

文章编号: 1005-0906(1999)03-0077-03

利用付里叶近红外漫反射光谱技术快速测定玉米子粒中蛋白质的含量

赵环环 严衍禄

(中国农业大学农学系, 北京 100094)

摘要: 利用付里叶近红外漫反射光谱技术和 PLS 算法相结合, 对玉米子粒样品中蛋白质的含量进行分析, 预测样品相关系数 $R_p = 0.982$, 预测标准差 $SEP = 0.587\%$ 。该技术可以用于农作物品质快速分析中。

关键词: 玉米; 近红外; 蛋白质含量; PLS 算法

中图分类号: Q-331; S 513

文献标识码: A

近红外漫反射定量分析方法是一种光谱定量方法, 它首先需要选择一个具有代表性的标准样品集, 用该样品集建立样品近红外光谱与样品浓度之间的预测模型, 然后用该预测模型去预测得到未知样品的浓度含量。近红外定量分析方法具有快速、可分析复杂样品、样品处理简单、对样品无损害等独特的优点, 引起了广泛的注意。

近红外漫反射定量分析技术最早由美国的 Norris 提出, 主要用于测定谷物中的水分含量, 后来逐步发展到同时测定样品中的蛋白质、淀粉、油分等多种组份, 应用范围也由农业扩展到食品、医药、纺织、石油等行业^[1]。近红外光谱仪也由专用型滤光片式发展到目前通用型付里叶变换近红外光谱仪; 样品测试方式也有很大发展, 出现了漫反射池, 光导纤维和积分球等测量方式。数学算法有逐步线性回归(SRG)、主成分回归(PCR)、偏最小二乘(PLS)和最近几年出现的人工神经网络(ANN)算法, 为近红外定量分析技术的完善提供了可能。

我国近红外漫反射定量分析技术的研究起步较晚。近年来, 随着近红外技术在国外逐步成为热点的同时, 我国也在石油、医药、烟草、饲料等行业开展了研究工作^[2,3]。本文研究运用付里叶近红外漫反射技术测定玉米子粒中蛋白质的含量, 与传统的分析方法相比, 近红外定量技术是一种快速、简易的测量方法。

1 材料和仪器

材料: 玉米子粒样品 50 份, 由中国农业大学、北京市农学院、中国农业科学院作物所提供。

仪器: Retch17-140 磨, Büchi-343 凯氏定 N 仪; P.E 公司付里叶变换近红外光谱仪, 带积分球。

2 实验方法

(1) 玉米子粒蛋白质含量标准值(以下简称真值)的测定: 将玉米子粒用 Retch17-140 磨统

收稿日期: 1998-12-21

作者简介: 赵环环(1973-), 女, 硕士学位, 中国农业大学农学系中心实验室讲师, 从事部分教学工作及作物生理和作物种植系统研究。

一磨碎过筛,颗粒大小为 40 目。充分混匀后,取部分样品用 Büchi-343 凯氏定 N 仪测定蛋白质含量,每个样品测定 3 次,取平均值。

(2)光谱扫描:将装有玉米粉末样品的塑料袋直接放在付里叶变换近红外光谱仪的样品窗上,放置时避免漏光现象。使用机器内置参比,扫描区间 $4\,000 \sim 12\,000\text{ cm}^{-1}$,每个样品扫描 32 次,取平均光谱。

(3)建立预测模型:用 CAU-NIR 软件处理从付里叶近红外光谱仪上得到的光谱,从 50 个样品中任选具有代表性的 33 个样品组成标准样品集,选取 $4\,000 \sim 5\,150\text{ cm}^{-1}$ 频率区间,采用 PLS 算法建立标准样品集样品光谱与样品蛋白质含量之间的预测模型。用该预测模型对剩余的 17 个样品所组成的预测样品集中样品的蛋白质含量进行预测,检验预测模型的预测效果。

3 实验结果

(1)玉米粉末样品的 NIR 光谱见图 1:

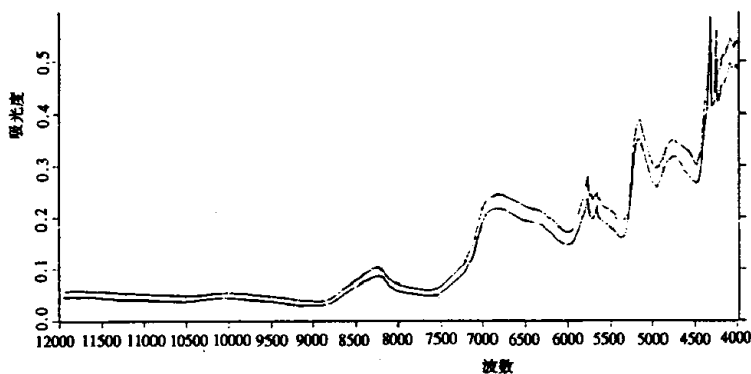
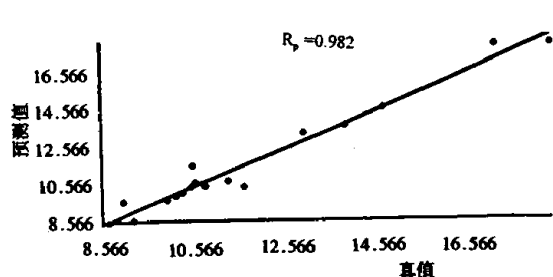


图 1 付里叶式近红外光谱仪上测得玉米样品 NIR 光谱

(2)预测模型的预测结果:建立的预测模型对预测样品集样品的预测结果(表 1),预测值与真值的相关性(图 2)。预测样品相关系数 $R_p = 0.982$,预测标准差 $SEP = 0.587\%$ 。

表 1 预测模型对 17 个样品蛋白质含量的预测结果

样品号	预测值	真值	残差	相对残差(%)	样品号	预测值	真值	残差	相对残差(%)
1	10.822	10.472	-0.350	-3.340	10	18.401	17.976	-0.425	-2.365
2	10.331	10.106	-0.225	-2.224	11	10.610	10.694	0.084	0.784
3	9.275	8.680	-0.595	-6.858	12	17.176	17.968	0.792	4.408
4	11.316	10.737	-0.579	-5.391	13	14.721	14.703	-0.018	-0.121
5	8.738	8.566	-0.172	-2.006	14	12.968	13.351	0.384	2.872
6	10.188	9.937	-0.251	-2.525	15	10.509	10.423	-0.086	-0.827
7	11.669	10.428	-1.241	-11.898	16	9.997	9.710	-0.287	-2.960
8	9.050	9.666	0.616	6.371	17	10.553	11.580	1.027	8.870
9	13.871	13.760	-0.111	-0.804					



4 结果和讨论

(1)从测试结果来看,预测模型对预测样品的预测是比较理想的: $R_p = 0.982$, $SEP = 0.587\%$,可以满足农产品的品质分析要求。近红外光谱定量技术与传统的化学测定方法相比,操作简单,省工省时。

图2 预测集样品预测值与真值之间的相关性

球,它比传统的漫反射架操作更为简单,只需将装有样品的塑料袋直接放置在样品窗上即可,不需要将样品取出,而且不需要考虑样品表面的均匀性对光谱的影响,样品表面的均匀性是采用漫反射架测试方式产生误差的一个重要原因;另外,积分球的测试光束较大,除样品的镜面反射光,其余的漫反射光均能到达检测器,从而提高了信噪比,使测试结果更加准确。在建立预测模型过程中,规范的、好的测量方法和测量条件,优秀的软件和相应的算法,是付里叶近红外光谱技术的关键。

(3)在生产实践中,特别是品质育种中,从大量的育种材料中选出有价值的品系时,近红外光谱定量技术的简单、快速是传统方法所无法比拟的;另外有报道用近红外光导纤维法和旋转漫反射池法测试单粒玉米子粒中油份的含量^[4],这为近红外光谱定量技术在农业领域的应用掀开了新的一页。随着人们对近红外光谱定量技术认识进一步的加深,该技术的应用前景是非常广阔的。

参 考 文 献

- [1] Matin K A. Recent advances in near-infrared reflectance spectroscopy. *Applied Spectroscopy Reviews*, 1992, 27(4): 325 - 383.
- [2] 杨曙明,张瑜. 近红外光谱分析技术及其在饲料质量分析中的应用. *分析仪器测试通讯*, 1997, (4).
- [3] 赵龙莲,等. 付里叶变换的红外光谱法测定烟草中九种品质参数. *光谱和光谱分析*, 1998, 18(4): 89.
- [4] 张晔晖,等. 用付里叶变换近红外光谱法测定完整的单粒玉米中油分的含量. *光谱和光谱分析*, 1998, 18(4): 99.

A New Method for Analysis Protein in Maize Seed

ZHAO Huan-huan, YAN Yan-lu

(Dept. of Agronomy, China Agricultural University, Beijing. 100094 China)

Abstract: The protein in maize seed were quantitatively determined by partial least - square on Flourier - transform Near - infrared spectroscopy(NIS). The predicted correlation coefficient and the standard error of prediction (SEP) between NIS predicted values and chemically determined values were 0.982 and 0.578%. This technology can be used in crop analysis.

Key words: Near - infrared; Protein; PLS