# 近红外光谱结合化学计量学技术快速测定 面条中马铃薯全粉的含量

吕都, 董楠, 陈中爱, 王辉, 李俊, 刘嘉

(贵州省农业科学院生物技术研究所,贵州省农业科学院食品加工研究所,贵州贵阳 550006)

摘要: 马铃薯干物质的主要成分为淀粉,将其与面粉混合后采用传统工艺制作成的马铃薯面条,使用化学检测方法很难测定马铃薯面条中马铃薯全粉的含量和面粉的含量。本研究旨在建立一种快速检测面条中马铃薯全粉含量的方法,为市场监督部门提供技术支撑。以不同马铃薯全粉含量的面条样品 236 份为实验材料,采集样品近红外漫反射光谱,结合化学计量学软件建立并优化预测模型。结果表明: 近红外光谱图范围为 9403.6~5446.2 cm<sup>-1</sup> 时,采用最小-最大归一化预处理光谱,建立的预测模型稳定性强预测精度高,预测模型的外部验证决定系数(R<sup>2</sup><sub>val</sub>)为 0.9775、预测均方根误差(RMSEP)为 1.28%,斜率为 0.95,模型的相对分析误差(relative prediction deviation,RPD) 为 4.74。采用近红外漫反射光谱技术可以快速预测面条中马铃薯全粉的含量,可以为市场监督部门提供技术支持。

关键词: 近红外; 马铃薯; 面条; 含量 文章篇号: 1673-9078(2019)04-230-236

DOI: 10.13982/j.mfst.1673-9078.2019.4.031

# Rapid Determination of Potato Powder Composition of Noodles by NIR

# **Spectroscopy and Stoichiometry**

### LYU Du, DONG Nan, CHEN Zhong-ai, WANG Hui, LI Jun, LIU Jia

(Biotechnology Institute of Guizhou Province, Food Processing Institute of Guizhou Province, Guiyang 550006, China)

**Abstract:** It was difficult to determined the content of whole potato powder and flour in potato noodles by chemical method. The objective of the study was to establish prediction model for rapid determination of potato powder composition in noodles by NIR spectroscopy and stoichiometry. The method was that 236 potato noodles studied by near infrared spectroscopy and stoichiometry were used to establish prediction model. The result indicated that the prediction model based on wave number of 9403.6~5446.2 cm<sup>-1</sup> and spectral pretreatment by minimum-maximum normalization showed an excellent prediction accuracy. The external validation determinant (R2val) was 0.9775, the root mean square error of prediction (RMSEP) was 1.28%, the slope was 0.95, and the relative prediction deviation (RPD) was 4.74. The results indicated that near infrared spectroscopy can be used as an efficient way to detect the potato powder content in potato noodles.

Key words: NIR; potato; noodles; quantification

面条是用谷物(主要是小麦粉)面粉加水揉和成面团,然后将面团压制或擀制或抻成面片,再经过切或搓、拉、捏等手段制成条状或片状,最后经煮、蒸、炒、烩或炸而成的一种食品<sup>[1]</sup>。随着我国马铃薯主粮化战略的提出,马铃薯被加入到面条当中,以提升面条的营养价值<sup>[2,3]</sup>。市场上出现了许多马铃薯面条产品,其标注含量在 10%~30%之间,有些产品甚至并未收稿日期: 2018-12-03

基金项目: 国家重点研发计划(2016YFNC010104); 贵州省科技计划项目(黔科合基础[2017]1179); 贵州省科技计划课题(黔科合重大专项字[2014]6016); 贵州省农业科学院课题(黔农科院科技创新[2017]07号)作者简介: 吕都(1988-), 男,硕士,助理研究员,研究方向: 食品加工与检测

通讯作者:刘嘉(1985-),男,博士,副研究员,研究方向:食品科学

标注含量。目前,关于马铃薯面条加工工艺和产品品质分析的研究较多<sup>[4,5]</sup>,但是关于检测其中马铃薯含量的研究尚未见报道。

近红外(Near Infrared, NIR)光的本质是一种电磁波,按照美国材料试验学会的定义,其波长在780~2526 nm之间,其谱区主要由合频和倍频吸收组成。近红外光谱吸收带较宽,重叠严重含大量噪声及背景干扰,谱图难以分析,限制着其发展和利用<sup>[6]</sup>。直到1974年,瑞典化学专家S.Wold和美国华盛顿大学教授B.R.Kowalski提出化学计量学,才使得近红外光谱分析技术得到迅速的推广和利用。近红外光谱分析技术是由硬件、化学计量学软件和模型三部分构成,傅里叶变换近红外光谱仪用于采集样品的近红外光谱,化学计量学软件用于建立定标模型,定标模型用

于待测样品的定量预测分析。Marilia B 等<sup>[7]</sup>利用近红外光谱技术实现了橙子中果胶含量的快速测定,Escribano S<sup>[8]</sup>等利用近红外光谱技术测定了樱桃中可溶性固形物和干物质的含量。如今,已广泛地应用于食品成分分析<sup>[9]</sup>、品质评价<sup>[10]</sup>等领域。

小麦面粉和马铃薯全粉的主要组成都是淀粉,两种不同来源的淀粉混合在一起,很难用化学分析方法来检测其中一种的含量。由于在面条中添加马铃薯全粉,可以增加面条的营养价值,因此马铃薯面条深受广大消费者的喜爱。但是,一些不法商家,为了降低生产成本,以低充高虚标面条中马铃薯全粉的含量。本研究以马铃薯面条为研究对象,采用近红外光谱分析技术,建立一种快速测定面条中马铃薯全粉含量的方法,以期为市场监督部门提供检测手段,打击在产品中虚标马铃薯全粉含量的不法商家。

# 1 材料与方法

# 1.1 材料与试剂

面粉 (中筋粉), 五得利面粉集团有限公司; 马铃

薯全粉(雪花粉),石家庄凌峰农副产品开发有限公司; 桶装饮用水,贵州北极熊实业有限公司。

## 1.2 仪器与设备

傅里叶变换近红外光谱仪(MPA型),德国 Bruker公司;自动面条机(JYL-N6型),杭州九阳小家电有限公司;电磁炉(IC-A2102型),广东太古电器科技有限公司;热泵干燥机(STML7001型),上海湿腾电器有限公司。万能粉碎机(800Y型),永康市铂欧五金制品有限公司。

# 1.3 面条样品的制备

随机称取一定量的面粉和马铃薯全粉,混合均匀后,放入自动面条机中,加入适量的水制作不同马铃薯全粉含量的面条<sup>[11]</sup>,共制作不同含量的马铃薯面条236份,由 OPUS7.5 软件随机选择 192 份作为校正集,44 份作为验证集。马铃薯粉含量的计算公式为:

马铃薯全粉含量(%) = 马铃薯全粉质量 + 面粉质量 ×100

各样品马铃薯全粉含量如下表。

表 1 校正集面条样品中马铃薯全粉的含量

Table 1 The potato powder content of potato noodles in calibration set

|    |       | - P |       | F   |       |     |             |
|----|-------|-----|-------|-----|-------|-----|-------------|
| 编号 | 含量/%  | 编号  | 含量/%  | 编号  | 含量/%  | 编号  | 含量/%        |
| 1  | 23.53 | 49  | 18.72 | 97  | 18.69 | 145 | 26.93       |
| 2  | 23.78 | 50  | 33.39 | 98  | 29.93 | 146 | 23.94       |
| 3  | 19.66 | 51  | 25.65 | 99  | 25.45 | 147 | 30.74       |
| 4  | 25.43 | 52  | 24.71 | 100 | 35.60 | 148 | 15.58       |
| 5  | 27.00 | 53  | 14.09 | 101 | 30.70 | 149 | 16.64       |
| 6  | 34.75 | 54  | 22.93 | 102 | 23.52 | 150 | 20.84       |
| 7  | 33.57 | 55  | 8.26  | 103 | 24.57 | 151 | 26.55       |
| 8  | 23.81 | 56  | 18.56 | 104 | 33.47 | 152 | 39.27       |
| 9  | 27.56 | 57  | 30.74 | 105 | 21.20 | 153 | 13.59       |
| 10 | 28.55 | 58  | 27.68 | 106 | 28.53 | 154 | 26.05       |
| 11 | 28.30 | 59  | 21.49 | 107 | 28.34 | 155 | 23.14       |
| 12 | 21.51 | 60  | 15.07 | 108 | 20.78 | 156 | 16.01       |
| 13 | 26.94 | 61  | 27.43 | 109 | 31.27 | 157 | 27.44       |
| 14 | 32.54 | 62  | 39.90 | 110 | 26.29 | 158 | 22.82       |
| 15 | 16.99 | 63  | 28.94 | 111 | 16.33 | 159 | 34.83       |
| 16 | 26.33 | 64  | 21.88 | 112 | 22.22 | 160 | 24.43       |
| 17 | 30.58 | 65  | 12.80 | 113 | 24.09 | 161 | 13.53       |
| 18 | 19.04 | 66  | 30.04 | 114 | 34.39 | 162 | 22.13       |
| 19 | 8.76  | 67  | 23.89 | 115 | 27.31 | 163 | 23.20       |
| 20 | 27.34 | 68  | 38.25 | 116 | 19.97 | 164 | 15.52       |
| 21 | 20.32 | 69  | 7.68  | 117 | 26.97 | 165 | 23.10       |
|    |       |     |       |     |       |     | <b>杜下</b> 百 |

转下页

| 接上页 |       |    |       |     |       |     |       |   |
|-----|-------|----|-------|-----|-------|-----|-------|---|
| 22  | 29.12 | 70 | 27.02 | 118 | 15.61 | 166 | 26.78 | - |
| 23  | 13.59 | 71 | 10.94 | 119 | 25.35 | 167 | 22.99 |   |
| 24  | 28.66 | 72 | 22.88 | 120 | 22.09 | 168 | 16.54 |   |
| 25  | 25.41 | 73 | 19.99 | 121 | 24.35 | 169 | 29.16 |   |
| 26  | 16.42 | 74 | 20.14 | 122 | 26.40 | 170 | 20.67 |   |
| 27  | 30.13 | 75 | 25.40 | 123 | 25.80 | 171 | 17.10 |   |
| 28  | 18.75 | 76 | 27.70 | 124 | 23.08 | 172 | 28.24 |   |
| 29  | 23.58 | 77 | 33.80 | 125 | 30.20 | 173 | 20.01 |   |
| 30  | 27.91 | 78 | 18.53 | 126 | 21.24 | 174 | 26.05 |   |
| 31  | 9.23  | 79 | 27.39 | 127 | 22.94 | 175 | 30.87 |   |
| 32  | 25.19 | 80 | 26.01 | 128 | 17.34 | 176 | 28.36 |   |
| 33  | 16.47 | 81 | 23.65 | 129 | 27.81 | 177 | 19.02 |   |
| 34  | 36.30 | 82 | 28.64 | 130 | 23.53 | 178 | 35.14 |   |
| 35  | 24.09 | 83 | 24.07 | 131 | 16.89 | 179 | 18.58 |   |
| 36  | 13.51 | 84 | 13.65 | 132 | 36.45 | 180 | 26.40 |   |
| 37  | 23.83 | 85 | 21.78 | 133 | 17.23 | 181 | 20.87 |   |
| 38  | 23.69 | 86 | 25.61 | 134 | 19.68 | 182 | 29.64 |   |
| 39  | 47.68 | 87 | 17.88 | 135 | 22.79 | 183 | 26.46 |   |
| 40  | 14.72 | 88 | 22.78 | 136 | 25.84 | 184 | 14.03 |   |
| 41  | 25.95 | 89 | 24.27 | 137 | 16.27 | 185 | 28.95 |   |
| 42  | 28.78 | 90 | 19.42 | 138 | 25.95 | 186 | 13.83 |   |
| 43  | 10.92 | 91 | 26.21 | 139 | 14.47 | 187 | 38.56 |   |
| 44  | 23.10 | 92 | 32.61 | 140 | 20.11 | 188 | 17.36 |   |
| 45  | 12.43 | 93 | 25.53 | 141 | 5.28  | 189 | 25.88 |   |
| 46  | 29.64 | 94 | 18.73 | 142 | 22.97 | 190 | 18.12 |   |
| 47  | 22.34 | 95 | 20.22 | 143 | 20.02 | 191 | 28.04 |   |
| 48  | 27.51 | 96 | 22.24 | 144 | 30.41 | 192 | 16.46 |   |
|     |       |    |       |     |       |     |       |   |

表 2 验证集面条样品中马铃薯粉的含量

Table 2 The potato powder content of potato noodles in Validation set

| 编号 | 含量/%  | 编号 | 含量/%  | _ | 编号 | 含量/%  | 编号 | 含量/%  |
|----|-------|----|-------|---|----|-------|----|-------|
| 1  | 30.38 | 12 | 33.01 |   | 23 | 29.46 | 34 | 23.86 |
| 2  | 22.18 | 13 | 32.74 |   | 24 | 30.71 | 35 | 13.77 |
| 3  | 21.70 | 14 | 20.45 |   | 25 | 28.80 | 36 | 24.99 |
| 4  | 24.53 | 15 | 20.89 |   | 26 | 24.85 | 37 | 18.13 |
| 5  | 21.18 | 16 | 22.01 |   | 27 | 35.43 | 38 | 25.98 |
| 6  | 32.00 | 17 | 31.10 |   | 28 | 28.04 | 39 | 28.83 |
| 7  | 21.37 | 18 | 34.86 |   | 29 | 8.78  | 40 | 25.47 |
| 8  | 30.31 | 19 | 16.62 |   | 30 | 16.35 | 41 | 20.04 |
| 9  | 28.76 | 20 | 33.02 |   | 31 | 21.80 | 42 | 25.26 |
| 10 | 27.47 | 21 | 23.62 |   | 32 | 18.79 | 43 | 31.33 |
| 11 | 26.14 | 22 | 26.13 |   | 33 | 12.50 | 44 | 24.37 |

1.4 试验方法

1.4.1 样品光谱采集

将用自动面条机制作好的马铃薯面条样品,放入 热泵干燥烘房内,调整温度为 60 ℃、湿度为 13%, 即样品的烘干终点为水分含量 13%。将烘干的样品粉

碎后,过100目标准筛,收集样品并编号。以镀金的 漫反射体作参比校正,工作期间,每隔 0.5 h 扫描一次 背景光谱。使用 OPUS7.5 软件, 调用积分球不旋转程 序,扫描光谱区域选用 3594.9~12790.3 cm<sup>-1</sup>,分辨率 为 16 cm<sup>-1</sup>,扫描次数为 64 次,采集面条样品的近红 外光谱图。每个样品扫描 3 次,取其平均值进行分析。

# 1.4.2 光谱的预处理

近红外光谱所反映的信息主要包含:分子中化学 键振动的倍频和组合频信息[12]。随着基频振动合频和 倍频的增加, 吸收峰重叠的越严重, 吸收越来越弱, 其近红外光谱也不是各组分单独光谱的简单叠加,因 此需要用化学计量学技术从复杂的光谱中提取有效信 息。近红外光谱的预处理方式主要有消除常数偏移量、 矢量归一化、最小-最大归一化、减去一条直线、多元 散射校正、一阶导数、二阶导数、一阶导数+减去一 条直线、一阶导数+矢量归一化和一阶导数+多元散射 校正等方法。

### 1.4.3 模型的建立和评价

将 192 份校正集面条样品采用不同的预处理方式 进行预处理, 然后采用交叉验证的方式, 分别建立定 标模型。根据交叉验证决定系数( $R^2_{cv}$ )和交叉验证 均方根误差(RMSECV)值来评价定标模型, $R^2_{cv}$ 值 越大, RMSECV 值越小, 模型越稳定[13]。

项目

#### 定标模型的验证

将 44 份验证集样品的近红外光谱图,带入建好的 定标模型中进行验算获得预测值,对定标模型进行外 部验证,根据外部验证决定系数(R<sup>2</sup>val)和预测均方 根误差(RMSEP)值评价定标模型的预测能力, $R^2_{val}$ 值越大, RMSEP 值越小, 定标模型的预测能力则越 强<sup>[14]</sup>。

# 1.5 数据统计与分析

本实验数据采用 OPUS7.5 和 Excel 处理分析。

# 2 结果与分析

# 2.1 样品的近红外光谱

最小值

8.78

随机制作不同马铃薯全粉含量的面条样品 236 份,校正集样品 192 份,马铃薯全粉含量范围为 5.28%~47.68%, 平均值为 23.72%; 验证集样品 44 份, 马铃薯全粉含量范围 8.78%~35.43%, 平均值为 24.95%。目前,市售马铃薯面条产品,其标注的马铃 薯全粉含量范围大致在10%~30%,建立定标模型的校 正集样品和外部验证定标模型的验证集样品的马铃薯 全粉含量都包含了市售马铃薯面条产品的含量,可以 很好的预测市售同类产品的马铃薯全粉含量。

表 3 样品化学值统计分析

Table 3 The analysis of sample chemical value

校正集(192份)

|     |           |        | Į    | 支小值  | 東大值   | 半均值                       |
|-----|-----------|--------|------|------|-------|---------------------------|
|     |           | 马铃薯粉含量 | /%   | 5.28 | 47.68 | 23.72                     |
|     | 4.0       |        |      |      |       | 成,且                       |
|     | 3.5       |        |      |      |       | 成,且<br>位 <sup>[15,1</sup> |
|     | 3.0       |        |      |      |       | 红外                        |
| 並又  | 2.5       |        |      |      |       |                           |
| 吸光度 | 2.0       |        |      |      |       | 察觉                        |
| R   | 1.5       |        |      |      | ſ     | 能进行                       |
|     | 1.0       |        |      |      |       | 2.2                       |
|     | 0.5       |        |      |      |       | 2.2                       |
|     | 0.0 12000 | 10000  | 8000 | 6000 | 4000  | Ì                         |

旦儿は

图 1 马铃薯面条样品的近红外光谱图

波数 / cm-1

# Fig.1 Near infrared spectra of potato noodles

近红外光谱是指物质在 4000~12000 cm<sup>-1</sup> 之间的 吸收光谱图。只有红外活性分子中的化学键才能与近 红外光子发生作用,产生近红外光谱吸收。分子在红 外光谱区内的吸收产生于分子振动或转动的状态变化 或者分子振动或转动状态在不同能级间的跃迁。产生 的吸收光谱主要由分子基频振动的倍频和组合频构 且XH,官能团的吸收谱带在吸收光谱中占主导地 <sup>16]</sup>。由图 1 可知,校正集中 192 个面条样品的近 ·光谱图的波峰、波谷和趋势较为相似,肉眼很难 :其差异, 需要通过 OPUS7.5 软件的化学计量学功 行处理分析。

验证集 (44份)

最大值

35.43

平均值

24.95

近红外光谱图的预处理和定标模型的建

立

将所得到的近红外光谱图,用全波段不预处理和 不同预处理方式预处理,采用偏最小二乘法 (PLS), 随机在192份面条样品中选择3个样品,作为验证样 品,剩余的样品建立定标模型,重复这个过程,直至 所有的样品均被作过检验样品。用全波段不预处理和 不同预处理方法,建立定标模型的结果见表 4。

由表 4 可知,用全波段不预处理的近红外光谱建 立的定标模型,其交叉验证决定系数( $R^2_{cv}$ )为 0.7106、

交叉验证均方根误差(RMSECV)为 3.59%,外部验证决定系数( $R^2_{val}$ )为 0.8543,预测均方根误差(RMSEP)为 3.27%。二阶导数方式预处理的近红外光谱建立定标模型,预测能力最差。根据定标模型和外部验证综合评判确定,建立定标模型的最佳预处理

方式为最小-最大归一化方式,其预处理的近红外光谱 图如图 2。由图 2 可知,经过最小-最大归一化方式处 理后的近红外光谱,其光谱范围在 9403.6~4246.6 cm<sup>-1</sup>,表明近红外光谱图的有效信息主要存在于此范 围内,即样品之间的差异主要来源于此范围内。

表 4 不同预处理方式定标模型的影响

Table 4 Effect of various treatment methods on Calibration model

| 预处理方法       | 光谱区间/cm <sup>-1</sup> | $R^2_{cv}$ | RMSECV/% | $R^2_{val}$ | RMSEP/% |
|-------------|-----------------------|------------|----------|-------------|---------|
| 全光谱         | 12790.3~3594.9        | 0.7106     | 3.59     | 0.8543      | 3.37    |
| 无处理         | 7502~4246.6           | 0.9337     | 3.88     | 0.9778      | 1.27    |
| 消除常数偏移量     | 9403.6~4246.6         | 0.9351     | 3.93     | 0.9731      | 1.40    |
| 矢量归一化       | 9403.6~4246.6         | 0.9377     | 1.67     | 0.9743      | 1.37    |
| 最小-最大归一化    | 9403.6~4246.6         | 0.9329     | 1.73     | 0.9775      | 1.28    |
| 减去一条直线      | 9403.6~4246.6         | 0.9356     | 1.69     | 0.9723      | 1.42    |
| 多元散射校正      | 9403.6~4246.6         | 0.9376     | 1.67     | 0.9735      | 1.39    |
| 一阶导数        | 7502~4597.6           | 0.8932     | 2.18     | 0.9282      | 2.34    |
| 二阶导数        | 7502~4597.6           | 0.6140     | 4.15     | 0.7453      | 4.20    |
| 一阶导数+减去一条直线 | 7502~4597.6           | 0.8974     | 2.14     | 0.9324      | 2.24    |
| 一阶导数+矢量归一化  | 7502~4597.6           | 0.8981     | 2.13     | 0.9393      | 2.12    |
| 一阶导数+多元散射校正 | 7502~4597.6           | 0.8981     | 2.13     | 0.9393      | 2.12    |

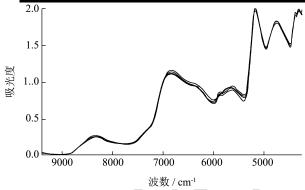


图 2 最小-最大归一化方式预处理后的光谱图

Fig.2 Pretreated Near infrared spectra of potato noodles by Minimum-maximum normalization

# 2.3 定标模型的优化

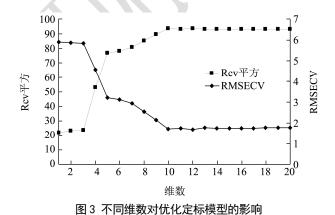


Fig.3 Effect of dimension on Calibration model

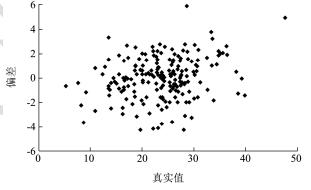
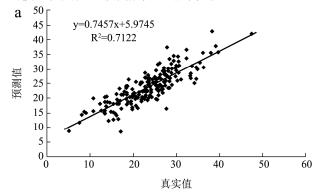


图 4 真实值与样品预测值偏差的分布情况

## Fig.4 The distribution of chemical value vs Predicted deviation

采用最小-最大归一化方式预处理光谱和不同维数建立定标模型,以交叉验证决定系数  $(R^2_{cv})$ 、交叉验证均方根误差 (RMSECV)、样品预测值偏差、定标模型预测值与真实值的线性关系为指标,考察定标的模型稳定性和预测能力,结果见图 3~5。



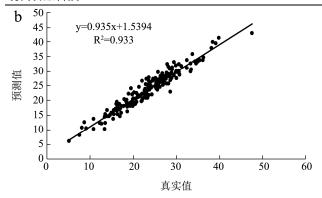


图 5 马铃薯泥含量预测值与真实值的相关关系(a)未处理(b) 最小-最大归一化处理

# Fig.5 Relationship between the predicted values and chemically measured values of the mashed potatoes content untreated by minimum-maximum normalization

近红外光谱图信息冗长,在利用化学计量学软件进行定量分析时,往往几个贡献率高的波数段就可以代表整个光谱的信息。由图 3 可知,当维数为 10 时,定标模型的交叉验证决定系数 (R<sup>2</sup><sub>cv</sub>)最大、交叉验证均方根误差 (RMSECV)最小,表明定标模型的稳

定性较好预测精度高。由图 4 可知,当定标模型预测值的偏差为±4%时,能够正确预测样品为 96.86%,当定标模型预测值的偏差为±3%时,能够正确预测样品为 92.19%,表明定标模型预测精度为±3%,可以较好地预测样品中马铃薯全粉的含量。图 5a 和图 5b 分别为全波段不预处理和最小-最大归一化方式预处理的近红外光谱建立的定标模型,其预测值和真实值的线性方程分别为 y=0.7457x+5.9745,相关系数(R²)为 0.71,y=0.935x+1.5394,相关系数(R²)为 0.93,相关系数(R²)越接近 1,说明预测值越接近真实值,结果表明,最小-最大归一化方式预处理后,建立的定标模型优于全波段不预处理方式。

# 2.4 定标模型的外部验证

为了验证定标模型的稳定性和预测能力,将未参与建立定标模型的 44 份验证集样品,带入定标模型中进行验算得出预测值,将其与验证集样品的真实值进行比较分析,结果见表 5;其定标模型得出的预测值与真实值的线性关系见图 6。

表 5 定标模型预测验证集样品的结果

Table 5 The result of predictive value of potato noodles in validation set by calibration model

| 编号 | 真实值/% | 预测值/% | 偏差    | 编号 | 真实值/% | 预测值/% | 偏差    |
|----|-------|-------|-------|----|-------|-------|-------|
| 1  | 30.38 | 29.98 | -0.40 | 23 | 29.46 | 28.52 | -0.94 |
| 2  | 22.18 | 23.62 | 1.44  | 24 | 30.71 | 29.96 | -0.76 |
| 3  | 21.70 | 22.71 | 1.01  | 25 | 28.80 | 29.27 | 0.47  |
| 4  | 24.53 | 23.24 | -1.29 | 26 | 24.85 | 25.25 | 0.40  |
| 5  | 21.18 | 19.90 | -1.28 | 27 | 35.43 | 32.93 | -2.50 |
| 6  | 32.00 | 32.19 | 0.19  | 28 | 28.04 | 30.55 | 2.51  |
| 7  | 21.37 | 20.39 | -0.98 | 29 | 8.78  | 9.98  | 1.20  |
| 8  | 30.31 | 31.54 | 1.23  | 30 | 16.35 | 17.50 | 1.15  |
| 9  | 28.76 | 27.95 | -0.81 | 31 | 21.80 | 24.21 | 2.41  |
| 10 | 27.47 | 27.46 | -0.01 | 32 | 18.79 | 18.06 | -0.73 |
| 11 | 26.14 | 25.95 | -0.19 | 33 | 12.50 | 14.58 | 2.08  |
| 12 | 33.01 | 31.16 | -1.85 | 34 | 23.86 | 24.27 | 0.41  |
| 13 | 32.74 | 33.26 | 0.52  | 35 | 13.77 | 14.25 | 0.48  |
| 14 | 20.45 | 21.32 | 0.87  | 36 | 24.99 | 24.09 | -0.90 |
| 15 | 20.89 | 21.60 | 0.71  | 37 | 18.13 | 17.88 | -0.25 |
| 16 | 22.01 | 21.32 | -0.69 | 38 | 25.98 | 23.80 | -2.18 |
| 17 | 31.10 | 30.59 | -0.51 | 39 | 28.83 | 31.00 | 2.17  |
| 18 | 34.86 | 35.68 | 0.82  | 40 | 25.47 | 25.55 | 0.08  |
| 19 | 16.62 | 14.56 | -2.06 | 41 | 20.04 | 21.77 | 1.73  |
| 20 | 33.02 | 33.16 | 0.14  | 42 | 25.26 | 27.12 | 1.86  |
| 21 | 23.62 | 24.10 | 0.48  | 43 | 31.33 | 32.09 | 0.76  |
| 22 | 26.13 | 24.73 | -1.40 | 44 | 24.37 | 22.48 | -1.89 |

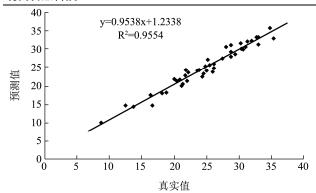


图 6 验证集中定标模型预测值与真实值的相关关系

# Fig.6 Relationship between the predicted values and chemically measured values of the potato powder content Validation set

由表 5 可知,定标模型得出的预测值与真实值偏差在 $\pm 3\%$ 以内。由图 6 可知,其预测值与真实值的线性关系方程为 y = 0.9538x+1.2338,相关系数(R²)为 0.95。定标模型的外部验证决定系数(R²<sub>val</sub>)为 0.9775、预测均方根误差(RMSEP)为 1.28%,模型的相对分析误差(relative prediction deviation,RPD)为 4.74,斜率为 0.95,斜率越接近 1 表明预测值与真实值越接近,表明定标模型的稳定性和预测能力较好。

# 3 结论

马铃薯主食化战略提出后,马铃薯类主食产品层出不穷,马铃薯馒头、马铃薯面条、马铃薯米粉和马铃薯复配大米等等产品先后上市。马铃薯类主食产品中,马铃薯全粉的含量有高有低,由于缺乏检测方法不能有效的起到监督作用。本研究结果表明,利用近红外漫反射技术,结合化学计量学方法,采用 PLS 方法建立定标模型,可以有效地对马铃薯面条中的马铃薯粉含量进行预测。但是定标模型的预测精度为±3%左右,模型的外部验证决定系数(R²val)为 0.9775,后续研究工作应继续增大定标模型的样本数量,提高定标模型的预测精度和外部验证决定系数,实现马铃薯面条中马铃薯全粉含量又快又准的测定。

# 参考文献

[1] 王乐.马铃薯面团特性及面条品质研究[D].西安:陕西科技 大学.2017

WANG Yue. Properties of potato dough and quality of potato noodles [D]. Xi'an: Shaanxi University of Science & Technology, 2017

[2] 刘嘉,吕都,唐健波,等.马铃薯米粉与纯米粉品质的分析比较[J].现代食品科技,2018,1:45-51

LIU Jia, LYU Du, TANG Jian-bo, et al. Quality comparison

- of potato rice noodles with rice noodles [J]. Modern Food Science and Technology, 2018, 1: 45-51
- [3] 沈耀衡,陆启玉,张珂.不同马铃薯全粉对马铃薯面条品质的影响[J].河南工业大学学报(自然科学版), 2017,38(3):38-44

SHEN Yao-heng, LU Qi-yu, ZHANG Ke. Effect of different potato powder on the quality of potato noodles [J]. Journal of Henan University of Technology (Natural Science Edition), 2017, 38(3): 38-44

[4] 张笑笑,李瑜.响应面法优化马铃薯泥面条工艺配方[J].包装与食品机械,2016,34(3):20-24

ZHANG Xiao-xiao, LI Yu. Optimization of mashed potatoes noodle process formula by RSM [J]. Packaging and Food Machinery Pack Food Mach, 2016, 34(3): 20-24

[5] 王丽,罗红霞,李淑荣,等.不同工艺条件对马铃薯粉及其面条品质特性的影响研究[J],食品工业,2017,11:13-15

WANG Li, LUO Hong-xia, LI Shu-rong, et al. The effect of different processing conditions on the quality of potato powder and the potato noodles [J]. The Food Industry, 2017, 11: 13-15

[6] 徐广通,袁洪福,陆婉珍.现代近红外光谱技术及应用进展 [J].光谱学与光谱分析,2000,20(2):134-142

XU Guang-tong, YUAN Hong-fu, LU Wan-zhen. Development of modern near infrared spectroscopic techniques and its applications [J]. Spectroscopy and Spectral Analysis, 2000, 20(2): 134-142

- [7] Bizzani M, Flores D W M, Colnago L A, et al. Non-invasive spectroscopic methods to estimate orange firmness, peel thickness, and total pectin content [J]. Microchemical Journal, 2017, 133: 168-174
- [8] Escribano S, Biasi W V, Lerud R, et al. Non-destructive prediction of soluble solids and dry matter content using NIR spectroscopy and its relationship with sensory quality in sweet cherries [J]. Postharvest Biology & Technology, 2017, 128: 112-120
- [9] Cayuela J A, García J F. Sorting olive oil based on alpha-tocopherol and total tocopherol content using near-infra-red spectroscopy (NIRS) analysis [J]. Journal of Food Engineering, 2017, 202(79): 79-88
- [10] Lu R F, Guyer D E, Beaudry R M. Determination of firmness and sugar content of apples using near-infrared diffuse reflectance [J]. Journal of Texture Studies, 2010, 31(6): 615-630

(下转第29页)