

<https://doi.org/10.21603/2074-9414-2025-4-2602>  
<https://elibrary.ru/WMZZOJ>

Обзорная статья  
<https://fptt.ru>

## Применение хемометрики в аналитике пищевых систем



А. Б. Лисицын<sup>ID</sup>, И. М. Чернуха<sup>\*ID</sup>,  
М. А. Никитина<sup>ID</sup>, В. А. Пчелкина<sup>ID</sup>

Федеральный научный центр пищевых систем имени В. М. Горбатова, Москва, Россия

Поступила в редакцию: 23.05.2025

Принята после рецензирования: 09.07.2025

Принята к публикации: 05.08.2025

\*e-mail: imcher@inbox.ru  
© А. Б. Лисицын, И. М. Чернуха, М. А. Никитина,  
В. А. Пчелкина, 2025



### Аннотация.

Пищевой продукт – это сложная пищевая система, оценка качества которой требует целостного подхода. Хемометрика позволяет получить важную информацию при анализе пищевых продуктов. Цель исследования – показать перспективы применения хемометрических методов в обработке экспериментальных данных в пищевых системах.

Объектами исследования являлись научные публикации отечественных и зарубежных ученых. Поиск научных источников осуществляли в базах данных Scopus, PubMed, MEDLINE, Web of Knowledge, Google Scholar, IEEE Xplore, Science Direct, eLIBRARY.RU (РИНЦ). Поисковые запросы включали следующие ключевые слова и словосочетания: хемометрика (chemometrics); хемометрические методы (chemometric methods); метод главных компонент (principal component analysis); PLS (projection on latent structures); искусственная нейронная сеть, ИНС (artificial neural network, ANN); многомерная классификация (multivariate classification); многомерный анализ данных (multivariate data analysis).

Рассмотрены основные инструменты хемометрики, используемые при анализе пищевых систем: иерархический кластерный анализ (HCA), метод главных компонент (PCA), дискриминантный анализ с помощью регрессии на латентные структуры (PLS-DA), методы проекции на латентные структуры (PLS), квадратичная проекция на латентные структуры PLS (QPLS), множественная линейная регрессия (MLR), искусственная нейронная сеть (ANN), метод опорных векторов (SVM), классификация по  $k$ -ближайшим соседям (KNN), методы ансамблей (RF, XGBoost). Из всего разнообразия хемометрических методов наиболее востребованным является PCA. Анализ научных публикаций показал, что для каждого вида пищевой продукции лучше использовать не один метод, а их сочетание. Методы классификации в каждом отдельном случае показывают разные результаты.

Исследования показали, что наиболее оптимально применять хемометрические методы не по отдельности, а в совокупности, например PCA + PLS-DA + ANN или PCA + PLS-DA + KNN. Сочетание инструментальных и хемометрических методов не только улучшает точность анализов, но и трансформирует подходы к управлению качеством для обеспечения устойчивого производства в пищевой промышленности.

**Ключевые слова.** Хемометрика, пищевые продукты, метод главных компонент, проекция на латентные структуры, классификация, регрессия

**Финансирование.** Статья подготовлена в рамках выполнения темы НИР № FGUS-2024-0002 государственного задания ФГБНУ «ФНЦ пищевых систем имени В. М. Горбатова» РАН.

**Для цитирования:** Лисицын А. Б., Чернуха И. М., Никитина М. А., Пчелкина В. А. Применение хемометрики в аналитике пищевых систем. Техника и технология пищевых производств. 2025. Т. 55. № 4. С. 723–743. <https://doi.org/10.21603/2074-9414-2025-4-2602>

## Chemometrics in Laboratory Data Analysis



Andrey B. Lisitsyn<sup>ID</sup>, Irina M. Chernukha<sup>\*</sup><sup>ID</sup>,  
Marina A. Nikitina<sup>ID</sup>, Viktoriya A. Pchelkina<sup>ID</sup>

V.M. Gorbatov Federal Research Center for Food Systems, Moscow, Russia

Received: 23.05.2025

\*e-mail: imcher@inbox.ru

Revised: 09.07.2025

© A.B. Lisitsyn, I.M. Chernukha, M.A. Nikitina, V.A. Pchelkina, 2025

Accepted: 05.08.2025



### Abstract.

Food is a complex system that requires holistic quality assessment. Chemometrics uses mathematical, statistical, and computer science methods to analyze and interpret chemical data, which means good prospects for food quality evaluation.

This review covered Russian and international publications indexed in Scopus, PubMed, MEDLINE, Web of Knowledge, Google Scholar, IEEE Xplore, Science Direct, and eLIBRARY.RU (RSCI). The search queries included such keywords as chemometrics; chemometric methods; principal component analysis; PLS (projection to latent structures); artificial neural network (ANN); multivariate classification; multivariate data analysis.

The main chemometric tools applied to food systems included hierarchical cluster analysis (HCA), principal component analysis (PCA), latent structures-discriminant analysis (PLS-DA), projections to latent structures (PLS), quadratic projection to latent structures (QPLS), multiple linear regression (MLR), artificial neural network (ANN), support vector machine (SVM),  $k$ -nearest neighbors (KNN), and ensemble model prediction (RF, XGBoost). The PCA proved to be the most popular chemometric method applied in the food industry. However, combinations of methods were always more effective than a single one. The KNN methods appeared to be quite unreliable.

Combinations of chemometric methods demonstrate the best prospects, e.g., PCA + PLS-DA + ANN or PCA + PLS-DA + KNN. If combined with instrumental tools, they are able to improve analytical accuracy and provide effective management approaches, thus ensuring sustainable food industry.

**Keywords.** Chemometrics, food, principal component analysis, projections to latent structures, classification, regression

**Funding.** The research was part of State Assignment No. FGUS-2024-0002 to the Federal Research Center for Food Systems, Russian Academy of Sciences.

**For citation:** Lisitsyn AB, Chernukha IM, Nikitina MA, Pchelkina VA. Chemometrics in Laboratory Data Analysis. Food Processing: Techniques and Technology. 2025;55(4):723–743. (In Russ.) <https://doi.org/10.21603/2074-9414-2025-4-2602>

### Введение

Термин “кеметри” введен Сванте Вольдом в 1971 г. при подаче заявки на грант. Впервые этот термин использовался в его статье, опубликованной в журнале “Kemisk Tidskrift” в 1972 г. на шведском языке и посвященной кубическим сплайнам [1].

Сотрудничество С. Вольда с Б. Ковальски способствовало появлению понятия “chemometrics” в английском языке. В 1975 г. они создали Международное общество хемометрики.

В своих воспоминаниях [2] С. Вольд отмечает: «Искусство извлечения химически значимой информации из данных, полученных в химических экспериментах, получило название «хемометрика» по аналогии с биометрией, эконометрикой и т. д. Хемометрика, как и другие метрики, в значительной степени зависит от использования различных видов математических моделей (модели высокой информации, модели

ad hoc и модели аналогии). Эта задача требует знания статистики, численного анализа, анализа операций и т. д., а в целом – прикладной математики. Однако, как и во всех прикладных отраслях науки, сложные и интересные проблемы определяются приложениями; в хемометрике основной вопрос заключается в структурировании химической проблемы в форме, которую можно выразить как математическое отношение. Связанные математические проблемы довольно просты, как это обычно бывает со статистическими задачами. Поэтому хемометрику нельзя отделять от химии или позволять ей становиться отдельной отраслью химии; она должна оставаться неотъемлемой частью всех областей химии».

Наиболее известными публикациями С. Вольда являются “Principal component analysis” (1987 г.) [3]; “PLS-regression: A basic tool of chemometrics” (2001 г.) [4]; “Cross-validatory estimation of the number of components

in factor and principal components models” (1978 г.) [5]. Лучшая работа Б. Ковальски в соавторстве с П. Гелади – “Partial least-squares regression: A tutorial” (1986 г.) [6].

Хемометрика обрела популярность после конференции по хемометрике, математике и статистике в химии, которую организовал институт передовых исследований НАТО 12–13 сентября 1983 г. в г. Козенца, Италия [7]. После этого начали проводить конференции, издавать журналы (*Journal of Chemometrics; Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*), выпускать пакеты прикладных программ и книги. В Европе несколько исследовательских групп, в основном в области аналитической химии, занялись хемометрикой, а Д. Л. Массарт и его коллеги создали один из самых ранних всеобъемлющих учебников “*Chemometrics: A textbook*” (1988 г.).

Определение «хемометрики» Д. Л. Массарта остается актуальным: «Хемометрика – это химическая дисциплина, которая использует математику, статистику и формальную логику (а) для проектирования или выбора оптимальных экспериментальных процедур; (б) для предоставления максимально релевантной химической информации путем анализа химических данных; и (с) для получения знаний о химических системах» [8].

В России А. Л. Померанцев и О. Е. Родионова были основоположниками Русского хемометрического общества. Первую зимнюю школу-конференцию по хемометрике провели в Костроме 11–15 февраля 2002 г. Обзорные статьи об основных достижениях в области хемометрики опубликованы А. Л. Померанцевым и О. Е. Родионовой в 2006 г. [9, 10].

Хемометрика прошла путь от узкого раздела аналитической химии до междисциплинарной науки,

применяемой в биологии, медицине, пищевой промышленности и экологии. Современные тенденции развития хемометрики, связанные с интеграцией машинного обучения и искусственного интеллекта, открывают новые горизонты для исследований и практического применения.

Peris-Díaz и Krężel [11] с помощью искусственного интеллекта построили топологическую сеть используемых методов хемометрики в научных публикациях с 2018 г. (рис. 1). Сформировано три основных кластера (желтый, фиолетовый и зеленый цвет на рис. 1). Размер меток масштабируется в соответствии с частотой появления метода и термина в анализируемых публикациях.

В хемометрике чаще всего используют следующие методы: главные компоненты (PCA); проекция на латентные структуры (PLS); дискриминантный анализ с помощью регрессии на латентные структуры (PLS-DA); квадратичный PLS (QPLS); искусственная нейронная сеть (ANN); классификация по *k*-ближайшим соседям (KNN) и т. д.

Цель исследования – показать перспективы применения данных методов в обработке экспериментальных данных в пищевых системах.

### Объекты и методы исследования

Проведен поиск и комплексный системный анализ публикаций по ключевым словосочетаниям: хемометрика (*chemometrics*); хемометрические методы (*chemometric methods*); метод главных компонент (*principal component analysis*); PLS (*projection on latent structures*); искусственная нейронная сеть, ИНС (*artificial neural network, ANN*); многомерная классификация (*multivariate classification*), многомерный анализ данных (*multivariate data analysis*) в базах данных

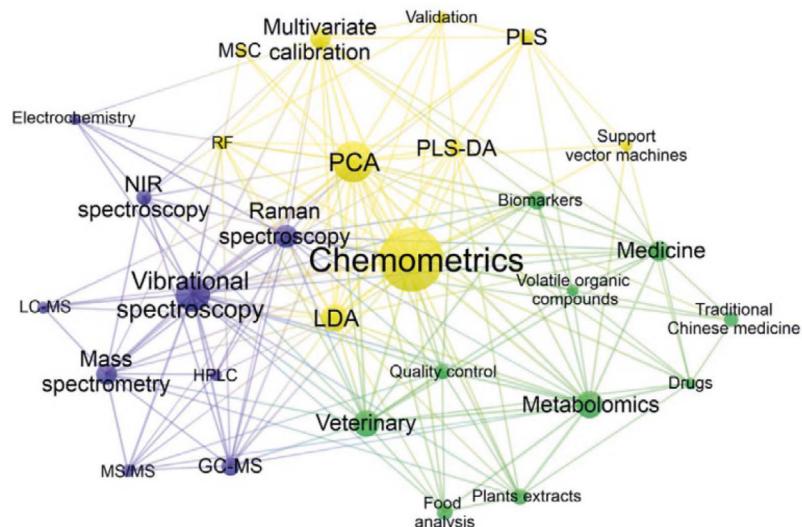


Рисунок 1. Топологическая карта взаимосвязи хемометрических методов (желтый), аналитических методов (фиолетовый) и областей применения (зеленый) [11]

Figure 1. Correlation map: chemometric methods (yellow), analytical methods (purple), and application areas (green) [11]

Scopus, PubMed, MEDLINE, Web of Knowledge, Google Scholar, IEEE Xplore, Science Direct, eLIBRARY.RU (РИНЦ) за период 2000–2025 гг.

Найденные публикации (статьи, книги, монографии, очерки) предварительно проанализировали по аннотации и ключевым словам. В качестве критериев включения выбраны:

- научные исследования о хемометрике, методах и алгоритмах реализации;
- публикации об исследовании данных, задачах классификации и дискриминации, моделирования и прогнозирования;
- условия применения в пищевых системах;
- ограничения применения;
- публикации преимущественно на русском и английском языках.

Критерий исключения – научные публикации, не связанные с пищевыми системами.

За последние 24 года количество публикаций с использованием хемометрических методов возросло приблизительно в 18 раз. Так, в 2001 г. было всего 109 публикаций, а в 2024 г. – 2005.

В результате поиска литературы получено 3 517 аннотаций и статей. На первом этапе провели анализ наименования анализируемых статей. Часть публикаций исключили ввиду несоответствия критериям включения. 198 ссылок признали потенциально подходящими. Далее проанализировали рефераты работ, осуществили второе исключение. После анализа статей и аннотаций оставшиеся 104 статьи включили в обзор. Из каждой публикации отобрали следующую информацию: автор(ы), год публикации, страна, цель и методика исследования, полученные результаты. Детальный анализ каждой включенной в обзор публикации проводили на основе конкретных элементов исследовательских вопросов и цели обзора. Одновременно был осуществлен ручной поиск ссылок на связанные статьи, чтобы не пропустить значимые публикации.

## Результаты и их обсуждение

Хемометрика объединяет статистические, математические и алгоритмические методы для анализа экспериментальных данных, в том числе результатов химических анализов. Основные методы включают:

- PCA (метод главных компонент, principal component analysis) используется для снижения размерности, визуализации кластеров;
- PLS (методы проекции на латентные структуры, partial least squares) и PLS-DA (PLS discriminant analysis, дискриминантный анализ с помощью регрессии на латентные структуры) применяют для построения регрессии и классификации при мультиколлинеарности данных;
- кластерный анализ (HCA, k-means) – группировка объектов по схожести;
- MLR (multiple linear regression) – калибровочные модели для количественного анализа;

– SVM (метод опорных векторов, support vector machine) и ANN (искусственная нейронная сеть, artificial neural networks) – нелинейная классификация и регрессия;

– методы ансамблей (random forest (RF), XGBoost) – прогнозирование сложных зависимостей.

Дополнительно к хемометрическим методам применяют инструментальные методы анализа:

- спектроскопия (ИК, УФ-видимая, Рамановская, ЯМР);
- хроматография (ГХ, ЖХ) и электрофорез;
- масс-спектрометрия (GC-MS, LC-MS);
- электрохимические методы (вольтамперометрия, потенциометрия);
- сенсоры и мультисенсорные системы.

Сводная информация представлена в таблице 1. Наибольшее внимание было уделено публикациям с использованием хемометрических и инструментальных методов в пищевой промышленности и животноводстве.

Примеры включают контроль качества, безопасность продукции и оптимизацию процессов.

На основании анализа отобранных статей составили топологическую карту взаимосвязи хемометрических методов (красный цвет), инструментальных методов (зеленый цвет) и направлений исследования (голубой цвет), представленную на рисунке 2.

Сформировано 5 направлений исследования. Наибольшее внимание в научных публикациях уделяется оценке качества (42 % от общего числа рассмотренных публикаций), на втором месте – направление идентификации и классификации (26 %). Среди хемометрических методов популярны PLSR, PCA; среди инструментальных – Рамановская спектроскопия, ближняя инфракрасная спектроскопия (NIRS), гиперспектральная визуализация (HIS).

**Оценка качества (контроль качества).** Применение хемометрических и инструментальных методов для оценки и контроля качества пищевой продукции позволяет решить ряд задач: определение химического состава (жиры, белки, углеводы, влага, минералы); обнаружение примесей, загрязнителей (пестициды, тяжелые металлы, микотоксины); мониторинг технологических процессов (ферментация, термообработка, хранение).

Paula и Conti-Silva [12] проводили оценку текстуры экструдированных снеков. С использованием PCA оценили 11 коммерческих экструдированных снеков различной формы. Текстуру описывали дескрипторами: твердость, хрустящая корочка, липкость, ломкость, жевательная способность. Цилиндрические снеки оценивались по хрустящей корочке и ломкости; гранулированные снеки и снеки в форме ракушек – по жевательной способности, а кольцеобразные снеки – по клейкости и твердости. PCA сенсорных и инструментальных данных показал, что вклад в общую дисперсию PC1 и PC2 составлял 74,4 %, при этом PC1 = 48,5 %, PC2 = 25,9 %. Первая главная

Таблица 1. Взаимосвязи инструментальных методов с хемометрическими для решения задач исследования пищевых продуктов

Table 1. Combinations of instrumental and chemometric methods in food science

Методы анализа		Задачи
Инструментальные	Хемометрические	
ИК-спектроскопия (ближний и средний ИК-диапазон)	PCA (principal component analysis)	снижение размерности, визуализация классификация продуктов по происхождению (выявление фальсификации оливкового масла / смеси с дешевыми аналогами)
	PLS (partial least squares)	калибровка концентраций быстрый контроль качества на производственной линии (прогнозирование содержания жира, белка и влаги в молоке и сыре)
	SVM	классификация полимеров
Газовая хроматография-масс-спектрометрия (ГХ-МС)	Кластерный анализ (НСА)	кластеризация летучих соединений оптимизация рецептур для целевого вкуса (группировка ароматических профилей вина или кофе)
	PCA	идентификация метаболитов
	RF (random forest)	прогнозирование токсичности
	SVM (support vector machines)	обеспечение безопасности продукции (обнаружение пестицидов во фруктах и овощах)
Жидкостная хроматография (ЖХ)	MLR (multiple linear regression)	количественный анализ лекарств соответствие нормам маркировки (количественный анализ витаминов в соках и детском питании)
	PLS-DA	разделение фармацевтических форм
Электрохимия	ANNs	прогнозирование pH и ионной силы
	k-means	обнаружение аномалий в сигналах
Рамановская спектроскопия	PCA + кластерный анализ	диагностика биологических тканей
	ANN (искусственные нейронные сети)	контроль текстуры продукта (определение степени кристаллизации шоколада)
Масс-спектрометрия (LC-MS)	PLS-DA (PLS discriminant analysis)	мониторинг биобезопасности (идентификация патогенов (салмонелла, листерия) в мясе и яйцах)
УФ-видимая спектроскопия	PCA + k-means	классификация туш по свежести (оценка качества мяса по содержанию миоглобина)
Мультисенсорные системы (электронный нос / язык)	Методы ансамблей (XGBoost)	раннее выявление заболеваний (диагностика мастита у коров по анализу молока)
Электрохимические сенсоры	RF (random forest)	предотвращение заболеваний у скота (анализ состава кормов – определение токсинов, например, афлатоксинов)

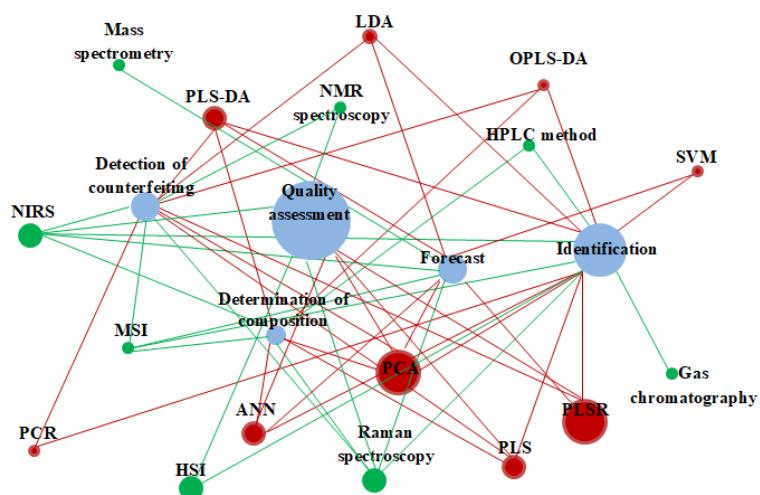


Рисунок 2. Топологическая карта хемометрических, инструментальных методов в направлении исследования пищевых систем

Figure 2. Chemometric and instrumental methods in food system research

компоненты объясняли все сенсорные характеристики (твёрдость, хрусткость, клейкость, хрупкость и жевательную способность) и инструментальные силы с использованием гильотины и V-образной формы. Вторая главная компонента – сжатие, прокол и сдвиг.

Dhanapal и Erkinbaev [13] провели исследование котлет из мясных бургеров на растительной основе. Многомерными методами анализа авторы определили роль основных ингредиентов (текстурированного и нетекстурированного белка) на качество продукта в течение хранения. Используя спектры в видимом-ближнем инфракрасном диапазоне (400–1000 нм) и РСА, прогнозировали показатели качества (цвет, влажность, pH и твёрдость) растительных мясных бургеров различных составов. Показатели фиксировали в течение 14-дневного периода хранения у образцов с содержанием текстурированного растительного белка от 10 до 30 % и горохового белка от 5 до 10 %. Результаты РСА показали нестабильность качества растительных мясных бургеров даже в течение короткого периода хранения. Кроме того, РСА продемонстрировал успешное пространственное разделение образцов растительных мясных бургеров в процессе хранения в зависимости от концентраций текстурированного растительного белка и горохового белка. РС1 объяснял 53,4 % от общей дисперсии и отвечал за яркость цвета, pH, влажность, активность воды ( $a_w$ ), когезионность и вязкость. РС2 составлял 21,24 % от общей дисперсии и оценивал желтизну цвета, содержание влаги и  $a_w$ . РС1 уловил основную изменчивость среди основных типов ингредиентов. Образцы на основе текстурированного растительного белка имели положительные оценки, а образцы на основе горохового белка – отрицательные оценки. РС2 отражал изменчивость, связанную с концентрацией текстурированного растительного белка. Образцы с низкой концентрацией текстурированного растительного белка также имели отрицательные оценки. С увеличением концентрации текстурированного растительного белка оценки переходили в область положительных значений. Следовательно, РСА может оценить качество пищевого продукта.

Xiao *et al.* [14] исследовали различные характеристики мяса 434 бройлеров 12 различных пород в Южном Китае. Исследование направлено на установление закономерностей влияния разных показателей на качество мяса бройлера. РСА проведен по 17 показателям, характеризующим качество мяса. Авторы установили существенные различия в качестве мяса бройлеров породы Xiaobai и др. Качественные характеристики тушек породы Guangxi Sanhuang более уникальные в сравнении с другими породами. Качество мяса породы Huangma совпадало с породой Zhongshan Shalan. Наиболее значимыми качественными показателями, согласно РСА, являются количество и вес брюшного жира, внутримышечный жир грудки и ширина межмышечного жира.

В исследовании [15] PLS использовали для изучения данных о качестве мяса, полученных с помощью инструментов хроматографии (включая усилие сдвига Warner-Bratzler и компрессию Instron) и сенсорных панелей. В ходе испытаний по горячей обвалке было использовано три способа обработки (горячая обвалка в течение 1 и 4 ч и обычная холодная обвалка) и два способа выдержки в вакуумной упаковке (выдержка в течение 1 и 4 недель при температуре 1 °C). Для анализа методом PLS использовали данные по 63 отрезкам (мышцам) говяжьей филейной части (*Longissimus dorsi*), собранные в ходе исследования. Для каждой мышцы были сняты шесть показаний: процент потерь при приготовлении (%<sub>cl</sub>), конечный pH мышцы, сжатие Instron (по Инстрону, IC), длина саркомера (sarc) и два измерения Warner-Bratzler – начальный выход (IY) и пиковая сила (PF). У каждой мышцы также сняли четыре показания сенсорных переменных: нежность, сочность, вкус и приемлемость. Оценка сенсорных переменных осуществлялась группой экспертов по 9 бальной шкале (1 – очень жесткий, очень сухой, без вкуса или очень плохой, а 9 – очень нежный, очень сочный, сильный вкус или очень хороший). Однофакторный анализ нежности показал, что более 60 % вариации сенсорной нежности и почти 60 % вариации сенсорной приемлемости можно объяснить с помощью инструментальных переменных, а также учета времени обвалки и выдержки. Графические отображения анализа показали, что горячая обвалка (через 1 или 4 ч) оказала незначительное влияние на качество мяса; продемонстрировали потенциальную важность влияния выдержки в вакуумной упаковке на приемлемость. По-видимому, образцы данного исследования приблизительно одинаковой нежности различались по приемлемости в зависимости от того, выдерживались ли образцы в течение 1 или 4 недель.

Agaýo *et al.* [16] с использованием PLS изучали взаимосвязи между показателями формы туши, характеристиками тканей туши и коммерческими отрубями ягнят с целью оценки способности видеозображений последовательно описывать качество мяса. Для моделирования использовали информацию о 67 охлажденных тушиах кастрированных ягнят мужского пола в возрасте от 8 до 11 месяцев. Животные откармлены в условиях изоляции и имели массу тела при убое от 21 до 49 кг, что отражало изменчивость критериев убоя в этих стадах. За основные переменные приняты масса охлажденной туши (CCW, кг) и ее выход (CCY, %); за скрытые переменные – форма туши, качество мяса, состав тканей туши и товарного отруба. В результате исследования были оценены три модели, отличающиеся друг от друга по форме туши. Одна из моделей с общей проекцией туши и ее частей признана подходящей. С ее помощью возможно прогнозировать характеристики качества мяса с учетом потерь при приготовлении и усилия

сдвига. Кроме того, рассматриваемая туша позволяла устанавливать категории для классификации туш, которые напрямую определяют сочность и нежность мяса на основе скрытых переменных, учитываемых при изучении формы туши, описания ее тканей и основных отрубов.

В исследовании [17] для оценки кислотности молока использовали Рамановскую спектроскопию в сочетании с хемометрическим анализом ANN. Шесть образцов молока по 10 мл отбирались случайным образом каждый день без повторного использования. Молоко после энергичного перемешивания помещалось на предметные стекла. Три точки на капле каждого образца молока случайным образом отобраны для записи Рамановских спектров. Три спектра, собранные из каждого образца, усреднили в один спектр как спектр образца для уменьшения случайной ошибки, вызванной неоднородностью образца. Спектрометр откалибровали по пику первого порядка кремния. Интегральное время одного сканирования составило 5 с, мощность лазера – 175 мВт в фокальной точке поверхности образца, а кумулятивное число – 8 для улучшения качества сигнала. Рамановские спектры измерялись ежедневно до тех пор, пока кислотность молока не достигла около 30 °Т. Для молока, помещенного в холодильник при температуре 4 °С, потребовалось 9 дней. ANN имела следующую структуру: входной слой содержал 1023 нейрона, количество нейронов в трех скрытых слоях составляло 100 для каждого, количество выходных нейронов – 1. Использовали функцию активации «ReLU». Количество итераций на обучение – 1000. Кислотность молока точно прогнозировалась с использованием модели BP-ANN. Корреляция между прогнозируемыми и измеренными значениями достигла 0,9909, а среднеквадратичное отклонение составило всего 0,3400 °Т.

Таким образом, сочетание методов хемометрических и инструментальных показателей в оценке качества пищевой продукции увеличивает скорость анализа: сочетание NIR и PLS; ИК-спектроскопия (NIR, MIR) и PLS, PCA позволяет за секунды оценить состав или содержание отдельных нутриентов без разрушения образца; повышает точность исследования (эксперимента) за счет устранения шумов. Фильтрация данных осуществлена с помощью PCA.

**Идентификация, классификация.** Идентификация и классификация необходимы чтобы определять подлинность (выявление фальсификаторов: разбавленное молоко, поддельное оливковое масло); производить классификацию по различным дескрипторам, параметрам, факторам (например, по происхождению, сорту, технологическим параметрам); различать свежую и испорченную продукцию и т. д. В этом разделе отражены два подхода: классификация и дискrimинация; количественный анализ посредством градуировочных моделей.

**Классификация и дискригинация.** Цель данного подхода – разделение образцов на категории по происхождению, типу, качеству и подлинности.

**Метод PCA (визуализация данных, снижение размерности).** В работе [18] были проведены исследования мармелада на агар-, желатиновой и пектиновой основе с мальтитом, сухофруктами и ягодами для контроля гликемии с использованием PCA. Результаты PCA, примененные к данным сенсорного анализа, показали вклад двух главных компонент (PC1 и PC2) в общую дисперсию на уровне 77,71 %. Первая главная компонента (PC1; 51,83 %) положительно коррелирует с дескрипторами вкуса, особенно со сладким и вяжущим вкусами. Вторая главная компонента (PC2; 25,88 %) взаимосвязана с дескрипторами текстуры (однородность, клейкость, упругость). Образцы мармелада разделены на 3 группы в зависимости от типа используемого гелеобразователя. Образцы на основе пектина имели достаточное сходство между собой, несмотря на различия в типах вкусо-ароматических соединений и их концентраций.

Deegan *et al.* [19] исследовали улучшение вкуса и текстуры у сыров с пониженным содержанием жира. Перцептивное пространство профилированных сыров оценивали с использованием PCA. На первый главный компонент приходилось 64 % общей дисперсии, на второй – 31 %. В PC1 с положительным знаком входила интенсивность вкуса, запаха и блеска, консистенция, цвет; с отрицательным знаком – размер глазка, желтизна, твердость, рассыпчатость, эластичность. В PC2 с отрицательным знаком – ореховый и кислый запах; с положительным – сладкий вкус и маслянистый запах. Визуальное отображение было представлено следующим образом: дескрипторы сильный запах, острый, сухой, твердый и рассыпчатый, обезжиренный, безвкусный, мягкий и странный / плохой расположены на противоположной стороне от PC1. В центре помещались дескрипторы ореховый, плотный, кислый; в нижней части – приятный, полный, мягкое послевкусие, сливочный и вкусный.

В исследовании [20] изучили влияние генетического отбора на качество мяса уток – быстрорастущих (LCA) и медленнорастущих (LCC). С помощью PCA рассмотрели показатели MUFA, WHC, WBSF, EAA и FAA. Общая дисперсия PC1 и PC2 составила 60,7 %. Наибольшее влияние на мясо грудки LCA оказывали PUFA, SFA, WBSF и MUFA. На качество мяса бедра как у LCA, так и LCC наибольшее влияние оказывал WHC.

В [21] использование PCA позволило идентифицировать мясо двух групп ялов (пастбищных и откормочных) по спектральным изменениям. Проанализированы спектры 36 образцов. Совокупный вклад PC1 и PC2 превышал 95 %. Визуально мясо откормочных ялов находилось на положительной стороне PC2 (I квадрант), мясо пасущихся ялов на отрицательной стороне PC2 (II квадрант).

Maritha *et al.* [22] для обеспечения халльской подлинности свинины и говядины в трехглавой мышце плеча (*Triceps brachii*), длиннейшей мышце спины (*Longissimus dorsi*) и двуглавой мышце бедра (*Biceps femoris*) использовали липидомный анализ. Для определения различий в липидных компонентах трехглавой мышцы плеча, длиннейшей мышцы спины и двуглавой мышцы бедра, а также наиболее важных компонентов для определения халляля применяли РСА. В результате выявлено различие липидных характеристик говяжьих и свиных мышц (*T. brachii*, *L. dorsi* и *B. femoris*) в обоих ионных режимах.

Amelin *et al.* [23] предложили экспресс-метод идентификации масла и жировых продуктов растительного происхождения по их флуоресценции и диффузному отражению ИК-излучения методами цветометрии и ближней ИК-спектроскопии. Идентификация и дифференциация исследуемых объектов осуществлена с использованием хемометрических алгоритмов – метода главных компонент (РСА) и иерархического кластерного анализа (НСА). Массовая доля жира в заявленной продукции определена с помощью одномерного и многомерного (PLS) анализа.

На графиках РСА и НСА фальсификаты сливочного масла находились обособленно от натуральных продуктов и не пересекались друг с другом на дендрограмме. Апробация рассматриваемых методов проведена с пробами сливочного масла и маслорастительных продуктов разных производителей. В случае многомерного анализа для молочных продуктов RMSEP ≤ 4,97 %; для маргарина RMSEP > 10,00 %. При использовании одномерного анализа относительное отклонение результатов у молочных продуктов от массовой доли жира, указанной на упаковке, не превышало 4,8 %; у маргарина – в пределах 96,3–96,5 %.

В исследовании [24] авторы показали возможность идентификации и аутентификации сухого коровьего молока методом цветометрии собственной флуоресценции образцов с использованием устройства для непосредственного (прямого) цветометрического анализа. Оценку массива данных цветометрических параметров флуоресценции (RGB) осуществляли методами главных компонент (РСА) и иерархического кластерного анализа (НСА).

Платов и соавторы [25] провели спектроколориметрическое исследование в сочетании с методами многомерного статистического анализа для идентификации гречневой крупы. Разработка классификационных моделей включала формирование баз данных цветовых координат в колориметрической системе CIE  $L^*a^*b^*$ , коэффициентов спектра отражения в видимой области образцов гречневой крупы и применение алгоритмов многомерного анализа (кластерный и дискриминантный анализ, метод главных компонент). При использовании кластерного и дискриминантного анализа разработана классификация гречневой крупы по цветовым координатам. При длительном хране-

нии непропаренной гречневой крупы повышается краснота (*a*) спектра, взаимосвязанная с процессами ферментативного потемнения. Анализ коэффициентов спектра отражения проводился с помощью метода главных компонент, выявлены участки спектра, изменение коэффициентов отражения которых взаимосвязано с физико-химическими процессами при термической обработке и длительном хранении гречневой крупы. Значительный вклад в дискриминацию образцов вносят факторные нагрузки коэффициентов отражения при 410 и 460, 650 и 680 нм, соответствующие полосам поглощения рутина и хлорофилла.

Platov *et al.* [26] проанализировали использование методов УФ-видимой-ближней ИК-спектроскопии в сочетании с многомерным анализом для классификации и идентификации гречневой крупы. Методом кластерного анализа образцы гречневой крупы, различающиеся временем урожая, размерами ядра, способом гидротермической обработки и сроками хранения, разделены на группы. Методом главных компонент выявлены полосы поглощения спектров УФ-видимых-ближних ИК-областей, соответствующие функциональным группам компонентов состава и вносящие наибольший вклад в разделение образцов на категории качества гречневой крупы. Методом дискриминантного анализа подтверждена гипотеза о разделении образцов на группы и построена классификационная функция для идентификации и сортировки гречневой крупы.

Для разработки моделей идентификации зернового кофе в исследовании [27] сформировали базу спектральных данных Фурье-ИК-спектроскопии и применили методы многомерного анализа – метод главных компонент и дискриминантный анализ. По спектральным данным РСА построена многомерная модель градации образцов кофе в зависимости от ботанического вида и наличия обжарки. По матрице факторных нагрузок выявлены полосы поглощения спектра, объясняющие различия образцов по ботаническому виду и обжарке и вносящие наибольший вклад в разделение образцов на группы. При помощи дискриминантного анализа разработана система классификационных функций градации образцов кофе по географическому месту произрастания. Таким образом, сочетание Фурье-ИК-спектроскопии с методами многомерного анализа можно использовать как быстрый и неразрушающий инструмент для идентификации зернового кофе.

Платова и соавторы [28] показали возможность применения UV-VIS-NIR спектроскопии в сочетании с многомерным анализом для градации пшеничной муки по группам, различающимся по технологическим свойствам. База данных спектров использована для построения классификационной модели градации пшеничной муки на группы качества сочетанием методов главных компонент и линейного дискриминантного анализа (PCA-LDA). Классификационная

модель, построенная на обучающей выборке, способна различать спектры пшеничной муки по группам качества с точностью 96,49 %.

*PLS-DA (прямая классификация, выявление маркеров).* В исследовании [29] для идентификации и анализа знаковых летучих органических соединений мускусной утки (*Cairina moschata*) разного возраста и пола (самка – 65, 70 и 75 дней; самец – 75, 80 и 75 дней) использовали PLS-DA. Этот метод полезен для визуализации многомерных данных и дискриминантного анализа потенциальных метаболитов, связанных с метаболическими изменениями. За независимые переменные приняли все летучие органические соединения в утке в соленом соусе по-нанкински. Группы одного и того же возраста сгруппированы вместе, а группы разного возраста более разбросаны. Сравнительный анализ базы данных HS-GC-IMS позволил установить 77 летучих органических соединений (21 спирт, 21 альдегид, 12 эфиров, 9 кетонов, 3 терпена, 2 фурана, 3 пиразина и 9 других соединений). Спирты и кетоны образуются в результате метаболизма сахаров, окисления липидов, декарбоксилирования и дегидрирования аминокислот. Распад ненасыщенных жирных кислот приводит к образованию альдегидов. После низкого порога обоняния эфиров они в первую очередь придают мясу желаемый фруктовый вкус, в то время как пиразины характеризируются специфическим привкусом выпечки. Различные химические компоненты для разных возрастов и полов в летучих органических соединениях в утке в соленом соусе по-нанкински проанализированы с помощью графика нагрузки, и в соответствии с интенсивностью пика каждого химического компонента была оценена степень вклада. Так, 32 летучих органических соединения из 77 внесли значительный вклад в состав образцов. По распределению и обилию этих 32 маркерных летучих органических соединений 80-дневный самец мускусной утки имел самые богатые вкусовые вещества.

В исследовании [30] анализировали способность портативных датчиков ближнего инфракрасного отражения (NIR) и Рамановской спектроскопии различать говядину, откормленную травой и зерном. С использованием PLS-DA было проанализировано 108 образцов говяжьих стейков, из них 54 образца – животные, откормленные травой, и 54 образца – животные, откормленные зерном. В результате установлено, что по спектрам NIR можно различать говядину, откормленную травой и зерном, как по жиру (91,7 %), так и по постному мясу (88,5 %). По Рамановским спектрам также наблюдалось различие говядины как по жиру (95,2 %), так и по постному мясу (69,6 %), но с менее точными результатами.

Pu *et al.* [31] провели профилирование белка MALDI-TOF MS четырех видов мяса (говядина, курица, утка и свинина) в сочетании с PLS-DA. Всего было собрано 103 образца чистого мяса и 81 образец смешанного. Свинину, курицу и утку выбрали для смешивания

с говяжьим мясом в бинарной смеси в массовом процентном соотношении 0, 25, 50, 75 и 100 % для имитации говядины, фальсифицированной другими видами. Более того, образцы тройной смеси, содержащие 50 % говяжьего мяса, смешанного с различным процентным содержанием куриного мяса (50 к 0 %) и свиного мяса (0 к 50 %), использовались для исследования способности рассматриваемого подхода к дифференциации тройных смесей. PLS-DA применялся для выбора пиков признаков для различия четырех видов мяса, которые затем были идентифицированы с помощью базы данных белков (Uniprot). На основе линейной зависимости между интенсивностями пиков признаков регрессия с использованием PLS успешно применена для построения моделей прогнозирования для определения коэффициентов фальсификации смесей говяжьего мяса, содержащих один из трех других видов. Для оценки метода применены слепые тесты, достигнута средняя точность прогнозирования в 94,7 %.

*PLS (подтверждение подлинности, аутентичности).* Метленкин и др. [32] проанализировали применение методов ИК-спектроскопии в сочетании с хемометрическими методами для подтверждения подлинности (аутентичности) сливочного и растительно-сливочного масла. Для построения калибровочных моделей идентификации масел была сформирована база данных ИК-спектров (калибровочный и тестовый наборы), применены алгоритмы многомерной регрессии (регрессия на главные компоненты, проекция на латентные структуры), произведен выбор спектрального интервала и числа латентных переменных. Калибровочный набор составлен из 7 смесей сливочного и пальмового масла в различных концентрациях, тестовый набор – из 13 коммерческих образцов сливочного и растительно-сливочного масла. В процессе последовательного моделирования были разработаны калибровочные модели прогнозирования содержания пальмового масла. Модели отличались по спектральным интервалам и числу факторов (латентных переменных). При анализе спектральных данных выявлены наиболее интенсивные пики полос ИК-спектра (при 2928, 2851, 1740 и 1161  $\text{cm}^{-1}$ ), связанные с наличием в образцах масла белковых и жировых связей и вносящие значительный вклад в дискриминацию образцов. Наиболее репрезентативная модель, полученная методом проекции на латентные структуры, включала два спектральных интервала (3110–2730, 1790–2600  $\text{cm}^{-1}$ ) и отличалась высоким качеством ( $R^2(P) = 0,989$ ) и точностью ( $\text{RMSEP} = 0,017$ ). Проверка качества и точности модели осуществлялась посредством полной перекрестной кросс-валидации и тест-валидации коммерческих образцов. С помощью репрезентативной модели определили содержание пальмового масла в коммерческих образцах.

*Методы машинного обучения. ANN (прогнозирование, классификация).* В исследовании [33] ANN применялись для прогнозирования происхождения образцов

мяса на основе многоэлементных и изотопных значений, систематизированных в матрице экспериментальных данных. Входной слой ANN содержал 58 ед., соответствующих анализируемым переменным. Сеть имела один скрытый слой с пятью единицами без узла смещения. Функция активации этого слоя – гиперболический тангенс (*tanh*). Количество единиц выходного слоя – 2 (два класса классификации: румынский, зарубежный). Функция активации выходного слоя – нормализованная экспоненциальная (*Softmax*). Распределение образцов между этапами обучения, проверки и тестирования было 6:3:1. Общий процент классификации для этапов обучения, тестирования и проверки составил 94,7; 96 и 100 % соответственно. Наиболее эффективными параметрами, которые могли предсказать происхождение мяса и внесли наибольший вклад в модель, были  $\delta^{2}\text{H}$ ,  $\delta^{13}\text{C}$ , Cs, Tb, Ir, Ce и Ti.

Tian *et al.* [34] использовали искусственные нейронные сети обратного распространения ошибок (BP-ANN) и модели опорных векторных машин для классификации яблок сорта Фуджи на больные и здоровые по спектрам ближнего ИК-диапазона. В модели BP-ANN в качестве передаточной функции скрытого слоя выбрана «*tan-sigmoid*», в качестве передаточной функции выходного слоя – «*purelin*», а в качестве функции обучения – «*trainlm*». Параметр структуры сети определялся путем объединения эмпирических уравнений и множественных испытаний. Количество узлов входного слоя – 8, скрытого слоя – 8, выходного слоя – 1. Скорость обучения нейронной сети составляла 0,05, целевая ошибка –  $10^{-6}$ , а максимальное количество обучений – 1000. Точность классификации на скорректированных спектрах была намного выше и составила 98,04 % для обучающего набора и 90,20 % для тестового.

Методы хемометрики широко применяют для анализа данных инфракрасной спектроскопии с целью аутентификации жиров и масел [35].

**KNN.** Для улучшения бактериальной классификации в исследовании [36] применяли метод машинного обучения KNN. Модель KNN с самой высокой точностью соответствовала уровню идентификации по Граму, т. е. позволяла определять семейство видов по Граму. Таким образом, если бактериальный вид, обнаруженный моделью, является Грам (–), остальные 25 видов по Граму (+) исключаются. На основе последнего результата предлагается список семейств и применяется другая модель KNN (на уровне семейства). Эта модель имела точность 95–98 %. Если семейство, определенное KNN, идентифицирует рассматриваемый штамм, он подтверждается. Кроме этого, модель рода KNN показала превосходную производительность классификации с процентом валидации 95,82 % для штаммов Gram (–) и 98,37 % для штаммов Gram (+). Однако, когда KNN применялся на уровне видов, точность классификации достигала только около 90 %. Это было связано с исключи-

тельно высоким уровнем сходства между штаммами, особенно в случае штаммов Gram (–).

**KNN+RF+SVM.** В работе [37] проводили классификацию нежелательных объектов с внешним видом и морфологией, схожими с ягодами годжи и трудно различимые методом KNN, SVM (support vector machine, метод опорных векторов), RF (random forest, случайный лес). Подготовили 250 образцов ягод годжи, собранных в Нинся-Хуэйском (автономный район Китая). Для исследования отобрано по 50 образцов каждого размера. Четыре типа инородных материалов в основном обнаружены во всех образцах: цветы, листья, ветки и кизил (другие плоды растений с морфологическими и цветовыми характеристиками, схожими с ягодами годжи). В результате классификации классификатор KNN показывал наилучшую производительность с точностью классификации 100 % и 100 % для проверочного и тестового наборов соответственно. Производительность классификации RF оказалась эффективнее, чем SVM, который ошибочно классифицировал волчью ягоду как кизил (1 раз). Точность на проверочной и тестовой выборке – 99,9 и 100 % соответственно. Классификатор SVM показывал наихудшие результаты идентификации среди всех. Точность 98,09 и 97,1 % соответственно на проверочной и тестовой выборках. Пять плодов кизила ошибочно классифицированы как волчьи ягоды, одна волчья ягода как цветок волчьей ягоды, тринадцать цветков волчьей ягоды как ветки волчьей ягоды, одна ветка волчьей ягоды как листья волчьей ягоды.

**Количественный анализ посредством градиуро-вочных моделей.** Цель данного подхода – прогнозирование численных значений (концентрация, доля примеси, срок годности).

**PLS (построение моделей «структура-свойство»).** Logan *et al.* [38] для классификации говяжьих туш из любой точки Австралии с учетом различных пород крупного рогатого скота, различных кормов и качества пастбищ использовали PLS-DA. Оценили 960 говяжьих туш из северных и южных регионов путем изучения подкожного жира. Туши из четырех различных систем производства в каждом регионе оценили с помощью Рамановской спектроскопии и состава жирных кислот для разработки моделей, которые наилучшим образом классифицировали различные системы производства. В результате разработано 12 моделей PLS-DA. Двухклассовая модель, основанная на составе жирных кислот, смогла верно классифицировать 99 % животных, питавшихся травой и зерном. Лучшая модель спектроскопии Рамана правильно классифицировала 94 % туш из северного региона, питавшихся травой и зерном. Для южного региона производства модели имели следующую точность классификации: долгосрочный откорм зерном (98 %); краткосрочный откорм зерном (95 %); откорм травой (96 %); откорм травой с добавкой (97 %). Кроме того, модель для южного региона классифицировала траву

против зерна (97 %). Для северного региона производства модели имели следующую точность классификации: долгосрочный откорм зерном – 59 %; краткосрочный откорм зерном – 77 %; откорм травой – 80 %; откорм травой с добавкой – 92 %.

Исследование [31] также можно отнести к данному подходу. Авторы определяли долю фальсификата в мясных смесях (0–100 %) с точностью 94,7 %.

Амелин и др. [39] предложили бесконтактный способ определения массовой доли молочного жира в бутилированном молоке по диффузному отражению излучения от светодиодов с длинами волн излучения 365, 390, 850 и 880 нм. Содержание молочного жира в анализируемых пробах молока оценивали, используя алгоритм многомерной градиуровки данных – частичную регрессию наименьших квадратов. Относительное стандартное отклонение результатов анализа не превышало 0,08.

*Машинное обучение. ANN (получение регрессионных моделей для количественных прогнозов).* Потенциал для прогнозирования параметров качества яблок по спектрам NIR [34] также можно отнести к данному подходу.

*KNN+RF.* Feng et al. [40] в своем исследовании проводят классификацию методами KNN, RF и PLS-DA трех видов рыб (минтая, угольной рыбы, арктического клыкача). Ни одна из моделей классификации не достигла 100 % по всем четырем оцененным индексам. Классификатор RF достиг более 90 % по каждой метрике. Классификатор KNN дал неоптимальные результаты, т. к. точность составила 80 %. Результаты классификации PLS-DA и KNN неудовлетворительны – из 237 образцов правильно идентифицировали 181 и 201 образцов соответственно. В модели PLS-DA 7 образцов минтая из 12 были неправильно классифицированы. Два из них определены как угольная рыба, а остальные пять как арктический клыкач. 5 образцов угольной рыбы из 13 неверно klassифицированы как минтай, 7 как арктический клыкач. Треть предсказанных образцов из 17 неверно отнесли арктического клыкача к минтаю, а остальные образцы – к угольной рыбе. В классификаторе KNN 62 образца были неправильно klassифицированы. В классе минтая, угольной рыбы и арктического клыкача было 18, 25 и 21 неправильной классификации. Классификатор RF неправильно klassифицировал только 12 образцов, что является выдающимся достижением с точностью 95,06 %, правильностью 93,10 %, полнотой 98,18 % и оценкой F1 95,57 %. Таким образом, классификатор RF является наиболее подходящей моделью для классификации минтая и показывает степень производительности лучше, чем традиционные методы. Это связано с тем, что по сравнению с PLS-DA и KNN модель RF может автоматически удалять выбросы во время кластеризации и не демонстрирует переобучения, что приводит к лучшей стабильности и чувствительности.

Для визуализации и оценки результатов идентификации и классификации эффективно используются следующие сочетания методов: электронный нос / язык + ANN в классификации сортов кофе, чая, сыров и т. д.; УФ-видимая спектроскопия + k-means в разделении мяса по степени свежести; масс-спектрометрия (MALDI-TOF) + RF в идентификации микробных загрязнений (например, плесень в зерне); Рамановская спектроскопия + PCA + LDA (линейный дискриминантный анализ) в установлении подлинности продукта (например, отличие натурального меда от искусственного, натурального растительного масла).

Используемые методы позволяют получить объективные решения, исключив человеческий фактор при оценке; выявлять скрытые закономерности (например, корреляция между спектральными данными и географическим происхождением); раннее обнаружение порчи (например, прогнозирование срока годности с помощью регрессионных моделей).

Опираясь на анализ приведенной литературы и собственные исследования, можно заключить, что, по мнению авторов, универсального инструмента для всех случаев аналитики не существует. Однако, для обработки многомерных данных многие исследователи отдают предпочтение использованию спектроскопии / хроматографии – PCA / PLS и HCA.

Методы хемометрики оказали свою эффективность при обработке данных с нечеткими результатами. Метод Рамановской спектроскопии – наглядное подтверждение этому заключению. Метод широко используется в химической промышленности и относительно недавно начал применяться при анализе пищевых продуктов. В таблице 2 представлены направления исследований Рамановской спектроскопии в сочетании с методами хемометрики.

В исследовании [41] определяли содержание глюкозы, фруктозы, сахарозы и мальтозы в различных образцах меда. Использовались Рамановские спектры, полученные из 40 модельных смесей и 90 образцов меда. Собранные данные как из подготовленных сахарных смесей, так и из медовых растворов обработаны с помощью PCA, PLS и ANN для разработки моделей прогнозирования в попытке достичь многокомпонентный количественный анализ в сложных смесях. Результаты сравнивали с результатами ВЭЖХ в качестве эталонного метода. Модели / обученные сети созданы с использованием набора калибровочных данных и оценены с использованием набора проверочных данных. Значения коэффициента корреляции между фактическими и прогнозируемыми значениями следующих составляющих: глюкозы, фруктозы, сахарозы, а также мальтозы определены как 0,964; 0,965; 0,968 и 0,949 для PLS и 0,965; 0,965; 0,978 и 0,956 для ANN соответственно.

Szykuła et al. [59] использовали PCA и PLS-DA в сочетании с Рамановской спектроскопией для межвидовой и внутривидовой классификации образцов

Таблица 2. Использование Рамановской спектроскопии

Table 2. Raman spectroscopy in food science

Хемометрический метод	Направление исследований	Источник
Классификация и дискриминация		
PLS-DA, LDA	Дифференциация говядины травяного откорма от говядины зернового откорма	[30]
PCA, PLS-DA	Классификация говяжьих туш из любой точки Австралии с учетом различных пород крупного рогатого скота, различных кормов и качества пастбищ	[38]
PCA, FDA, KNN, CNN	Идентификация бактерий в пищевой промышленности	[36]
PCA, PLS-DA, SVM	Видовая идентификация красного мяса (говядина, оленина, баранина)	[53]
Количественный анализ посредством градуировочных моделей		
PLSR, BP-ANN	Оценка кислотности молока и идентификация фальсификации молока	[17]
PCA, PLS, ANN	Определение содержания глюкозы, фруктозы, сахарозы и мальтозы в различных образцах меда	[41]
PLS	Определение жирных кислот в свином шпике	[61]
PLS-DA, PCA	Контроль температуры термической обработки свинины	[42]
PLS-DA, PCA	Прогнозирование pH свинины	[43]
PLSR	Прогнозирование pH и потери влаги в свинине	[44]
PLSR	Прогнозирование ВУС и pH у свиней <i>longissimus lumborum</i>	[45]
PLSR	Оценка нежности говядины	[46]
PLS-DA	Выявление фальсификации говядины каррагинаном и солью	[47]
PCA, PLSR	Прогнозирование текстурных характеристик говядины при замораживании и размораживании	[48]
PLSR	Определение органолептических характеристик говядины разных пород и возрастов	[49]
PCA	Определение типа откорма по содержанию жирных кислот в говядине	[50]
PLS-DA, PLSR	Прогнозирование физико-химических показателей говядины	[51]
PLSR	Прогнозирование органолептических показателей говядины	[52]
PLSR и линейная регрессия	Определение внутримышечного жира и основных групп жирных кислот в баранине	[54]
PLSR	Определение технологических свойств баранины (усилие сдвига, потери при варке)	[55–57]
PLSR	Определение свежести баранины в процессе хранения	[58]

мяса по профилям жировой ткани. Применение метода PCA показало четкое разделение между образцами свинины, баранины и курицы. Лучшее разделение классов наблюдалось для первой главной компоненты (объясняет 78,4 % общей дисперсии) и второй главной компоненты (объясняет 12,1 % общей дисперсии).

В исследовании [60] также изучали возможности PCA и Рамановской спектроскопии для классификации козьего, коровьего и буйволиного жира по ряду показателей: концентрация бета-каротина, жирных кислот, липидов, конъюгированной линолевой кислоты (CLA) и витамина D. График оценок показал, что 51 % дисперсии вносили PC1 и 10 % – PC2. При этом между коровьим жиром и жирами буйвола и козы наблюдались достоверные различия, в то же время между жирами буйвола и козы статистически значимых различий в содержании изучаемых веществ не выявлено.

Berhe *et al.* [61] изучали модели PLS для прогнозирования отдельных жирных кислот на основе спектров Рамана свиного шпика. Для извлечения информации о вариациях в наборе данных выполнили метод главных компонент, который определил, что существуют различия между внешним и внутренним слоями жира.

Графики, основанные на средних спектрах образцов (внутренний + внешний слой жира), продемонстрировали их разделение на основе йодного числа. В результате получены модели PLS с корреляцией от 0,78 до 0,90 между спектрами Рамана, показателями йодного числа, SFA, MUFA и PUFA.

Метод PCA применяли для классификации 300 туш крупного рогатого скота с разным откормом (травой и зерном) [62]. Полученная диаграмма рассеивания включала два кластера: животные, содержащиеся на зерновом и травяном откормах.

Robert *et al.* [53] проанализировали данные Рамановской спектроскопии 90 образцов красного мяса (говядины, ягнятины и оленины) методами PCA, SVM и PLSDA. Две главные компоненты объясняли 59 % дисперсии по образцам мяса. График оценок PCA продемонстрировал, что говядина, оленина и баранина отчетливо разделялись друг от друга. Разделение вдоль оси PC2 связано с липидами: сигнал  $911\text{ cm}^{-1}$  более интенсивный в образцах ягненка, образцы говядины формировали кластеры в отрицательном пространстве PC1, демонстрируя более сильные полосы амида III при  $1267\text{--}1316\text{ cm}^{-1}$ .

В исследовании [63] изучали качество мяса по таким предикторам, как гликоген, глюкоза, лактат и кортизол. PCA показал четкое разделение образцов на четыре отдельные группы и выявил взаимосвязь гликогена, глюкозы и лактата.

Abbas *et al.* [64] сравнили Рамановские спектры жиров птицы, свинины, говядины, баранины и рыбьего жира с использованием PCA. Общая вариация дисперсии составила 91 % (PC1 = 67 %, PC2 = 24 %), при этом получено четкое разделение образцов рыбьего, птичьего, свиного и говяжьего жиров. Образцы ягненка были близки к говяжьим, что объяснимо сходством их составов.

В [65] применяли Рамановскую спектроскопию с PCA для классификации семи видов мяса и салами из них. В результате анализа было сформировано четыре кластера: A1 включал образцы крупного рогатого скота, овец и коз; A2 – образцы свиней и буйволов; A3 – образцы птицы; A4 – образцы рыбы.

Lyndgaard *et al.* [66] применили PCA к спектрам Рамана свиной жировой ткани для различения жировых слоев (внешнего и внутреннего) и оценки изменения состава жирных кислот в зависимости от глубины жира и жирового слоя. На графике PCA заметно почти полное разделение жировых слоев вдоль первого главного компонента, который описывает 79 % общей спектральной вариации, что позволило авторам предложить свой подход для быстрой сортировки свиных туш.

В исследовании [67] также применили PCA для классификации животных жиров по данным Рамана в ближнем инфракрасном (FT-Raman,  $\lambda_{\text{ex}} \sim 1064$  нм) и видимом диапазонах (vis-Raman,  $\lambda_{\text{ex}} \sim 532$  нм). Полное разделение животных жиров разных видов указывало на то, что характеристики образцов существенно различаются и обладают значительным потенциалом для идентификации происхождения. С помощью хемометрического анализа заключили, что vis-Raman обладает лучшей способностью дифференциации животных жиров по сравнению с FT-Raman.

В исследовании [68] примененили random frog-PLS (RF-PLS) для модели прогнозирования пропорций миоглобина (дезоксимиоглобина и оксимиоглобина). Авторы получили результаты для дезоксимиоглобина  $R_p = 0,8936$  и RMSEP = 2,91; для оксимиоглобина  $R_p = 0,9762$  и RMSEP = 1,23.

Инструменты хемометрики в сочетании с Рамановской спектроскопией в том числе использовали для прогноза органолептических и функционально-технологических показателей. Модель на основе PLSR при использовании диапазона частот комбинационного рассеяния 1300–2800  $\text{cm}^{-1}$  образцов говядины продемонстрировала эффективность от умеренной до высокой ( $R_{\text{cv}}^2 = 0,50\text{--}0,84$ ; RMSECV = 1,31–9,07) для комплекса органолептических показателей, а при сужении области интереса только до вкусовых характеристик – высокую эффективность ( $R_{\text{cvs}}^2 = 0,80\text{--}0,84$ ; RMSECVs = 4,21–4,65) [69].

Andersen *et al.* разработали модель PLSR для скринингового анализа потерь мясного сока и pH свинины с использованием спектров Рамана и *Longissimus lumborum* [70]. Результаты модели составили для потери мясного сока  $R_{\text{cv}}^2 = 0,75$ ; RMSECV = 1,27 % и RPD = 2,0; для показателя pH –  $R_{\text{cv}}^2 = 0,72$ ; RMSECV = 0,05 и RPD = 2,0.

Исследование [71] показало, что с помощью PCA для анализа спектров Рамана можно различать образцы молока с лактозой и без нее, прошедшие различные термические процессы, и определять активность пептидазы (*Pseudomonas* sp.) в процессе хранения и прогнозировать стабильность молочной пены путем ее корреляции с концентрацией свободных жирных кислот. Применение PCA в сочетании с Рамановской спектроскопией оказалось полезным методом анализа для быстрого и чувствительного определения фагов и антибиотиков в сыром молоке по сравнению с традиционными методами анализа, основанными на микробном ингибиравании. Присутствие фага обнаруживалось с титром 10<sup>7</sup> КОЕ/мл, а антибиотика в концентрации 0,5 мкг/мл [72].

Rodrigues Júnior *et al.* [73] применяли многомерный анализ данных спектроскопии на основе PCA и PLS-DA для классификации образцов сухого молока (цельнолактозного и низколактозного), фальсифицированных мальтодекстрином (2,5–50,0 % по весу). Полученные модели PLS-DA позволили правильно классифицировать все образцы со специфичностью 100,00 % и чувствительностью 98,58 %, согласно ROC-кривой.

Taylan *et al.* [74] предложили методологию обнаружения и количественного определения жира в масле на основе спектроскопии Рамана, иерархического кластерного анализа (HCA), анализа главных компонентов (PCA), регрессии с использованием частично наименьших квадратов и регрессии главных компонентов. Значения  $R^2 = 0,99$  получены при перекрестной проверке разработанных методов PLSR и PCR.

Пространственно-смешенную Рамановскую спектроскопию (SORS) и PLSR использовали для количественной оценки фальсификации сливочного масла маргарином через упаковку [75]. Коэффициенты корреляции 0,95 и 0,92, связанные с ошибкой прогнозирования 3,2 и 3,9 % соответственно, получены для двух разных типов упаковки. При этом авторы применили усреднение спектров, собранных для одного образца, чтобы минимизировать отношение сигнал:шум.

В исследовании [76] использовали корреляционный анализ Пирсона для подтверждения взаимосвязи между сигналом 1657  $\text{cm}^{-1}$  и содержанием полиненасыщенных жирных кислот ( $r > 0,98$ ) и линоленовой кислоты ( $r > 0,97$ ) в сливочном масле.

Спектры Рамана оценивались с помощью частичного дискриминанта наименьших квадратов (PLS-DA) и PLS для определения происхождения жира / масла

и соотношений фальсификации образцов белого и ультрафильтрованного сыра. Коэффициенты определения и пределы обнаружения для фальсификации маргарином, кукурузным и пальмовым маслом составили 0,990; 0,993; 0,991 и 3,30; 3,36 и 3,59 % для двух видов сыров соответственно [77].

В исследовании [78] выполнен количественный анализ жира, лактозы и белка в йогуртах моделями частичных наименьших квадратов и данных Рамановской спектроскопии. Стандартные ошибки прогнозирования для коммерческих образцов составили 3,2–3,9 %.

Анализ главных компонентов позволил успешно классифицировать образцы молочных сливок и йогуртов с включениями посторонних растительных жиров и масел (кукурузного и подсолнечного) [79]. Рамановские спектры, полученные при более высоких температурах, более интенсивны, а ферментация йогурта оказывает влияние на Рамановское рассеяние и последующую кластеризацию образцов с помощью РСА из-за липолиза и образования новых продуктов.

Определение меламина в сухом молоке с использованием портативного спектрометра Рамана и метода частичных наименьших квадратов (PLS) показало предел обнаружения 0,13 % [80]. РСА позволил дифференцировать фальсифицированные образцы при концентрациях > 1,0 % для сухого смешивания и > 0,30 % для образцов влажного смешивания, а мягкое независимое моделирование аналогии классов (SIMCA) для тех же образцов – ≥ 0,5 и 0,30 % соответственно [81].

Сочетание Рамановской спектроскопии с SIMCA продемонстрировало хорошую классификацию козьего и коровьего молока и их бинарных смесей, а метод PLS успешно использовали для прогнозирования концентрации коровьего молока в козьем с показателем  $R^2$  калибровки 0,97 и  $R^2$  проверки 0,98 [82].

Поверхностно-усиленную Рамановскую спектроскопию с анализом PLS применяли для извлечения и количественного обнаружения тиабендазола на поверхности яблок [83].

В исследовании [84] для анализа деградации каротиноидов в процессе сушки применяли РСА спектров картофеля. Наилучшая линейная корреляция была достигнута для образцов, нагретых горячим воздухом,  $R^2 = 0,90$ , а в микроволновой печи  $R^2 = 0,88$ . Также построили модели PLS, получившие удовлетворительный коэффициент детерминации.

Регрессионная модель на основе PLSR спектров Рамана, разработанная для количественного анализа концентрации каротиноидов в томатах, продемонстрировала хорошие результаты –  $R^2 = 0,94$  [85]. Лазер с длиной волны 785 нм является наиболее подходящим для этих целей, чем 532 нм и 1064 нм. В дальнейшем исследовании [86] оптимизировали время экспозиции при записи спектров. Точность модели PLSR была выше ( $R^2 = 0,87$ ), когда спектры получали в течение 10 с, но снижалась с уменьшением времени экспозиции ( $R^2 = 0,69$  для 0,7 с). На точность модели

PLS-DA время не оказывало влияния (процент определения 90 %). Таким образом, Рамановская спектроскопия в сочетании с PLS-DA является перспективным инструментом анализа каротиноидов во фруктах и овощах.

Mandrile *et al.* [87] оценили возможность Рамановской спектроскопии в сочетании с PLS-DA для мониторинга заражения томатов двумя вирусными патогенами (вирусом желтой курчавости листьев и вирусом пятнистого увядания). Разработанная модель позволила отличить здоровые образцы от инфицированных с точностью > 70 % через 14 дней после заражения для первого вируса и > 85 % через 8 дней для второго. При этом авторы выявили спектральные различия в зараженных образцах, что говорит о возможности идентификации возбудителя.

Сочетание методов самомоделирования смеси (SMA), спектральной дивергенции информации (SID) и PLSR применили для обнаружения изменений в тинне граната с целью контроля зрелости плодов ( $R^2 > 0,92$ ) [88].

Использование OPLS-DA портативного Рамановского спектрометра позволило выявить инфицированные цитрусовые деревья (болезнь Huanglongbing, вызываемая бактерией *Candidatus Liberibacter spp.*) с точностью ~ 98 % для грейпфрутов и ~ 87 % для апельсиновых деревьев, а точность определения ранней и поздней стадии заражения составила 100 % для грейпфрутов и ~ 94 % для апельсинов [89].

Фальсификация растительных масел чаще всего включает замену дорогостоящего масла более дешевым, включение в пищевые непищевые масла, смешивание низкосортного и высококачественного [90]. При анализе масел методом Рамановской спектроскопии основные различия заключались в количестве и пропорции структур с двойной связью [91, 92].

Классификации различных видов масел на основе корреляции данных Рамановской спектроскопии и степени ненасыщенности йодным числом и содержанием каротиноидов посвящен ряд работ [93, 94]. Полученные спектральные данные обычно анализировали статистически с применением методов РСА, CA, РЛС и другими хемометрическими методами [95, 96].

В исследовании [97] разработали калибровочные модели с частичной регрессией методом наименьших квадратов (PLSR) для определения примеси обычного оливкового масла в оливковом масле первого отжима (EVOO). Модель дала стандартную ошибку прогнозирования (SEP) 1,34 % и коэффициент корреляции прогнозирования 0,99. Кроме того, значение остаточного прогнозирующего отклонения (RPD) составило 5,71, что указывает возможность использования разработанной модели для рутинного контроля качества.

Georgouli *et al.* [98] для выявления фальсификации EVOO применили алгоритм проекций с сохранением локальности по классам (CLPP) в сочетании с моде-

лью классификации  $k$ -ближайшего соседа (KNN), получив точность классификации 80 % с четырьмя классами. Обнаружение и количественное определение примеси соевого масла в оливковом масле первого отжима методом регрессии наименьших квадратов (OLS) на основе отношения интенсивности  $I_{1266}/I_{1440}$  спектров Рамана показало высокую линейность с  $R_c^2$  и  $R_p^2$  0,9769 и 0,9450; RMSEC и RMSEP 1,445 и 1,975 % (об./об.) соответственно [99].

Модель PLS с дискриминантным анализом применяли для классификации оливкового масла по географическому происхождению, году сбора урожая и сорту оливок, получив более 84,0 % верной классификации [100].

В исследовании [101] использовали алгоритмы машинного обучения для обработки данных Рамановской спектроскопии с целью проверки подлинности пищевых растительных масел (из кунжута, конопли, грецкого ореха, льна, тыквы и облепихи). Подход был основан на сборе спектров масел и создании обучающего набора данных, которые не требуют специальной или предварительной обработки, и их анализе в приложении Classification learner для создания наиболее релевантной модели классификации. Авторам удалось не только обнаружить фальсификацию масел, но и провести ее количественную оценку. Например, для образца масла с 80 % облепихового и 20 % подсолнечного соотношение между двумя типами масел не соответствовало заявленному: подсолнечное масло присутствовало в гораздо большем процентном соотношении.

Jiang *et al.* [102] предложили количественный метод определения кислотного числа пищевого масла во время хранения на основе спектральных характеристик Рамана и методов мягкой усадки bootstrap (BOSS), анализа популяции переменной комбинации (VCPA), основанных на стратегии анализа популяции модели (MPA). Модель VCPA-SVM показала наилучшие результаты:  $R_c^2$  и RMSEP в наборе прогнозов составили 0,932 и 0,153 соответственно.

Хемометрика, основанная на регрессии опорных векторов (SVR), использовалась для количественного анализа  $\beta$ -каротина в синтетических оливковых маслах. Показатели оценки тестового набора линейного ядра SVR составили RMSE = 0,0653;  $R^2$  = 0,9868 [103].

Для определения качества пищевого масла в исследовании [104] применили девять алгоритмов контролируемого машинного обучения (ML). Рамановские спектры десяти коммерческих пищевых масел проанализировали с помощью контролируемых алгоритмов ML и сравнили с моделью PCA. Модель ML показала точность классификации 96,7 % при определении типа масла и прогноза фальсификации ( $R^2$  составил 0,984).

## Выводы

Несмотря на то, что раздел химии хемометрика появился в 1970 гг., хемометрические методы в ана-

лизе сложных пищевых систем распространились в начале 2000 гг. Из всего разнообразия хемометрических методов наиболее востребованным является PCA. Анализ научных публикаций показал, что для каждого вида пищевой продукции лучше использовать не один метод, а их сочетание. Методы классификации в каждом отдельном случае показывают разные результаты.

Хемометрические и инструментальные методы взаимно усиливают друг друга. Спектроскопия / хроматография требуют применение методов PCA / PLS для обработки многомерных данных. Масс-спектрометрия использует кластеризацию для группировки сложных спектров. Сенсоры сочетаются с алгоритмами машинного обучения (ML) для классификации в реальном времени.

В пищевой промышленности хемометрические методы чаще применяются для контроля состава (жиры, белки, витамины); обнаружения фальсификаций; управления технологическими процессами (например, ферментация).

Таким образом, хемометрические методы дополняют инструментальные, решая следующие задачи: предобработка данных (нормализация, фильтрация шумов); извлечение признаков (например, PCA для спектров); классификация и калибровка (PLS для количественного анализа в ИК-спектроскопии); интерпретация сложных данных (кластеризация масс-спектров).

ИК-спектроскопию совместно с PCA применяют для визуализации кластеров образцов. ГХ-МС и НСА используют для группировки соединений по масс-спектрам; ЖХ и PLS – для прогнозирования концентраций веществ; электрохимические сенсоры и SVM – для классификации примесей.

Сочетание инструментальных и хемометрических методов не только улучшает точность анализов, но и трансформирует подходы к управлению качеством для обеспечения устойчивого производства в пищевой промышленности.

## Критерии авторства

Авторы в равной степени участвовали в подготовке и написании статьи.

## Конфликт интересов

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

## Contribution

All the authors contributed equally to the study and bear equal responsibility for information published in this article.

## Conflict of interest

The authors declared no potential conflict of interest regarding the research, authorship, and/or publication of this article.

### Список литературы / References

1. Wold S. Spline functions, a new tool in data analysis. *Kemisk Tidskrift*. 1972;84(3):34–37.
2. Wold S. Chemometrics; What do we mean with it, and what do we want from it? *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*. 1995;30(1):109–115. [https://doi.org/10.1016/0169-7439\(95\)00042-9](https://doi.org/10.1016/0169-7439(95)00042-9)
3. Wold S, Esbensen K, Geladi P. Principal component analysis. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*. 1987;2(1–3):37–52. [https://doi.org/10.1016/0169-7439\(87\)80084-9](https://doi.org/10.1016/0169-7439(87)80084-9)
4. Wold S, Sjöström M, Eriksson L. PLS-regression: A basic tool of chemometrics. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*. 2001;58(2):109–130. [https://doi.org/10.1016/s0169-7439\(01\)00155-1](https://doi.org/10.1016/s0169-7439(01)00155-1)
5. Wold S. Cross-validatory estimation of the number of components in factor and principal components models. *Technometrics*. 1978;20(4):397–405. <https://doi.org/10.2307/1267639>
6. Geladi P, Kowalski BR. Partial least-squares regression: A tutorial. *Analytica Chimica Acta*. 1986;185:1–17. [https://doi.org/10.1016/0003-2670\(86\)80028-9](https://doi.org/10.1016/0003-2670(86)80028-9)
7. Chemometrics: Mathematics and Statistics. In: Kowalski BR, editor. NATO ASI series. Series C, mathematical and physical sciences. Dordrecht: Reidel Publ.Co.; 1984; vol. 138. 485 p.
8. Massart DL, Vandeginste BGM, Buydens LMC, de Jong S, Lewi PJ, et al. Handbook of Chemometrics and Qualimetrics. Amsterdam: Elsevier Science; vol. 20A. 867 p.
9. Родионова О. Е., Померанцев А. Л. Хемометрика: достижения и перспективы. Успехи химии. 2006. Т. 75. № 4. С. 302–321. [Rodionova OYe, Pomerantsev AL. Chemometrics: Achievements and prospects. Uspekhi khimii. 2006;75(4): 302–321. (In Russ.)] <https://elibrary.ru/HSQIRD>
10. Родионова О. Е. Хемометрический подход к исследованию больших массивов химических данных. Российский химический журнал. 2006. Т. 50. № 2. С. 128–144. [Rodionova OYe. Chemometric approach to big data in chemistry. Russian Journal of General Chemistry. 2006;50(2):128–144. (In Russ.)] <https://elibrary.ru/HTUUSZ>
11. Peris-Díaz MD, Kręzel A. A guide to good practice in chemometric methods for vibrational spectroscopy, electrochemistry, and hyphenated mass spectrometry. *Trends in Analytical Chemistry*. 2021;135:116157. <https://doi.org/10.1016/j.trac.2020.116157>
12. Paula AM, Conti-Silva AC. Texture profile and correlation between sensory and instrumental analyses on extruded snacks. *Journal of Food Engineering*. 2014;121:9–14. <https://doi.org/10.1016/j.jfoodeng.2013.08.007>
13. Dhanapal L, Erkinbaev C. Portable hyperspectral imaging coupled with multivariate analysis for real-time prediction of plant-based meat analogues quality. *Journal of Food Composition and Analysis*. 2024;126:105840. <https://doi.org/10.1016/j.jfca.2023.105840>
14. Xiao L, Qi L, Fu R, Nie Q, Zhang X, et al. A large-scale comparison of the meat quality characteristics of different chicken breeds in South China. *Poultry Science*. 2024;103(6):103740. <https://doi.org/10.1016/j.psj.2024.103740>
15. Toscas PJ, Shaw FD, Beilken SL. Partial least squares (PLS) regression for the analysis of instrument measurements and sensory meat quality data. *Meat Science*. 1999;52(2):173–178. [https://doi.org/10.1016/S0309-1740\(98\)00165-X](https://doi.org/10.1016/S0309-1740(98)00165-X)
16. Araújo JC, Lima ACS, Nunes MPM, Sousa MAP, Serrão GX, et al. Relationships among carcass shape, tissue composition, primal cuts and meat quality traits in lambs: A PLS path modeling approach. *Small Ruminant Research*. 2020;182:52–66. <https://doi.org/10.1016/j.smallrumres.2019.106024>
17. Huang W, Fan D, Li W, Meng Y, Liu TC. Rapid evaluation of milk acidity and identification of milk adulteration by Raman spectroscopy combined with chemometrics analysis. *Vibrational Spectroscopy*. 2022;123:103440. <https://doi.org/10.1016/j.vibspec.2022.103440>
18. Zhilinskaya NV, Sarkisyan VA, Vorobieva VM, Vorobieva IS, Kochetkova AA, et al. Development of a marmalade for patients with type 2 diabetes: Sensory characteristics and acceptability. *Food Science and Technology International*. 2018;24(7):617–626. <https://doi.org/10.1177/1082013218779748>
19. Deegan KC, Holopainen U, McSweeney PLH, Alatossava T, Tuorila H. Characterisation of the sensory properties and market positioning of novel reduced-fat cheese. *Innovative Food Science & Emerging Technologies*. 2014;21:169–178. <https://doi.org/10.1016/j.ifset.2013.10.003>
20. Li F, Lu Y, He Z, Yu D, Zhou J, et al. Analysis of carcass traits, meat quality, amino acid and fatty acid profiles between different duck lines. *Poultry Science*. 2024;103(7):103791. <https://doi.org/10.1016/j.psj.2024.103791>
21. Liu Y, Yang X, Wu S, Degen A, Huan X, et al. Identifying meat from grazing or feedlot yaks using visible and near-infrared spectroscopy with chemometrics. *Journal of Food Protection*. 2024;87(7):100295. <https://doi.org/10.1016/j.jfp.2024.100295>
22. Maritha V, Harlina PW, Musfiroh I, Muchtaridi M, Rafi M, et al. Lipidomics analysis for halal authentication of *Triceps brachii*, *Longissimus dorsi*, and *Biceps femoris* meats: Profiling the lipid composition. *LWT*. 2023;185:115187. <https://doi.org/10.1016/j.lwt.2023.115187>

23. Amelin VG, Emelyanov OE, Tretyakov AV, Kish LK. Identification and detection of adulterated butter by colorimetry and near-IR-spectroscopy. *Journal of Applied Spectroscopy*. 2024;91:826–834. <https://doi.org/10.1007/s10812-024-01790-0>
24. Амелин В. Г., Шаока З. А. Ч., Большаков Д. С. Идентификация и аутентификация сухого коровьего молока с использованием смартфона и хемометрического анализа. *Вестник Московского университета. Серия 2: Химия*. 2023. Т. 64. № 1. С. 49–59. [Amelin VG, Shogah ZACH, Bolshakov DS. Identification and authentication of cow's milk powder using a smartphone and chemometric analysis. *Moscow University Chemistry Bulletin. Series 2: Chemistry*. 2023;64(1):49–59. (In Russ.)] <https://doi.org/10.55959/MSU0579-9384-2-2023-64-1-49-59>
25. Платов Ю. Т., Бобожонова Г. А., Метленкин Д. А. Спектроколориметрический метод идентификации гречневой крупы. *Хлебопечение России*. 2020. № 1. С. 24–28. [Platov YuT, Bobozhonova GA, Metlenkin DA. Spectrocolorimetry in buckwheat identification. *Bakery of Russia*. 2020;(1):24–28. (In Russ.)] <https://elibrary.ru/MXAOOU>
26. Platov YuT, Metlenkin DA, Platova RA, Rassulov VA, Vereshchagin AI, et al. Buckwheat identification by combined UV-VIS-NIR spectroscopy and multivariate analysis. *Journal of Applied Spectroscopy*. 2021;88(4):723–730. <https://doi.org/10.1007/s10812-021-01231-2>
27. Метленкин Д. А., Платов Ю. Т., Платова Р. А., Рубцов А. Е., Михайлова А. М. Идентификация кофе в зернах методами Фурье-ИК-спектроскопии и многомерного анализа. *Известия высших учебных заведений. Пищевая технология*. 2021. № 5–6. С. 92–97. [Metlenkin DA, Platov YuT, Platova RA, Rubtzov AE, Mikhaylova AM. Identification of coffee beans using ftir-spectroscopy and multivariate analysis. *Izvestiya vuzov. Food Technology*. 2021;(5–6):92–97. (In Russ.)] <https://doi.org/10.26297/0579-3009.2021.5-6.17>
28. Платова Р. А., Жиркова Е. В., Метленкин Д. А., Лысенкова А. А., Платов Ю. Т. и др. Прогнозирование технологических свойств пшеничной муки сочетанием методов UV-VIS-NIR спектроскопии и многомерного анализа. *Пищевые системы*. 2024. Т. 7. № 1. С. 22–30. [Platova RA, Zhirkova EV, Metlenkin DA, Lysenkova AA, Platov YuT, et al. Prediction of technological properties of wheat flour by combination of UV-VIS-NIR spectroscopy and multivariate analysis methods. *Food Systems*. 2024;7(1):22–30. (In Russ.)] <https://doi.org/10.21323/2618-9771-2024-7-1-22-30>
29. Zhu Z, Bassey AP, Cao Y, Du X, Huang T, et al. Meat quality and flavor evaluation of Nanjing water boiled salted duck (NWS) produced by different Muscovy duck (*Cairina moschata*) ingredients. *Food Chemistry*. 2022;397:133833. <https://doi.org/10.1016/j.foodchem.2022.133833>
30. Coombs CE, Liddle RR, González LA. Portable vibrational spectroscopic methods can discriminate between grass-fed and grain-fed beef. *Journal of Near Infrared Spectroscopy*. 2021;29(6):321–329. <https://doi.org/10.1177/09670335211049506>
31. Pu K, Qiu J, Li J, Huang W, Lai X, et al. MALDI-TOF MS protein profiling combined with multivariate analysis for identification and quantitation of beef adulteration. *Food Analytical Methods*. 2023;16:132–142. <https://doi.org/10.1007/s12161-022-02403-2>
32. Метленкин Д. А., Платов Ю. Т., Рубцов А. Е. Идентификация сливочного масла методами ИК-спектроскопии и многомерного анализа. *Пищевая промышленность*. 2020. № 3. С. 58–61. [Metlenkin DA, Platov YuT, Rubtzov AE. Identification of butter using IR spectroscopy and multivariate analysis. *Food Industry*. 2020;(3):58–61. (In Russ.)] <https://doi.org/10.24411/0235-2486-2020-10033>
33. Cristea G, Voica C, Feher I, Puscas R, Magdas DA. Isotopic and elemental characterization of Romanian pork meat in corroboration with advanced chemometric methods: A first exploratory study. *Meat Science*. 2022;189:108825. <https://doi.org/10.1016/j.meatsci.2022.108825>
34. Tian S, Zhang J, Zhang Z, Zhao J, Zhang Z, et al. Effective modification through transmission Vis/NIR spectra affected by fruit size to improve the prediction of moldy apple core. *Infrared Physics and Technology*. 2019;100:117–124. <https://doi.org/10.1016/j.infrared.2019.05.015>
35. Rohman A, Ghazali MAB, Windarsih A, Irnawati, Riyanto S, et al. Comprehensive review on application of FTIR spectroscopy coupled with chemometrics for authentication analysis of fats and oils in the food products. *Molecules*. 2020;25(22):5485. <https://doi.org/10.3390/molecules25225485>
36. Dib OH, Assaf A, Grangé E, Morin JF, Cordella CBY, et al. Automatic recognition of food bacteria using Raman spectroscopy and chemometrics: A comparative study of multivariate models. *Vibrational Spectroscopy*. 2023;126:103535. <https://doi.org/10.1016/j.vibs.2023.103535>
37. Hu X, Ma P, He Y, Guo J, Li Z, et al. Nondestructive and rapid detection of foreign materials in wolfberry by hyperspectral imaging combining with chemometrics. *Vibrational Spectroscopy*. 2023;128:103578. <https://doi.org/10.1016/j.vibs.2023.103578>
38. Logan BG, Hopkins DL, Schmidtke LM, Fowler SM. Assessing chemometric models developed using Raman spectroscopy and fatty acid data for Northern and Southern Australian beef production systems. *Meat Science*. 2022;187:108753. <https://doi.org/10.1016/j.meatsci.2022.108753>
39. Амелин В. Г., Емельянов О. Э., Шаока З. А. Ч., Третьяков А. В. Определение массовой доли молочного жира в бутилированном молоке бесконтактным цветометрическим методом. *Журнал аналитической химии*. 2024. Т. 79. № 11. С. 1147–1153. [Amelin VG, Emelyanov OE, Shaoka ZACH, Tratyakov AV. Determination of the mass fraction of milk fat in bottled milk by non-contact colorimetric method. *Zhurnal analiticheskoi khimii*. 2024;79(11):1147–1153. (In Russ.)] <https://elibrary.ru/SXOHRV>

40. Feng S, Qi S, Chen C, Khan IM, Gu Q, et al. Classification and quantification of adulterants in Alaska pollock based on fourier transform near-infrared spectroscopy with chemometrics. *Food Bioscience*. 2024;59:104003. <https://doi.org/10.1016/j.fbio.2024.104003>
41. Özbalci B, Boyaci İH, Topcu A, Kadılar C, Tamer U. Rapid analysis of sugars in honey by processing Raman spectrum using chemometric methods and arti-ficial neural networks. *Food Chemistry*. 2013;136(3–4):1444–1452. <https://doi.org/10.1016/j.foodchem.2012.09.064>
42. Berhe DT, Eskildsen CE, Lametsch R, Hviid MS, van den Berg F. Prediction of total fatty acid parameters and individual fatty acids in pork back fat using Raman spectroscopy and chemometrics: Understanding the *cage of covariance* between highly correlated fat parameters. *Meat Science*. 2016;111:18–26. <https://doi.org/10.1016/j.meatsci.2015.08.009>
43. Berhe DT, Lawaetz AJ, Engelsen SB, Hviid MS, Lametsch R. Accurate determination of endpoint temperature of cooked meat after storage by Raman spectroscopy and chemometrics. *Food Control*. 2015;52:119–125. <https://doi.org/10.1016/j.foodcont.2014.12.011>
44. Nache M, Hinrichs J, Scheier R, Schmidt H, Hitzmann B. Prediction of the pH as indicator of porcine meat quality using Raman spectroscopy and metaheuristics. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*. 2016;154:45–51. <https://doi.org/10.1016/j.chemolab.2016.03.011>
45. Andersen PV, Afseth NK, Gjerlaug-Enger E, Wold JP. Prediction of water holding capacity and pH in porcine *longissimus lumborum* using Raman spectroscopy. *Meat Science*. 2021;172:108357. <https://doi.org/10.1016/j.meatsci.2020.108357>
46. Bauer A, Scheier R, Eberle T, Schmidt H. 46 Meat Science. 2016;115:27–33. <https://doi.org/10.1016/j.meatsci.2015.12.020>
47. Nunes KM, Andrade MVO, Almeida MR, Fantini C, Sena MM. Raman spectroscopy and discriminant analysis applied to the detection of frauds in bovine meat by the addition of salts and carrageenan. *Microchemical Journal*. 2019;147:582–589. <https://doi.org/10.1016/j.microc.2019.03.076>
48. Chen Q, Zhang Y, Guo Y, Cheng Y, Qian H, et al. Non-destructive prediction of texture of frozen/thaw raw beef by Raman spectroscopy. *Journal of Food Engineering*. 2020;266:109693. <https://doi.org/10.1016/j.jfoodeng.2019.109693>
49. Zhao M, Nian Y, Allen P, Downey G, Kerry JP, et al. Application of Raman spectroscopy and chemometric techniques to assess sensory characteristics of young dairy bull beef. *Food Research International*. 2018;107:27–40. <https://doi.org/10.1016/j.foodres.2018.02.007>
50. Logan BG, Hopkins DL, Schmidtke L, Morris S, Fowler SM. Preliminary investigation into the use of Raman spectroscopy for the verification of Australian grass and grain fed beef. *Meat Science*. 2020;160:107970. <https://doi.org/10.1016/j.meatsci.2019.107970>
51. Nian Y, Zhao M, O'Donnell CP, Downey G, Kerry JP, et al. Assessment of physico-chemical traits related to eating quality of young dairy bull beef at different ageing times using Raman spectroscopy and chemometrics. *Food Research International*. 2017;99(Part 1):778–789. <https://doi.org/10.1016/j.foodres.2017.06.056>
52. Fowler SM, Schmidt H, van de Ven R, Hopkins DL. Preliminary investigation of the use of Raman spectroscopy to predict meat and eating quality traits of beef loins. *Meat Science*. 2018;138:53–58. <https://doi.org/10.1016/j.meatsci.2018.01.002>
53. Robert C, Fraser-Miller SJ, Jessep WT, Bain WE, Hicks TM, et al. Rapid discrimination of intact beef, venison and lamb meat using Raman spectroscopy. *Food Chemistry*. 2021;343:128441. <https://doi.org/10.1016/j.foodchem.2020.128441>
54. Fowler SM, Ponnampalam EN, Schmidt H, Wynn P, Hopkins DL. Prediction of intramuscular fat content and major fatty acid groups of lamb *M. longissimus lumborum* using Raman spectroscopy. *Meat Science*. 2015;110:70–75. <https://doi.org/10.1016/j.meatsci.2015.06.016>
55. Schmidt H, Scheier R, Hopkins DL. Preliminary investigation on the relationship of Raman spectra of sheep meat with shear force and cooking loss. *Meat Science*. 2013;93(1):138–143. <https://doi.org/10.1016/j.meatsci.2012.08.019>
56. Fowler SM, Schmidt H, van de Ven R, Wynn P, Hopkins DL. Raman spectroscopy compared against traditional predictors of shear force in lamb *M. longissimus lumborum*. *Meat Science*. 2014;98(4):652–656. <https://doi.org/10.1016/j.meatsci.2014.06.042>
57. Fowler SM, Schmidt H, van de Ven R, Wynn P, Hopkins DL. Predicting tenderness of fresh ovine *semimembranosus* using Raman spectroscopy. *Meat Science*. 2014;97(4):597–601. <https://doi.org/10.1016/j.meatsci.2014.02.018>
58. Fowler SM, Schmidt H, van de Ven R, Wynn P, Hopkins DL. Predicting meat quality traits of ovine *M. semimembranosus*, both fresh and following freezing and thawing, using a hand held Raman spectroscopic device. *Meat Science*. 2015;108:138–144. <https://doi.org/10.1016/j.meatsci.2015.06.010>
59. Szykuła KM, Offermans T, Lischtschenko O, Meurs J, Guenther D, et al. Predicting animal welfare labels from pork fat using raman spectroscopy and chemometrics. *AppliedChem*. 2023;3(2):279–289. <https://doi.org/10.3390/appliedchem3020017>
60. Saleem M, Amin A, Irfan M. Raman spectroscopy based characterization of cow, goat and buffalo fats. *Journal of Food Science and Technology*. 2021;58(1):234–243. <https://doi.org/10.1007/s13197-020-04535-x>

61. Berhe DT, Eskildsen CE, Lametsch R, Hviid MS, van den Berg F, et al. Prediction of total fatty acid parameters and individual fatty acids in pork backfat using Raman spectroscopy and chemometrics: Understanding the cage of covariance between highly correlated fat parameters. *Meat Science*. 2016;111:18–26. <https://doi.org/10.1016/j.meatsci.2015.08.009>
62. Logan BG, Hopkins DL, Schmidtke L, Morris S, Fowler SM. Preliminary investigation into the use of Raman spectroscopy for the verification of Australian grass and grain fed beef. *Meat Science*. 2020;160:107970. <https://doi.org/10.1016/j.meatsci.2019.107970>
63. Ostovar pour S, Fowler SM, Hopkins DL, Torley PJ, Gil H, et al. Investigation of chemical composition of meat using spatially off-set Raman spectroscopy. *Analyst*. 2019;144(8):2618–2627. <https://doi.org/10.1039/c8an01958d>
64. Abbas O, Fernández Pierna JA, Codony R, von Holst C, Baeten V. Assessment of the discrimination of animal fat by FT-Raman spectroscopy. *Journal of Molecular Structure*. 2009;924–926:294–300. <https://doi.org/10.1016/j.molstruc.2009.01.027>
65. Boyaci IH, Uysal RS, Temiz T, Shendi EG, Yadegari RJ, et al. A rapid method for determination of the origin of meat and meat products based on the extracted fat spectra by using of Raman spectroscopy and chemometric method. *European Food Research and Technology*. 2014;238:845–852. <https://doi.org/10.1007/s00217-014-2168-1>
66. Lyndgaard LB, Sørensen KM, van der Berg F, Engelsen SB. Depth profiling of porcine adipose tissue by Raman spectroscopy. *Journal of Raman Spectroscopy*. 2012;43(4):482–489. <https://doi.org/10.1002/jrs.3067>
67. Gao F, Ben-Amotz D, Zhou S, Yang Z, Han L, et al. Comparison and chemical structure-related basis of species discrimination of animal fats by Raman spectroscopy using near-infrared and visible excitation lasers. *LWT*. 2020;134:110105. <https://doi.org/10.1016/j.lwt.2020.110105>
68. Li H, Haruna SA, Wang Y, Hassan M, Geng W, et al. Simultaneous quantification of deoxymyoglobin and oxymyoglobin in pork by Raman spectroscopy coupled with multivariate calibration. *Food Chemistry*. 2022;372:131146. <https://doi.org/10.1016/j.foodchem.2021.131146>
69. Zhao M, Nian Y, Allen P, Downey G, Kerry JP, et al. Application of Raman spectroscopy and chemometric techniques to assess sensory characteristics of young dairy bull beef. *Food Research International*. 2018;107:27–40. <https://doi.org/10.1016/j.foodres.2018.02.007>
70. Andersen PV, Afseth NK, Gjerlaug-Enger E, Wold JP. Prediction of water holding capacity and pH in porcine *longissimus lumborum* using Raman spectroscopy. *Meat Science*. 2020;172:108357. <https://doi.org/10.1016/j.meatsci.2020.108357>
71. Reiner J, Protte K, Hinrichs J. Investigation of the applicability of raman spectroscopy as online process control during consumer milk production. *ChemEngineering*. 2020;4(3):45. <https://doi.org/10.3390/chemengineering4030045>
72. Acar-Soykut E, Tayyarcan EK, Boyaci IH. A simple and fast method for discrimination of phage and antibiotic contaminants in raw milk by using Raman spectroscopy. *Journal of Food Science and Technology*. 2018;55(1):82–89. <https://doi.org/10.1007/s13197-017-2798-y>
73. Rodrigues Júnior PH, de Sá Oliveira K, de Almeida CE, de Oliveira LF, Stephani R, et al. FT-Raman and chemometric tools for rapid determination of quality parameters in milk powder: Classification of samples for the presence of lactose and fraud detection by addition of maltodextrin. *Food Chemistry*. 2016;196:584–588. <https://doi.org/10.1016/j.foodchem.2015.09.055>
74. Taylan O, Cebi N, Yilmaz MT, Sagdic O, Bakhsh AA. Detection of lard in butter using Raman spectroscopy combined with chemometrics. *Food Chemistry*. 2020;332:127344. <https://doi.org/10.1016/j.foodchem.2020.127344>
75. Lohumi S, Lee H, Kim MS, Qin J, Cho B-K. Through-packaging analysis of butter adulteration using line-scan spatially offset Raman spectroscopy. *Analytical and Bioanalytical Chemistry*. 2018;410(22):5663–5673. <https://doi.org/10.1007/s00216-018-1189-1>
76. Gómez-Mascaraque LG, Kilcawley K, Hennessy D, Tobin JT, O'Callaghan TF. Raman spectroscopy: A rapid method to assess the effects of pasture feeding on the nutritional quality of butter. *Journal of Dairy Science*. 2020;103(10):8721–8731. <https://doi.org/10.3168/jds.2020-18716>
77. Genis DO, Sezer B, Durna S, Boyaci IH. Determination of milk fat authenticity in ultra-filtered white cheese by using Raman spectroscopy with multivariate data analysis. *Food Chemistry*. 2021;336:127699. <https://doi.org/10.1016/j.foodchem.2020.127699>
78. Czaja T, Baranowska M, Mazurek S, Szostak R. Determination of nutritional parameters of yoghurts by FT Raman spectroscopy. *Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy*. 2018;196:413–417. <https://doi.org/10.1016/j.saa.2018.02.054>
79. Karacaglar NNY, Bulat T, Boyaci IH, Topcu A. Raman spectroscopy coupled with chemometric methods for the discrimination of foreign fats and oils in cream and yogurt. *Journal of Food and Drug Analysis*. 2019;27(1):101–110. <https://doi.org/10.1016/j.jfda.2018.06.008>
80. Cheng Y, Dong Y, Wu J, Yang X, Bai H, et al. Screening melamine adulterant in milk powder with laser Raman spectrometry. *Journal of Food Composition and Analysis*. 2010;23(2):199–202. <https://doi.org/10.1016/j.jfca.2009.08.006>
81. Karunathilaka SR, Farris S, Mossoba MM, Moore JC, Yakes BJ. Non-targeted detection of milk powder adulteration using Raman spectroscopy and chemometrics: Melamine case study. *Food Additives & Contaminants: Part A*. 2017;34(2):170–182. <https://doi.org/10.1080/19440049.2016.1260168>

82. Yaman H. A rapid method for detection adulteration in goat milk by using vibrational spectroscopy in combination with chemometric methods. *Journal of Food Science and Technology*. 2020;57(8):3091–3098. <https://doi.org/10.1007/s13197-020-04342-4>
83. He L, Chen T, Labuza TP. Recovery and quantitative detection of thiabendazole on apples using a surface swab capture method followed by surface-enhanced Raman spectroscopy. *Food Chemistry*. 2014;148:42–46. <https://doi.org/10.1016/j.foodchem.2013.10.023>
84. Sebben JA, da Silveira Espindola J, Ranzan L, de Moura NF, Trierweiler LF, et al. Development of a quantitative approach using Raman spectroscopy for carotenoids determination in processed sweet potato. *Food Chemistry*. 2018;245:1224–1231. <https://doi.org/10.1016/j.foodchem.2017.11.086>
85. Hara R, Ishigaki M, Kitahama Y, Ozaki Y, Genkawa T. Excitation wavelength selection for quantitative analysis of carotenoids in tomatoes using Raman spectroscopy. *Food Chemistry*. 2018;258:308–313. <https://doi.org/10.1016/j.foodchem.2018.03.089>
86. Hara R, Ishigaki M, Ozaki Y, Ahamed T, Noguchi R, et al. Effect of Raman exposure time on the quantitative and discriminant analyses of carotenoid concentrations in intact tomatoes. *Food Chemistry*. 2021;360:129896. <https://doi.org/10.1016/j.foodchem.2021.129896>
87. Mandrile L, Rotunno S, Miozzi L, Vaira AM, Giovannozzi AM, et al. Nondestructive Raman spectroscopy as a tool for early detection and discrimination of the infection of tomato plants by two economically important viruses. *Analytical Chemistry*. 2019;91(14):9025–9031. <https://doi.org/10.1021/acs.analchem.9b01323>
88. Khodabakhshian R. Feasibility of using Raman spectroscopy for detection of tannin changes in pomegranate fruits during maturity. *Scientia Horticulturae*. 2019;257:108670. <https://doi.org/10.1016/j.scienta.2019.108670>
89. Sanchez L, Pant S, Xing Z, Mandadi K, Kurouski D. Rapid and noninvasive diagnostics of Huanglongbing and nutrient deficits on citrus trees with a handheld Raman spectrometer. *Analytical and Bioanalytical Chemistry*. 2019;411:3125–3133. <https://doi.org/10.1007/s00216-019-01776-4>
90. César J-S, Ruiz JR. Use of Raman spectroscopy for analyzing edible vegetable oils. *Applied Spectroscopy Reviews*. 2016;51(5):417–430. <https://doi.org/10.1080/05704928.2016.1141292>
91. Covaci F-D, Berghian-Grosan C, Feher I, Magdas DA. Edible oils differentiation based on the determination of fatty acids profile and Raman spectroscopy—A case study. *Applied Sciences*. 2020;10(23):8347. <https://doi.org/10.3390/app10238347>
92. Wang H, Xin Y, Ma H, Fang P, Li C, et al. Rapid detection of Chinese-specific peony seed oil by using confocal Raman spectroscopy and chemometrics. *Food Chemistry*. 2021;362:130041. <https://doi.org/10.1016/j.foodchem.2021.130041>
93. Castro RC, Ribeiro DSM, Santos JLM, Páscoa RN MJ. The use of *in-situ* Raman spectroscopy to monitor at real time the quality of different types of edible oils under frying conditions. *Food Control*. 2022;136:108879. <https://doi.org/10.1016/j.foodcont.2022.108879>
94. Zhao H, Zhan Y, Xu Z, Nduwamungu JJ, Zhou Y, et al. The application of machine-learning and Raman spectroscopy for the rapid detection of edible oils type and adulteration. *Food Chemistry*. 2022;373(Part B):131471. <https://doi.org/10.1016/j.foodchem.2021.131471>
95. Samyn P, van Nieuwkerke D, Schoukens G, Vonck L, Stanssens D, et al. Quality and statistical classification of Brazilian vegetable oils using mid-infrared and Raman spectroscopy. *Applied Spectroscopy*. 2012;66(5):552–565. <https://doi.org/10.1366/11-06484>
96. Zou M-Q, Zhang X-F, Qi X-H, Ma H-L, Dong Y, et al. Rapid authentication of olive oil adulteration by Raman spectrometry. *Journal of Agricultural and Food Chemistry*. 2009;57(14):6001–6006. <https://doi.org/10.1021/jf900217s>
97. Tiryaki GY, Ayvaz H. Quantification of soybean oil adulteration in extra virgin olive oil using portable Raman spectroscopy. *Journal of Food Measurement and Characterization*. 2016;11(2):523–529. <https://doi.org/10.1007/s11694-016-9419-8>
98. Georgouli K, del Rincon JM, Koidis A. Continuous statistical modelling for rapid detection of adulteration of extra virgin olive oil using mid infrared and Raman spectroscopic data. *Food Chemistry*. 2017;217:735–742. <https://doi.org/10.1016/j.foodchem.2016.09.011>
99. Barros HASI, Santos LP, Filgueiras PR, Romão W. Design experiments to detect and quantify soybean oil in extra virgin olive oil using portable Raman spectroscopy. *Vibrational Spectroscopy*. 2021;116:103294. <https://doi.org/10.1016/j.vibspec.2021.103294>
100. Sánchez-López E, Sánchez-Rodríguez MI, Marinas A, Marinas JM, Urbano FJ, et al. Chemometric study of Andalusian extra virgin olive oils Raman spectra: Qualitative and quantitative information. *Talanta*. 2016;156–157:180–190. <https://doi.org/10.1016/j.talanta.2016.05.014>
101. Berghian-Grosan C, Magdas DA. Raman spectroscopy and machine-learning for edible oils evaluation. *Talanta*. 2020;218:121176. <https://doi.org/10.1016/j.talanta.2020.121176>

102. Jiang H, He Y, Xu W, Chen Q. Quantitative detection of acid value during edible oil storage by Raman spectroscopy: Comparison of the optimization effects of BOSS and VCPA algorithms on the characteristic Raman spectra of edible oils. Food Analytical Methods. 2021;14:1826–1835. <https://doi.org/10.1007/s12161-020-01939-5>
103. Fang P, Wang H, Wan X. Olive oil authentication based on quantitative  $\beta$ -carotene Raman spectra detection. Food Chemistry. 2022;397:133763. <https://doi.org/10.1016/j.foodchem.2022.133763>
104. Zhao H, Zhan Y, Xu Z, Nduwamungu J, Zhou Y, et al. The application of machine-learning and Raman spectroscopy for the rapid detection of edible oils type and adulteration. Food Chemistry. 2022;373(Part B):131471. <https://doi.org/10.1016/j.foodchem.2021.131471>

**Дополнительная информация об авторах / Additional information about the authors**

Лисицын Андрей Борисович / Andrey B. Lisitsyn ORCID 0000-0002-4079-6950; eLIBRARY SPIN 9423-1852  
Чернуха Ирина Михайловна / Irina M. Chernukha ORCID 0000-0003-4298-0927; eLIBRARY SPIN 3423-3754  
Никитина Марина Александровна / Marina A. Nikitina ORCID 0000-0002-8313-4105; eLIBRARY SPIN 3179-0920  
Пчелкина Виктория Александровна / Viktoriya A. Pchelkina ORCID 0000-0001-8923-8661; eLIBRARY SPIN 9943-8980