

# 近红外光谱技术在小麦粉品质检测方面的应用研究进展

何鸿举<sup>1</sup>, 王玉玲<sup>2</sup>, 陈岩<sup>1</sup>, 欧行奇<sup>2</sup>, 张正茂<sup>3</sup>, 刘玉秀<sup>3</sup>, 乔红<sup>4</sup>, 李新华<sup>4</sup>

(1.河南科技学院食品学院, 河南新乡 453003;

2.河南科技学院生命科技学院, 河南新乡 453003;

3.西北农林科技大学农学院, 陕西杨凌 712100;

4.新乡市农乐种业有限责任公司, 河南新乡 453003)

**摘要:**近红外光谱(NIRS)技术是当前发展最快、最具前景的现代无损分析技术之一。NIRS技术融合了计算机、光学、数学、化学和化学计量学等多个学科的最新研究成果,具有简便、快速、低成本、无污染、不接触等优点,目前被广泛应用于食品品质分析与检测研究。本文综述了近十年来NIRS技术在小麦粉理化指标(如水分、灰分、蛋白质、淀粉)、粉质指标(如面筋、面筋指数、沉降值、吸水量、形成时间、稳定时间、弱化度)及掺杂物(如甲醛次硫酸氢钠、滑石粉、过氧化苯甲酰、石灰、偶氮甲酰胺、曲酸)等方面的检测研究进展。同时,基于当前研究进展,NIRS技术在光谱数据挖掘、建模算法优化、模型稳健性等方面还需大量研究,为研发小麦粉质量快速无损检测设备提供更多数据支撑和方法参考。

**关键词:**近红外, 小麦粉, 品质, 检测

## Advances on Near-infrared Spectroscopy for Quality Detection of Wheat Flour

HE Hong-ju<sup>1</sup>, WANG Yu-ling<sup>2</sup>, CHEN Yan<sup>1</sup>, OU Xing-qi<sup>2</sup>, ZHANG Zheng-mao<sup>3</sup>,

LIU Yu-xiu<sup>3</sup>, QIAO Hong<sup>4</sup>, LI Xin-hua<sup>4</sup>

(1.School of Food Science, Henan Institute of Science and Technology, Xinxiang 453003, China;

2.School of Life Science and Technology, Henan Institute of Science and Technology, Xinxiang 453003, China;

3.College of Agronomy, Northwest Agriculture & Forestry University, Yangling 712100, China;

4.Xinxiang Nongle Seed Industry Co.Ltd., Xinxiang 453003, China)

**Abstract:** Near-infrared spectroscopy (NIRS) is one of the current fastest developing and most promising modern nondestructive analysis technology. NIRS integrates the latest research achievements of computer, optics, mathematics, chemistry and chemometrics, and has the advantages of simplicity, rapid, low cost, no pollution, contactless, etc. At present, NIRS has been widely used in food quality analysis and detection research. In the paper, the research progresses of NIRS in wheat flour quality detection in the recent ten years concerning physicochemical indexes including moisture, ash, protein, starch, and powder quality indicators including gluten, gluten index, zeleny, water quantity, formation time, stability time and weakening degree, as well as adulterants including sodium formaldehyde sulfoxylate, talcum powder, benzoyl peroxide, lime, azodicarbonamide, kojic acid are reviewed. At the same time, based on the current research progresses, it still requires a lot of NIRS research in spectral data mining, modeling algorithm optimization and model robustness, which will provides more data support and method reference for the equipment development of wheat flour quality detection in a rapid and nondestructive way.

**Key words:** Near-infrared; wheat flour; quality; detection

中图分类号: TS210

文献标识码: A

文章编号: 1002-0306(2020)07-0345-09

doi:10.13386/j.issn1002-0306.2020.07.057

**引文格式:**何鸿举, 王玉玲, 陈岩, 等. 近红外光谱技术在小麦粉品质检测方面的应用研究进展[J]. 食品工业科技, 2020, 41(7): 345-352, 357.

收稿日期: 2019-09-09

作者简介: 何鸿举(1983-), 男, 博士, 教授, 主要从事食品质量分析与快速检测方面的研究, E-mail: hongju\_he007@126.com。

基金项目: 河南省重大科技专项项目(151100110700); 新乡市重大科技专项项目(ZD18007); 河南科技学院高层次人才引进项目(2015015, 2015003); 河南科技学院重大成果培育工程项目(2018CG02); 河南科技学院重大项目培育工程项目(2018ZX02); 河南科技学院重大科研培育项目(2015ZD02)。

日常饮食中,小麦粉是不可或缺的重要组成部分,其品质优劣关乎人们的健康。随着生活水平的不断提高,消费者越发关注并重视小麦粉品质,如蛋白质含量、面筋含量、是否含有掺杂物等。目前,小麦粉品质参数的检测仍然主要依赖于常规手段,如国标法<sup>[1]</sup>、高效液相色谱法<sup>[2]</sup>、气质联用法<sup>[3]</sup>等,操作过程繁琐、耗时耗力、效率低下、无法满足现场快速检测要求,这对小麦产业链的迅速发展,要求快速监控面粉品质提出了挑战。面粉企业和科研工作者都在努力开发一种快速无损检测技术,以解决目前的快检难题。

近红外光谱(NIRS)技术是20世纪80年代后期发展起来的一种简便、快速、低成本、无污染、不接触样品的绿色检测技术<sup>[4]</sup>。与传统的检测方法相比,NIRS技术操作简单省时,可实现多组分同时测定<sup>[5]</sup>。NIRS技术用于小麦粉检测已得到了广泛研究和诸多报道,主要是基于小麦粉组分中含氢基团(C-H、O-H、N-H、S-H等)在近红外光谱区有特征吸收信息<sup>[6]</sup>,通过构建吸收光谱信息和待测指标之间的定量关系(即模型),实现对小麦粉品质的快速监测。构建的模型性能主要通过决定系数( $R^2$ )或相关系数(R)、均方根误差(RMSE)或标准偏差(SEP)、剩余预测偏差(RPD)等指标进行评价。一般而言, $R^2$ 或R越高且接近于1,模型的相关性越好;RMSE或SEP越小且接近于0,且RPD大于2.5,模型的预测效果越好<sup>[7-8]</sup>。

鉴于NIRS技术的巨大潜力和不断涌现的研究

成果,本文综述了近十年来NIRS技术在小麦粉检测方面的应用研究进展,主要涉及到理化指标检测、粉质指标检测以及掺杂物检测三个方面,以期小麦粉的NIRS检测应用及设备研发提供更多思路,同时基于当前研究进展提出一些建设性的建议和未来发展趋势。

## 1 NIRS技术检测理化指标

### 1.1 水分

水分是小麦粉安全储藏的重要指标,同时水分多少直接影响面粉的吸水性、稳定时间与拉伸强度,最终影响面制食品的食用品质<sup>[9]</sup>。NIRS技术被用于快速检测小麦粉中水分含量研究,是基于水分中O-H键在近红外光谱区(780~2526 nm)有特征吸收,通过挖掘光谱信息构建模型实现水分含量的快速预测,结果如表1所示。多数研究选择构建偏最小二乘(PLS)模型预测小麦粉水分含量<sup>[10-16]</sup>,其中,以金华丽等<sup>[10]</sup>( $R_p^2 = 0.9848$ , SEP = 0.0929)、Dong等<sup>[13]</sup>( $R_p = 0.990$ , RMSEP = 0.088%)和孙晓荣等<sup>[15]</sup>( $R_c^2 = 0.9777$ , RMSEP = 0.264%)构建的PLS模型预测水分含量效果最好, $R^2$ 或R接近于1,SEP或RMSEP接近于0。尽管这些研究选择的光谱范围不同,采用的光谱预处理方法也迥异,导致最后构建的模型预测效果也不同,但整体上,基于NIRS快速检测小麦粉水分含量研究效果较好,未来研究需要寻找更可靠的光谱预处理方法以增强模型的稳健性。

表1 NIRS技术用于检测小麦粉理化指标

Table 1 Application of NIRS technology for detection of physicochemical index in wheat flour

指标	光谱范围	光谱预处理方法	最优波长/ 波段筛选方法	建模方法	模型性能	参考文献
水分	950~1650 nm	1 <sup>st</sup> Der	-	PLS	$R_c^2 = 0.9843$ $R_p^2 = 0.9848$ SEP = 0.0929	[10]
水分	1200~2400 nm	(1 <sup>st</sup> Der) + SNV	-	PLS	$R_p^2 = 0.850$ RMSEP = 0.27% RPD = 2.43	[11]
水分	570~1100 nm	SNV	-	LC	$R_p = 0.905$ $R_c = 0.997$	[12]
水分	10000~4000 $cm^{-1}$	None	iPLS	PLS	RMSECV = 0.097% $R_p = 0.990$ RMSEP = 0.088%	[13]
水分	12000~4000 $cm^{-1}$	MSC	-	PLS	$R_p^2 = 0.9315$ SEP = 0.279 $R_c^2 = 0.9777$	[14]
水分	12000~4000 $cm^{-1}$	(S-G) + (1 <sup>st</sup> Der) + SNV	GA	PLS	RMSEC = 0.2453 RMSEP = 0.2640 RPD = 2.6183 $R_c^2 = 0.947$ RMSEP = 0.146%	[15]
水分	910~1860 nm	None	-	PLS	$R_{cv}^2 = 0.841$ RMSEP = 0.198% $R_p^2 = 0.883$ RMSEP = 0.206%	[16]

续表

指标	光谱范围	光谱预处理方法	最优波长/ 波段筛选方法	建模方法	模型性能	参考文献
灰分	570~1100 nm	None	-	LC	$R_p = 0.956$ $R_c = 0.923$	[12]
灰分	10000~4000 $cm^{-1}$	None	iPLS	PLS	RMSECV = 0.019% $R_p = 0.911$ RMSEP = 0.019%	[13]
灰分	12000~4000 $cm^{-1}$	MSC	-	PLS	$R_p^2 = 0.9506$ SEP = 0.0248 $R_c = 0.9760$	[14]
灰分	12000~4000 $cm^{-1}$	None	SAA	PLS	RMSECV = 0.0220 RMSEP = 0.0301 $R_c^2 = 0.947$ RMSEC = 0.026	[19]
灰分	1150~2150 nm	Normalize + (S-G)	-	PLS	$R_{cv}^2 = 0.947$ RMSECV = 0.037 RMSEP = 0.206 $R_p^2 = 0.81$	[20]
蛋白质	1200~2400 nm	(1 <sup>st</sup> Der) + SNV	-	PLS	RMSEP = 0.58% RPD = 2.17	[11]
蛋白质	570~1100 nm	2 <sup>nd</sup> Der	-	MPLS	$R_p^2 = 0.937$ SEP = 0.492	[22]
蛋白质	570~1100 nm	None	-	ANN	$R_p = 0.807$	[12]
蛋白质	12500~3300 $cm^{-1}$	SNV + (2 <sup>nd</sup> Der)	-	SVR	$R_p^2 = 0.906$ ; RMSEP = 0.425	[23]
蛋白质	12000~4000 $cm^{-1}$	SNV + 1 <sup>st</sup> Der	前向区间 + GA	PLS	$R_p = 0.98$ ; RMSEP = 0.181%	[24]
淀粉	570~1100 nm	Weighted MSC	-	PCR	$R_p = 0.833$	[12]

注:1<sup>st</sup>Der:一阶导数;PLS:偏最小二乘; $R_c$ :校正集相关系数; $R_{cv}$ :交叉验证集相关系数; $R_p$ :验证集相关系数; $R_c^2$ :校正集决定系数; $R_p^2$ :预测集决定系数;SEP:标准偏差;RMSEC:校正集均方根误差;RMSECV:交叉验证集均方根误差;RMSEP:预测集均方根误差;RPD:剩余预测偏差;SNV:标准正态变量变换;2<sup>nd</sup>Der:二阶导数;iPLS:间隔偏最小二乘;MSC:多元散射校正;Normalize:归一化;S-G:卷积平滑;Baseline:基线校正;None:无预处理;SAA:模拟退火算法;MPLS:改进的偏最小二乘;GA:遗传算法;Weighted MSC:加权多元散射校正;表2~表3同。

### 1.2 灰分

灰分指小麦粉经高温灼烧后剩下的矿物质元素,其含量是衡量小麦粉品质的客观因素之一,直接影响面粉的内在品质(如色泽)和食用性能(如口感)<sup>[17]</sup>,因此被当做一项重要指标用于面粉精度鉴别、分等、定级等<sup>[18]</sup>。近年来,越来越多的学者研究NIRS技术用于定量检测小麦粉灰分含量的可行性。闫李慧等<sup>[12]</sup>基于没有预处理的Vis/NIR光谱(570~1100 nm)构建LC模型预测小麦粉中灰分含量,尽管 $R_p$ 达到了0.90以上,但是并未提及模型误差结果,略显不足。Dong等<sup>[13]</sup>采集更大范围的光谱信息(10000~4000  $cm^{-1}$ )构建小麦灰分的PLS预测模型,虽然误差很小,但是R并未提高。随后,孙晓荣课题组又探讨了12000~4000  $cm^{-1}$ 和1150~2150 nm范围内的光谱信息,采用不同光谱预处理(如MSC、Normalize + (S-G))可明显提升PLS模型预测灰分含量效果<sup>[14,19-20]</sup>,说明选择合适的光谱预处理方法和光谱范围可提升小麦灰分预测模型性能。

### 1.3 蛋白质

蛋白质是面粉的重要组成部分,其含量多少影响面粉的加工品质<sup>[21]</sup>。蛋白质测量多依赖于国标法-凯氏定氮,操作繁冗、耗时长。基于蛋白质结构中含有的N-H基团在近红外光谱区有吸收峰,可研究利用NIRS技术快速检测小麦粉中蛋白质含量。Kahrman等<sup>[11]</sup>基于(1<sup>st</sup> Der) + SNV预处理1200~2400 nm范围光谱信息,构建PLS模型预测小麦粉中蛋白质含量,效果尚可( $R_p^2 = 0.81$ , RMSEP = 0.58%)。Jin等<sup>[22]</sup>改进了PLS算法,同时选用2<sup>nd</sup> Der方法预处理Vis/NIR光谱,预测蛋白质效果明显提升( $R_p^2 = 0.937$ , SEP = 0.492)。Chen等<sup>[23]</sup>尝试使用支持向量机(SVM)算法构建模型,也得到了类似的预测效果。近期,陈嘉等<sup>[24]</sup>采用前向区间和遗传算法(GA)筛选了最优波段,又进一步提高了模型预测性能( $R_p = 0.98$ , RMSEP = 0.181%)。这些研究显示,12000~4000  $cm^{-1}$ 更适合于小麦粉蛋白质含量预测研究,采用SNV + (1<sup>st</sup> Der)预处理光谱可进一步提高模型预测性能。

## 1.4 淀粉

淀粉是一种多糖物质,也是小麦粉的重要组成部分之一。运用 NIRS 技术检测小麦粉中淀粉含量的研究相对较少,预测效果也并不理想<sup>[12]</sup>,可能与 570~1100 nm 范围内含有部分可见光信息有关,后续研究可单独选择近红外区信息进行数据挖掘,寻找光谱信息与淀粉含量之间的定性定量关系。

总体而言,NIRS 技术用于检测小麦粉中理化指标是可行的,绝大多数研究采用 PLS 算法构建模型进行检测应用,相比之下,NIRS 检测水分含量效果最好。此外,近红外光谱区内的不同波段、不同的光谱预处理方法以及不同的建模算法都会影响 NIRS 技术对小麦粉理化指标的检测效果。目前针对同一指标检测,依然需要在最优波段和光谱预处理方法选择方面做大量研究。

## 2 NIRS 技术检测粉质指标

小麦粉粉质指标主要涉及到面筋(干面筋和湿面筋)、面筋指数分、吸水量、形成时间、稳定时间、弱化度等。采用 NIRS 技术快速检测小麦粉粉质指标也已被报道,具体结果如表 2 所示。

### 2.1 面筋和面筋指数

面筋主要构成是蛋白质(主要是醇溶蛋白和麦谷蛋白),其含量多少可间接反映面粉中蛋白质含量,主要影响面粉的弹性和黏性等。面筋含量和面筋指数已被用作评价小麦粉品质优劣的重要指

标<sup>[25-27]</sup>。传统的面筋含量测定方法主要是洗涤法和化学测定法,检测时间长,操作繁琐,易受人为因素影响,且对技术要求高,无法达到快速检测<sup>[28]</sup>。NIRS 技术为快速检测小麦粉面筋和面筋指数提供了一种新思路,相关报道也逐渐增多,如 Kahrman 等<sup>[11]</sup>挖掘 1200~2400 nm 波段的光谱信息构建 PLS 模型,预测小麦粉面筋含量效果良好( $R_p^2 = 0.88$ ,  $RMSEP = 1.59\%$ ,  $RPD = 3.25$ ),但预测面筋指数效果不理想。缩小光谱范围后(570~1100 nm),预测面筋和面积指数效果变得更差<sup>[12]</sup>,这可能是部分近红外光谱信息缺失所致。相比之下,扩大光谱范围后(12000~4000  $cm^{-1}$ ),预测面筋和面积指数效果变得良好<sup>[14,23,31]</sup>,甚至更好<sup>[24,29-30]</sup>,这也可能是由于扩大光谱范围导致信息量增加所致。其中,孙晓荣等<sup>[29]</sup>采用归一化预处理光谱,进一步采用 SAA 算法预优化波段,预测面筋含量效果最好( $R_p^2 = 0.9491$ ,  $RMSEP = 0.5341$ ,  $RPD = 4.8287$ )。使用相同的光谱信息,陈嘉等<sup>[24]</sup>采用 SNV + (1<sup>st</sup> Der) 预处理光谱,进一步前向区间 + GA 算法优化波段,预测湿面筋含量效果最好( $R_p = 0.98$ ,  $RMSEP = 0.590\%$ )。这些研究结果表明,全波段光谱经过合适的算法筛选最优波段后,模型预测小麦粉面筋或湿面筋含量效果更好,这源于最优波长筛选后,冗余信息和干扰信息得以剔除,模型性能得以提升。

### 2.2 沉降值

沉降值是蛋白质含量和质量的综合体现,是反

表 2 NIRS 技术用于检测小麦粉粉质指标

Table 2 Application of NIRS technology for detection of quality index in wheat flour

指标	光谱范围	光谱预处理方法	最优波长/ 波段筛选方法	建模 方法	模型性能	参考文献
面筋	1200~2400 nm	(1 <sup>st</sup> Der) + SNV	-	PLS	面筋: $R_p^2 = 0.88$ $RMSEP = 1.59\%$ $RPD = 3.25$ 面筋指数: $R_p^2 = 0.76$ $RMSEP = 7.34\%$ $RPD = 1.90$	[11]
面筋	570~1100 nm	SNV + (2 <sup>nd</sup> Der) + (S-G)(干面筋) Detrend + (1 <sup>st</sup> Der) + (S-G)(湿面筋) SNV + Detrend + (1 <sup>st</sup> Der) + (S-G)(面筋指数)		LC	$R_p = 0.845$ (干面筋) $R_p = 0.859$ (湿面筋) $R_p = 0.474$ (面筋指数)	[12]
面筋	12000~4000 $cm^{-1}$	MSC	-	PLS	$R_p^2 = 0.8232$ $SEP = 0.147$	[14]
面筋	12000~4000 $cm^{-1}$	Normalize	SAA	PLS	$R_p^2 = 0.9491$ $RMSEP = 0.5341$ $RPD = 4.8287$	[29]
湿面筋	10000~4000 $cm^{-1}$	减去一条直线	-	PLS	$R_C^2 = 0.934$ $RMSECV = 0.51$ $RMSEP = 0.456$ $R_{CV} = 0.9018$	[30]
湿面筋	10000~4000 $cm^{-1}$	(1 <sup>st</sup> Der) + 减去一条直线	-	PLS	$RMSECV = 0.708$ $R_p = 0.9209$ $RMSEP = 0.083$	[31]

续表

指标	光谱范围	光谱预处理方法	最优波长/ 波段筛选方法	建模 方法	模型性能	参考文献
湿面筋	12500~3300 $\text{cm}^{-1}$	SNV + (2 <sup>nd</sup> Der)	-	SVM	$R_p^2 = 0.850$ RMSEP = 1.024	[23]
湿面筋	12000~4000 $\text{cm}^{-1}$	SNV + (1 <sup>st</sup> Der)	前向区间 + GA	PLS	$R_p = 0.98$ RMSEP = 0.590%	[24]
沉降值	1200~2400 nm	(1 <sup>st</sup> Der) + SNV	-	PLS	$R_p^2 = 0.76$ RMSEP = 7.34% RPD = 1.90 吸水量: $R_p = 0.97$ RMSEP = 0.455 形成时间: $R_p = 0.94$	[11]
吸水量形成 时间稳定 时间弱化度	12000~4000 $\text{cm}^{-1}$	SNV + (1 <sup>st</sup> Der)	前向区间 + GA	PLS	RMSEP = 0.502 稳定时间: $R_p = 0.95$ RMSEP = 0.557 弱化度: $R_p = 0.95$ RMSEP = 13.047	[24]

映面粉中面筋含量与质量的综合指标,也是衡量面筋质量优劣的基本指标<sup>[32-33]</sup>。但是采用 NIRS 技术检测小麦粉的沉降值研究较少,虽然 Kahrıman 等<sup>[11]</sup> 研究使用 PLS 算法寻找 1200~2400 nm 波段的光谱信息和小麦粉沉降值之间的定量关系,但效果也不是很理想,还需要进一步在预处理方法和最优波段选择方面进行研究。

### 2.3 其他参数

面粉的吸水量、形成时间、稳定时间、弱化度等作为面粉的粉质特性,也常被用来表征小麦粉的品质<sup>[34-35]</sup>。陈嘉等<sup>[24]</sup> 尝试使用 12000~4000  $\text{cm}^{-1}$  波段内信息,经光谱预处理和波段筛选,构建 PLS 模型同时预测这 4 种指标,结果显示 PLS 模型性能均良好,说明利用 NIRS 技术检测小麦粉质特性是可行的,但研究太少,还需通过大量试验进一步验证 NIRS 技术的可靠性和适用性。

## 3 NIRS 技术检测掺杂物

面粉的食用安全一直备受人们重视,但是部分面粉企业为了谋取利益,向面粉中添加一些违禁添加剂,以增加面粉重量(如滑石粉、石灰等)或提高面粉品质(如过氧化苯甲酰、偶氮甲酰胺、曲酸等),但会严重影响人们身体健康<sup>[36]</sup>,研究基于 NIRS 技术建立一种方法快速检测这些掺假物可为消费者利益提供有利保障。

### 3.1 甲醛次硫酸氢钠

甲醛次硫酸氢钠,俗称吊白块,主要用于印染工业,禁止作为食品添加剂在食品中应用。添加甲醛次硫酸氢钠,可以改善面粉口感、白度、延长货架期,其检测一般采用高效液相色谱法<sup>[37]</sup>。Yuan, 等<sup>[38]</sup> 采用 SNV + (1<sup>st</sup> Der) 预处理 12500~4000  $\text{cm}^{-1}$  区间的光谱信息,然后采用 SPA 法筛选最优波长后构建 LS-SVM 模型识别小麦粉中的甲醛次硫酸氢钠,正确识别率高达 94.7% (表 3)。尽管研究甚少,但这项研究

揭示了 NIRS 技术识别小麦粉中甲醛次硫酸氢钠的可行性,后续可多次重复研究,以提高模型的可靠性和稳定性。

### 3.2 滑石粉

滑石粉的化学名称为硅酸镁,主要成分是二氧化硅、氧化镁和硫酸钠。国标法检测食品中滑石粉主要采用化学法,操作繁琐、耗时较长、检测成本较高。为了达到快速检测,孙晓荣等<sup>[39]</sup> 利用 PLS 算法挖掘没有经过任何预处理的 12500~4000  $\text{cm}^{-1}$  全波段光谱信息,建立 PLS 模型预测面粉中滑石粉含量,结果表明,NIRS 技术用于快速无损检测面粉中滑石粉效果极好。随后该课题组又采用 MSC 法预处理相同波段的光谱信息,再次进行试验,结果显示 PLS 模型预测面粉中滑石粉含量精度有所降低<sup>[40]</sup>,这可能与 MSC 预处理有很大关系,但也进一步验证了 NIRS 技术检测面粉中滑石粉的巨大潜力。将波长区间扩大到 400~2500 nm 后,邹博睿采用 SNV 光谱预处理,构建径向基函数人工神经网络(RBF-ANN)模型预测小麦粉中滑石粉含量,预测效果进一步提升<sup>[41]</sup>,这可能与增加了可见光信息有关。

### 3.3 过氧化苯甲酰(BPO)

BPO 被用作品质改良剂和增白剂添加到面粉中,国家卫生部 2011 年开始禁止在面粉生产中添加过氧化苯甲酰。现有的 BPO 检测主要有气相色谱法和液相色谱法<sup>[42-43]</sup>,研究 NIRS 技术实现简便、快速检测面粉中 BPO 意义重大。张志勇等<sup>[44-45]</sup> 先后采用小波变换、经验模态分解(EMD)预处理近红外光谱(900~1700 nm)信息,分别使用全波段光谱和 SPA 选出的 7 个特征波长(930、1065、1313、1443、1480、1639、1687 nm)构建 PLS 模型预测面粉中 BPO,结果显示 PLS 模型预测效果良好,表面 NIRS 技术可潜在用于小麦粉中 BPO 含量检测。但是基于 NIRS 的 BPO 检测研究甚少,还需大量研究,以提高 NIRS 技

术的检测精度。

### 3.4 石灰

目前使用 NIRS 技术检测石灰类物质报道较少。Wang 等<sup>[46-47]</sup>先后采用经典最小二乘(CLS)算法、PLS 算法构建预测石灰类物质的定量模型,结果显示预测小麦粉中石灰、碳酸钙的模型具有较高的精度(表3)。

### 3.5 偶氮甲酰胺(ADC)

ADC 是一种化学添加剂,具有漂白与氧化双重功能,是面粉中常用的一种增筋剂。一些研究表明 ADC 被食用存在较大隐患<sup>[48-49]</sup>,欧洲很多国家已禁止向面粉中添加 ADC,我国国家标准中规定面粉中 ADC 的添加量不能超过 45 mg/kg<sup>[50]</sup>。Gao 等<sup>[51]</sup>利用 850~1050 nm 范围的光谱信息建立 RBF-ANN 模型预测小麦粉中的 ADC 含量,结果显示,当使用所有浓度的 ADC 样品建模时,模型对低浓度 ADC 样品预测能力较差;仅使用低浓度( $\leq 72$  mg/kg) ADC 样本建模时,模型预测能力较高,说明 ADC 样品的浓度对 RBF-ANN 模型精度有很大影响。扩大光谱范围至 400~2500 nm, Che 等<sup>[52]</sup>采用相同的 RBF-ANN 算法建立模型预测面粉中 ADC 含量,获得了和 Gao 等类似

的研究结果。这些说明 RBF-ANN 算法是合适于挖掘近红外光谱信息与小麦粉中 ADC 之间的定量关系。

### 3.6 曲酸

曲酸具有抑菌、抗氧化等活性<sup>[53]</sup>,被添加于面粉中抑制酶促褐变,可改善面粉外观和品质。但研究表明,曲酸具有弱毒性,大剂量饮食可对人体健康造成危害<sup>[54]</sup>。利用 NIRS 技术快速定量检测面粉中曲酸研究极少。目前仅有赵昕等<sup>[55]</sup>在 1000~2400 nm 范围内选取最优波段(1088.8~1153.5 nm),并基于 PLS 算法构建模型预测高、中、低筋面粉以及混合面粉中不同浓度曲酸(1.0~10.0%)含量,结果显示 PLS 模型预测面粉中曲酸含量效果良好(表3)。

如表3所示,尽管这些研究结果说明 NIRS 技术用于小麦粉中掺假物检测具有一定可行性,但是报道依然较少,后续还需大量研究,进一步验证 NIRS 技术检测小麦粉中掺假物的可靠性和稳定性。

## 4 结语及展望

综述近十年的研究结果可知,NIRS 技术在小麦粉品质检测方面具有巨大潜力。总体而言,NIRS 技术目前多用于小麦粉理化指标检测和粉质指标中的面筋含量检测,其他指标的测定研究相对很少,还需

表3 NIRS 技术用于检测小麦粉掺杂物

Table 3 Application of NIRS technology for detection of adulteration in wheat flour

指标	光谱范围	光谱预处理方法	最优波长/ 波段筛选方法	建模方法	模型性能	参考文献
甲醛次硫酸氢钠	12500~4000 $\text{cm}^{-1}$	SNV + (1 <sup>st</sup> Der)	SPA	LS-SVM	正确识别率 94.7% $R_c^2 = 0.9911$	[38]
滑石粉	12500~4000 $\text{cm}^{-1}$	-	-	PLS	RMSECV = 0.118 RMSEP = 0.0841 $R_c^2 = 0.9386$	[39]
滑石粉	12500~4000 $\text{cm}^{-1}$	MSC	-	PLS	RMSECV = 1.45 RMSEP = 1.05 $R_p = 0.9992$	[40]
滑石粉	400~2500 nm	SNV	-	RBF-ANN	RMSEP = 0.1638 RPD = 25.2485 $R_c^2 = 0.8901$	[41]
过氧化苯甲酰	900~1700 nm	小波变换	-	PLS	RMSEC = 40.85 mg/kg $R_p^2 = 0.8865$ RMSEP = 44.69 mg/kg $R_c^2 = 0.863$	[44]
过氧化苯甲酰	900~1700 nm	EMD	SPA	PLS	RMSEC = 45.47 mg/kg $R_p^2 = 0.860$ RMSEP = 46.02 mg/kg	[45]
石灰	7240~6870 $\text{cm}^{-1}$	-	-	CLS	R = 0.9483	[46]
石灰类物质	12800~4000 $\text{cm}^{-1}$	-	-	PLS	石灰: $R_c^2 = 0.9980$ RMSEC = 0.19 RMSEP = 0.63 碳酸钙: $R_c^2 = 0.9698$ RMSEC = 0.34 RMSEP = 0.44	[47]

续表

指标	光谱范围	光谱预处理方法	最优波长/ 波段筛选方法	建模方法	模型性能	参考文献
偶氮甲酰胺	850~1050 nm	-	相关系数法	RBF-ANN	全部样本: $R_p = 0.97828$ RMSEP = 18.2887 mg/kg RPD = 4.7621 低浓度样本( $\leq 72$ mg/kg): $R_p = 0.99492$ RMSEP = 2.0286 mg/kg RPD = 9.4631 $R_p = 0.99996$	[51]
偶氮甲酰胺	400~2500 nm	(1 <sup>st</sup> Der) + SNV	相关系数法	RBF-ANN	RMSEP = 0.5467 mg/kg RPD = 116.5858	[52]
曲酸	1000~2400 nm	(S-G) + (1 <sup>st</sup> Der)	iPLS	PLS	高筋面粉: $R_p^2 = 0.957$ RMSEP = 0.717% RPD = 4.824 中筋面粉: $R_p^2 = 0.951$ RMSEP = 0.830% RPD = 4.171 低筋面粉: $R_p^2 = 0.963$ RMSEP = 0.717% RPD = 4.830 混合面粉: $R_p^2 = 0.949$ RMSEP = 0.795% RPD = 4.352	[55]

进一步深入研究。研究结果首先揭示,通过选择合适的预处理方法、有效的算法筛选最优波段或波长可明显提高模型预测精度。其次,目前使用最多、效果较好、适用性较强的依然是 PLS 算法,其他算法依然有待开发。再次,尽管这些研究阐释了 NIRS 技术的潜能,未来依然要通过大量研究,构建高精度高稳定性模型,集成转化,从而真正形成生产力,实现实际生产应用。

参考文献

[1] 孙兴权,曾泽,赵景红,等.组合分析法检测小麦粉中4种非法添加物[J].食品工业科技,2013,34(21):305-309.  
 [2] 汪辉,曹小彦,彭新凯,等.高效液相色谱法测定小麦粉与大米粉中甲醛次硫酸氢钠含量的不确定度评定[J].食品科学,2009,30(12):205-208.  
 [3] 袁建,付强,高瑛琰,等.顶空固相微萃取-气质联用分析不同储藏条件下小麦粉挥发性成分变化[J].中国粮油学报,2012,27(4):106-109.  
 [4] 何鸿举,王玉玲,乔红,等.基于长波近红外光谱快速无接触评估小麦籽粒含水率[J].海南师范大学学报(自然科学版),2019,32(1):26-32.  
 [5] 张仲源,刘静,管晓,等.近红外光谱分析技术在食品检测中的应用研究进展[J].食品与发酵工业,2011,37(11):159-165.

[6] 何鸿举,王玉玲,乔红,等.NIR 光谱法快速预测小麦籽粒干物质含量[J].海南师范大学学报(自然科学版),2019,32(1):33-38.  
 [7] Kandpal L M, Lee H, Kim M S, et al. Hyperspectral reflectance imaging technique for visualization of moisture distribution in cooked chicken breast[J].Sensors,2013,13(10):13289-13300.  
 [8] Xiong Z, Sun D W, Dai Q, et al. Application of visible hyperspectral imaging for prediction of springiness of fresh chicken meat [J]. Food Analytical Methods, 2015, 8(2):380-391.  
 [9] 刘长虹,孙祥祥,王颖,等.小麦粉储存湿度对面粉品质及其制作馒头品质的影响[J].食品工业科技,2018,39(22):12-16.  
 [10] 金华丽,卞科.近红外光谱法检测小麦粉中的水分含量[J].中国粮油学报,2010,25(8):109-112.  
 [11] Kahnman F, Egesel C O. Development of a calibration model to estimate quality traits in wheat flour using NIR spectroscopy [J]. Research Journal of Agricultural Science, 2011, 43(3):392-400.  
 [12] 闫李慧.基于近红外光谱技术的面粉品质研究[D].郑州:河南工业大学,2012.  
 [13] Dong X, Sun X. A case study of characteristic bands selection in near-infrared spectroscopy: nondestructive detection of ash and

- moisture in wheat flour [J]. Journal of Food Measurement & Characterization, 2013, 7(3): 141-148.
- [14] 徐一茹, 刘翠玲, 孙晓荣, 等. 基于近红外和中红外光谱技术的小麦粉品质检测及掺杂鉴别方法[J]. 食品科学, 2014, 35(12): 128-132.
- [15] 孙晓荣, 周子健, 刘翠玲, 等. 基于光谱预处理结合遗传算法优化波长的面粉水分快速检测[J]. 食品科学, 2017, 38(16): 256-260.
- [16] 张斌, 沈飞, 章磊. 面粉品质近红外光谱在线检测系统开发与应用[J]. 现代食品科技, 2019, 35(2): 247-252.
- [17] Adeyeye S A O, Yildiz F. Assessment of quality and sensory properties of sorghum-wheat flour cookies [J]. Cogent Food & Agriculture, 2016, 2: 1245059.
- [18] Lin L Y, Peng C C, Wu T H, et al. Flour blending based on crude fat is more crucial than ash content in view of prolonged quality assurance [J]. Journal of Food Processing & Preservation, 2010, 34(1): 104-126.
- [19] 窦颖, 孙晓荣, 刘翠玲, 等. 基于模拟退火算法优化波长的面粉品质检测[J]. 食品科学, 2016, 37(12): 208-211.
- [20] 王赋腾, 孙晓荣, 刘翠玲, 等. 光谱预处理对便携式近红外光谱仪快速检测小麦粉灰分含量的影响[J]. 食品工业科技, 2017, 38(10): 16-19, 24.
- [21] Sudha M L, Vetrmani R, Leelavathi K. Influence of fibre from different cereals on the rheological characteristics of wheat flour dough and on biscuit quality [J]. Food Chemistry, 2007, 100(4): 1365-1370.
- [22] Jin H, Wang J, Yan L, et al. Establishment of nondestructive testing model of the protein content in wheat flour by near infrared spectroscopy [C]. International Conference on New Technology of Agricultural Engineering. IEEE, 2011.
- [23] Chen J, Zhu S, Zhao G. Rapid determination of total protein and wet gluten in commercial wheat flour using siSVR-NIR [J]. Food Chemistry, 2017, 221: 1939-1946.
- [24] 陈嘉, 叶发银, 赵国华. 基于信息融合的小麦粉品质快速检测[J]. 食品与发酵工业, 2019, 45(15): 243-250.
- [25] 张晓燕, 陆启玉, 蔡凤仪, 等. 面粉面筋数量和质量与鲜湿面条品质的关系 [J]. 河南工业大学学报: 自然科学版, 2006, 27(2): 25-28.
- [26] Chandi G K, Seetharaman K. Optimization of gluten peak tester: a statistical approach [J]. Journal of Food Quality, 2012, 35(1): 69-75.
- [27] 朱小乔, 刘通讯. 面筋蛋白及其对面包品质的影响[J]. 粮油食品科技, 2001, 22(8): 90-93.
- [28] Wesley I, Larrque 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.
- [29] 孙晓荣, 周子健, 刘翠玲, 等. 光谱预处理结合模拟退火算法的小麦粉面筋含量检测[J]. 食品科学, 2018, 39(2): 222-226.
- [30] 胡玉君, 刘翠玲, 窦森磊, 等. 基于近红外光谱的小麦粉湿面筋含量检测[J]. 四川大学学报: 自然科学版, 2015, 52(4): 49-49.
- [31] 孙营伟, 周萍. 面粉湿面筋近红外定量分析中的光谱预处理方法研究[J]. 中国酿造, 2016, 35(1): 137-140.
- [32] Łuczycycka D, Czubaszek A, Fajarczuk M, et al. Dielectric properties of wheat flour mixed with oat meal [J]. International Agrophysics, 2013, 27(2): 175-180.
- [33] 杨虬. 庆阳市冬小麦品质育种及高分子优质亚基组成评价与分析[D]. 杨凌: 西北农林科技大学, 2005.
- [34] 潘治利, 田萍萍, 黄忠民, 等. 不同品种小麦粉的粉质特性对速冻熟制面条品质的影响[J]. 农业工程学报, 2017, 33(3): 307-314.
- [35] 陈洁, 霍蓓, 宋泽伟, 等. 小麦粉粉质特性与饺子皮质构品质的关系研究[J]. 食品工业, 2013(4): 136-138.
- [36] 郭光美, 王云清. 面粉中掺有滑石粉的快速检测方法[J]. 食品研究与开发, 2000, 21(1): 40-42.
- [37] 黄丽金, 童优芸. 高效液相色谱法测定面粉及其制品中的甲醛次硫酸氢钠残留量[J]. 安徽农业科学, 2015(13): 259-260.
- [38] Yuan W, Xiang B, Yu L, et al. A non-invasive method for screening sodium hydroxymethanesulfonate in wheat flour by near-infrared spectroscopy [J]. Food Analytical Methods, 2011, 4(4): 550-558.
- [39] 孙晓荣, 刘翠玲, 吴静珠, 等. 基于近红外光谱无损快速检测面粉品质的研究[J]. 食品科学技术学报, 2011, 29(4): 68-70.
- [40] 刘翠玲, 董秀丽, 孙晓荣, 等. 近红外光谱快速检测小麦面粉中滑石粉含量研究—基于 PLS [J]. 农机化研究, 2013(7): 183-187.
- [41] 邹博睿. 基于 NIRS 技术的面粉中滑石粉含量检测技术研究[D]. 哈尔滨: 黑龙江大学, 2018.
- [42] 钟全斌, 宁啸骏, 李兆阶, 等. 高效液相色谱法测定粉丝中过氧化苯甲酰 [J]. 理化检验: 化学分册, 2006, 42(6): 435-436.
- [43] 李新华, 赵岷, 寇登民, 等. 毛细管柱气相色谱法测定小麦粉中过氧化苯甲酰 [J]. 理化检验: 化学分册, 2007, 43(8): 655-657.
- [44] 张志勇, 李刚, 刘海学, 等. 近红外漫反射光谱法检测小麦粉过氧化苯甲酰 [J]. 光谱学与光谱分析, 2011, 31(12): 3260-3263.
- [45] 张志勇, 李刚, 林凌, 等. EMD 和 SPA 算法在光谱法检测面粉过氧化苯甲酰添加量中的应用 [J]. 光谱学与光谱分析, 2012, 32(10): 2815-2819.
- [46] Wang D, Ma Z H, Pan L G, et al. The application of CLS algorithm in the quantitative analysis of lime in wheat flour by NIR spectroscopy [J]. Advanced Materials Research, 2012, 472-475: 1874-1880.
- [47] 王冬, 马智宏, 潘立刚, 等. 近红外光谱法定量测定小麦粉中的石灰类添加剂的研究 [J]. 光谱学与光谱分析, 2013, 33(1): 69-73.
- [48] Vlastos D, Moshou H, Epeoglou K. Evaluation of genotoxic effects of semicarbazide on cultured human lymphocytes and rat bone marrow [J]. Food & Chemical Toxicology, 2010, 48(1):



nanoemulsions: Essential oil (thyme oil) and cationic surfactant (lauric arginate) [J]. Food Chem, 2015, 172: 298-304.

[27] 邓伶俐, 余立意, 买尔哈巴·塔西帕拉提, 等. 纳米乳液与微乳液的研究进展[J]. 中国食品学报, 2013, 13(8): 173-180.

[28] 孙小涵. 金华佛手精油的提取、纳米乳制备及活性研究[D]. 无锡: 江南大学, 2018.

[29] 任婧楠, 董曼, 范刚, 等. 甜橙精油纳米乳液的制备及其抑菌作用研究[J]. 食品工业科技, 2018, 39(23): 80-83, 104.

[30] 周汉军. 桉叶精油提取、纳米乳化及其抑菌活性研究[D]. 长沙: 中南林业科技大学, 2016.

[31] Lin L, Zhang X J, Zhao C T, et al. Liposome containing nutmeg oil as the targeted preservative against *Listeria*

monocytogenes in dumplings [J]. Rsc Advances, 2016, 6: 978-986.

[32] Mura S, Nicolas J, Couvreur P. Stimuli - responsive nanocarriers for drug delivery [J]. Nature Materials, 2013, 12(11): 991-1003.

[33] 谭晨. 类胡萝卜素脂质体的研究[D]. 无锡: 江南大学, 2015.

[34] 赵呈婷. 刺激响应型丁香精油脂质体对金黄色葡萄球菌的抑制作用及其在豆制品中的应用研究[D]. 镇江: 江苏大学, 2016.

[35] 张雪婧. 刺激释放型豆蔻精油纳米脂质体的制备及在肉类食品中的应用[D]. 镇江: 江苏大学, 2016.

(上接第 352 页)

209-214.

[49] Maranghi F, Tassinari R, Lagatta V. Effects of the food contaminant semicarbazide following oral administration in juvenile Sprague-Dawley rats. Food & Chemical Toxicology, 2009, 47: 472-479.

[50] 中华人民共和国卫生部. GB 2760-2011《食品安全国家标准食品添加剂使用标准》[S]. 北京: 中国标准出版社, 2011.

[51] Gao S, Sun L, Hui G, et al. Prediction of azodicarbonamide in flour using near - infrared spectroscopy technique [J]. Food Analytical Methods, 2016, 9(9): 2642-2648.

[52] Che W, Sun L, Zhang Q, et al. Application of visible/near-

infrared spectroscopy in the prediction of azodicarbonamide in wheat flour [J]. Journal of Food Science, 2017, 82(10): 2516-2525.

[53] 顾娟红, 杨天宇. 曲酸的安全性及检测方法研究进展[J]. 理化检验: 化学分册, 2012, 48(2): 247-249.

[54] Chusiri Y, Wongpoomchai R, Kakehashi A, et al. Non-genotoxic mode of action and possible threshold for hepatocarcinogenicity of kojic acid in F344 rats [J]. Food and Chemical Toxicology, 2011, 49(2): 471-476.

[55] 赵昕, 张任, 王伟, 等. 基于近红外光谱快速定量检测面粉中曲酸的方法建立[J]. 食品科学, 2018, 39(8): 249-255.

## 《食品工业科技》收录栏目

《食品工业科技》既是反映当前国内外食品工业技术水平的窗口, 又是新技术应用推广的桥梁, 面向食品、生物等相关专业的高校及科研机构, 政府管理机构, 大中型食品企业, 覆盖食品各分支行业, 不论对企业决策者, 还是研发人员都能提供有益的帮助。

栏目内容包括: 研究与探讨、生物工程、工艺技术、食品安全、分析检测、包装与机械、食品添加剂、贮运保鲜、营养与保健、综述, 呈现国内外最前沿的学术成果, 为科研人员提供专业指导。