

ИДЕНТИФИКАЦИЯ ГРЕЧНЕВОЙ КРУПЫ СОЧЕТАНИЕМ МЕТОДОВ УФ-ВИДИМОЙ–БЛИЖНЕЙ ИК-СПЕКТРОСКОПИИ И МНОГОМЕРНОГО АНАЛИЗА

Ю. Т. Платов^{1*}, Д. А. Метленкин¹, Р. А. Платова¹,
В. А. Рассулов², А. Л. Верещагин³, В. А. Марьин³

УДК 633.12:519.237:535.15

¹ Российский экономический университет им. Г. В. Плеханова, Москва, Россия;
e-mail: Platov.YT@rea.ru

² Всероссийский институт минерального сырья им. Н. М. Федоровского, Москва, Россия

³ Бийский технологический институт (филиал)

Алтайского государственного технического университета им. И. И. Ползунова, Бийск, Россия

(Поступила 16 февраля 2021)

Проанализировано использование методов УФ-видимой–ближней ИК-спектроскопии в сочетании с многомерным анализом для классификации и идентификации гречневой крупы. Методом кластерного анализа образцы гречневой крупы, различающиеся временем урожая, размерами ядра, способом гидротермической обработки и сроками хранения, разделены на группы. Методом главных компонент выявлены полосы поглощения спектров УФ-видимой–ближней ИК-областей, соответствующие функциональным группам компонентов состава и вносящие наибольший вклад в разделение образцов на категории качества гречневой крупы. Методом дискриминантного анализа подтверждена гипотеза о разделении образцов на группы и построена классификационная функция для идентификации и сортировки гречневой крупы.

Ключевые слова: гречневая крупа, идентификация, качество, оптическая спектроскопия, хеометрика.

The application of UV-VIS-NIR spectroscopy combined with multivariate analysis for the classification and identification of buckwheat groats was analyzed. Samples of buckwheat groats differing in harvest time, kernel size, roasting method and storage time were divided into groups using cluster analysis method. Method of principal components revealed absorption bands of the UV-VIS-NIR spectrum, corresponding to the functional groups of the components of the composition and making the greatest contribution to the differentiation of samples into the quality categories of buckwheat. The method of discriminant analysis confirmed the hypothesis on dividing the samples of buckwheat into groups, and a classification function for the identification and sorting of buckwheat was built.

Keywords: buckwheat, identification, quality, optical spectroscopy, chemometrics.

Введение. Гречневая крупа играет важную роль в питании человека, что обусловлено содержанием сложных углеводов, белка, жиров, пищевых волокон и минеральных веществ [1, 2]. Присутствие в составе крупы флавоноидов положительно влияет на антиоксидантную активность и позволяет рассматривать гречневую крупу в качестве продукта функционального назначения [3]. Большое количество пищевых волокон и отсутствие глютена в гречневой крупе улучшают самочувствие и снижают риск возникновения различных заболеваний [4].

Для увеличения объемов производства крупы при благоприятных климатических условиях возможен сбор урожая, перезимовавшего под снегом, весной. Несмотря на это, качество зерна, убранны-

BUCKWHEAT IDENTIFICATION BY COMBINATION OF UV-VIS-NIR SPECTROSCOPY AND MULTIVARIATE ANALYSIS

Yu. T. Platonov^{1*}, D. A. Metlenkin¹, R. A. Platova¹, V. A. Rassulov², A. L. Vereshchagin³, V. A. Marin³
(¹ Plekhanov Russian University of Economics, Moscow, Russia; e-mail: Platov.YT@rea.ru; ² All-Russian Scientific-Research Institute of Mineral Resources named after N. M. Fedorovsky, Moscow, Russia; ³ Biysk Technological Institute is a Subsidiary of Polzunov Altai State Technical University, Biysk, Russia)

го весной, значительно отличается от убранных осенью физическими и химическими показателями [5]. Ранее отмечалось, что время сбора урожая влияет на количество проросших и испорченных зерен, влажность, кислотность и кислотное число жира [5]. Проблемы идентификации гречневой крупы и зерна исследовались в работах [6, 7]. Изучено распределение ядер гречихи по фракциям и показано, что каждая фракция по крупности не может характеризоваться однородным составом [6], механические свойства перезимовавшего зерна изменяются неравномерно, соответственно, такие данные необходимо принимать в расчет при шелушении и предпродажной подготовке зерна [7].

На основе методов многомерного анализа и спектроскопии проводят идентификацию зерновых продуктов [8]. Показана дискриминация разновидностей пшеницы, выращенных в Испании и Франции [9], проведена градация пшеничной муки в зависимости от хлебопекарных качеств на основе измерений ближней ИК-спектроскопии (NIR) [10]. Использование производных NIR-спектров для классификации сортов ячменя, выращенных в Австралии, показано в работе [11]. С помощью ИК-Фурье-спектроскопии и метода главных компонент проведен скрининг и дискриминация кукурузы различных химических составов [12].

Вопросы идентификации гречневой крупы в зависимости от времени урожая и размера ядра в настоящее время изучены недостаточно. Для обеспечения эффективной сепарации, шелушения и дальнейшей обработки гречневой крупы, используемой в пищевых целях, необходимо, во-первых, обосновать взаимосвязь физико-химических свойств крупы со спектральными характеристиками, во-вторых, выявить полосы поглощения UV-VIS-NIR-спектра, вносящие наибольший вклад в разделение гречневой крупы по категориям качества.

Цель настоящей работы — применение сочетания UV-VIS-NIR-спектроскопии и методов многомерного анализа для идентификации гречневой крупы в зависимости от времени урожая, размера ядра и гидротермической обработки (ГТО).

Эксперимент. В качестве объектов исследования взяты два набора образцов гречневой крупы: образцы пропаренной и непропаренной, различающиеся сроками хранения ($n = 20$); образцы, различающиеся временем урожая (осень/весна, 2019/2020 г.) и размером ядер ($n = 12$). Образцы из первого набора под номерами 1—4, 10, 18 — непропаренные, образцы 1 и 2 — длительного хранения, все остальные номера присвоены образцам пропаренной крупы, закупленным в розничных торговых сетях г. Москвы (коммерческие). Образцы пропаренной гречневой крупы осеннего и весеннего урожая из второго набора представлены в шести фракциях по размеру ядра (производство ООО “Бийский элеватор”, Алтайский край) (табл. 1).

Измерение UV-VIS-NIR-спектров диффузного отражения проведено на портативном спектрометре ASD TerraSpec® 4 Hi-Res в диапазоне 350—2500 нм. Использование портативного спектрометра имеет ряд преимуществ: измерение диффузного отражения можно проводить *in situ*, без пробоподготовки; при измерении спектров используется проба большого объема и массы, что повышает достоверность и репрезентативность результатов; сочетание видимого (VIS) и ближнего инфракрасного (NIR) диапазонов позволяет, с одной стороны, определить по VIS-диапазону цветовые характеристики и центры окраски, с другой — идентифицировать по NIR-диапазону функциональные группы компонентов химического состава гречневой крупы.

Т а б л и ц а 1. Размеры ядра и цветовые характеристики образцов гречневой крупы различных фракций осеннего и весеннего урожая

Образец	Размер ядра фракции гречневой крупы, мм	Цветовые координаты		
		L*(O/V)	a*(O/V)	b*(O/V)
O6,V6	4.5	48.0/44.3	8.0/9.5	20.4/19.7
O5,V5	4.2	45.5/44.1	8.5/10.4	19.3/20.7
O4,V4	4.0	41.2/43.2	11.2/10.2	19.9/19.4
O3,V3	3.8	36.6/42.1	13.5/10.7	19.9/19.4
O2,V2	3.6	37.4/40.5	13.9/11.5	20.8/19.9
O1,V1	3.4	38.8/40.4	13.1/12.0	20.4/19.7

П р и м е ч а н и е: O — осенний урожай; V — весенний урожай.

Измерение UV-VIS-NIR-спектров образцов 1—10 из первого набора проводилось в двух повторениях, образцов 11—20 из первого и второго наборов — в пяти повторениях. На основе этих спектров построена матрица данных X размерностью 130×2150 (130 — количество измерений спектров образцов, 2150 — отсчеты на длинах волн). Преобразование исходных UV-VIS-NIR-спектров применялось для повышения качества и точности моделей. По VIS-диапазону спектра рассчитаны цветовые характеристики в колориметрической системе CIEL*a*b*: L^* — светлота; a^* — $+a^*$ — красный, $-a^*$ — зеленый; b^* — $+b^*$ — желтый, $-b^*$ — синий [13].

Многомерные методы. Иерархический агломеративный кластерный анализ (КА): правило объединения между объектами — метод полных связей, мера сходства — евклидово расстояние; метод главных компонент (МГК): алгоритм — NIPALS, метод проверки — полная перекрестная валидация, применялись на основе программного комплекса Unscrambler X 10.0.4 (Camo Software); дискриминантный анализ (ДА) на основе программного комплекса Origin 2019b (OriginLab Corporation).

Результаты и их обсуждение. Анализ исходных UV-VIS-NIR-спектров. До многомерного моделирования проведена предварительная обработка UV-VIS-NIR-спектров: преобразование коэффициентов диффузного отражения (R) в коэффициенты поглощения по функции $A = \log(1/R)$; мультипликативная коррекция рассеяния (MSC) света; удаление областей спектра (350—380 и 2400—2500 нм) для уменьшения влияния шума; усреднение спектральных данных. Соотнесение длин волн полос поглощения UV-VIS-NIR-спектра, приписываемых функциональным группам компонент и характеризующих химический состав образцов гречневой крупы, проведено по данным [14—18].

При анализе UV-VIS-NIR-спектров образцов гречневой крупы выявлено, что интенсивность полос поглощения (ПП) 1933 нм выше у образцов весеннего урожая по сравнению с образцами осеннего урожая, что свидетельствует о большем содержании в таких образцах влаги (рис. 1). В свою очередь образцы осеннего урожая имеют более высокую интенсивность ПП 1205, 1570, 1770, 2110 и 2310 нм, ответственных за содержание белка, крахмала и липидов. Интенсивность ПП с максимумом при 1460 нм изменяется в зависимости от размера ядра и времени урожая крупы: при размере ядра крупы 4.2—4.5 мм интенсивность в среднем выше, чем при размере <4.2 мм; для образцов с размером ядра 4.2—4.5 мм интенсивность этой полосы у образцов осеннего урожая выше, чем весеннего.

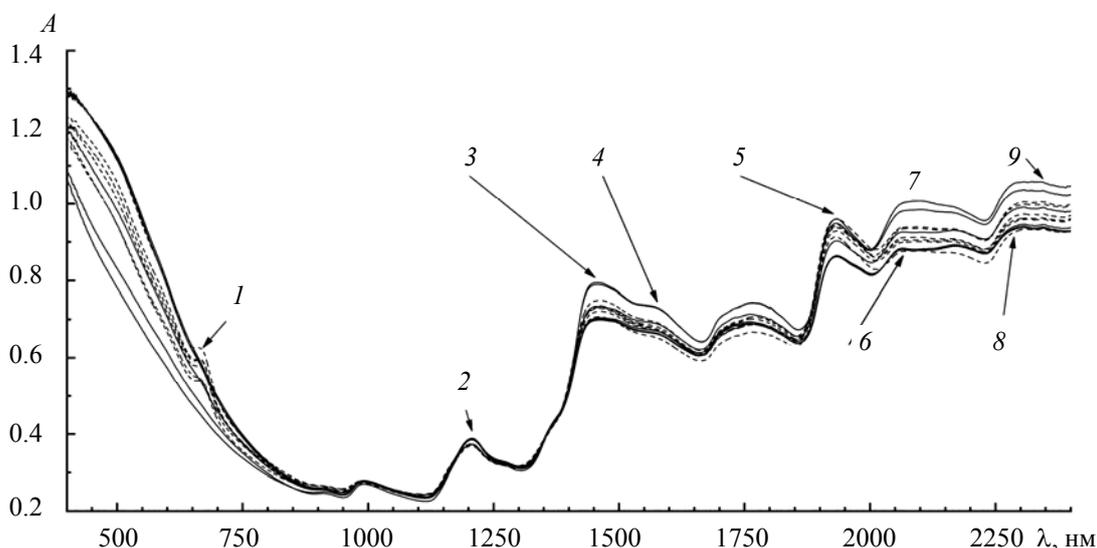


Рис. 1. Профиль спектров в UV-VIS-NIR-диапазоне 380—2400 нм образцов весеннего (сплошные линии) и осеннего (штриховые) урожая: 1 — 666 нм, феофитин; 2 — 1205 нм, валентные колебания $C=O$, белок, липиды; 3 — 1460 нм, первый обертона валентных колебаний $O-H$, крахмал; 4 — 1570 нм, первый обертона валентных колебаний $N-H$, белок; 5 — 1933 нм, комбинация валентных и деформационных колебаний $O-H$, крахмал; 6 — 2060 нм, второй обертона комбинации валентных и деформационных колебаний $N-H$, белок; 7 — 2110 нм, комбинация деформационных колебаний $O-H$ и валентных колебаний $C-O$, крахмал; 8 — 2310 нм, второй обертона деформационных колебаний $C-H$, деформационные колебания CH_2 , липиды; 9 — 2350 нм, валентные колебания $C=O$, липиды

Интенсивность ПП 1933 нм (вода) выше для образцов непропаренной гречневой крупы, что связано с частичным разрушением ОН-связей в процессе ГТО. Интенсивность ПП 1205 нм (липиды, белок) у образцов непропаренной гречневой крупы также больше, что согласуется с [19]. Широкая и асимметричная ПП 1205 нм, приписываемая функциональной группе С=О, может соответствовать как липидам, так и белкам [16]. Среди образцов непропаренной гречневой крупы интенсивности ПП 2310 и 2350 нм (липиды) меньше у образцов непропаренной гречневой крупы длительного хранения, что свидетельствует о протекании процесса окисления липидов при хранении. Выявленные различия в интенсивностях отдельных ПП, приписываемых функциональным группам компонент состава гречневой крупы, соответствуют данным [5].

Поглощение в диапазоне 350—840 нм образцов непропаренной гречневой крупы более низкое по сравнению с пропаренной, что объясняет их более светлую зеленовато-желтую окраску. Изменение качественного состава хлорофилла гречневой крупы в зависимости от времени урожая (осеннего или весеннего) и ГТО подтверждается разной формой спектра в диапазоне 640—680 нм (рис. 2). В спектрах непропаренной гречневой крупы проявляются две ПП с максимумами при 650 и 678 нм, соответствующие хлорофиллу *b* и *a* (рис. 2, в). В спектрах образцов пропаренной крупы из коммерческого набора (5—17, 19—20) и весеннего урожая (V1—V6) присутствует ПП феофитина *a* при 666 нм [23], образовавшегося из хлорофилла *a* при пропаривании, и отмечается потеря вспомогательного пигмента хлорофилла *b* [24, 25] (рис. 2, а). В спектрах образцов пропаренной крупы осеннего урожая ПП в этом диапазоне отсутствует (рис. 2, б).

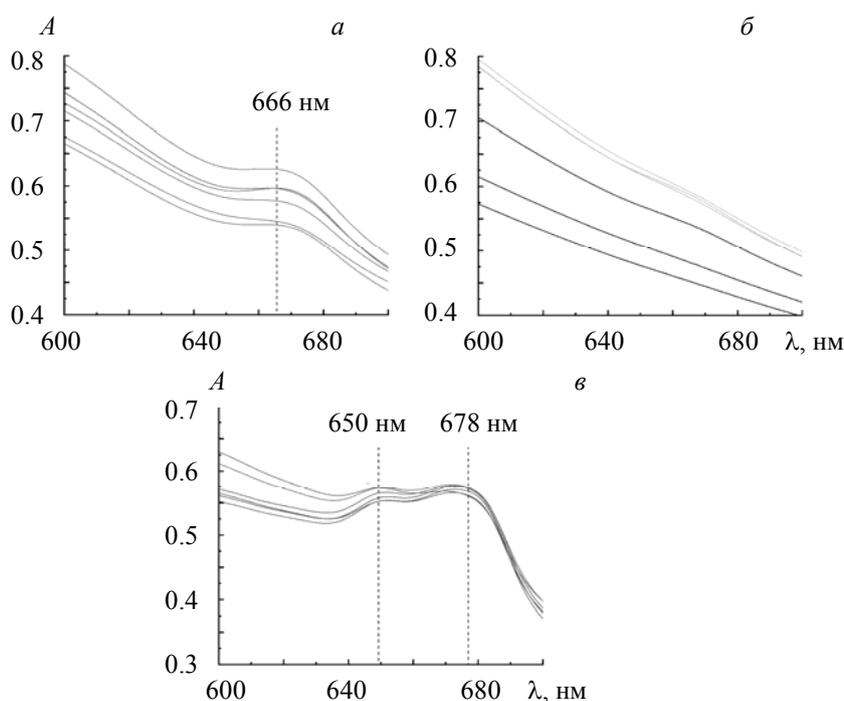


Рис. 2. UV-VIS-NIR-спектры образцов гречневой крупы в диапазоне 640—680 нм: весеннего (*а*) и осеннего урожая (*б*), непропаренной гречневой крупы (*в*)

Различия образцов гречневой крупы фракций осеннего и весеннего урожаев по цветовым характеристикам. Различия по цветовым характеристикам между образцами пропаренной и непропаренной гречневой крупы, включая непропаренную гречневую крупу с длительным сроком хранения, проанализированы ранее [20]. Координаты цвета в системе CIE L*a*b образцов гречневой крупы различных фракций весеннего и осеннего урожаев приведены в табл. 1. По координате желтизна *b** образцы имеют незначительные различия в зависимости от времени урожая и фракции крупы. С увеличением размера крупы отмечается повышение светлоты *L**: для образцов осеннего урожая от 38.8 до 48.0, весеннего — от 40.4 до 44.3.

Наибольший вклад в цветоразличение пропаренной гречневой крупы разных фракций вносит координата краснота a^* , размах значений которой больше для образцов осеннего урожая ($\Delta a^* = 5.1$) в отличие от образцов весеннего урожая ($\Delta a^* = 2.5$). Коричневая окраска пропаренной гречневой крупы, фиксируемая через повышение координат цветности, преимущественно красноты ($+a^*$), связана как с реакциями карамелизации сахаров и меланоидинообразования [20], так и с образованием феофитина a из хлорофилла a .

Классификация образцов гречневой крупы по UV-VIS-NIR-спектрам. По матрице X усредненных UV-VIS-NIR-спектров методом КА выявлено семь групп в зависимости от ГТО, срока хранения непропаренной гречневой крупы, размера ядра и времени урожая: 1 — непропаренная гречневая крупа (образцы 3, 4, 10, 18); 2 — непропаренная гречневая крупа длительного хранения (1, 2); 3 — гречневая крупа осеннего сбора с размером ядра 4.2—4.5 мм (O6, O5); 4 — гречневая крупа весеннего сбора с размером ядра 4.2—4.5 мм (V6, V5) и образцы пропаренной гречневой крупы (5, 6, 20); 5 — образец осеннего сбора с размером ядра 4.0 мм (O4) и образцы пропаренной гречневой крупы (8, 9, 11, 13, 14, 17, 19); 6 — образцы весеннего сбора с размером ядра 3.6—4.0 мм (V2—V4) и образцы пропаренной гречневой крупы (15, 16); 7 — образец весеннего сбора с размером ядра 3.4 мм (V1), образцы осеннего сбора с размером ядер 3.4—3.8 мм (O1—O3) и образцы пропаренной гречневой крупы (7, 12). Проведена декомпозиция X -матрицы усредненных UV-VIS-NIR-спектров (после их предварительной обработки) образцов гречневой крупы ($n = 32$) на T -матрицу счетов — координат образцов по первой и второй главным компонентам (ГК) (рис. 3, *а*), и P -матрицу — факторных нагрузок длин волн спектра по 1 и 2 ГК (рис. 3, *б*). Две ГК объясняют 95 % от общей дисперсии (87 и 8 % соответственно). Расположение координат образцов и значения факторных нагрузок длин волн UV-VIS-NIR-спектра плоскости 1 и 2 ГК представлены на рис. 3. По максимальным значениям факторных нагрузок длин волн ПП UV-VIS-NIR-спектра, которые информируют о корреляции с ГК, определен их вклад в разделение множества образцов на группы (табл. 2).

Интерпретация двух ГК проведена по знаку (+/–) и значениям факторных нагрузок длин волн. Согласно знаку (+/–) и факторным нагрузкам длин волн по 1 ГК спектр разделен на два диапазона: знак (+) — имеют факторные нагрузки длин волн спектра, соответствующие VIS-диапазону, знак (–) — NIR-диапазону. Предложена следующая интерпретация ГК: 1 ГК объясняет степень зрелости пропаренной крупы в зависимости от размера ядра, 2 ГК разделяет образцы в зависимости от времени урожая (осеннего или весеннего) и ГТО (непропаренная или пропаренная).

Факторные нагрузки длин волн со знаком (+) в виде широкой ПП спектра по 1 ГК имеют два максимума, различающиеся знаками (–/+) по 2 ГК — при 520 и 678 нм, которые приписывают двум центрам окраски. Первый расположен в VIS-диапазоне и представлен широкой ПП с максимумом факторной нагрузки при 520 нм, которая захватывает видимую область, вплоть до 716 нм (рис. 3, *б*). Эта ПП (табл. 2) связана в основном с реакциями карамелизации сахаров и меланоидинообразования в процессе ГТО [20]. Второй центр окраски с максимумом факторной нагрузки длины волны при 678 нм соответствует ПП хлорофилла.

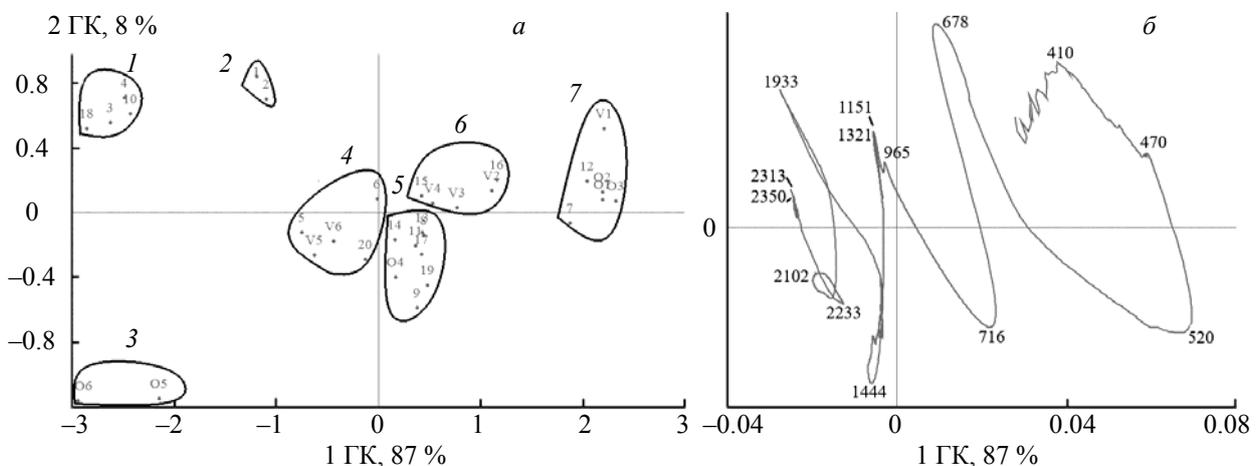


Рис. 3. Расположение точек, соответствующих образцам гречневой крупы, в координатах 1 и 2 ГК (*а*); факторные нагрузки длин волн UV-VIS-NIR-спектра поглощения в координатах 1 и 2 ГК (*б*)

Ряд полос в NIR-диапазоне спектра со знаком (–) по 1 ГК, которые различаются по знаку (+/–) по 2 ГК, приписывают функциональным группам компонент, характеризующих химический состав гречневой крупы (табл. 2).

Разделение образцов гречневой крупы на группы. На рис. 3, а показано расположение кластеров (групп) образцов гречневой крупы, полученных методом КА, в координатах двух ГК. Согласно факторным нагрузкам длин волн, приписываемым функциональным группам компонент состава гречневой крупы, выявлены те, которые вносят наибольший вклад в разделение образцов на группы (табл. 2). При сопоставлении расположения по знаку (+/–) факторных нагрузок длин волн спектра и координат образцов из разных групп в плоскости 1 и 2 ГК выявлен ряд закономерностей. Во-первых, в зависимости от знака (+/–) координат образцов по 1 ГК увеличивается размер ядра, что характерно для пропаренной гречневой крупы осеннего и весеннего урожаев (от 3 до 7 группы образцов). Согласно [6, 7], размер ядра связан со зрелостью зерна. Расположение образцов пропаренной гречневой крупы осеннего и весеннего урожаев от O1/V1 до O6/V6 (табл. 1), различающихся размером ядра (от 3.4 до 4.5 нм), аналогично их расположению в плоскости координат цвета: с увеличением размера ядра повышается светлота L^* (от 38.8/40.4 до 48.0/44.3) при уменьшении красноты a^* (от 13.1/12.0 до 8.0/9.6). Этот порядок расположения в координатах двух систем хорошо согласуется

Т а б л и ц а 2. Факторные нагрузки длин волн UV-VIS-NIR-спектра поглощения модели МГК

Максимум, нм	1 ГК	2 ГК	Функциональная группа	Компонент	Источник
Группы 1, 2					
678	0.0091	0.0567		Хлорофилл <i>a</i>	[14, 15]
965	–0.0029	0.01808	Второй обертона валентных колебаний ОН (абсорбционная вода)	Вода	[16]
1151	–0.0055	0.027	С=О	Липиды	[18]
1321	–0.0055	0.0263	Колебания метильных групп СН ₃	Липиды	[18]
1933	–0.0274	0.0383	Комбинация валентных колебаний ОН и деформационных колебаний НОН	Вода	[16]
2313	–0.0243	0.0079	Второй обертона деформационных колебаний С–Н, деформационные колебания СН ₂	Липиды	[18]
2350	–0.0237	0.0057	Валентные колебания С=О	Липиды	[18]
Группы 3, 4					
1444	–0.006	–0.0434	Первый обертона валентных колебаний ОН	Крахмал (гидроксильная группа)	[16]
1560	–0.0049	–0.0328	Первый обертона валентных колебаний N–H	Белок	[16]
2042	–0.0154	–0.0198	Комбинация валентных колебаний N–H и С=О	Белок	[16]
2102	–0.0197	–0.0148	Комбинация деформационных колебаний ОН и валентных колебаний С–О Третий обертона валентных колебаний С–О–О	Крахмал	[17, 18]
2233	–0.0127	–0.0212	Второй обертона деформационных колебаний N–H, комбинация валентных колебаний С–Н и С=О	Белок	[18]
Группы 5, 6, 7					
716	0.0227	–0.0273		Продукты меланоидинообразования и карамелизации	[20]
520	0.0694	–0.0259			
470	0.059	0.0204		Каротиноиды	[14, 15]

с интерпретацией факторных нагрузок длин волн в диапазоне 380—716 нм (рис. 3, б). Во-вторых, образцы в координатах 1 и 2 ГК делятся в зависимости от ГТО на непропаренную (1 и 2) и пропаренную (3—7). Образцы непропаренной гречневой крупы, включенные в группы 1 и 2, находятся в плоскости 1 и 2 ГК со знаком (–/+) аналогично знакам (–/+) факторных нагрузок длин волн при 965 и 1933 нм (влаги) и 2315 и 2350 нм (липиды), что соответствует данным о большом содержании влаги и липидов [18]. При этом образцы из групп 1 и 2 различаются по координатам 1 и 2 ГК, что объясняется процессом ферментативного окисления органических соединений при длительном хранении крупы из группы 2, как указано в [20].

Группа 3, объединяющая образцы осеннего сбора с размером ядра 4.2—4.5 мм, расположена в координатах 1 и 2 ГК аналогично по знакам факторных нагрузок длин волн полос при 1444, 2042, 2102 и 2233 нм, приписываемым функциональным группам крахмала и белков (табл. 2). Поэтому образцы этой группы пропаренной крупы в отличие от других групп содержат больше углеводов и белковых соединений, что согласуется с данными [5]. Группа 4, включающая в себя образцы весеннего сбора с размером ядра 4.2—4.5 мм, также характеризуется высоким содержанием углеводов и белков, но меньшим, чем у образцов группы 3. Группы 5—7 пропаренной гречневой крупы взаимосвязаны с факторными нагрузками ПП в диапазоне 380—716 нм, которые обусловлены реакциями меланоидинообразования и карамелизации при ГТО.

Построение системы классификационной функции для идентификации гречневой крупы. Решение задачи идентификации и сортировки гречневой крупы подразумевает использование небольшого количества длин волн из широкого диапазона UV-VIS-NIR-спектра, вносящих наибольший вклад в разделение образцов по категориям качества. С помощью методов КА и МГК проведено разделение образцов на семь групп и определены длины волн с максимальным значением факторных нагрузок 520, 678, 1444 и 1933 нм, использованные в качестве дискриминантных переменных.

Идентификация гречневой крупы по качеству сведена к нахождению системы классификационных функций, полученных на обучающей выборке методом ДА. Для решения этой задачи использованы два блока данных: X — матрица размерностью 130×4 , где 130 строк — количество образцов, четыре столбца — коэффициенты интенсивности на длине волны спектра поглощения; Y — матрица из 130 строк номеров групп для образцов. С помощью классификационной модели, связывающей блоки X и Y , можно предсказать номер группы по интенсивности на длине волны спектра образца.

По собственному значению классификационных функций, которые связаны с их дискриминантной возможностью (% от общей), установлено, что основное различие — по первой и второй функциям, менее значительно — по третьей (72.8, 23.6 и 2.6 % соответственно). Третья функция кроме низкой дискриминантной возможности имеет более низкие значения канонической корреляции ($R^2 = 0.65$) против соответствующих значений первой и второй функций (0.98 и 0.93), поэтому, как следствие, не очень тесно связана с группами образцов и не является информативной. Общее количество правильно классифицированных образцов в каждой группе 100 %. Следовательно, результатами моделирования методом ДА подтверждено разделение образцов гречневой крупы на семь групп.

Расположение координат объектов — образцов гречневой крупы — в пространстве двух канонических дискриминантных функций представлено на рис. 4. Как видно, области групп 1—3 различаются в координатах двух функций, а более близкое расположение между группами 4—7 объясняется схожими спектральными характеристиками и, соответственно, химическим составом образцов пропаренной крупы. По первой функции, обладающей большей дискриминантной возможностью, образцы разделяются на группы непропаренной (1, 2) и пропаренной (3—7) гречневой крупы, а по второй функции — на группу (3) пропаренной крупы с большим размером ядра осеннего урожая против групп (4—7) пропаренной крупы. Градация образцов на группы объясняется различием по знаку (+/–) и значению структурных коэффициентов (520, 678, 1444 и 1933) двух дискриминантных функций (рис. 4, вставка).

Методом канонического ДА с использованием блоков X и Y данных рассчитаны константы b_{k0} и коэффициенты b_{k1}, \dots, b_{kp} , соответствующие классификационным функциям h_k для семи выделенных групп ($k = 1, \dots, 7$) образцов гречневой крупы. Система классификационных функций представлена в виде $h_k = b_{k0} + b_{k1}X_1, \dots, b_{kp}X_p$, где b_{k1}, \dots, b_{kp} — коэффициенты функций k -группы для p -коэффициентов длин волн ($p = 1, 2, 3, 4$); X_1, \dots, X_p — коэффициенты интенсивности длин волн 520, 678, 1444 и 1933 нм.



Рис. 4. Расположение точек, соответствующих образцам 1—7 групп гречневой крупы, и структурных коэффициентов (вставка) в координатах двух канонических дискриминантных переменных

Классификация образцов гречневой крупы, различающихся размером ядра, временем урожая, сроком хранения, в зависимости от ГТО сведена к нахождению системы классификационных функций h_k , полученной по двум блокам данных X и Y . Идентификация образцов гречневой крупы осуществляется по их принадлежностям к одной из семи групп, которая устанавливается по наибольшему значению классификационной функции h_k .

Заключение. Показан потенциал и преимущество использования портативного спектрометра для измерения UV-VIS-NIR-спектров диффузного отражения гречневой крупы *in situ*. По видимому диапазону (380—750 нм) определены цветовые характеристики, по UV-VIS-NIR-диапазону — функциональные группы компонент, характеризующие химический состав и пищевую ценность гречневой крупы. Для идентификации гречневой крупы по категориям качества (размеру ядра, времени урожая и гидротермической обработке) использованы методы предварительной обработки спектров и многомерного анализа — кластерный, главных компонент и дискриминантного анализа. Классификация гречневой крупы по UV-VIS-NIR-спектрам на группы по размеру ядра, времени урожая, сроку хранения и гидротермической обработке проведена методами кластерного анализа и главных компонент. При декомпозиции матрицы UV-VIS-NIR-спектров методом главных компонент идентифицированы длины волн полос поглощения по их соответствию функциональным группам компонент состава и определен их вклад в разделение образцов гречневой крупы на группы по качеству. Идентификация гречневой крупы по категориям качества сведена к построению системы классификации функции по дискриминантным переменным — коэффициентам интенсивности длин волн полос поглощения при 520, 678, 1444 и 1933 нм.

- [1] P. Qin, Q. Wang, F. Shan, Z. Hou, G. Ren. *Int. J. Food Sci. Technol.*, **45** (2010) 951—958
 [2] A. Ahmed, N. Khalid, A. Ahmad, N. A. Abbasi, M. S. Z. Latif, M. A. Randawa. *J. Agric. Sci.* (2013) 1—21
 [3] H. Yılmaz, N. Ayhan, C. Meriç. *Current Nutr. Food Sci.*, **16** (2020) 29—34
 [4] Scientific Concepts of Functional Foods in Europe. Consensus Document. *Br. J. Nutr.*, **81** (Suppl. 1) (1999) 1—27

- [5] **В. А. Марьин, А. Л. Верещагин, Н. В. Бычин.** В сб. “Технологии и оборудование химической, биотехнологической и пищевой промышленности”, материалы XII Всерос. науч.-практ. конф. студентов, аспирантов и молодых ученых с международным участием (2019) 509—512
- [6] **В. А. Марьин, А. Л. Верещагин.** Хранение и переработка сельхозсырья, № 1 (2019) 130—138
- [7] **В. А. Марьин, А. Л. Верещагин, Н. В. Бычин.** Хлебопродукты, № 5 (2019) 58—61
- [8] **D. Cozzolino, S. Roumeliotis, J. Eglinton.** Food Res. Int., **51**, N 2 (2013) 444—449
- [9] **C. Miralbés.** Food Chem., **106** (2008) 386—389
- [10] **G. Foca, M. Cocchi, M. Li Vigni, R. Caramanico, M. Corbellini, A. Ulrici.** Chemom. Intell. Lab. Syst., **99** (2009) 91—100
- [11] **P. R. Wiley, G. J. Tanner, P. M. Chandler.** J. Agric. Food Chem., **57** (2009) 4042—4050
- [12] **S. Kuhnen, J. Ogliari, B. Dias, P. Fernando.** Int. J. Food Sci. Technol., **45** (2010) 1673—1681
- [13] Цвет в промышленности, под ред. Р. Мак-Дональда, пер. с англ., Москва, Логос (2002)
- [14] **H. Croft.** In: Comprehensive Remote Sensing, **3**, Toronto, Canada, Elsevier Inc. (2017) 117—142
- [15] **L. Guidi, M. Tattini, M. Landi.** How Does Chloroplast Protect Chlorophyll Against Excessive Light? Ed. E. Jacob-Lopes, Chlorophyll-London, UK, IntechOpen (2017) 21—36
- [16] **A. Anne Frank Joe, A. Gopal.** Int. Conf. Circuit, Power and Computing Technologies (ICCPCT) (2017) 1—5
- [17] **M. Kumagai, K. Karube, T. Sato, N. Ohisa, T. Amano, R. Kikuchi, N. Ogawa.** Anal. Sci.: Int. J. Jap. Soc. Anal. Chem., **18**, N 10 (2002) 1145—1150
- [18] **D. Ertlen, D. Schwartz, M. Trautmann, R. Webster, D. Brunet.** Eur. J. Soil Sci., **61** (2015) 207—216
- [19] **K. Dzedzic, D. Górecka, A. Marques, M. Rudzińska, G. Podolska.** Czech J. Food Sci., **33** (2015) 424—430
- [20] **Ю. Т. Платов, Д. А. Метленкин, Г. А. Бобожонова.** Хлебопечение России, № 1 (2020) 24—28
- [21] **С. В. Мурашев, С. А. Воробьев, М. Е. Жемчужников.** Науч. журн. НИУ ИТМО. Сер. Процессы и аппараты пищевых производств, № 1 (2010), <https://cyberleninka.ru/article/n/fizicheskie-i-himicheskie-prichiny-vozniknoveniya-krasnogo-tsveta-myasa> (01.12.2020)
- [22] **X. Zhou, T. Hao, Y. Zhou, W. Tang, Y. Xiao, X. Meng, X. Fang.** J. Food Sci. Technol., **52**, N 4 (2015) 2458—2463
- [23] **S. M. Milenković, J. B. Zvezdanović, T. D. Anđelković, D. Z. Marković.** Adv. Technol., **1**, N 1 (2012) 16—24
- [24] **O. V. Voitsekhovskaja, E. V. Tyutereva.** J. Plant Physiol., **189** (2015) 51—64
- [25] **M. Kunugi, S. Satoh, K. Ihara, K. Shibata, Y. Yamagishi, K. Kogame, J. Obokata, A. Takabayashi, A. Tanaka.** Plant Cell Physiol., **57** (2016) 1231—1243