

# 糙米蛋白质含量的 近红外透射光谱分析

(广东省农业科学院水稻研究所, 广东省水稻育种新技术重点实验室, 广州 510640) 谢新华 肖 昕 李晓方\*

**摘 要** 应用近红外透射光谱技术, 采用改进的偏最小二乘法 (MPLS) 建立糙米蛋白质含量 (PC) 定量分析数学模型。糙米蛋白质含量预测数学模型校正标准误差 (SEC)、交叉检验标准误差 (SECV) 分别为 0.2114、0.2365, 校正相关系数 (RSQ) 和交叉验证相关系数 (1-VR) 分别为 0.9807、0.9768, 预测误差与常规分析方法的误差接近。内部交叉检验和外部验证结果表明, 近红外定量分析有很高的准确度, 近红外光谱法完全可以替代常规分析方法。

**关键词** 近红外透射光谱, 蛋白质含量, 定量分析, 糙米

**Abstract:** With the technique of near infrared transmittance spectroscopy (NITS), the predicted model for quantitative analysis of protein content in brown rice was established by using modified Partial Least Square (MPLS). The results were indicated by the standard errors (SEC for calibration, SECV for cross validation) and determination coefficients (RSQ for calibration and 1-VR for validation) when the model was calibrated by MPLS. The SEC and SECV were 0.2114, 0.2365; While RSQ and 1-VR were 0.9807, 0.9768. The predictive errors measured by NITS were close to those by routine laboratory methods. The method of NITS had high accuracy in predicted tests of cross validation and independent validation and was available to replace the routine laboratory analysis.

**Key words:** near infrared transmittance spectroscopy (NITS); protein content; quantitative analysis; brown rice

中图分类号: TS207.3 文献标识码: A

文章编号: 1002-0306 (2004) 02-0142-02

近红外光谱法是本世纪 70 年代兴起的一项化学成分快速定量测定技术<sup>[1,2]</sup>。在国外, 近红外光谱技术已成为谷物品质分析的重要手段<sup>[3,4]</sup>。在国内, 近红外光谱技术在多种作物品质分析上应用的报道较多<sup>[5,6]</sup>, 但在水稻品质分析上应用则很少。本研究用近红外透射光谱法来测定糙米中蛋白质含量, 期望为水稻品质育种和品质分析提供一种快速有效的分析方法。

收稿日期: 2003-07-17 \* 通讯联系人

作者简介: 谢新华 (1978-) 男, 西北农林科技大学硕士研究生, 从事谷物化学与品质分析。

基金项目: 国家自然科学基金重大项目 (98933350); 广东省自然科学基金项目 (020384)。

## 1 材料与方法

### 1.1 实验材料

供试水稻材料 由广东省农科院水稻研究所提供, 选用的材料多为常用亲本水稻品种和高代稳定新品系, 共有 135 份样本, 其中包括籼稻、粳稻和糯稻品种, 校正群体有 113 份样本, 检验群体有 22 份样本, 这些材料覆盖了绝大部分水稻品种的蛋白质含量范围, 具有较好的代表性。

### 1.2 糙米蛋白质含量的测定

糙米用旋风式样品磨 (1093CYCLOTEC, FOSS Tecator) 碾磨后, 过 100 目筛网成米粉。采用 FOSS Tecator 公司的自动定氮分析仪 (KJELTEC 1030 AUTO Analyzer), 半微量凯氏法测定蛋白质含量<sup>[7]</sup>。

### 1.3 NITS 扫描和光谱分析

NITS 扫描采用由丹麦福斯 (FOSS) 公司生产的 INFRAEC1255 型近红外谷物品质分析仪, 在波长为 850~1050nm 的范围内, 每个样品重复扫描 5 次, 平均得到 1 条连续近红外光谱, 并转化成  $\ln(1/R)$  贮存于计算机内 (如图 1)。光谱分析采用了 WinISI 软件具备的“标准正常化处理和散射处理”数学处理方法, 对所收集的光谱进行处理和比较, 了解光谱的特性并剔除异常光谱, 去除离散性大的样品和性质相似的样品, 对样品群体的代表性进行优化。经过近红外光谱的筛选归类分析, 从 113 份样本中筛选出 97 份进行回归方程的建立。

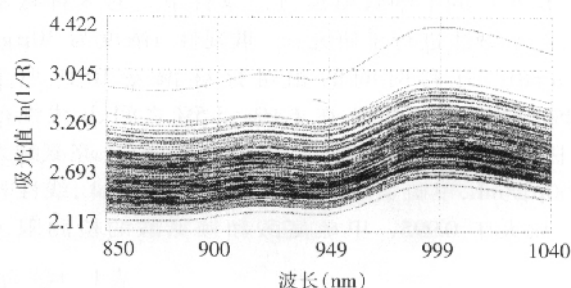


图 1 糙米蛋白质含量 NITS 连续扫描光谱图

## 2 结果与分析

### 2.1 定标与检验

2.1.1 定标的建立 定标过程就是将 NIRS 光谱特征与糙米蛋白质之间建立起相关关系。利用 FOSS 公司提供的 WinISI 软件,采用“标准正常化处理和散射处理,参数选择为 2.1.1.1”的数学处理方法进行光谱处理,对精选的 97 份样品数据进行前处理,利用改进的最小二乘法 (MPLS) 建立定标模型,其定标标准误差 (SEC)、交叉检验标准误差 (SECV)、定标相关系数 (RSQ) 和交叉验证相关系数 (Q-VR) 分别为 0.2114、0.2365、0.9807、0.9768,相关性达到极显著水平。

2.1.2 定标模型验证实验 内部交叉验证是根据样品的 NIRS 特征,利用软件的自动验证功能,软件每次在 97 份定标样品中随机选取 15 份样品作为验证样品,用其余的样品 (92 份) 建立定标模型,并对验证样品做预测,自动重复至所有样品均被作过验证样品,再通过验证结果计算其标准误差 SEP(C) 和相关系数。以此在定标样品群体中,通过内部交叉方式对定标方程的精度进行了验证。交叉验证结果如图 2,其 SEP(C) 和 RSQ 分别为 0.170、0.987,相关性达到了极显著水平。

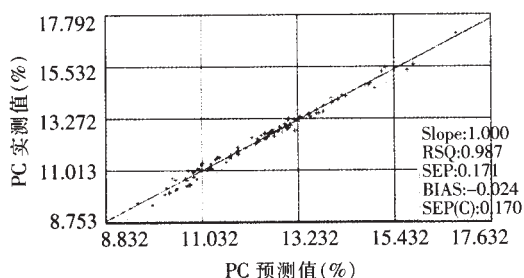


图 2 糙米蛋白质预测模型内部交叉验证图

外部验证是选择一批与建模样品集独立无关的样品,通过比较独立样品预测值与化学值的差异来判断模型的预测准确性,同时利用化学法和近红外谷物品质分析仪检测其蛋白质含量。结果可见,化学法检测结果和近红外预测值相关系数为 0.9954,表明近红外光谱法测试的糙米蛋白质含量的变化与化学法结果一致,如图 3。

### 3 结论

稻米蛋白质含量常规化验分析工作格外繁重,

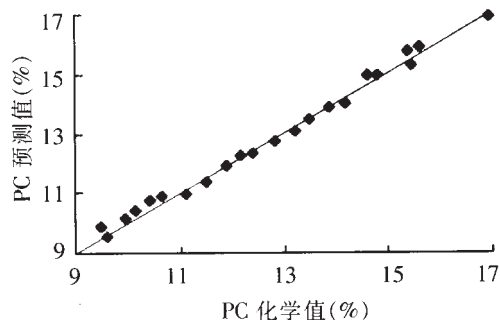


图 3 糙米蛋白质含量预测值和化学值之间相关性图

测定方法繁琐费时,难以及时准确地提供分析数据。本实验以近红外透射光谱分析技术为基础,建立了糙米蛋白质含量的定量分析数学模型,很好地解决了常规分析难以解决的问题。由本实验建立的数学模型获得的近红外定量分析结果有很高的准确性,预测误差接近常规分析方法的误差,可以代替稻米蛋白含量常规分析方法。

### 参考文献:

- [1] Ciurczak E W. Uses of near infrared spectroscopy in cereal product[J]. Food Testing and Analysis, 1995(5):35~39.
- [2] Osborne B G. NIRS analysis of grain: past, present and future. In Batten G D ed. Leap Ahead with Near Infrared Spectroscopy[M]. Yanco, Australia: NSW, 1995. 133~135.
- [3] Delwiche S R, Bean M M, Miller R E, et al. Apparent amylose content of milled rice by near infrared reflectance spectrometry[J]. Cereal Chem, 1995, 72: 182~187.
- [4] Delwiche S R, McKenzie K S, Webb B D. Quality characteristics in rice by near infrared reflectance analysis of whole grain milled sample[J]. Cereal Chem, 1996, 73: 257~263.
- [5] 曹干, 谭中文, 梁计南. 蔗汁品质成分的傅立叶变换近红外分析数学模型[J]. 中国农业科学, 2003, 36(3): 254~258.
- [6] 舒庆尧, 吴殿星, 夏英武, 等. 用近红外反射光谱测定小样本糙米粉的品质性状[J]. 中国农业科学, 1999, 32(4): 92~97.
- [7] 中华人民共和国国家标准. 谷类、豆类作物种子粗蛋白测定方法 (半微量凯氏法) [M]. 技术标准出版社.

(上接第 147 页)

Lactobacillus acidophilus and bifidobacteria in yogurt using two step fermentation and neutralized mix [J]. Food Australia, 1997, 49: 363~366.

[7] Ravula, R R, N P Shah. Survival of Microencapsulated of *L. acidophilus* and *Bifidobacterium* spp in fermented frozen dairy desserts[J]. Dairy Sci, 82(4).

[8] Dave R I, N P Shah. Effect of cysteine on the viability of yogurt and probiotic bacteria in yogurts made with commercial starter cultures[J]. Int Dairy, 1997(7): 537~545.

[9] Dave R I, N P Shah. Effectiveness of ascorbic acid as an oxygen scavenger in improving viability of probiotic bacteria in yogurts made with commercial starter cultures[J]. Int. Dairy, 1997(7): 435~443.

[10] N P Shah, P Jelen. Lactose absorption by post-weaning rats from yogurt, quarg, and quarg whey[J]. Dairy Sci, 1991, 74: 1512~1520.

[11] N P Shah, W E V Lankaputhra. Improving viability of *L. acidophilus* and *Bifidobacterium* spp in yogurt[J]. Int Dairy, 1997(7): 349~356.