 模型前 15 个主成分  $Q^2$  最大, 为 71.21%,  $R^2Y$  为 92.94%。

SG+2-D+MSC 预处理后 PLS-DA 模型前 13 个主成分  $Q^2$  最大, 为 77.42%,  $R^2Y$  为 93.98%。SG+2-D+SNV 预处理后 PLS-DA 模型前 13 个主成分  $Q^2$  最大, 为 77.44%,  $R^2Y$  为 94.02%。SG+2-D+SNV 预处理后  $Q^2$  与  $R^2Y$  值均大于其它方法, 表明 SG+2-D+SNV 为最佳光谱预处理方法。

对牛肝菌样品光谱进行 SG + 2-D + SNV 处理后, 进行 PLS-DA 分析, 图 4 为 77 个牛肝菌样品 PLS-DA 得分图, 储藏年限 2 年、5 年和 6 年样品能很好的区分开, 储藏年限 1 年与 3 年样品不能很好的聚为一类。难以区分不同储藏年限牛肝菌样品。

表 3 不同方法预处理红外光谱后 PLS-DA 模型  $Q^2$  最大值

Table 3  $Q^2$  and  $R^2Y$  of PLS-DA models of FT-IR spectra with different pretreatment

预处理方法	$Q^2$ 最大值	$R^2Y$
SG + 1-D	67.87%	87.93%
1-D + SNV	71.21%	92.94%
SG + 2-D + MSC	77.42%	93.98%
SG + 2-D + SNV	77.44%	94.02%

### 2.3 数据融合分析

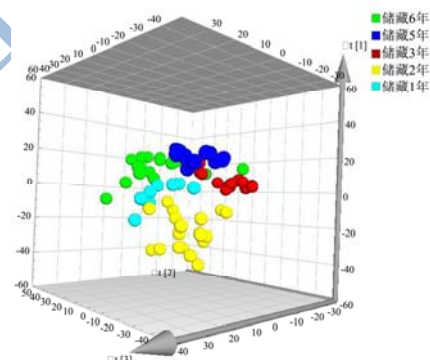


图5 绒柄牛肝菌低级数据融合 PLS-DA 得分图

Fig.5 PLS-DA score plot of *B. tomentipes* by low-level data fusion

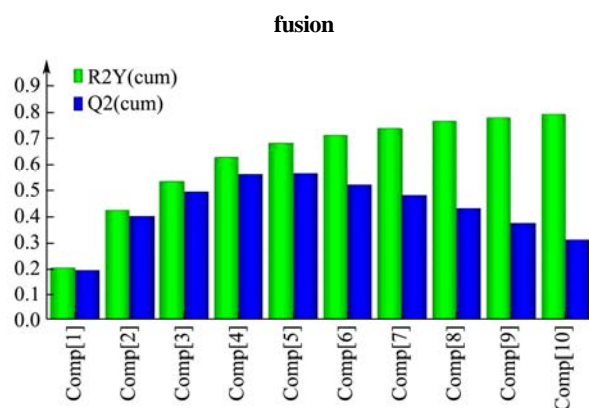


图6 紫外光谱 PLS-DA  $R^2Y$ 、 $Q^2$  累积图

Fig.6  $R^2Y$  and  $Q^2$  plot of PLS-DA of UV spectra

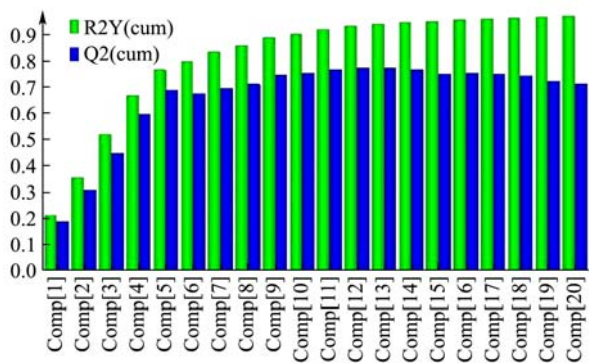


图7 红外光谱 PLS-DA  $R^2Y$ 、 $Q^2$  累积图

Fig.7  $R^2Y$  and  $Q^2$  plot of PLS-DA of FT-IR spectra

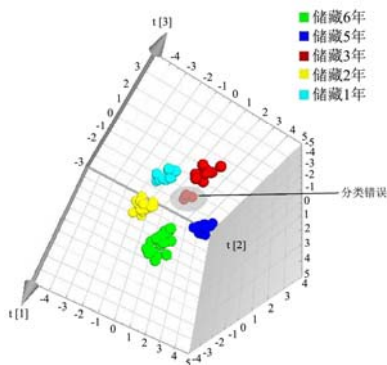


图8 绒柄牛肝菌中级数据融合后 PLS-DA 得分图

Fig.8 PLS-DA score plot of *B. tomentipes* by mid-level data fusion

低级数据融合，将预处理后的 UV 与 FT-IR 数据归一化后直接串联，得到一个新的数据矩阵，建立 PLS-DA 模型进行鉴别分析。图 5 为 77 个样品主成分三维得分图，由图可知储藏 5 年部分样品与 1 年样品混在一起，较难区分开，其它几个储藏年限样品均很好的聚为一类。

中级数据融合前对多源光谱数据进行 PLS-DA 降维，挖掘出与牛肝菌储藏年限差异有关的信息。在预处理的基础上，对原始数据中利于分类的特征变量进行挖掘，将筛选的两组数据进行连接，得到新的数据矩阵，建立 PLS-DA 模型。从 UV 与 FT-IR 的  $R^2Y$ 、 $Q^2$  累积图(图 6、7)可知，UV 与 FT-IR 模型前 5 个与前 13 个主成分  $Q^2$  最大，模型的预测能力最好，提取模型前 5 个与前 13 个主成分为特征变量。将提取的特征变量进行融合建立 PLS-DA 模型。

图 8 为中级数据融合后的 PLS-DA 三维得分图，五个储藏年限样品可被明显区分，且同一储藏年限的样品聚类效果好，每一类样品均聚类集中，仅储藏年限 3 年的 3-11、3-12、3-13 样品不能与同一储藏年限样品聚为一类。相较于 UV、FT-IR 和低级数据融合策略，中级数据融合策略对不同储藏年限样品的分类效

果最好，能将相似度较高的样品进行区分，可以用于不同储藏年限的绒柄牛肝菌的鉴别。

### 2.3.1 不同模型分类结果比较分析

随机选择 1-1~1-4、2-13~2-16、3-3~3-4、3-11~3-13、4-6~4-9、4-16~4-18、5-4~5-6，23 个样品作为预测集，其余 54 个样品为训练集，采用 UV、FT-IR、低级数据融合和中级数据融合策略，分别建立 PLS-DA 模型。当训练集与预测集的预测值在 0.5~1.5 范围，样品分类正确，预测值越接近于 1，分类效果越好，小于 0.5 或大于 1.5 的样品分类错误<sup>[28]</sup>，不同类型模型的预测结果见表 4，中级数据融合策略样品错判数最少，仅 3 个分类错误。

单独采用 UV 建立分类判别模型效果最差，10 个样品分类错误，通过比较四种模型，中级数据融合策略分类效果最佳，训练集、预测集和样品的分类准确率均最高。

评价 PLS-DA 模型训练集常用的参数有  $R^2_{cal}$ 、RMSECV。当内部验证决定系数 (Internal validation determines the coefficients,  $R^2_{cal}$ ) 越接近于 1，内部交叉验证均方根误差 (Root mean squares error of cross-validation, RMSECV) 越小，训练集的模型预测能力越好<sup>[29]</sup>。

从表 5 可知，五个储藏年限样品  $R^2_{cal}$ 、RMSECV 平均值中，中级数据融合的  $R^2_{cal}$  平均值最接近于 1、且 RMSECV 平均值最小；只采用紫外光谱进行鉴别时， $R^2_{cal}$  平均值最小，RMSECV 最大。综上表明，采用中级数据融合策略能区分相似度较高的样品，分类效果最佳。

通过利用 UV、FT-IR、低级数据融合和中级数据融合模型，对不同储藏年限绒柄牛肝菌进行鉴别，结果显示不同模型分类准确率，中级数据融合>低级数据融合>FT-IR>UV，数据融合策略优于采用一种光谱分类效果，这与 Anibal C V D<sup>[30]</sup>等、Márquez C<sup>[31]</sup>等掺假鉴别研究相似。

低级数据融合模型受无关信息影响，降低模型性能<sup>[32]</sup>，中级数据融合对原始数据中利于分类的特征变量进行挖掘，中级数据融合分类效果优于低级数据融合。因此中级数据融合也可以用于不同储藏年限样品的鉴别；UV、FT-IR、低级数据融合 PLS-DA 模型，储藏年限较短的几类样品混在一起，不易区分。与周琼琼<sup>[33]</sup>等、Ning J M<sup>[34]</sup>等对茶储藏年限研究结果相似，储藏年限较短的样品中内含物质含量无显著变化。随储藏年限增加，样品内蛋白质、可溶性糖等内含物质含量可能减少。

表 4 不同模型的预测结果

Table 4 Forecasting results of different models

模型类型	训练集正确识别率/%	预测集正确识别率/%	错判数
UV	92.59	73.91	10
FT-IR	98.15	78.26	6
低级数据融合	98.15	86.36	4
中级数据融合	100	86.36	3

表 5 不同模型的  $R^2_{cal}$  和 RMSECVTable 5  $R^2_{cal}$  and RMSECV of different models

年份	UV		FT-IR		低级数据融合		中级数据融合	
	$R^2_{cal}$	RMSECV	$R^2_{cal}$	RMSECV	$R^2_{cal}$	RMSECV	$R^2_{cal}$	RMSECV
2011	0.85	0.20	0.87	0.28	0.90	0.26	0.95	0.21
2012	0.87	0.19	0.88	0.24	0.91	0.22	0.96	0.20
2014	0.67	0.27	0.85	0.22	0.87	0.25	0.90	0.20
2015	0.57	0.33	0.90	0.27	0.91	0.26	0.87	0.23
2016	0.48	0.27	0.79	0.22	0.84	0.20	0.87	0.16
平均值	0.69	0.25	0.86	0.25	0.89	0.24	0.91	0.20

### 3 结论

采用 FT-IR 和 UV 光谱法, 测定 5 个不同储藏年限绒柄牛肝菌的 FT-IR 和 UV 光谱, 运用 SG、1-D、2-D、OSC、MSC、SNV 预处理方法对原始光谱进行优化处理, 结果显示 SG+2-D+SNV 和 SG+2-D 分别为 FT-IR 和 UV 光谱的最优预处理, UV、FT-IR、低级和中级数据融合 PLS-DA 模型, 总样品分类错误数分别为 10、6、4、3, 中级数据融合 > 低级数据融合 > FT-IR > UV, 中级数据融合显示出更高的分类正确率。说明数据融合策略利用不同来源数据的互补性, 增加样品化学信息, 从不同的层面反映牛肝菌个体差异, 相较于单一仪器数据融合显示出更高分类正确率。中级数据融合对原始数据中分类有关信息进行挖掘, 相较于低级数据融合分类效果更好。中级数据融合策略结合 PLS-DA 为不同储藏年限绒柄牛肝菌的鉴别分析提供了方法, 同时为其品质保证提供了新思路。

### 参考文献

- [1] Schnürer J, Olsson J, Börjesson T. Fungal volatiles as indicators of food and feeds spoilage [J]. *Fungal Genetics and Biology*, 1999, 27(2-3): 209-217
- [2] 陈杰, 徐冲. 食用菌加工产业研究现状与前景[J]. *微生物学杂志*, 2013, 33(3): 94-96  
CHEN Jie, XU Chong. Status quo and prospects of edible fungi processing industry [J]. *Journal of Microbiology*, 2013, 33(3): 94-96
- [3] Atkinson R, Arey J. Gas-phase tropospheric chemistry of

- biogenic volatile organic compounds: a review [J]. *Atmospheric Environment*, 2003, 37(1): 197-219
- [4] 廖劲松, 张水华. 食品风味物质的分离研究进展与应用[J]. *食品工业科技*, 2003, 24(8): 106-108  
LIAO Jin-song, ZHANG Shui-hua. Progress and application of separation of flavor compounds in food [J]. *Science and Technology of Food Industry*, 2003, 24(8): 106-108
- [5] Shahidi. 肉制品与水产品的风味[M]. 北京: 中国轻工业出版社, 2001  
Shahidi. Flavor of meat, meat products and seafoods [M]. Beijing: China Light Industry Press, 2001
- [6] Pinho P G, Ribeiro B, Gonçalves R F, et al. Correlation between the pattern volatiles and the overall aroma of wild edible mushrooms [J]. *Journal of Agricultural and Food Chemistry*, 2008, 56(5): 1704-1712
- [7] Bassabi M, Luca M D, Ioele G, et al. Prediction of the geographical origin of butters by partial least square discriminant analysis (PLS-DA) applied to infrared spectroscopy (FT-IR) data [J]. *Journal of Food Composition & Analysis*, 2014, 33(2): 210-215
- [8] Li Y, Zhang J, Zhao Y, et al. Exploring geographical differentiation of the hoelen medicinal mushroom, *Wolfiporia extensa* (Agaricomycetes), using fourier-transform infrared spectroscopy combined with multivariate analysis [J]. *International Journal of Medicinal Mushrooms*, 2016, 18(8): 721
- [9] 杨天伟, 李涛, 李杰庆, 等. 不同年份和产地美味牛肝菌的红外光谱鉴别研究[J]. *光谱学与光谱分析*, 2016, 36(7):



- 2117-2123  
YANG Tian-wei, LI Tao, LI Jie-qing, et al. Study on the discrimination of *Boletus Edulis* from different years and origins with FT-IR [J]. Spectroscopy and Spectral Analysis, 2016, 36(7): 2117-2123
- [10] Yang Y, Liu X, Li W, et al. Rapid measurement of epimedinin A, epimedinin B, epimedinin C, icariin, and moisture in *Herba Epimedii* using near infrared spectroscopy [J]. Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy, 2017, 171: 351-360
- [11] Qin O, Zhao J, Chen Q. Instrumental intelligent test of food sensory quality as mimic of human panel test combining multiple cross-perception sensors and data fusion [J]. Analytica Chimica Acta, 2014, 841(23): 68-76
- [12] Biancolillo A, Bucci R, Marini F. Data-fusion for multiplatform characterization of an Italian craft beer aimed at its authentication [J]. Analytica Chimica Acta, 2014, 820: 23-31
- [13] Sun W, Xin Z, Zhang Z, et al. Data fusion of near-infrared and mid-infrared spectra for identification of rhubarb [J]. Spectrochimica Acta Part A Molecular & Biomolecular Spectroscopy, 2017, 171: 72-79
- [14] Dankowska A. Data fusion of fluorescence and UV spectroscopies improves the detection of cocoa butter adulteration [J]. European Journal of Lipid Science and Technology, 2017
- [15] 卯晓岚.中国大型真菌[M].郑州:河南科学技术出版社,2000  
MAO Xiao-lan. The Macrofungi in China [M]. Zhengzhou: Henan Science and Technology Press, 2000
- [16] 李泰辉,宋斌.中国食用牛肝菌的种类及其分布[J].食用菌学报,2002,9(2):22-30  
LI Tai-hui, SONG Bin. Species and distributions of Chinese edible boletes [J]. Acta Edulis Fungi, 2002, 9(2): 22-30
- [17] Kong F L, Zhang M W, Kuang R B, et al. Antioxidant activities of different fractions of polysaccharide purified from pulp tissue of litchi (*Litchi chinensis* Sonn.)[J]. Carbohydrate Polymers, 2010, 81(3): 612-616
- [18] Li X M, Ma Y L, Liu X J. Effect of the *Lycium barbarum* polysaccharides on age-related oxidative stress in aged mice [J]. Journal of Ethnopharmacology, 2007, 111(3): 504-511
- [19] Lin C L, Wang C C, Chang S C, et al. Antioxidative activity of polysaccharide fractions isolated from *Lycium barbarum* Linnaeus [J]. International Journal of Biological Macromolecules, 2009, 45(2): 146-151
- [20] Wang C C, Chang S C, Inbaraj B S, et al. Isolation of carotenoids, flavonoids and polysaccharides from *Lycium barbarum* L. and evaluation of antioxidant activity [J]. Food Chemistry, 2010, 120(1): 184-192
- [21] Sun Y X, Li T B, Liu J C. Structural characterization and hydroxyl radicals scavenging capacity of a polysaccharide from the fruiting bodies of *Auricularia polytricha* [J]. Carbohydrate Polymers, 2010, 80(2): 377-380
- [22] Chen R Z, Meng F L, Liu Z Q, et al. Antitumor activities of different fractions of polysaccharide purified from *Ornithogalum caudatum* Ait [J]. Carbohydrate Polymers, 2010, 80(3): 845-851
- [23] Pavel K. Chemical composition and nutritional value of European species of wild growing mushrooms: A review [J]. Food Chemistry, 2009, 113(1): 9-16
- [24] Sobek S, Tranvik L J, Prairie Y T, et al. Patterns and regulation of dissolved organic carbon: An analysis of 7,500 widely distributed lakes [J]. Limnology and Oceanography, 2007, 52(3): 1208-1219
- [25] 孙素琴.中药红外光谱分析与鉴定[M].北京:化学工业出版社,2010  
SUN Su-qin. Analysis of traditional chinese medicine by infrared spectroscopy [M]. Beijing: Chemical Industry Press, 2010
- [26] Zervakis G I, Bekiaris G, Tarantilis P A, et al. Rapid strain classification and taxa delimitation within the edible mushroom genus *pleurotus* through the use of diffuse reflectance infrared fourier transform (DRIFT) spectroscopy [J]. Fungal Biology, 2012, 116(6): 715-728
- [27] Jaiswal P, Jha S N, Borah A, et al. Detection and quantification of soymilk in cow-buffalo milk using attenuated total reflectance fourier transform infrared spectroscopy (ATR-FT-IR) [J]. Food Chemistry, 2015, 168: 41-47
- [28] Blanco M, Cueva-Mestanza R, Peguero A. NIR analysis of pharmaceutical samples without reference data: Improving the calibration [J]. Talanta, 2011, 85(4): 2218-2225
- [29] De Bleye C, Chavez P F, Mantanus J, et al. Critical review of near-infrared spectroscopic methods validations in pharmaceutical applications [J]. Journal of Pharmaceutical and Biomedical Analysis, 2012, 69: 125-132
- [30] Di Anibal C V, Callao M P, Ruisánchez I. 1 H NMR and UV-visible data fusion for determining Sudan dyes in culinary spices [J]. Talanta, 2011, 84(3): 829-833
- [31] Márquez C, López M I, Ruisánchez I, et al. FT-Raman and NIR spectroscopy data fusion strategy for multivariate

- qualitative analysis of food fraud [J]. *Talanta*, 2016, 161: 80-86
- [32] 李明达,郑浩然.一种面向组学数据的中级融合分类方法[J].*北京生物医学工程*,2016,35(3):249-253  
LI Ming-da, ZHENG Hao-ran. Amid-level fusion method for omics dataset [J]. *Beijing Biomedical Engineering*, 2016, 35(3): 249-253
- [33] 周琼琼,孙威江,叶艳,等.不同年份白茶的主要生化成分分析[J].*食品工业科技*,2014,35(9):351-354  
ZHOU Qiong-qiong, SUN Wei-jiang, YE Yan, et al. Study on the main biochemical components of white tea stored at different years [J]. *Science and Technology of Food Industry*, 2014, 35(9): 351-354
- [34] Ning J M, Ding D, Song Y S, et al. Chemical constituents analysis of white tea of different qualities and different storage times [J]. *European Food Research and Technology*, 2016, 242(12): 2093-2104

现代食品科技