

近红外光谱技术在粮食工业中的应用

孙玉侠

(自贡市粮油科学研究所, 四川 自贡 643010)

摘要:近红外光谱技术是一种无损、快速、高效的检测技术,综述介绍近年来近红外光谱技术在粮食行业中的应用,从粮食收获到储藏、加工过程中的质量控制,涉及粮食的营养成分、储存指标以及卫生安全指标的检测模型的建立等方面看,近红外光谱技术在粮食安全在线检测方面具备可行性,可为我国“粮安”工程实时在线检测提供支持。

关键词:近红外光谱技术;粮食;质量安全;检测

中图分类号:TS210.1 文献标识码:A 文章编号:1007-7561(2017)01-0058-03

Application of near infrared spectroscopy technology in food industry

SUN Yu-xia

(Zigong Grain and Oil Science Institute, Zigong Sichuan 643010)

Abstract: Near infrared spectroscopy is a nondestructive, rapid and efficient detection technology. The application of near infrared spectroscopy in food industry in recent years was introduced. In the aspects of grain picking, the quality and safety control during storage and process, food nutrients and detection models of storage indexes and health security, the near infrared spectroscopy in food safety online detection have the feasibility, which can provide support for real-time online detection of the “food security” project in our country.

Key words: near infrared spectroscopy technology; food; quality safety; detection

近红外光谱技术,是近年来发展迅猛的无损检测技术。近红外光谱波长在780~2500 nm,近红外光谱的产生则是由于分子振动的倍频或合频吸收造成的,能在近红外波段产生基频振动的主要是含氢基团,如O—H、N—H、C—H、S—H的伸缩或弯曲振动,其他的官能团如C—O、C—N、C—C等键的伸缩振动在近红外区域仅能产生信号强度很弱的多级倍频,一般会被含氢基团的一级或者二级倍频掩盖。故此近红外光谱技术所能测定的成分中必须是含氢基团,如蛋白质、脂肪、淀粉等。

近红外光谱技术的优点:弱吸收谱,样品大多不需前处理,分析过程简单;分析速度快,分析效率高。一个样品光谱测定1 min左右即可完成,通过建立的多种模型,即可得到检测数据;波段可由光纤传导,能够适用于在线或有毒有害环境的远程分析;分析成本低,对操作者要求低;无损检测,重现性好。

近红外光谱技术也有其弱点,因为近红外光谱

区包含含氢基团不同级别的倍频和不同形式的组合合频吸收,所以其谱带较宽,吸收峰重叠严重,谱带复杂,且吸收强度较弱,光谱的信噪比较低。近红外光谱一般都是对复杂样品进行近红外建模分析,是从复杂、重叠及变动的光谱中提取微弱信息,属于微弱信号提取处理技术;而且,近红外光谱技术本身是一种二次测量技术,因为近红外定量分析方法的灵敏度不仅仅依赖于光谱测量技术的准确性,还有赖于样品物化性质测试的准确度^[1]。

影响近红外光谱准确性和稳定性的因素主要有:环境条件;光谱波长选择及采集光谱的处理;校正模型的建立;化学测量值的准确度及不确定度。其次还有后续校正模型的数据补充等。

近红外光谱技术目前已在农业、环境、食品、医疗^[2]、通信等行业广泛应用,在粮食领域,已应用于粮油的收获和储藏的品质检测等。

1 在粮食中质量控制中的应用

近红外光谱技术(NIR)是新型快速无损检测技术的代表,由于不需要制备样品,运行成本较低,是一种环境友好、快速可在线检测的技术。因此,在粮

收稿日期:2016-05-24

基金项目:自贡市重点科技项目(2016NY10)

作者简介:孙玉侠,1986年出生,女,硕士研究生,工程师。

食收获、储存,加工过程的食质量安全控制中得到越来越多的应用。

1.1 小麦

Johannes Hell 等^[3]通过比较近红外光谱和中红外光谱对麦麸的多种营养成分进行测定,发现近红外光谱检测模型在灰分、淀粉、膳食纤维指标上表现更好,中红外光谱在蛋白质测定上更优越,其他成分表现相似。在小麦加工过程中,于 760 ~ 900 nm 波长条件下采用短波—近红外光谱成像对小麦粉烘焙过程中物理化学特性和流变学特性进行研究,对发酵动力学参数、谷蛋白等进行检测分析^[4],有效优化小麦粉发酵过程发酵参数;小麦面筋蛋白的主要成分是麦胶蛋白和麦谷蛋白, Wesley 等用 SE - HPLC 方法测定面筋蛋白质,开发了最小二乘法校正模型,测定面筋蛋白质含量,均方根误差为 0.36^[5];还可对粗粒小麦粉的质量进行预测。Sinelli 等采用傅里叶变换近红外光谱法(FT - NIR)采集了 500 份硬质小麦光谱数据,建立了较好的面筋含量、面筋指数模型,但面筋拉力测定模型不太成功^[6];也可对小麦种子的发展发芽阶段进行无损检测^[7]。

1.2 稻谷

Adcha Heman 等^[8]采用近红外/可见光光谱技术分别建立了不同收获期稻谷的水分测定模型,水分含量从 11.5% ~ 28.7% 不等,相关系数在 0.9 以上;近年来稻谷副产物的开发受到重视,其中糙米及米糠的产品较多, Torit Baran Bagchi 等^[9]研究开发近红外检测模型检测水稻籽粒的蛋白质含量,糙米的直链淀粉含量,以及米糠的蛋白质、脂肪、水分、灰分和纤维含量,这些校准模型的精确度高。Setia Darmawan Afandi 等通过人工神经网络方法,采用近红外光谱反射技术,选择波长在 700 ~ 1 075 nm,测定水稻在生长过程中不同部位氮含量的变化^[10],从而推断水稻的光合作用,为水稻的高产量及稻田管理提供数据支持。

1.3 玉米

结合化学计量学方法和近红外光谱技术,采用 SIMCA(光谱分析软件)对涂有涂层剂的玉米种子进行漫反射定性识别,达到 97.5% 的准确率^[11]; Chen Hua - zhou 等基于 FT - NIR,通过移动窗口偏最小二乘(OMWPLS)计量方法对玉米蛋白质的波段选择进行优化,选择最优的稳定模型均方根误差为 0.413%,预测的相关系数为 0.939^[12]; Rita Redaelli 等采用近红外光谱技术结合比色法对意大利的 391 份玉米面粉样品的总抗氧化能力进行检测,

并建立模型评估得出近红外光谱技术远程操控具备可行性^[13]; Paul J. Williams 等采用近红外光谱成像及多变量数据分析技术研究玉米内核中的真菌概况,在 1 000 ~ 2 498 nm 光谱范围,对吸光度的像素和阴影图像采用主成分分析(PCA)法,通过感染镰刀菌,分析淀粉和蛋白质的变化,发现玉米感染真菌的前期阶段^[14]。

1.4 其他粮食作物

Diarah Guindo 等通过近红外光谱技术对高粱果皮厚度进行扫描检测,预测高粱的有关质量信息^[15]; Chen Jing 等采用近红外光谱法测定小米的蛋白质、碳水化合物以及粗脂肪含量^[16], Lembe Samukelo Magwaza 等用近红外光谱技术快速定量地瓜中的蛋白质含量,光谱范围为 1 600 ~ 2 200 nm,相关系数达到 0.98,均方根误差 0.29^[17]; Linda Dykes 等研究近红外光谱技术在高粱的育种中的应用,无损检测高粱的总酚含量、单宁含量以及 3 - 脱氧花青素含量^[18]。

在粮食感官实验中, Nicoletta Sinelli 等采用近红外光谱技术评定大米的蒸煮时间,凝胶化时间,推荐最优蒸煮时间,通过处理与烹饪相关的大米分子团体的近红外光谱图,建立近红外光谱检测模型,快速客观评价大米的感官质量^[19]。

在粮食储存过程中,大米的外观、风味和营养质量一直处在动态变化过程中,通常在储存的过程中,大米的酸度会增加,通过检测大米的酸度可以对大米的新鲜度进行评估。Chuang Yung - Kun 等通过麝香草溴酚蓝—甲基红(BTB - MR)方法测定大米的酸度,收集了 180 份白米样品,结合独立分量分析技术(ICA)与 NIR 技术,建立酸度检测模型,相关系数为 0.924,预测标准误差为 0.146^[20],结果表明,ICA - NIR 技术有潜力成为大米新鲜度评价的一种有效方法。

2 在粮食经济作物质量控制中的应用

Sunoj 等使用 FT - NIR 研究近红外光谱技术检测可可豆的质量参数,如发酵指数、pH 值、总多酚含量,采用偏最小二乘(PLS)法分别建立相关检测模型,研究了发酵指数在 0.535 ~ 1.242 之间、pH 值位于 4.26 ~ 6.13 之间,总多酚含量在 6.48 ~ 15.58 mg/g 之间,建立的检测模型相关系数大于 0.8^[21]。Ernest Teye 等采用人工神经网络(BPANN)建立近红外检测模型,检测可可豆的发酵指数、pH 值,其检测模型的相关系数大于 0.95,预测的均方根误差小于 0.1,准确度很高^[22]; SHAN Jiajia 等采用近红外

光谱法联合高效液相色谱法(HPLC)检测咖啡豆中的绿原酸(CGA),用偏最小二乘回归(PLSR)法建立检测模型,合成的模型相关系数为0.76,交叉验证的均方根误差为1.16%,可以为咖啡豆的烘烤品质在线监测提供数据支持^[23]。

3 展望

对近红外光谱技术在粮食质量控制中的应用进行了综述,可看出我国近红外光谱技术的研究主要集中在常见营养成分的定量研究,已经趋于成熟,而对于植物化学成分如绿原酸、总酚、花青素等研究较少,对于粮食作物中的农药残留、真菌感染研究寥寥无几,感官检验的研究相对较少。目前我国粮食安全问题主要集中在农药残留和真菌感染等问题上,如果建立近红外检测相关模型,将有利于我国“粮安”工程建设,促进粮食质量在线监测监控。

参考文献:

- [1] 陈达. 近红外光谱新型化学计量学建模方法研究[D]. 合肥: 中国科学技术大学, 2005.
- [2] Tadanobu Nagaya, Yuko Nakamura, Kazuhide Sato, et al. Improved micro-distribution of antibody-photon absorber conjugates after initial near infrared photoimmunotherapy (NIR-PIT) [J]. *Journal of Controlled Release*, 2016, 232:1-8.
- [3] Johannes Hell, Michael Prückler, Lukas Danner, et al. A comparison between near-infrared (NIR) and mid-infrared (ATR-FTIR) spectroscopy for the multivariate determination of compositional properties in wheat bran samples [J]. *Food Control*, 2016, 60:365-369.
- [4] Samuel Verdú, Eugenio Ivorra, Antonio J. Sánchez, et al. Study of high strength wheat flours considering their physicochemical and rheological characterisation as well as fermentation capacity using SW-NIR imaging [J]. *Journal of Cereal Science*, 2015, 62:31-37.
- [5] Wesley I J, Larroque O, Osborne B G, et al. Measurement of gliadin and glutenin content of flour by NIR spectroscopy [J]. *Journal of Cereal Science*, 2001, 34(2):125-133.
- [6] Sinelli N, Pagani M A, Lucisano M, et al. Prediction of semolina technological quality by FT-NIR spectroscopy [J]. *Journal of Cereal Science*, 2011, 54(2):218-223.
- [7] András Salgó, Szilveszter Gergely. Analysis of wheat grain development using NIR spectroscopy [J]. *Journal of Cereal Science*, 2012, 56(1):31-38.
- [8] Adcha Heman, Ching-Lu Hsieh. Measurement of moisture content for rough rice by visible and near-infrared (NIR) spectroscopy [J]. *Engineering in Agriculture, Environment and Food*, In Press, Corrected Proof, Available online 18 February 2016.
- [9] Torit Baran Bagchi, Srigopal Sharma, Krishnendu Chattopadhyay. Development of NIRS models to predict protein and amylose content of brown rice and proximate compositions of rice bran [J]. *Food Chemistry*, 2016, 191:21-27.
- [10] Setia Darmawan Afandi, Yeni Herdiyeni, Lilik B. Prasetyo, et al. Nitrogen content estimation of rice crop based on near infrared (NIR) reflectance using artificial neural network (ANN) [J]. *Procedia Environmental Sciences*, 2016, 33:63-69.
- [11] Jia Shiqiang, An Dong, Liu Zhe, et al. Variety identification method of coated maize seeds based on near-infrared spectroscopy and chemometrics [J]. *Journal of Cereal Science*, 2015, 63:21-26.
- [12] Chen Hua-Zhou, Song Qi-Qing, Tang Guo-Qiang, et al. An optimization strategy for waveband selection in FT-NIR quantitative analysis of corn protein [J]. *Journal of Cereal Science*, 2014, 60(3):595-601.
- [13] Rita Redaelli, Michela Alfieri, Giovanni Cabassi. Development of a NIRS calibration for total antioxidant capacity in maize germplasm [J]. *Talanta*, 2016, 154:164-168.
- [14] Paul J. Williams, Paul Geladi, Trevor J. Britz, et al. Investigation of fungal development in maize kernels using NIR hyperspectral imaging and multivariate data analysis [J]. *Journal of Cereal Science*, 2012, 55(3):272-278.
- [15] Diarah Guindo, Fabrice Davrieux, Niaba Teme, et al. Pericarp thickness of sorghum whole grain is accurately predicted by NIRS and can affect the prediction of other grain quality parameters [J]. *Journal of Cereal Science*, 2016, 69:218-227.
- [16] Chen Jing, Ren Xin, Zhang Qing, et al. Determination of protein, total carbohydrates and crude fat contents of foxtail millet using effective wavelengths in NIR spectroscopy [J]. *Journal of Cereal Science*, 2013, 58(2):241-247.
- [17] Lembe Samukelo Magwaza, Sónia Inês Messo Naidoo, Sunette M. Laurie, et al. Development of NIRS models for rapid quantification of protein content in sweetpotato [J]. *LWT - Food Science and Technology*, 2016, 72:63-70.
- [18] Linda Dykes, Leo Hoffmann Jr., Ostilio Portillo-Rodríguez, et al. Prediction of total phenols, condensed tannins, and 3-deoxyanthocyanidins in sorghum grain using near-infrared (NIR) spectroscopy [J]. *Journal of Cereal Science*, 2014, 60(1):138-142.
- [19] Nicoletta Sinelli, Simona Benedetti, Gabriella Bottega, et al. Evaluation of the optimal cooking time of rice by using FT-NIR spectroscopy and an electronic nose [J]. *Journal of Cereal Science*, 2006, 44(2):137-143.
- [20] Chuang Yung-Kun, Hu Yi-Ping, Yang I-Chang, et al. Integration of independent component analysis with near infrared spectroscopy for evaluation of rice freshness [J]. *Journal of Cereal Science*, 2014, 60(1):238-242.
- [21] Sunoj S, Igathinathane C, Visvanathan R. Nondestructive determination of cocoa bean quality using FT-NIR spectroscopy [J]. *Computers and Electronics in Agriculture*, 2016, 124:234-242.
- [22] Ernest Teye, Xingyi Huang, Livingstone K. Sam-Amoah, et al. Estimating cocoa bean parameters by FT-NIRS and chemometrics analysis [J]. *Food Chemistry*, 2015, 176:403-410.
- [23] Shan Jiajia, Tetsuhito Suzuki, Diding Suhandy, et al. Chlorogenic acid (CGA) determination in roasted coffee beans by near infrared (NIR) spectroscopy [J]. *Engineering in Agriculture, Environment and Food*, 2014, 7(4):139-142. 完