

近红外光谱法快速检测美藤果主要品质指标的定量模型研究

杨水艳¹, 彭涛², 杨瑾¹, 陈国艳¹, 郭颖¹, 陶银¹, 刘付英¹, 邵志凌¹

(1. 云南省粮油科学研究院(云南省粮油产品质量监督检验测试中心), 昆明 650033;

2. 西双版纳印奇生物资源开发有限公司, 云南 西双版纳 666100)

摘要:美藤果含有丰富的油脂、蛋白质等营养物质,具有重要的营养价值。为了快速检测美藤果品质,采用传统国标方法获得美藤果水分含量、含油量(湿基)和蛋白质含量(湿基)的化学值,之后对美藤果颗粒及美藤果粉的近红外光谱全谱及不同波段光谱进行预处理,通过偏最小二乘法分别建立了美藤果颗粒及美藤果粉的校正模型。结果显示,美藤果颗粒和美藤果粉建立的校正模型的相关系数(R_c)均大于0.94,校正均方根误差($RMSEC$)小于0.45%,交叉验证相关系数(R_{cv})大于0.91,验证均方根误差($RMSECV$)小于0.53%。用建立的美藤果颗粒和美藤果粉校正曲线对未参与建模的20个样品进行了近红外检测,结果显示,用两种方法建立的校正模型都能较好地实现对美藤果水分、含油量(湿基)和蛋白质含量(湿基)的预测,但是使用美藤果颗粒建立的校正模型进行美藤果品质检测更简便,且对样品没有破坏性。

关键词:美藤果;近红外光谱法;水分含量;含油量;蛋白质含量

中图分类号:TS222;TQ646

文献标识码:A

文章编号:1003-7969(2020)03-0038-07

Quantitative model for rapid detection of main quality index of Sacha Inchi (*Plukenetia volubilis* L.) seed by near infrared spectrometry

YANG Shuiyan¹, PENG Tao², YANG Jin¹, CHEN Guoyan¹,
GUO Ying¹, TAO Yin¹, LIU Fuying¹, SHAO Zhiling¹

(1. Yunnan Grain and Oil Science Research Institute (Yunnan Grain and Oil Product Quality Supervision and Inspection Center), Kunming 650033, China; 2. Yinqi Biological Resources Development Co., Ltd., Xishuangbanna 666100, Yunnan, China)

Abstract: Sacha Inchi seed is rich in nutrients, such as fat and protein, and has important nutritional value. In order to rapidly detect the quality of Sacha Inchi seed, the chemical values of moisture content, oil content (wet basis) and protein content (wet basis) in Sacha Inchi seed were obtained by traditional national standard methods. The full and part near infrared spectrum of Sacha Inchi seed and its powder were treated with different method, and then the calibration models of Sacha Inchi seed and its powder were established by partial least squares regression. The results showed that the correlation coefficients (R_c) of the calibration models were all high than 0.94, the corrected root mean square error ($RMSEC$) was less than 0.45%, the correlation coefficients of the cross validation models (R_{cv}) were high than 0.91, and the root mean square error of cross validation ($RMSECV$) was less than 0.53%. Near infrared

收稿日期:2019-07-04;修回日期:2019-11-08

基金项目:云南省科技厅青年项目(2017FD026)

作者简介:杨水艳(1987),女,工程师,硕士,主要从事粮食、油脂检测及相关研究(E-mail) ysy200891@126.com。

通信作者:邵志凌,高级工程师(E-mail) 1051339040@qq.com。

(NIR) measurements were carried out on 20 samples which were not involved in the established models, and the results showed that the calibration models could predict moisture content, oil content (wet basis) and protein content (wet basis) of Sacha Inchi seed and its powder.

However, the calibration model established by Sacha Inchi seed was more convenient and non-destructive to the samples.

Key words: Sacha Inchi (*Plukenetia volubilis* L.) seed; near infrared spectrometry; moisture content; oil content; protein content

美藤果(*Plukenetia volubilis* L.),又名南美油藤、星油藤、印加果、印加花生、印奇果,是大戟科(Euphorbiaceae)的一种木质藤本植物,原生长在南美洲的热带雨林海拔200~1500 m,印加语称Sacha Inchi或Inca Inchi,已被南美印第安土著居民食用了3000多年^[1-5]。美藤果当年种植,当年可挂果,2~3年即进入盛产期,产量很高^[6]。美藤果种子的主要成分是油脂、蛋白质、维生素、甾醇等生物活性物质,以及生物碱、皂甙和香豆素等次生代谢物^[7]。美藤果含油量很高,在41%~54%,蛋白质含量25%~27%^[8-12]。美藤果油对调节血脂、预防心血管疾病、保养肌肤等方面有显著作用^[13]。

水分含量、含油量和蛋白质含量是美藤果的重要品质指标,检测这些指标主要采用烘箱干燥法、索氏抽提法、凯氏定氮法等传统方法。美藤果种子有一层近1 mm厚的果壳,而且美藤果含油量较高,在检测之前须将其粉碎至合适的粒度,普通的实验室粉碎机难以对其进行粉碎。Niu^[9]、Zanquia^[11]等采用搅拌机进行粉碎后过筛以达到实验要求。GB/T 14488.1—2008《植物油料 含油量测定》中规定对于含油量高的样品,在粉碎前可将其放入-10~-20℃下冷冻,但是粉碎过程中及粉碎后要避免其吸收水分。所以在采用传统方法对美藤果的品质指标进行检测时,样品的前处理过程比较烦琐,耗时长,检测中消耗试剂多。相对于传统方法,近红外光谱法具有分析速度快、效率高、非破坏性、分析成本低、无污染、几乎不需预处理、操作方便、无需使用试剂等优点^[14-15]。目前,国内外尚无已知的美藤果品质指标的近红外光谱检测方法。本文通过传统国标方法检测美藤果水分含量、蛋白质含量和含油量的化学值,之后与美藤果(包括颗粒和粉)的近红外光谱进行拟合之后,建立美藤果水分含量、蛋白质含量和含油量的近红外光谱校正模型,并对该模型进行验证。建立的模型可用于美藤果采收及美藤果油生产加工企业快速检测美藤果的品质,同时也可用于美藤果种子培育过程中品质监测。

1 材料与方法

1.1 实验材料

1.1.1 原料与试剂

美藤果,由西双版纳印奇生物资源开发有限公

司采集并提供,共121份,每份3 kg,随机抽取其中的101份样品用于建立校正模型,20份用作验证。美藤果主要采自我国云南景洪、普文、勐腊、勐养、大勐龙、普洱市、墨江县、红河州,泰国以及老挝琅勃拉邦、南塔、乌多姆赛、丰沙里。采集时间为2016—2018年的不同收获月份。

石油醚(沸程60~90℃),天津市风船化学试剂科技有限公司;EDTA标准品(含氮量9.58%),丹麦FOSS公司。

1.1.2 仪器与设备

PM200行星式球磨仪,德国Retsch公司;YS-02小型高速粉碎机,北京燕山正德机械设备有限公司;SER148脂肪测定仪,意大利VELP公司;ThermoStable SOFW155电热鼓风干燥箱,韩国DAIHAN Scientific公司;DA7250近红外分析仪,瑞典波通仪器公司;Dumatec 8000杜马斯燃烧定氮仪,丹麦FOSS公司。

1.2 实验方法

1.2.1 样品制备

所有样品在测定之前用孔径4.5 mm的筛子去除灰尘等杂质,手工去除其他固体杂质。用于采集近红外光谱及水分含量测定的美藤果采用YS-02小型高速粉碎机粉碎12 s(粉碎时间过长会导致出油过多,影响后续测定),得到美藤果粉。粉碎的样品装入聚四氟乙烯袋子密封并及时用于水分含量测定及近红外光谱扫描。

用小型高速粉碎机粉碎得到的美藤果粉,粒度达不到含油量(湿基)和蛋白质含量(湿基)测定的要求,故采用PM200行星式球磨仪进行粉碎。通过预实验确定560 r/min速度粉碎美藤果90 s,此时样品成膏状,果肉、果壳粉碎充分且基本不会出油。

1.2.2 化学值检测

水分含量测定参照GB 5009.3—2016《食品安全国家标准 食品中水分的测定》第一法直接干燥法。每个样品重复测定2次,相对误差不得超过10%。

含油量(湿基)测定参考GB/T 14488.1—2008《植物油料 含油量测定》、GB 5009.6—2016《食品安全国家标准 食品中脂肪的测定》及文献[9],按下述操作进行:称取2.5 g(精确到0.001 g)样品于

滤纸筒中,用石油醚(沸程 60~90℃)于 130℃浸提 4 h,淋洗 3 h,回收石油醚后将含有抽提油脂的恒重烧杯于(103±2)℃的电热鼓风干燥箱干燥 1.5 h 后冷却称重。每个样品重复测定 2 次,相对误差不得超过 10%。

蛋白质含量(湿基)测定参考 GB 5009.5—2016《食品安全国家标准 食品中蛋白质的测定》第三法燃烧法。通过对仪器条件及工作曲线等进行优化,最终确定检测条件:燃烧炉顶部温度 1 100℃;燃烧炉底部温度 300℃;还原炉顶部温度 600℃;还原炉底部温度 750℃;恒温箱 40℃;IC 反应器 150℃。以 EDTA 为标准物质建立工作曲线,称取约 100 mg 样品进行测定。蛋白质含量为氮含量乘以系数 6.25。每个样品重复测定 2 次,相对误差不得超过 10%。

1.2.3 校正模型的建立

1.2.3.1 近红外光谱采集

考虑到模型除了可以用于实验室中快速检测美藤果品质外,还可用于美藤果收购、生产加工油脂以及育种过程中的质量控制,模型必须具有可操作性,尤其在收购环节中,采用模型进行检测时必须快速、简便、易行,所以首先采用整粒美藤果进行扫描光谱后建模。

美藤果种子有一层近 1 mm 厚的果壳,在扫描近红外光谱时,果壳会影响近红外光的透射从而使吸光度减小,如果将果壳除去,会排除这样的干扰,但是美藤果果壳比较坚硬,剥壳比较耗时。采用小型粉碎机将其粉碎,既可以减少果壳的影响而且样品均匀性更好,更具有代表性。

综上,用 DA7250 近红外分析仪分别采集美藤果及美藤果粉的近红外光谱,采用漫反射方式扫描,波长 950~1 650 nm,光谱分辨率 2 nm,每个样品检测 4 次,取平均吸光度光谱作为最终光谱。

1.2.3.2 光谱预处理

在近红外光谱测量过程中,由于多种因素影响,

导致测量光谱中含有噪声、基线漂移、波长漂移等不稳定因素。为了减少不利因素的影响,对光谱信号进行消除噪声等预处理是十分必要的。谱图预处理主要包括噪声和其他谱图不规则影响因素的滤除和谱图信息的优化。在近红外光谱分析领域中,常用的预处理方法包括光谱增强算法、标准正态变量变换(SNV)等多种方法。在实际应用过程中,通常采用一种或多种方法相结合对光谱进行预处理^[18]。本文主要采用 Savitzky-Golay 卷积一阶求导处理(SGFD)、SNV 及二者的结合对光谱进行预处理。

1.2.3.3 校正集与验证集选择

在建立光谱多元校正模型之前要进行样本校正集和验证集的挑选,这是光谱分析中的一个重要环节,直接影响所建立校正模型的准确性。目前,常用的样本校正集与验证集划分方法有随机(RS)法、Kennard-Stone(KS)法、含量梯度法(Rank)等^[16]。本文采用 RS 法进行选择,得到 101 个校正集样品和 20 个验证集样品。

1.2.3.4 建模方法及模型评价

采用 The Unscrambler X10.4 软件对光谱进行不同预处理后采用偏最小二乘(Partial Least Squares,PLS)法建立校正模型及交叉验证。采用校正相关系数(Correlation coefficient of calibration, R_c)、校正均方根误差(Root mean square error of calibration, $RMSEC$)、交叉验证相关系数(Correlation coefficient of cross validation, R_{cv})、验证均方根误差(Root mean square error of cross validation, $RMSECV$)进行模型性能评估。通常一个好的模型应该具有高的 R_c 、 R_{cv} ,低的 $RMSEC$ 和 $RMSECV$,并且 $RMSEC$ 和 $RMSECV$ 值的差异应尽量小^[17]。

2 结果与分析

2.1 美藤果品质指标的化学值

美藤果品质指标值的分布范围、平均值和标准偏差见表 1。

表 1 美藤果品质指标化学值统计分析

参数	校正集($n=101$)			验证集($n=20$)			%
	范围	平均值	标准偏差	范围	平均值	标准偏差	
水分含量	5.77~8.19	6.92	0.53	6.16~8.19	7.53	0.62	
含油量(湿基)	29.8~37.3	34.8	1.22	31.70~37.0	34.10	1.17	
蛋白质含量(湿基)	17.2~23.1	20.8	1.49	16.6~21.6	19.5	1.32	

由表 1 可见,采用 RS 法选择的验证集与校正集中各指标的分布、平均值和标准偏差基本一致。美藤果化学值分布直方图见图 1。由图 1 可见,美

藤果的 3 个品质指标的化学值基本呈正态分布。这些说明样品采集较合理,具有代表性,能满足近红外光谱建立定量模型的条件。

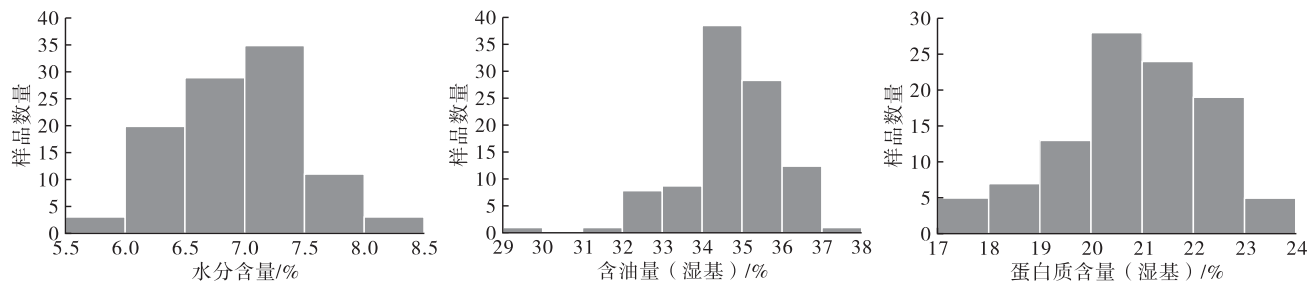


图1 美藤果品质指标化学值分布直方图

2.2 美藤果颗粒及美藤果粉近红外光谱图(见图2)

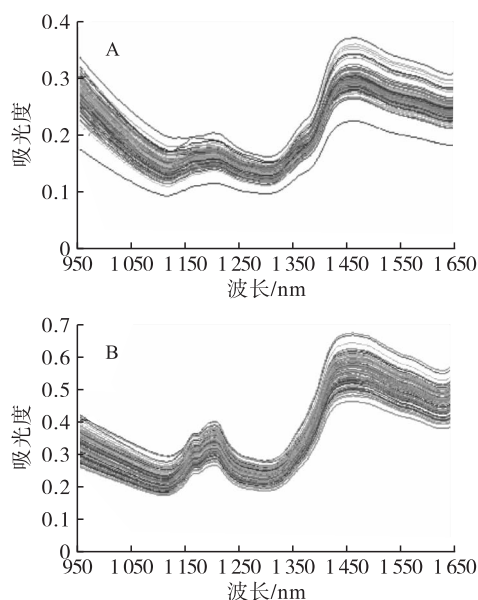


图2 美藤果颗粒(A)及美藤果粉(B)近红外光谱图

从图2可以看出,美藤果颗粒及美藤果粉采集

的近红外光谱趋于一致,在1 206、1 450 nm处有2个特征峰,这2个特征峰主要是O—H键的二级振动。由于美藤果粉均匀性比美藤果颗粒好,而且降低了果壳对近红外光的散射作用,所以美藤果粉的吸光度比颗粒高,且特征吸收峰更明显。

2.3 PLS模型的建立

2.3.1 水分含量的PLS模型

在PLS模型建立过程中,主因子数是模型的重要参数,对模型的预测结果有很大的影响。因子数过低时模型精度不足,会丢失光谱的有效信息,导致欠拟合;因子数过高易出现过拟合的现象。当获得较小 $RMSECV$ 同时 $RMSEC$ 与 $RMSECV$ 无明显差异时,判定为最优主因子数^[18]。根据美藤果颗粒和美藤果粉的近红外光谱图,对特征峰所在波段1 110~1 270 nm、1 300~1 650 nm、1 110~1 650 nm及全谱的光谱信号进行不同预处理,在最佳主因子数下建立的水分含量PLS模型校正结果及预测结果见表2。

表2 不同光谱预处理下水分含量PLS建模结果

种类	波长范围/nm	最佳预处理方法	最佳主因子数	R_c	$RMSEC/\%$	R_{cv}	$RMSECV/\%$
美藤果颗粒	全谱	SNV + SGFD	12	0.987 0	0.084 8	0.958 9	0.150 7
	1 110 ~ 1 270	SNV + SGFD	6	0.963 2	0.144 1	0.945 7	0.178 7
	1 300 ~ 1 650	SNV	16	0.990 6	0.072 4	0.971 8	0.124 8
	1 110 ~ 1 650	SNV	19	0.993 0	0.061 7	0.975 0	0.117 0
美藤果粉	全谱	SNV	10	0.988 0	0.081 6	0.983 7	0.096 2
	1 110 ~ 1 270	SNV	10	0.975 9	0.115 0	0.967 7	0.134 2
	1 300 ~ 1 650	SNV + SGFD	4	0.976 7	0.113 7	0.973 8	0.122 0
	1 110 ~ 1 650	SNV	10	0.984 0	0.094 5	0.979 2	0.110 5

由表2可见,美藤果颗粒的最佳模型是:1 110~1 650 nm波长,经过SNV预处理,最佳主因子数19,校正模型相关系数 R_c 达到0.993 0, $RMSEC$ 为0.061 7%,预测模型相关系数 R_{cv} 达到0.975 0, $RMSECV$ 为0.117 0%。

美藤果粉全谱经过SNV预处理后建立的PLS模型最佳,最佳主因子数10,校正模型相关系数 R_c 达到0.988 0, $RMSEC$ 为0.081 6%,预测模型相关

系数 R_{cv} 达到0.983 7, $RMSECV$ 为0.096 2%。

2.3.2 含油量(湿基)的PLS模型

含油量(湿基)的建模过程与水分含量的建模过程类似,具体的PLS模型校正结果及预测结果见表3。

由表3可见,美藤果颗粒在1 110~1 650 nm波长的原始光谱建立的校正模型和验证模型效果最好,最佳主因子数10,校正模型相关系数 R_c 达到

0.956 3, $RMSEC$ 为 0.336 1%, 验证模型相关系数 R_{cv} 达到 0.931 0, $RMSECV$ 为 0.444 2%。

美藤果粉在 1 300 ~ 1 650 nm 的光谱经 SGFD 预处理后, 最佳主因子数为 11 的情况下建立的校正

模型和验证模型的效果最好, 校正模型相关系数 R_c 达到 0.974 1, $RMSEC$ 为 0.277 8%, 验证模型相关系数 R_{cv} 达到 0.914 1, $RMSECV$ 为 0.524 3%。

表 3 不同光谱预处理下含油量(湿基)PLS 建模结果

种类	波长范围/nm	最佳预处理方法	最佳主因子数	R_c	$RMSEC/\%$	R_{cv}	$RMSECV/\%$
	全谱	SNV + SGFD	5	0.910 0	0.418 6	0.882 6	0.501 6
美藤果颗粒	1 110 ~ 1 270	SGFD	9	0.954 9	0.359 1	0.896 9	0.525 2
	1 300 ~ 1 650	SGFD	5	0.928 2	0.405 9	0.901 8	0.495 1
	1 110 ~ 1 650	原始	10	0.956 3	0.336 1	0.931 0	0.444 2
	全谱	SGFD + SNV	8	0.934 5	0.424 8	0.890 0	0.550 4
美藤果粉	1 110 ~ 1 270	SNV + SGFD	6	0.913 7	0.496 1	0.886 6	0.574 4
	1 300 ~ 1 650	SGFD	11	0.974 1	0.277 8	0.914 1	0.524 3
	1 110 ~ 1 650	SNV + SGFD	8	0.949 4	0.382 4	0.899 4	0.522 9

2.3.3 蛋白质含量(湿基)的 PLS 模型
蛋白质含量的建模过程与水分含量及含油量的

建模过程类似, 具体的 PLS 模型校正结果及预测结果见表 4。

表 4 不同光谱预处理下蛋白质含量(湿基)PLS 建模结果

种类	波长范围/nm	最佳预处理方法	最佳主因子数	R_c	$RMSEC/\%$	R_{cv}	$RMSECV/\%$
	全谱	SNV + SGFD	7	0.941 9	0.451 3	0.891 1	0.599 2
美藤果颗粒	1 110 ~ 1 270	SNV	8	0.962 0	0.363 9	0.929 7	0.497 4
	1 300 ~ 1 650	SGFD + SNV	6	0.944 9	0.466 9	0.890 5	0.671 6
	1 110 ~ 1 650	SNV + SGFD	7	0.962 7	0.366 0	0.929 5	0.530 3
	全谱	SNV	8	0.903 4	0.583 3	0.872 6	0.684 0
美藤果粉	1 110 ~ 1 270	原始	7	0.947 5	0.424 9	0.918 2	0.508 9
	1 300 ~ 1 650	SGFD + SNV	10	0.975 6	0.312 4	0.900 2	0.648 4
	1 110 ~ 1 650	原始	11	0.930 4	0.527 2	0.892 7	0.656 6

由表 4 可见, 美藤果颗粒在 1 110 ~ 1 270 nm 波长的光谱经过 SNV 预处理后, 最佳主因子数为 8 的情况下建立的校正模型和验证模型的效果最好, 校正模型相关系数 R_c 达到 0.962 0, $RMSEC$ 为 0.363 9%, 验证模型相关系数 R_{cv} 达到 0.929 7, $RMSECV$ 为 0.497 4%。

美藤果粉在 1 110 ~ 1 270 nm 波长的原始光谱建立的校正模型和验证模型最好, 最佳主因子数 7, 校正模型相关系数 R_c 达到 0.947 5, $RMSEC$ 为 0.424 9%, 验证模型相关系数 R_{cv} 达到 0.918 2, $RMSECV$ 为 0.508 9%。

2.4 模型验证

在模型投入使用前还需对其进行外部验证, 以便检查能否准确预测结果。良好的模型除了满足内部交叉验证需要, 在用验证集进行外部验证时, 其预

测结果与标准方法实际测量结果应有良好的一致性。一般用已建立的模型对 5 ~ 10 个性质参数已知但未参与建模的合格样品(即验证集)进行分析测试, 只要误差在能够接受范围内的样品数与误差在不能够接受范围内的样品数之比大于 3:2, 则一般认为该模型是有效的, 便可投入使用^[15]。

将建好的校正曲线拷贝到近红外光谱仪, 对未参与建模的 20 个样品进行检测, 实测值与预测值及相对误差(Relative error, RE)见表 5。

由表 5 可见, 美藤果颗粒和美藤果粉分别有 3 个样品的蛋白质含量预测值超出了误差范围($|RE| \leq 10\%$), 其余预测值均符合误差要求, 这表明用两种方法采集近红外光谱建立的校正模型都能较好地实现对美藤果水分含量、含油量(湿基)和蛋白质含量(湿基)的预测。

表5 校正模型验证结果

验证 集样 品	水分含量/%			含油量(湿基)/%			蛋白质含量(湿基)/%		
	实测值	预测值		实测值	预测值		实测值	预测值	
		颗粒	粉		颗粒	粉		颗粒	粉
1	8.03	7.96(-0.87)	7.78(-3.11)	34.7	34.7(0)	33.4(-3.75)	18.5	18.8(1.62)	18.1(-2.16)
2	7.86	8.15(3.69)	7.72(-1.78)	34.4	37.3(8.43)	34.6(0.58)	20.0	20.4(2.00)	20.0(0)
3	6.16	6.23(1.14)	6.36(3.25)	35.8	34.1(-4.75)	33.4(-6.70)	20.8	19.3(-7.21)	19.1(-8.17)
4	7.03	7.06(0.43)	7.03(0)	31.9	32.4(1.57)	31.9(0)	18.6	19.8(6.45)	20.2(8.60)
5	8.00	7.60(-5.00)	7.84(-2.00)	33.1	35.1(6.04)	32.6(-1.51)	20.4	21.4(4.90)	20.5(0.49)
6	6.52	6.74(3.37)	6.01(-7.82)	33.6	35.5(5.65)	33.4(-0.60)	20.2	19.3(-4.46)	19.8(-1.98)
7	8.02	7.66(-4.49)	7.74(-3.49)	32.3	32.9(1.86)	31.6(-2.17)	20.0	19.1(-4.50)	20.2(1.00)
8	7.90	7.66(-3.04)	7.95(0.63)	37.0	35.2(-4.86)	35.5(-4.05)	16.6	18.3(10.24)	16.0(-3.61)
9	6.87	7.32(6.55)	6.76(-1.60)	35.9	36.8(2.51)	33.3(-7.24)	19.5	19.7(1.03)	16.8(-13.85)
10	7.74	7.74(0)	7.83(1.16)	30.1	31.6(4.98)	30.5(1.33)	18.3	19.9(8.74)	20.2(10.38)
11	8.16	7.92(-2.94)	7.96(-2.45)	33.7	34.7(2.97)	34.4(2.08)	19.9	19.2(-3.52)	19.0(-4.52)
12	7.91	8.13(2.78)	8.35(5.56)	35.6	36.9(3.65)	34.6(-2.81)	19.2	18.7(-2.60)	17.8(-7.29)
13	7.54	7.13(-5.44)	7.69(1.99)	32.4	33.0(1.85)	30.9(-4.63)	18.7	19.4(3.74)	17.4(-6.95)
14	8.10	7.92(-2.22)	7.47(-7.78)	33.8	34.5(2.07)	33.9(0.30)	21.1	19.4(-8.06)	20.3(-3.79)
15	6.77	7.10(4.87)	6.88(1.62)	31.7	34.5(8.83)	33.1(4.42)	17.3	19.3(11.56)	15.6(-9.83)
16	7.98	7.95(-0.38)	7.79(-2.38)	32.0	33.9(5.93)	33.3(4.06)	21.6	21.3(-1.39)	21.4(-0.93)
17	7.45	7.76(4.16)	7.68(3.09)	35.3	35.1(-0.57)	35.2(-0.28)	20.0	18.8(-6.00)	19.5(-2.50)
18	7.60	7.01(-7.76)	7.78(2.37)	31.6	32.0(1.27)	31.2(-1.27)	21.4	19.1(-10.75)	19.7(-7.94)
19	6.77	7.00(3.40)	6.91(2.07)	34.4	34.3(-0.29)	32.4(-5.81)	19.3	19.5(1.04)	17.3(-10.36)
20	8.19	7.98(-2.56)	7.58(-7.45)	35.7	36.2(1.40)	35.1(-1.68)	18.4	18.6(1.09)	18.0(-2.17)

注:括号中数据为各指标的相对误差。

3 结论

本文从云南、泰国、老挝等不同美藤果种植基地采集了2016—2018年不同收获月份的121份样品,随机抽取了101份用于建立PLS模型,20份样品用于外部验证。采用传统的烘箱干燥法、索氏抽提法、燃烧法分别测定了121份美藤果样品的水分含量、含油量(湿基)和蛋白质含量(湿基),之后分别采集了美藤果颗粒和美藤果粉的近红外光谱,对光谱进行不同的预处理后进行PLS建模并进行了外部验证。结果表明:采用两种方法建立的PLS模型校正模型的相关系数(R_c)均大于0.94,校正均方根误差($RMSEC$)小于0.45%,交叉验证相关系数(R_{cv})大于0.91,验证均方根误差($RMSECV$)小于0.53%。通过外部验证实验表明用两种方法采集近红外光谱建立的校正模型都能较好地实现对美藤果水分、含油量(湿基)和蛋白质含量(湿基)的预测。虽然两种方法建立的校正模型都能满足对美藤果品质的预测,但是使用美藤果颗粒建立的校正模型进行美藤果品质的检测更简便,而且对样品没有破坏性。

参考文献:

[1] GUILLÉN M D, RUIZ A, CABO N, et al. Characterization of sachu inchi (*Plukenetia volubilis* L.) oil by FTIR pec-

troscopy and ^1H NMR. Comparison with linseed oil[J]. J Am Oil Chem Soc, 2003, 80(8): 755-762.

- [2] 杨小敏, 张亚飞, 胡鹏. 美藤果油的研究开发进展[J]. 粮食与食品工业, 2015, 22(3): 37-41.
- [3] LIU Q, XU Y K, ZHANG P, et al. Chemical composition and oxidative evolution of Sachu Inchi (*Plukenetia volubilis* L.) oil from Xishuangbanna (China) [J/OL]. Grasas Aceites, 2014, 65(1): e012 [2019-07-01]. <https://doi.org/10.3989/gya.075713>.
- [4] CHASQUIBOL N A, DEL AGUILA C, YÁCONO J C, et al. Characterization of glyceridic and unsaponifiable compounds of sachu inchi (*Plukenetia huayllabambana* L.) oils [J]. J Agric Food Chem, 2014, 62(41): 10162-10169.
- [5] 董玉玲, 陈茂盛, 王秀兰, 等. 木本油料作物美藤果组织培养植株再生体系的建立[J]. 分子植物育种, 2016(2): 462-470.
- [6] 蔡志全, 杨清, 唐寿贤, 等. 木本油料作物星油藤种子营养价值的评价[J]. 营养学报, 2011(2): 193-195.
- [7] 蔡志全. 特种木本油料作物星油藤的研究进展[J]. 中国油脂, 2011, 36(10): 1-6.
- [8] MAURER N E, HATTA - SAKODA B, PASCUAL - CHAGMAN G, et al. Characterization and authentication of a novel vegetable source of omega-3 fatty acids, sachu inchi (*Plukenetia volubilis* L.) oil [J]. Food Chem, 2012, 134(2): 1173-1180.

(下转第61页)

参考文献:

- [1] ZHONG H Y, BEDGOOD D, BISHOP A, et al. Endogenous biophenol, fatty acid and volatile profiles of selected oils[J]. Food Chem, 2007, 100(4): 1544 - 1551.
- [2] SHINTANI R, FU G C. Highly enantioselective desymmetrization of anhydrides by carbon nucleophiles; reactions of grignard reagents in the presence of (-) - sparteine[J]. Angewandte Chem Inform, 2002, 41(6): 1057 - 1059.
- [3] WARNER K, DUNLAP C. Effects of expeller - pressed/physically refined soybean oil on frying oil stability and flavor of french - fried potatoes [J]. J Am Oil Chem Soc, 2006, 83(5): 435 - 441.
- [4] 姜建国, 吴群, 山长柱, 等. 油茶籽低温冷榨制油工艺实践[J]. 粮食与食品工业, 2008, 15(4): 17 - 23.
- [5] 罗凡, 费学谦, 杨楠, 等. 热处理延长油茶籽油氧化稳定性研究[J]. 中国油脂, 2018, 43(9): 17 - 22, 29.
- [6] 黎贵卿, 江燕, 陆顺忠, 等. 不同加工方式对茶油中 VE 含量影响[J]. 广西林业科学, 2014, 43(3): 322 - 324.
- [7] 于蒙杰, 张学军, 牟国良, 等. 我国热风干燥技术的应用研究进展[J]. 农业科技与装备, 2013(8): 14 - 16.
- [8] 冯有胜. 加热温度和时间对菜籽油质量影响的研究[J]. 中国油脂, 2003, 28(6): 17 - 19.
- [9] MA S Y, FAN D M, WANG L Y, et al. The impact of microwave heating on the granule state and thermal properties of potato starch[J]. Starch Stärke, 2015(5/6): 391 - 398.
- [10] 陈洁, 洪振童, 刘国琴, 等. 微波焙炒对葵花籽油品质和挥发性物质的影响[J]. 现代食品科技, 2015, 31(8): 211 - 218.
- [11] KSHITIJ S, FEYERA G G, BRUNO D M. A novel insight on the high oxidative stability of roasted mustard seed oil in relation to phospholipid, Maillard type reaction products, tocopherol and canolol contents [J]. Food Res Int, 2013, 54: 587 - 594.
- [12] 周洋, 杨文婧, 操丽丽, 等. 生育酚抑制油脂氧化机制研究进展[J]. 中国油脂, 2018, 43(8): 32 - 38.
- [13] NEUZIL J, WITTING P K, STOCKER R. α - Tocopheryl hydroquinone is an efficient multifunctional inhibitor of radical - initiated oxidation of low density lipoprotein lipids[J]. Proceed Natl Acad Sci USA, 1997, 94(15): 7885 - 7890.
- [14] AZADMARD - DAMIRCHI S, HABIBI - NODEH F, HESARI J, et al. Effect of pretreatment with microwaves on oxidative stability and nutraceuticals content of oil from rapeseed[J]. Food Chem, 2010, 121(4): 1211 - 1215.
- [15] 杨俊换, 周建平, 胡尧超. 油茶籽壳的化学成分分析与扫描电镜观察[J]. 湖南农业大学学报(自然科学版), 2013, 39(5): 554 - 558.
- [16] FIŠNAR J, DOLEŽAL M, RÉBLOVÁ Z. Tocopherol losses during pan - frying [J]. Eur J Lipid Sci Technol, 2015, 116(12): 1694 - 1700.
- [17] CHIRINOS R, ZULOETA G, PEDRESCHI R, et al. Sacha inchi (*Plukenetia volubilis*): a seed source of polyunsaturated fatty acids, tocopherols, phytosterols, phenolic compounds and antioxidant capacity [J]. Food Chem, 2013, 141(3): 1732 - 1739.
- [18] ZOU X B, ZHAO J W, MALCOLM J W, et al. Variables selection methods in near - infrared spectroscopy [J]. Anal Chim Acta, 2010, 667(1/2): 14 - 32.
- [19] 杨琼. 近红外光谱法定量分析及其应用研究[D]. 重庆: 西南大学, 2009.
- [20] 梁晨. 近红外光谱多元校正模型传递方法的研究[D]. 北京: 北京化工大学, 2016.
- [21] 李江波, 彭彦昆, 陈立平, 等. 近红外高光谱图像结合 CARS 算法对鸭梨 SSC 含量定量测定[J]. 光谱学与光谱分析, 2014, 34(5): 1264 - 1269.
- [22] 夏柏杨, 任芊. 近红外光谱分析技术的一些数据处理方法的讨论[J]. 光谱实验室, 2005, 22(3): 629 - 634.

(上接第 43 页)

- [9] NIU L J, LI J L, CHEN M S, et al. Determination of oil contents in Sacha inchi (*Plukenetia volubilis*) seeds at different developmental stages by two methods: Soxhlet extraction and time - domain nuclear magnetic resonance [J]. Ind Crop Prod, 2014, 56: 187 - 190.
- [10] 杨水艳, 邵志凌, 聂绪恒. 10 种云南植物油脂脂肪酸组成比较分析与评价[J]. 中国油脂, 2018, 43(1): 144 - 146.
- [11] ZANQUA A B, DA SILVA C M, DE MORAIS D R, et al. Sacha inchi (*Plukenetia volubilis* L.) oil composition varies with changes in temperature and pressure in subcritical extraction with *n* - propane [J]. Ind Crop Prod, 2016, 87: 64 - 70.
- [12] SANCHEZ - REINOSO Z, GUTIÉRREZ L F. Effects of the emulsion composition on the physical properties and oxidative stability of sacha inchi (*Plukenetia volubilis* L.) oil microcapsules produced by spray drying[J]. Food Bioprocess Technol, 2017, 10(7): 1354 - 1366.