

近红外光谱仪在黄酒品质分析中的应用

邓德文 步琦实验室设备贸易(上海)有限公司, 上海, 200090

郑校先, 朱宏霞 上海冠生园华光酿酒药业有限公司, 上海, 200439

摘要: 用 BUCHI NIRLab N-200 近红外光谱仪对黄酒的基酒、调和酒和成品酒进行近红外谱图扫描。同时, 用国标规定方法对这些样品进行经典的化学分析。谱图与化学值经化学计量学处理, 得到标定曲线, 用于近红外光谱仪的日常分析。结果表明, 酒精度、糖度和总固形物用近红外光谱仪进行分析, 具有良好的效果。pH 的测定结果与经典数据也具有较好的线性, 也可作为一种半定量的参考方法, 而总酸度和氨基酸态氮在我们的实验中用近红外分析的结果与经典数据比较则效果稍差。

序言: 黄酒是一种营养型养生酒, 以其性温和, 味道合口, 有益于身体健康而广受人们喜欢。为控制黄酒成品的质量, 中国国家标准局规定了一系列在生产过程中需要执行的标准。其中很多都是经典的化学方法, 分析周期长, 可谓“劳民伤财”。近红外光谱分析是一种快速无损的多功能分析方法。本研究旨在阐明黄酒品质控制中各项指标应用近红外光谱仪进行分析的可行性。本文对酒精度、糖度、总固形物、酸度、氨基酸态氮和 pH 的近红外分析方法进行了研究。

材料与方

材料: 所有实验样品均来自于上海冠生园华光酿酒药业有限公司的生产线。

经典方法: 经典化学值: 酒精度、糖度、酸度、氨基酸态氮(以下简称氨氮)、pH 和总固形物均严格按国标方法进行。

近红外谱图: 样品置于标准的培氏培养皿中, 盖上透反射盖, 用BUCHI NIRLab N-200 (FT-NIR Buchi, Switzerland)近红外光

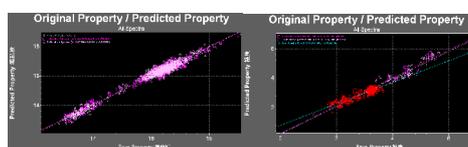


谱仪进行扫描。扫描条件: 谱图范围1000-2500nm, 扫描次数为64次, 分辨率为2cm⁻¹, 环境室温, 时间从2006年9月至2006

年12月底。测量结果与谱图解析用NIRCal 4.21(chemometric software from Buchi, Switzerland)进行处理。

结果与讨论:

1. 各属性近红外测定与经典方法的结果统计如表1所示。结果显示, 酒精度、糖度和总固形物的近红外测量结果具有良好的线性关系。特别是酒精度, 无论是线性度还是预测误差, 都非常理想。



图一、酒精度经典值与预测值对照图 图二、全浓度糖度分段曲线表现图

2. 表1中糖度有两行值, 即糖度1和糖度2, 分成两组的原因在于, 国标的分析方法为两种, 如果采用一条标准曲线, 会出现拐点, 如图所示, 从而导致预测结果与实验结果误差偏大。

3. 标定波长范围选择在4393.08-4801.91, 5392.03-6603.11, 7798.77-10001.1之间, 主要目的是避开在近红外区具有强吸收的水峰的一级和二级倍频的干扰。

结论: 表1的结果表明, 用近红外光谱仪分析黄酒酒精度完全可以替代常规实验方法; 而糖度和总固形物具有良好的线性, 表明近红外方法与经典方法相关性很高, 通过完善经典数据, 也可提高预测准确度从而替代经典方法; 而其它几个属性, 也具较高的参考意义。

表1. 黄酒中各属性近红外分析的标定与预测的统计

	样品个数	拟合方法	谱图前处理	拟合因子	标定		预测		标定范围
					误差	线性	误差	线性	
酒精度(%)	2416	PLS	1. First Derivative BCAP 2. Normalization to Unit Length	7	0.17	0.99	0.19	0.99	12.20-19.11
糖度1(g/100ml)	1160	PLS	MSC full	12	0.20	0.93	0.21	0.93	0.80-3.98
糖度2(g/100ml)	828	PLS	Absorbance Log10(1/x)	12	0.16	0.97	0.18	0.97	3.00-5.88
酸度(mg/100g)	1107	PLS	MSC full	13	0.29	0.75	0.34	0.65	4.40-6.90
氨氮(mg/100g)	757	PLS	Normalization by Closure	11	0.06	0.65	0.06	0.61	0.57-1.06
pH	658	PLS	First Derivative BCAP	8	0.08	0.79	0.09	0.69	3.54-4.02
总固形物(%)	767	PLS	First Derivative BCAP	5	3.47	0.95	3.83	0.94	35.04-93.50