

傅里叶近红外反射光谱法快速测定大豆脂肪酸含量

孙君明¹, 韩粉霞¹, 闫淑荣¹, 杨 华¹, 佐藤哲生²

1. 中国农业科学院作物科学研究所, 国家农作物基因资源与基因改良重大科学工程, 北京 100081
2. 日本九州冲绳农业研究中心, 日本 熊本 861 1192

摘 要 目前大豆脂肪酸育种需要进行大量的气相色谱数据分析, 因此建立近红外光谱(NIRS)快速测定脂肪酸组分技术具有重要意义。文章以 108 个中国大豆[*Glycine max* (L.) Merr.] 品种或品系为材料, 以傅里叶近红外光谱(FT-NIRS, 4 000~12 500 cm^{-1})与气相色谱(GC)技术相结合, 采用偏最小二乘(PLS)回归和交叉验证法, 探讨利用 FT-NIRS 技术预测脂肪酸含量的可行性。依据 OPUS 5.0 软件针对不同脂肪酸组分筛选出最佳 NIRS 光谱区域为 6 101.9~5 446.5 cm^{-1} 。交叉验证结果显示大豆主要脂肪酸组分, 如油酸(C18: 1, $R^2_{\text{CV}} = 0.94$)、亚油酸(C18: 2, $R^2_{\text{CV}} = 0.87$)、亚麻酸(C18: 3, $R^2_{\text{CV}} = 0.85$)和总饱和脂肪酸(C16: 0+ C18: 0, $R^2_{\text{CV}} = 0.88$)的预测准确率较高。外部验证结果证明大豆油酸预测模型的决定系数最高($R^2_{\text{val}} = 0.91$), 其预测均方根误差(RMSEP)为 2.47 $\text{g} \cdot \text{kg}^{-1}$ 干重, RMSEP/SD 的比值为 0.29, 可保证大豆油酸辅助育种的准确性; 而棕榈酸、硬脂酸、亚油酸、亚麻酸和总饱和脂肪酸的预测决定系数范围为 0.66~0.76, RMSEP 范围为 0.37~2.74 $\text{g} \cdot \text{kg}^{-1}$ 干重, RMSEP/SD 比值范围为 0.47~0.53, 表明可以进行大豆脂肪酸组分含量的初步筛选。该研究进一步证明利用 FT-NIRS 技术预测大豆主要脂肪酸组分是稳定可行的。

关键词 大豆[*Glycine max* (L.) Merr.]; 脂肪酸; 傅里叶近红外反射光谱; 气相色谱

中图分类号: O657.3 文献标识码: A 文章编号: 1000-0593(2008)06-1290-06

引 言

大豆[*Glycine max* (L.) Merr.] 是人类重要的植物蛋白质和油脂来源, 其油脂含量达到 20% 左右, 是植物油加工业主要原料^[1]。大豆油脂中含有大量不饱和脂肪酸有益于人体健康, 引起人们普遍重视, 但由于大豆油中亚麻酸含量普遍较高, 降低其储存期^[2], 而从育种角度改善脂肪酸组成是行之有效的办法, 因此脂肪酸成分的改良已成为大豆品质育种的重要内容。过去对大豆脂肪酸分析主要采用气相色谱和液相色谱技术, 不仅消耗大量人力和物力, 而且造成时间浪费, 降低育种效率^[3, 4]。由此可见, 如何快速、准确地测定大豆种子中的脂肪酸组分, 以加速大豆品质育种是一个亟待解决的问题。

近红外光谱技术(near infrared spectra, NIRS)是利用有机质在近红外光谱区(800~2 500 nm)的振动吸收从而快速测定样品中多种化学成分含量的一项新技术。目前, 在不同作物上利用 NIRS 技术测定脂肪酸组成国外已有部分研究报

道。Velasco 等利用气相色谱结合近红外光谱技术基于油菜的混合籽粒样品进行交叉验证模型分析, 在油酸、亚油酸、亚麻酸和芥酸($R^2 = 0.95 \sim 0.98$)上获得较好预测结果, 而针对棕榈酸、硬脂酸和十二碳烯酸的预测结果相对较差($R^2 = 0.62 \sim 0.76$)^[5]。Velasco 等又基于油菜籽粒样品进行检测模型研究, 发现在油酸($R^2 = 0.85$)和芥酸($R^2 = 0.88$)上获得较好预测结果, 而在亚油酸($R^2 = 0.56$)和亚麻酸($R^2 = 0.53$)上预测决定系数却较低^[6]。Perez Vich 等鉴定向日葵混合籽粒中的脂肪酸组成也获得了较高 NIRS 决定系数($R^2 = 0.90 \sim 0.97$)^[7]。Sato 等分析了芝麻混合种子脂肪酸组成的预测模型, 同样在亚油酸($R^2 = 0.89$)和油酸($R^2 = 0.81$)上获得比较理想的预测结果, 而在硬脂酸($R^2 = 0.76$)和棕榈酸($R^2 = 0.35$)上预测结果相对较差^[8]。

国外在大豆的脂肪酸鉴定方面也有 NIRs 的研究报道。Pazdernik 等利用大豆粉沫和混合籽粒样品研究五种脂肪酸的 NIRS 预测模型, 其决定系数范围分别为 0.38~0.71 和 0.18~0.56^[9]。Kovalenko 等研究了不同统计分析方法对脂肪酸预测准确性的影响, 发现在总饱和脂肪酸(棕榈酸+硬

收稿日期: 2007-02-16, 修订日期: 2007-05-19

基金项目: 国家自然科学基金项目, 国家“948”项目(2006G1), “973”项目(2002CB111300), “863”计划项目(2006AA100104)院所基金和支撑计划项目(2006BAD13B05 和 2006BAD01A04)资助

作者简介: 孙君明, 1972 年生, 中国农业科学院作物科学研究所副研究员 e-mail: sunjm@mail.caas.net.cn

脂酸)上获得的预测结果较好($R^2 = 0.91 \sim 0.94$),而在油酸($R^2 = 0.76 \sim 0.81$),亚油酸($R^2 = 0.73 \sim 0.76$)和亚麻酸($R^2 = 0.67 \sim 0.74$)的预测效果次之^[10]。我国利用NIRS技术鉴定大豆的品质性状主要集中在蛋白质、脂肪含量和微量元素等方面^[11, 12],而在大豆脂肪酸组成方面未见研究报道。本文利用傅里叶近红外反射光谱(FT-NIRS)技术测定我国108份大豆品种或品系的傅里叶近红外漫散射光谱,采用偏最小二乘(partial least square, PLS)回归法,对FT-NIRS预测大豆脂肪酸组分的方法进行研究,旨在探索FT-NIRS技术在大豆脂肪酸组成育种中的应用,提高我国大豆品质育种效率。

1 实验部分

1.1 实验材料

选用108个大豆品种或品系,分别来自本所大豆种质资源库和育种后代材料,于2004—2005年分别种植于北京昌平试验基地,当年收获后统一晾晒,然后放入干燥器中平衡水分一周,并将所有样品分为校正集(64份样品)和外部验证集(44份样品)。利用旋风磨(Retsch ZM100, $\varnothing = 1.0$ mm, Rheinische, Germany)将全部样品粉碎成粉状,分装于封口塑料袋中,编号保存于4℃冰箱中,待测定化学值和收集光谱数据。

1.2 大豆脂肪酸含量测定

样品甲酯化处理:每个样品称取1.5 g左右的粉碎过目的豆粉,放入瑞士生产的Buchi B-811半自动索氏提取仪的样品杯中,添加一定量无水乙醚回流提取大豆油6 h,然后检测各个样品的油份含量。将提取的豆油取30 mg放入试管底部,加入2.0 mL 0.5 mol·L⁻¹的甲醇钠(NaOMe, SIGMA)混匀,60℃温浴5.0 min,然后加入2.0%的乙酸(Acetic acid, 国产分析纯)4.0 mL混匀,再添加2.0 mL正己烷(Hexane, 分析纯),充分混匀,静置片刻,待溶液分层后,取上层含脂肪酸甲酯的正己烷溶液上机测定。

气谱检测条件:气相色谱仪(GC)采用美国菲尼根公司生产的Trace 2000,配备氢火焰离子化(FID)检测器和氢气发生器。色谱柱选用美国J&W公司的石英毛细管柱:DB WAX30 m×0.25 mm i.d.×0.25 μm;柱温190℃持续25 min;进样口温度270℃,检测器温度290℃;总载气量16 mL·min⁻¹;氢气35 kPa;空气350 kPa;氮气30 kPa;分流比10:1。每个样品检测两次,取平均值。大豆主要五种脂肪酸组分含量按质量比计算(g·kg⁻¹豆粉干重),包括棕榈酸(C16:0)、硬脂酸(C18:0)、油酸(C18:1)、亚油酸(C18:2)、亚麻酸(C18:3)和饱和脂肪酸(C16:0+C18:0)。标准样品亚油酸(C18:2, 色谱纯)购自日本Wako公司。

1.3 样品光谱数据采集

实验所用仪器为德国Bruker VECTOR 28/N傅里叶变换近红外光谱仪。将30 g左右大豆粉末样品盛于直径50 mm的旋转样品池中,在4 000~12 000 cm⁻¹(波长800~2 400 nm)谱区范围内,扫描64次,分辨率为16 cm⁻¹,采集样品的吸收光谱^[9]。为消除样品粒度大小、均匀性不一致等因素对光谱的影响,每个样品均重复装样3次,计算其平均光谱

数值贮于计算机中待用。

1.4 NIRS数学模型建立

采用BRUKER公司OPUS/QUANT 5.0商用光谱定量分析软件进行光谱预处理、谱区选择和回归统计分析。建立模型的化学计量学方法为偏最小二乘(partial least square, PLS)回归法。将样品分为校正集和外部验证集。首先采用校正样品集建立校正模型并作交叉验证,再用外部验证样品集进行外部验证,最后根据交叉验证决定系数(R_{CV}^2)和外部验证决定系数(R_{val}^2)、交叉验证均方根误差RMSECV(root mean square error of cross validation)、及预测均方根误差RMSEP(root mean square error of prediction)、RMSEP/SD比值等指标确定最优校正模型。对于未知样品的分析采用被测未知样品的光谱与建模集的平均光谱马氏距离(Mahalanobis distance)来估计该样品是否可用此模型预测。采用SPSS 10.0软件进行光谱参数与脂肪酸组成的相关系数分析和显著性测验。

2 结果与分析

2.1 样品脂肪酸含量的组成分布

将108份大豆样品随机分成校正集(64份)和外部验证集(44份),采用气相色谱仪(GC)测定主要脂肪酸组分含量。由GC检测结果显示在所选校正集的大豆种子中亚油酸(C18:2)含量最高,为主要脂肪酸组分,平均含量为106.73 g·kg⁻¹干重,其含量变化范围在93.66~135.56 g·kg⁻¹干重之间;油酸(C18:1)含量次之,变化范围在30.07~63.02 g·kg⁻¹干重之间,且变异系数最高(CV=19.61%);而硬脂酸(C18:0)含量最低,平均含量为6.95 g·kg⁻¹干重,变化范围在5.20~9.03 g·kg⁻¹干重之间(见表1)。表2为外部验证集中NIRS预测大豆脂肪酸含量的统计分析,由表1和表2可知,所选择的108份大豆品种或品系主要来自本所大豆种质资源库和育种后代材料,基本上涵盖当前生产上推广品种和育种中间材料中可能出现的脂肪酸含量变化范围,其脂肪酸含量之间存在广泛的品种间差异,具有较好的建模检测样品代表性,可以保证所建大豆脂肪酸含量NIRS检测模型的可靠性。

2.2 最优光谱波段的选择和回归分析

利用OPUS/Quant 5.0软件中自动优化功能,筛选建模最佳光谱预处理方法和谱区范围,并经SPSS 10.0软件分析不同光谱波段与脂肪酸组分之间相关关系(见表3)。结果显示大豆脂肪酸组成最优NIR光谱区段主要分布在6 101.9~5 446.2 cm⁻¹之间,且不同脂肪酸组分对应的最佳光谱波段不同,结果如下:亚油酸在5 801.0 cm⁻¹光谱区相关系数最高($r = 0.855^{***}$),而其他脂肪酸如棕榈酸、硬脂酸、油酸、亚麻酸和总饱和脂肪酸(C16:0+C18:0)对应的最佳光谱波段分别为6 009.3 cm⁻¹($r = 0.611^{***}$), 5 723.9 cm⁻¹($r = -0.526^{***}$), 5 831.9 cm⁻¹($r = 0.576^{***}$), 5 677.6 cm⁻¹($r = -0.581^{***}$)和6 009.3 cm⁻¹($r = 0.603^{***}$),由此证明,上述光谱波段针对不同大豆脂肪酸组成NIRS预测模型的贡献率相对较高。

Table 1 Cross validation statistics of the NIRS calibration equations developed to estimate fatty acid concentrations($\text{g} \cdot \text{kg}^{-1}$ dry weight) in soybeans

Fatty acid compositions	N	Minimum	Maximum	Mean	SD	CV %	R^2_{CV}	RMSECV	RMSECV / SD
Palmitic acid(C16: 0)	64	18.62	27.72	21.60	1.56	7.22	0.65	0.91	0.58
Stearic acid(C18: 0)	64	5.20	9.03	6.95	0.78	11.22	0.66	0.40	0.51
Oleic acid(C18: 1)	64	30.07	63.02	43.90	8.61	19.61	0.94	2.02	0.23
Linoleic acid(C18: 2)	64	93.66	135.56	106.73	7.12	6.67	0.87	2.58	0.36
Linolenic acid(C18: 3)	64	12.00	21.55	16.53	2.32	14.04	0.85	0.89	0.38
Total saturates(C16: 0+ C18: 0)	64	24.62	35.71	28.55	1.97	6.90	0.88	0.58	0.29

R^2_{CV} = determination coefficient of cross validation; SD= standard deviation of the reference method values; RMSECV= a root mean square error of cross validation; CV, coefficient of variance

Table 2 External validation statistics of the NIRS calibration equations developed to estimate fatty acid concentrations($\text{g} \cdot \text{kg}^{-1}$ dry weight) in soybeans

Fatty acid composition	N	Minimum	Maximum	Mean	SD	CV %	R^2_{val}	RMSECV	RMSECV / SD
Palmitic acid(C16: 0)	44	18.60	23.49	21.23	1.40	6.59	0.74	0.69	0.50
Stearic acid(C18: 0)	44	5.62	8.54	6.93	0.69	9.96	0.66	0.37	0.53
Oleic acid(C18: 1)	44	30.05	63.04	44.14	8.46	19.17	0.91	2.45	0.29
Linoleic acid(C18: 2)	44	94.95	118.09	105.47	5.60	5.31	0.76	2.74	0.49
Linolenic acid(C18: 3)	44	12.59	20.74	16.07	1.96	12.20	0.75	0.93	0.47
Total saturates(C16: 0+ C18: 0)	44	24.60	31.93	28.23	1.73	6.13	0.76	0.84	0.49

R^2_{val} = determination coefficient of external validation; SD= standard deviation of the reference method values; RMSEP= a root mean square error of prediction; CV, coefficient of variance

Table 3 Correlation coefficients between spectral wavenumbers and fatty acid compositions in soybeans

Fatty acid composition	Spectral wavenumber selected for analysis (cm^{-1})				
	6 009.3	5 831.9	5 801.0	5 723.9	5 677.6
Palmitic acid(C16: 0)	0.611***	-0.367**	0.337**	0.215	-0.013
Stearic acid(C18: 0)	0.299*	-0.471***	0.249*	0.526***	0.408***
Oleic acid(C18: 1)	0.271*	-0.576***	0.010	0.546***	0.467***
Linoleic acid(C18: 2)	0.373**	-0.106	0.855***	0.382**	0.152
Linolenic acid(C18: 3)	0.159	0.347**	0.096	-0.507***	-0.581***
Total saturates(C16: 0+ C18: 0)	0.603***	-0.478***	0.366**	0.378**	0.151

Note: Spectral preprocessing method: first derivative plus straight line subtraction; *, **, and *** represented the significant levels at 0.05, 0.01 and 0.001, respectively

2.3 NIRS校正模型的建立和参数优化

利用 OPUS/Quant 5.0 软件, 通过交叉验证方法比较不同光谱预处理方法与谱区范围组合的交叉验证决定系数(R^2)、交叉验证均方根误差(RMSECV)和主因子数等参数, 确定最优校正模型。结果显示, 采用一阶导数+直线扣减光谱预处理结合分析谱区 6 101.9~5 770.2 cm^{-1} , 建立了大豆油酸组分最佳 NIRS 校正模型($R^2_{\text{CV}} = 0.94$, RMSECV= 2.02); 在同样光谱条件下, 亚麻酸组分也获得了最佳校正模型($R^2_{\text{CV}} = 0.85$, RMSECV= 0.89); 另外, 亚油酸组分在 5 777.9~5 446.2 cm^{-1} 谱区范围内结合二阶导数预处理也建立较理想的校正模型($R^2_{\text{CV}} = 0.87$, RMSECV= 2.58); 而棕榈酸和硬脂酸的校正模型的决定系数相对较低(C16: 0, $R^2_{\text{CV}} = 0.65$; C18: 0, $R^2_{\text{CV}} = 0.66$), 但将两个饱和脂肪酸合并计算所获得的校正模型却较为理想($R^2_{\text{CV}} = 0.88$, RMSECV= 0.58)(表 1)。

采用外部验证方法对所建模型的质量或实际预测效果进

行了评价(见图 1)。由表 2 和图 1 可见, 油酸组分的预测模型决定系数仍然最高($R^2_{\text{val}} = 0.91$), 其预测均方根误差(RMSEP)为 2.47 $\text{g} \cdot \text{kg}^{-1}$ 干重, RMSEP/SD 的比值为 0.29, 可保证大豆油酸辅助育种的准确性; 而棕榈酸、硬脂酸、亚油酸、亚麻酸和总饱和脂肪酸的预测决定系数范围为 0.66~0.76, 其 RMSEP 范围 0.37~2.74 $\text{g} \cdot \text{kg}^{-1}$ 干重, RMSEP/SD 比值范围为 0.47~0.53, 表明可以进行大豆脂肪酸组分初步筛选。综上所述, 进一步证明利用 FT-NIRS 技术预测大豆主要脂肪酸组分是稳定可行的。

3 讨论

3.1 针对脂肪酸的最优 NIR 光谱波段选择

Sato 等(2002, 2003)指出 1 600~1 800 nm(波数 6 250~5 555.6 cm^{-1})的近红外反射光谱波长区域与脂肪酸的碳链长度和顺式不饱和脂肪酸的吸收带有关, 特别是在 1 708 nm

($5\ 855\ \text{cm}^{-1}$) 波长范围内油酸和亚油酸与该波段的光谱参数具有极显著相关性^[8, 13]。本文同样证明了 $6\ 101.9 \sim 5\ 446.2\ \text{cm}^{-1}$ (波长 $1\ 638.8 \sim 1\ 836.1\ \text{nm}$) 近红外波数区域是脂肪酸

NIRS 建模优选光谱区段, 且在 $5\ 801.0$ 和 $5\ 831.9\ \text{cm}^{-1}$ 波段附近为亚油酸和油酸组分建模的最佳光谱区段(见表 3), 与 Sato 的研究结果基本一致。

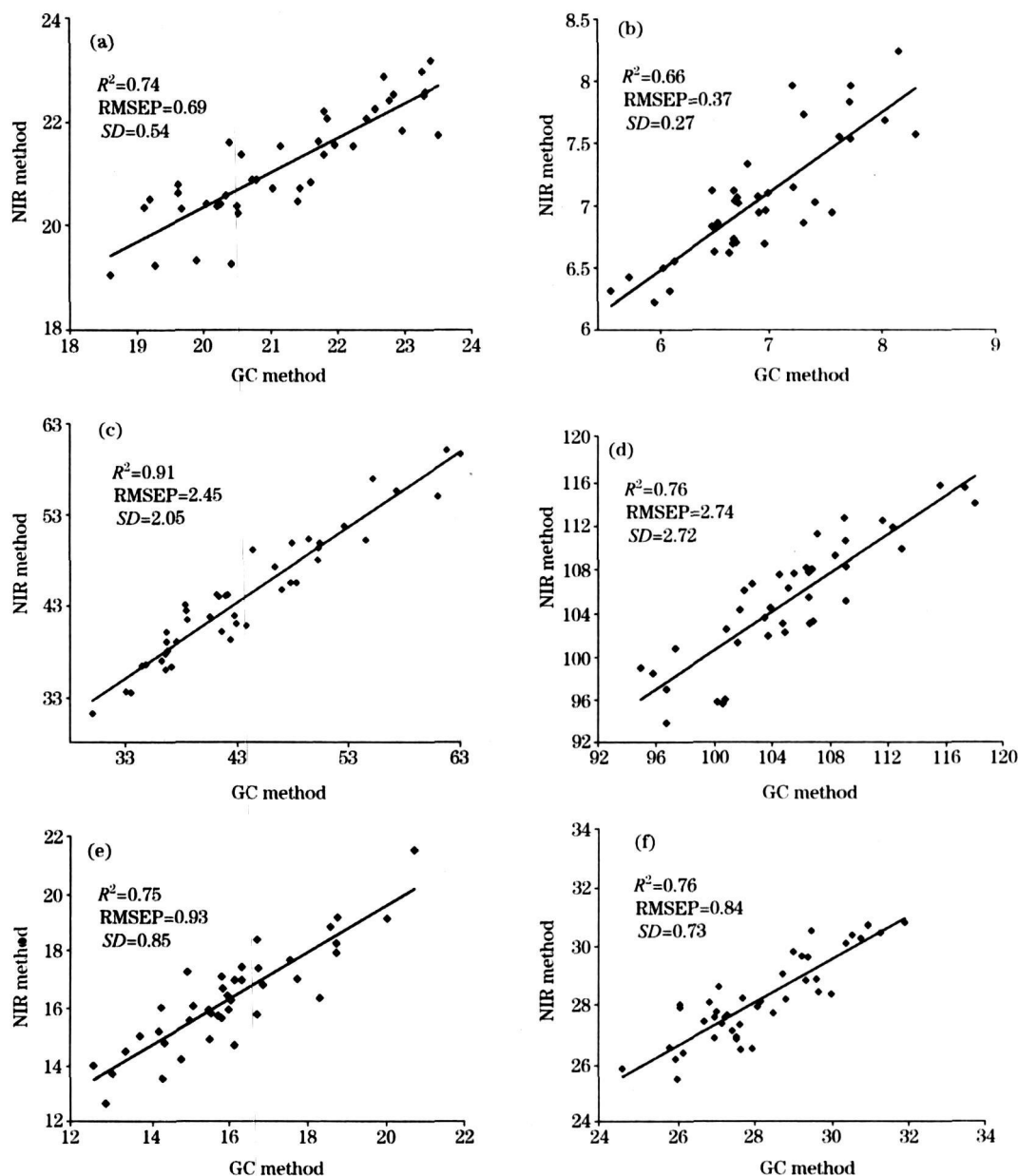


Fig 1 Scatter plots of correlation between NIRs and GC methods for the prediction of fatty acid concentrations ($\text{g} \cdot \text{kg}^{-1}$ dry weight) in the external validation set

(a): Palmitic acid; (b): Stearic acid; (c): Oleic acid; (d): Linoleic acid;
(e): Linolenic acid; (f): Total saturates(Palmitic acid+ Stearic acid)

3.2 脂肪酸 NIRS 预测模型的比较

国外关于脂肪酸的 NIRS 预测早有研究报道, 并在不同作物上获得了较好的预测效果, 而在大豆脂肪酸的预测效果上并不十分理想。Pazdernik 等利用大豆粉末和混合籽粒样品分别研究五种脂肪酸组分的 NIRS 预测效果, 其预测决定系数都普遍较低, 分别为 $0.38 \sim 0.71$ 和 $0.18 \sim 0.56$ ^[9]。Nirmalayar 等(2004)以大豆粉末为样品研究 FT-NIR 对脂肪酸组

分的预测效果也不太理想, 五个脂肪酸的预测决定系数较低 ($R^2 = 0.24 \sim 0.76$), 相应的 RMSEP/SD 的比值也较低 ($0.53 \sim 1.00$)^[14]。Kovalenko 等(2006)在大豆总饱和脂肪酸(棕榈酸+硬脂酸)上获得了较好预测结果 ($R^2 = 0.91 \sim 0.94$), 而在油酸 ($R^2 = 0.76 \sim 0.81$), 亚油酸 ($R^2 = 0.73 \sim 0.76$) 和亚麻酸 ($R^2 = 0.67 \sim 0.74$) 上的预测效果相对差一些^[10]。而我们建立的 NIRS 预测模型在大豆油酸方面获得了较为理想的

预测效果($R^2_{\text{val}} = 0.91$), 而在其他脂肪酸组分方面的预测效果与 Kovalenko 的研究结果基本相当(见表 2), 却明显优于 Pazdernik 和 Nimaiyar 的研究结果。国内利用 NIRS 技术检测脂肪酸组成的研究相对较少, 仅有吴建国等研究了油菜籽脂肪酸组成的 NIRS 分析模型, 获得了较好的预测结果^[15], 而关于大豆脂肪酸的 NIRS 预测结果未见研究报道。

3.3 应用 NIRS 快速测定大豆脂肪酸含量的可行性

本研究根据育种实际需要, 选来源广泛的大豆种质资源、高代品系等材料组成 NIRS 建模的校正集和外部验证集, 利用 NIRS 技术建立了稳定、准确、快速的大豆主要脂肪酸组分含量的 NIRS 预测模型。虽然所选样品类型为大豆粉末, 稍微增加了样品的预处理时间, 但减少了样品籽粒大小和均一性对预测模型精度的影响。另外, 由于传统的脂肪酸含量检测主要依靠气相色谱技术结合复杂的样品前处理,

不仅显著增加检测时间, 而且消耗大量人力和物力, 而利用 NIRS 技术可以快速、准确地预测主要脂肪酸组成, 大大节省检测时间, 提高大豆脂肪酸育种效率。

近红外高质量预测模型的建立需要拥有大量典型的种质资源, 才能使所建立的模型准确而稳定。虽然本研究所选用的材料具有较好的代表性(表 1 和表 2), 可以进行大豆早代材料的育种筛选, 但由于大豆种子中脂肪酸组成为数量性状, 受基因型、年份和环境条件的影响较大^[16-18]; 另外, 供试的大豆样品中部分脂肪酸组分含量变化范围尚不够宽泛, 如: 棕榈酸和硬脂酸含量变化范围相对较窄, 因而所建模型的预测效果较低。因此在现有的基础上, 应进一步增加部分有代表性的大豆种质, 尽量覆盖大豆育种材料中脂肪酸组分的变化范围, 逐步优化预测模型, 提高模型的质量和适用范围, 为大豆脂肪酸育种和种质资源品质鉴定服务。

参 考 文 献

- [1] Sonntag O V N. Journal of the American Oil Chemists' Society, 1985, 62: 928.
- [2] Willett W C. Science, 1994, 264: 532.
- [3] Hildebrand D F, Adams T R, Dahmer M L, et al. Plant Cell Reports, 1989, 7: 701.
- [4] Kinami T, Horii N, Narayan B, et al. Journal of the American Oil Chemists' Society, 2007, 84: 23.
- [5] Velasco L, Becker H C. Euphytica, 1998, 101: 221.
- [6] Velasco L, Möllers C, Becker H C. Euphytica, 1999, 106: 79.
- [7] Perez Vich B, Velasco L, Fernandez Martinez J M. Journal of the American Oil and Chemists' Society, 1998, 75: 547.
- [8] Sato T, Maw A A, Katsuta M. Journal of the American Oil and Chemists' Society, 2003, 80: 1157.
- [9] Pazdernik D L, Killam A S, Orf J H. Agronomy Journal, 1997, 89: 679.
- [10] Kovalenko I V, Rippke G R, Hurburgh C R. Journal of the American Oil and Chemists' Society, 2006, 83: 421.
- [11] LI Ning, MIN Shun-geng, QIN Fang-li, et al(李 宁, 闵顺耕, 覃方丽, 等). Spectroscopy and Spectral Analysis(光谱学与光谱分析), 2004, 24(1): 45.
- [12] ZHANG Zhuo-yong, CHEN Hang-ting, WANG Dan, et al(张卓勇, 陈杭亭, 王 丹, 等). Spectroscopy and Spectral Analysis(光谱学与光谱分析), 2002, 22(4): 673.
- [13] Sato T, Takahashi M, Matsunaga R. Journal of the American Oil and Chemists' Society, 2002, 79: 535.
- [14] Nimaiyar S, Paulsen M R, Nelson R L. 2004 ASAE/CSAE Annual International Meeting Sponsored by ASAE/CSAE Fairmont Chateau Laurier, The Westin, Government Centre Ottawa, Ontario, Canada, 2004, paper number: 046118.
- [15] WU Jianguo, SHI Chunhai, ZHANG Haizhen(吴建国, 石春海, 张海珍). Spectroscopy and Spectral Analysis(光谱学与光谱分析), 2006, 26(2): 259.
- [16] Hou G, Ablett G R, Pauls K P, et al. Journal of the American Oil Chemists' Society, 2006, 83: 759.
- [17] Rahman S M, Takagi Y, Kinoshita T. Theoretical and Applied Genetics, 1997, 95: 772.
- [18] Rebetzke G J, Pantalone V R, Burton J W, et al. Euphytica, 1996, 91: 289.

Rapid Determination of Fatty Acids in Soybeans [*Glycine max* (L.) Merr.] by FT Near-Infrared Reflectance Spectroscopy

SUN Jun-ming¹, HAN Feng-xia¹, YAN Shu-rong¹, YANG Hua¹, Tetsuo Sato²

1. Institute of Crop Sciences, Chinese Academy of Agricultural Sciences, National Key Facility for Crop Gene Resources and Genetic Improvement (NFCRI), Beijing 100081, China

2. National Agricultural Research Center for Kyushu Okinawa Region(KONARC), Koshi City, Kumamoto, Japan 861-1192

Abstract Current breeding programs dealing with fatty acid (FA) concentrations in soybean [*Glycine max* (L.) Merr.] require

large numbers for gas chromatographic analyses, thus it is important to develop a method for rapid determination of fatty acid by Near Infrared Reflectance spectroscopy (NIRS) in soybeans. The objective of this work was to study the potential of fourier-transform near infrared reflectance spectroscopy (FT-NIRS) to estimate the fatty acid concentrations in Chinese soybean varieties. One hundred and eight of soybean cultivars or lines (the calibration set: 64; the external validation set: 44) were scanned within $4\,000\text{--}12\,500\text{ cm}^{-1}$ of wavenumbers using a standard sample cup by NIRS machinery, and analyzed the fatty acids by gas chromatograph (GC) methods. Equations were developed using partial least squares (PLS) regression and cross validation for multivariate calibration in this study. The optimal spectral region was selected from $6\,101.9\text{--}5\,446.5\text{ cm}^{-1}$ based on the OPUS 5.0 software. Cross validation results showed that major FA components such as oleic acid ($R_{CV}^2 = 0.94$), linoleic acid ($R_{CV}^2 = 0.87$), linolenic acid ($R_{CV}^2 = 0.85$), and total saturates ($R_{CV}^2 = 0.88$) were accurately determined by the proposed equations as compared with the reference data obtained by the GC method. External validation results also demonstrated that equation for oleic acid had the highest predictive ability ($R_{va}^2 = 0.91$), root mean square error of predication (RMSEP) value was $2.47\text{ g} \cdot \text{kg}^{-1}$ dry weight, the ratios of RMSEP to the standard deviation (SD) was 0.29 , which was usable for quality assurance application. Moreover, equations for palmitic acid, stearic acid, linoleic acid, linolenic acid, and total saturates were predicted with the determination coefficients ranging from 0.66 to 0.76 , RMSEP values from 0.37 to $2.74\text{ g} \cdot \text{kg}^{-1}$ dry weight, and RMSEP/ SD values from 0.47 to 0.53 , which could be used for sample screening. Therefore, we confirmed that a reliable estimation of the major fatty acid components is possible by using NIRS technique in soybeans.

Keywords Soybean [*Glycine max* (L.) Merr.]; Fatty acid; FT-NIRS; Gas chromatograph

(Received Feb. 16, 2007; accepted May 19, 2007)

2008 第3届亚太地区冬季等离子体光谱化学会议 2008 Third Asia Pacific Winter Conference on Plasma Spectrochemistry (2008 APWC)

由日本化学会和日本分析化学学会主办的第3届亚太地区冬季等离子体光谱会议(2008 APWC)将于2008年11月16~21日在日本筑波国际会议中心举行。

征文范围:

1. ICP-MS 和 ICP-OES 的仪器与原理; 2. 样品的制备和导入; 3. ICP-MS 的碰撞反应池技术与应用; 4. 新仪器与等离子体源; 5. 辉光放电光源; 6. 环境、金属组学和生命科学中的元素形态; 7. ICP-MS 和 ICP-OES 的应用, 包括: 冶金、RoHS、高纯物质及半导体材料、核工业材料、环境、地质、海洋科学、食品、农业、生物学、临床和药物、质量控制和标准化等; 8. 同位素比和同位素稀释; 9. 激光烧蚀进样。

会议地点:

筑波国际会议中心(Tsukuba International Congress Center) (日本茨城县筑波市(Tsukuba, Ibaraki, Japan))

联系人: Prof. Naoki Furuta

Chuo University, Faculty of Science and Engineering, Department of Applied Chemistry, 1-13-27 Kasuga, Bunkyo-ku, Tokyo 112-8551, Japan

Tel: +81-3-3817-1906, Fax: +81-3-3817-1699

e-mail: n.furuta@chem.chuo-u.ac.jp

会议使用英语交流

会议详细信息请登录网站查询 <http://envsun.chem.chuo-u.ac.jp/plasma/2008apwc>