

## **Lygčių kūrimas kviečių grūdų kokybę vertinant spektrometru NIRS-6500.**

### **I. Grūdų kokybės ir optinių duomenų bazės charakteristika**

Bronislava BUTKUTĖ, Jurgita CESEVIČIENĖ

Lietuvos žemdirbystės institutas

Instituto al. 1, Akademija, Kėdainių r. sav.

El. paštas: brone@lzi.lt, jurgita@lzi.lt

#### **Santrauka**

Kalibracinėms lygtims kurti 1995–2008 m. sukaupta daugiau kaip 4 000 žieminių ir vasarinių kviečių (*Triticum aestivum* L.) grūdų mėginių optinių bei cheminių duomenų bazė, kurią sudaro mėginių spektrai, užregistruoti 400–2500 nm intervale, ir juos atitinkantys cheminės sudėties rodikliai, nustatyti pamatiniais metodais. Duomenų bazėje kurti lygtims, skirtoms kviečių kokybės rodikliams nustatyti prietaisu NIRS-6500, rodiklių vertės buvo: grūdų drėgnio 8,6–18,0 % (vidurkis – 12,4 %), baltymų kiekio 6,7–17,3 % (vidurkis – 12,6 %), krakmolo kiekio 59,4–73,9 % (vidurkis – 67,6 %). Skirtingos cheminės sudėties grūdų mėginių spektrai turi specifines absorbcijos smailes atitinkamuose tirtu spektro srityse, susijusiose su cheminės sudėties komponentų kiekybiniais ypatumais. Smailės, susidariusios srityse, artimose 700, 1962, 2290 bei 2330 nm bangų ilgiams, gali būti siejamos su krakmolu, 1506, 2184, 2300 nm – su baltymais, o 1150, 1400, 1790, 1900 nm bangos sietinos su vandens ir hidroksilo absorbcija. Optiniai skirtumai išryškėja priklausomai nuo spektrų transformavimo. Artimosios srities infraraudonųjų spindulių (AIR) atspindžio spektruose yra informacija apie mėginių cheminę sudėtį, tačiau ją galima gauti tik atlikus cheminių ir optinių duomenų kalibraciją.

Reikšminiai žodžiai: artimosios srities infraraudonųjų spindulių (AIR) atspindžio spektroskopija, kviečių grūdai, drėgnis, baltymai, krakmolas, duomenų bazė.

#### **Įvadas**

Kviečių grūdų technologinės savybės dėl geno, metų ir auginimo sąlygų gali kisti plačiu diapazonu. Kokybiniai kviečių grūdų skirtumai iš esmės sąlygoja išauginto derliaus paskirtį: kepti duoną ar konditerijos gaminius, gaminti kruopas, biokurą ar sunaudoti pašarui.

Baltymų kiekis ir kviečiuose, ir jų miltuose yra vienas iš pagrindinių duonos kokybės kriterijų /Finney et al., 1987/. Šio grūdų žaliavos cheminės sudėties komponento kiekis sausojoje medžiagoje (SM) kinta nuo 6 iki 20 %. Neįmanoma iškepti geros kokybės duonos, jei miltai turi mažai baltymų, todėl duonos gamybai yra naudojami tik pakankamą baltymų kiekį (11 % ir daugiau) turintys grūdai /Atwell, 2001/. Tačiau vien pakankamas baltymų kiekis neužtikrina geros duonos kokybės. Kai kurių veislių kviečių kepanosios savybės praktiškai nepriklauso nuo baltymų kiekio, o jam padidėjus duonos kokybė kartais suprastėja. Žinoma, kad iš įvairių grūdų, turinčių tokį patį kiekį baltymų,

gaunami skirtingi miltai, iš kurių iškepti gaminiai esti nevienodi. Daugeliu atvejų tai paaiškinama baltymų, sudarančių glitimą, kokybės skirtumais /Finney et al., 1987/.

Pagal grūdų cheminę sudėtį kviečiai priskiriami krakmolingoms kultūroms – jų grūduose krakmolas sudaro daugiau kaip pusę masės (63–72 % SM) ir yra rezervinė medžiaga, sukaupiama endosperme. Dėl krakmolo unikalių funkcinių savybių – struktūros, stabilumo kontrolės, klampumo ypatybių – jo kiekis yra vienas labiausiai vertinamų nemaisto reikmėms skirtų grūdų kokybės rodiklių /Wilson et al., 2006/. Pastaraisiais metais Europoje didėja pašarinių (prastesnės kokybės) grūdų poreikis, nes tokie grūdai naudojami ir bioenergetiniais tikslais.

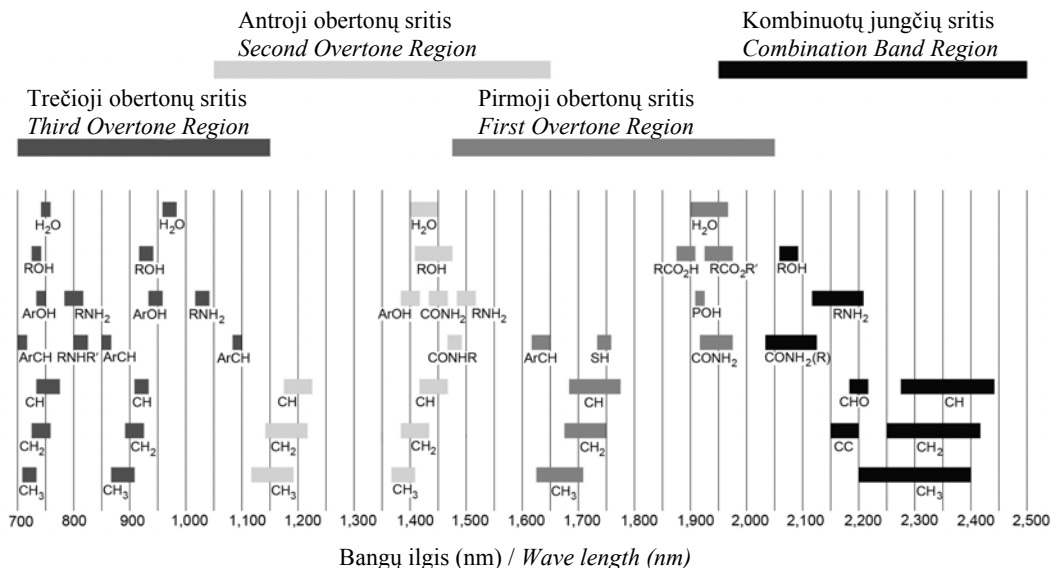
Siekiant išvengti grūdų kiekybės ir kokybės nuostolių, visoje derliaus nuėmimo bei saugojimo grandinėje yra svarbus grūdų drėgnis. 14 % ir mažesnio drėgnio kviečių grūdai laikomi gana sausais saugiai sandėliuoti. Tačiau užtikrinus žemesnę sandėliavimo patalpos temperatūrą ( $\leq +10$ – $+12$  °C) ir nedidelį santykinį drėgnį ( $\sim 60$ – $70$  %), ypač sandėliuojant trumpesnę laikotarpį, grūdų drėgnis gali būti ir šiek tiek didesnis, t. y. 14,5–15 % /Navarro, Noyes, 2002/. Laikomuose tinkamo drėgnio grūduose nevyksta intensyvūs kvėpavimo procesai, sukeltantys kaitimą ir suaktyvinantys sandėlio kenkėjų bei mikroskopinių grybų (produkuojančių žmonių ir gyvūnų sveikatai žalingus toksinus) veiklą. Literatūroje aptinkama duomenų, kad esant 17–19 % grūdų drėgniui susidaro optimalios sąlygos vystytis *Fusarium* genties grybams /Ruckenbauer, 2004/. Be to, didėjant grūdų drėgniui, gausėja *Penicillium* spp. ir kitų genčių grybais užkrėstų sėklų kiekis /Dabkevičius ir kt., 2005/. O grūduose, kurių drėgnis  $\leq 13,0$  %, toksinų kaupimosi tikimybė sumažėja net ir esant toksinų producentams /Löiveke et al., 2004/.

Grūdų kokybę lemia keletas veiksnių: veislės genetinis potencialas, meteorologinės sąlygos ir auginimo agrotechnika. Be to, javų grūdų kokybei daro įtaką ir dirvožemis. Priklausomai nuo veislės genetinių savybių, grūdai gali skirtis aminorūgščių kokybine sudėtimi, krakmolo fizinėmis bei cheminėmis savybėmis ir fermentų aktyvumu. Nustatyta, kad brandos laikotarpiu vyraujant aukštesnei temperatūrai ir vidutiniam dirvos drėgniui grūdai subręsta labai gyvybingi, fiziologiškai išsivystę, didelio baltymingumo ir gerų technologinių savybių. Norvegijoje atliktų bandymų duomenimis, kviečių grūdų augimo metu palaikant nevienodą oro temperatūrą nustatyta, kad kylant oro temperatūrai baltymų kiekis grūduose didėja /Uhlen et al., 1998/. Tai patvirtina ir kitų tyrimų duomenys. Brandos laikotarpiu esant aukštai temperatūrai ir sausrai, grūdai būna smulkūs, nes sulėtėja krakmolo sintezė. Tačiau baltymų kiekis tokiomis sąlygomis subrendusiuose grūduose būna didesnis, palyginti su optimaliomis meteorologinėmis sąlygomis /Corbellini et al., 1997/. Baltymų sintezę lėtina lietūs bei atšalimas grūdų brandimo metu (plaukėjimo–vaškinės brandos pradžioje). Pastebėta, kad kuo daugiau drėgmės, tuo mažiau susikaupia baltymų, tačiau drėgnais ir vėsiais metais derlingumas padidėja. Mažesnis kiekis baltymų aiškinamas tuo, kad tą patį azoto kiekį reikia pasisavinti didesniai kiekiui grūdų, be to, vėsiu oru azoto pasisavinimas sulėtėja.

Kadangi grūdų kokybę lemia jų supirkimo kainą, paskirtį, pagrindinių bei šalutinių produktų išėigą, kokybę ir savikainą, vertinant grūdus pageidautina greitai, pigiai ir pakankamai tiksliai nustatyti jų kokybę. Vienas tokių būdų yra infraraudonųjų spindulių spektroskopijos metodas. Spektroskopija yra skirstoma pagal tris kriterijus. Pagal spinduliuotės energijos pokytį sąveikos su medžiaga metu galima išskirti absorbcinę (sugeriančią spinduliuotę), emisinę (išskiriančią spinduliuotę) ir sklaidos spektroskopiją

/Buika ir kt., 2007/. Kitas kriterijus yra medžiagos molekulių kitimas po spinduliuotės energijos sąveikos su medžiaga arba jos metu. Šiuo atžvilgiu spektroskopiją galima skirstyti į elektroninę, osciliacinę (vibracinę), rotacinę, paramagnetinio elektronų rezonanso (PER) ir branduolių magnetinio rezonanso (BMR). Trečias skirstymo kriterijus yra spinduliuotė atitinkantis bangų ilgis (energijos dydis). Pagal šį kriterijų spektroskopija skirstoma į radijo bangų, mikrobangų, infraraudonąją (IR), ultravioletinę (UV) ir regimosios šviesos (RŠ). Prietaisas NIRS-6500 atitinka tokius spektroskopijos kriterijus: pagal molekulių kitimą – osciliacinė (vibracinė), pagal bangų ilgį – matomos ir artimosios srities infraraudonųjų spindulių (registruoja 400–2500 nm spektrus), pagal spinduliuotės energijos pokytį sąveikos su medžiaga metu – absorbcinė (absorbuotos energijos kiekis vertinamas pagal atspindėtos energijos kiekį, o absorbcija dažniausiai yra susijusi su obertonais).

Artimieji infraraudonieji spinduliai (AIR) – tai elektromagnetinio spinduliavimo sritis, apimanti bangų ilgio sritį nuo matomos šviesos srities pabaigos – 700 nm, arba  $14285\text{ cm}^{-1}$ , iki pagrindinės infraraudonosios (IR) spektro srities – 2500 nm, arba  $4000\text{ cm}^{-1}$ . Organiniai junginiai gerai atspindi arba praleidžia šios srities bangas. Dauguma gerai pastebimų absorbcijos smailių AIR srityje yra susijusios su organinių medžiagų funkcinųjų grupių –CH, –NH ir –OH ir kt. molekulinėmis vibracijų obertonų arba kombinacinių smailių sritimis (1 pav.).



**1 paveikslas.** Pagrindinės cheminės jungtys ir jas atitinkančių intensyvių AIR absorbcijos smailių padėtis (pagal [http://www.winisi.com/NIRS\\_theory.htm](http://www.winisi.com/NIRS_theory.htm))

**Figure 1.** The main chemical bonds and position of intensive NIR absorption peaks corresponding to them ([http://www.winisi.com/NIRS\\_theory.htm](http://www.winisi.com/NIRS_theory.htm))

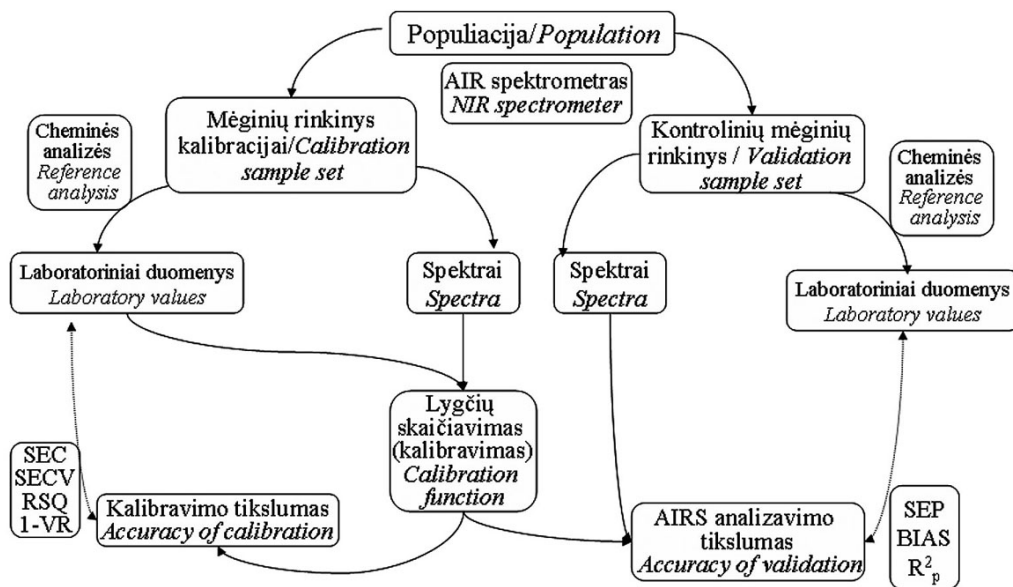
Smalių kiekis mažėja, jei 1) virpesiai yra neaktyvūs IR srityje, 2) molekulės simetrija sąlygoja kai kurių vibracinių lygmenų nuokrypį, pasireiškiantį tuo, kad keli molekuliniai osciliatoriai absorbuoja esant tam pačiam dažniui, 3) absorbcija vyksta už

prietaiso darbo srities, 4) mažas smailių intensyvumas, 5) smailės atsitiktinai persidengia /Buika ir kt., 2007/. Smailių kiekis didėja, jei spektre atsiranda obertonų ar kombinacinės smailės, smailės dėl Fermi arba tarpmolekulinio rezonanso. Daugumai bioorganinių junginių AIR spektro srityje būdingos unikalios absorbcinės smailės, kurių analizė gali būti panaudota kiekybiniam ir kokybiniam vertinimui. AIR absorbcinės smailės yra 10–100 kartų silpnesnės nei pagrindinės IR srities. Tačiau silpna absorbcija turi ir analitinį pranašumą, nes leidžia tiesiogines analizes atlikti šviesą intensyviai absorbuojančiose arba išsklaidančiose matricose, t. y. tiesiog tyrimo objektuose: grūduose, miltuose, tešloje ir pan. Be cheminės sudėties informacijos, AIR spektruose taip pat užregistruota ir mėginio fizikinė informacija – dalelių dydis bei spalva. Absorbuotos energijos kiekis yra proporcingas ją išspinduliuojančių jungčių skaičiui ir jam galioja Lamberto Beero dėsnis /Blanco, Villarroya, 2002; Buika ir kt., 2007; Dahm, Dahm, 2007/. Tiriama produkto atskirų rodiklių (baltymų, celiuliozės) absorbcijos bangos artimųjų infraraudonųjų spindulių spektre dažniausiai persidengia /Osborne, 2000; Blanco, Villarroya, 2002; Buika ir kt., 2007/.

AIR spektroskopija biologinės medžiagos cheminę sudėtį matuoja pagal užregistruotą mėginio jungčių atspindėto arba pro jas praėjusio šviesos srauto spektrą /Workman, Shenk, 2004; Dahm, Dahm, 2007/. Kiekybiškai įvertinus energijos, likusios po absorbcijos cheminėse jungtyse, atspindžio kiekį galima nustatyti organinių medžiagų sudėtį. Junginių (vandens, baltymų, riebalų ir kt.) kiekis objekte AIR atspindžio spektroskopijos metodu nėra nustatomas tiesiogiai, tai – lyginimo metodas. Spektrui nustatyti nereikia daug laiko, tačiau pasinaudoti jame užfiksuota informacija įmanoma tik ją susiejant su pamatiniais metodais gauta informacija apie cheminę sudėtį /Dryden, 2003/. Kad šis analizės metodas būtų tinkamas, o jį taikant gauti duomenys būtų pripažinti, turi būti sukurtos labai tikslios analizavimo AIR spektrometrais lygtys.

Svarbiausi lygčių kūrimo etapai pavaizduoti 2 paveiksle. Kalibracijos tikslumas visų pirma priklauso nuo duomenų bazėje sukauptos informacijos: objekto populiacijos, jai tirti taikomų pamatinių metodų ir darbo tikslumo, tinkamų kalibravimo rodiklių parinkimo /ISI/NIRS 2, 1995; Butkutė, 2004/.

Spektrams daro įtaką tiriamų objektų kilmė, klimato ir metų meteorologinės sąlygos, todėl mėginiai turi būti paimti iš įvairių vietovių. Duomenų tikslumui taip pat daro įtaką visi metodiniai mėginių paruošimo skirtumai, todėl lygčių, sukurtų naudojant kviečių grūdų mėginius, paimtus iš vienokiomis klimato ir dirvožemio sąlygomis augusių tam tikrų veislių javų, taikymas kitokiomis sąlygomis išaugintų kviečių mėginiams analizuoti gali būti nepakankamai patikimas /Leroux et al., 1995/. Taigi kuriant lygtis pirmoji ir viena svarbiausių užduočių yra sukurti pakankamai gausią duomenų bazę, pasižyminčią numatomų analizuoti mėginių ypatybių įvairove.



Pastaba. SEC – standartinė kalibravimo paklaida, SECV – standartinė kryžminio vertinimo paklaida, SEP – standartinė analizavimo paklaida, BIAS – vidutinis pamatiniais metodais ir AIR spektrometru nustatytų verčių skirtumas, RSQ, 1-VR ir  $R^2_p$  – atitinkamų kalibravimo etapų determinacijos koeficientai.

Note. SEC – standard error of calibration, SECV – standard error of cross-validation, SEP – standard error of prediction, BIAS – average difference between reference and NIR values, RSQ, 1-VR and  $R^2_p$  – coefficients of determination in different calibration stages.

## 2 paveikslas. Lygčių kūrimo principinė schema

Figure 2. Principal scheme of development of equations

### Sąlygos ir metodai

*Mėginių charakteristika ir paruošimas.* Duomenų bazė sudaryta iš 1995–2008 m. meteorologinėmis sąlygomis subrandintų įvairių veislių paptastųjų kviečių (*Triticum aestivum* L.) grūdų mėginių spektrų. Kviečiai auginti tikslųjų bandymų (žemės dirbimo, tręšimo, pesticidų, ekologinės žemdirbystės bei selekcijos) ir ūkiniuose plotuose Kėdainių, Kauno, Klaipėdos, Raseinių, Rokiškio, Ukmergės, Panevėžio, Pasvalio, Joniškio, Radviliškio, Kelmės, Šiaulių ir kt. rajonuose. Vyravo žieminių kviečių mėginiai. Duomenų bazėje dominavo veislės 'Zentos' ir 'Ada'. Iš kitų į duomenų bazę pateko žieminių kviečių veislės 'Širvinta', 'Aron', 'Portal', 'Bussard', 'Ibis', 'Jubilatka', 'Alba', 'Marabu' ir kt. bei vasarinių – 'Henika', 'Selpek', 'Nandu', 'Triso' ir kt., taip pat yra ir nežinomų veislių kviečių grūdų spektrų. Duomenų bazę sudarantys mėginiai yra labai įvairios genetinės kilmės, nes dalis mėginių spektrų surinkta iš selekcinų veislių ir numerių grūdų. Spektrams rinkti naudoti neapdoroti, t. y. nemalti, sveiki grūdai. Suskilę grūdai ir priemaišos išrinkti prieš skenavimą, užpildžius kiuvetes.

*1995–2008 m. meteorologinės sąlygos.* Palankūs javams bręsti ir derliui nuimti buvo 1997, 1999, 2001, 2002, 2003 bei 2006 m. šilti liepos mėnesių orai, kai įvairiais metais mėnesio vidutinė temperatūra buvo nuo +20,1 iki +21,3 °C, t. y. mažiausiai

laipsniu didesnė nei 1995–2008 m. ir dviem su puse laipsnio didesnė nei 1924–2008 m. daugiamečiai liepos mėnesių vidurkis. 1999 ir 2002 m. liepos mėnesiai buvo dar ir pakankamai sausi – iškrito mažiau nei pusė mėnesio daugiamečių normos (1924–2008 m. vidurkis – 73 mm) kritulių, o didesnioji dalis – pirmąjį liepos mėnesio dešimtadienį, todėl tais metais javų brandimas buvo greitesnis. Žieminiai kviečiai subrendo labai anksti – liepos mėnesio viduryje. 2000 ir 2004 m. liepos mėnesiai buvo vėsesni – atitinkamai +16,3 ir +16,9 °C, be to 2000 m., kaip ir 2007 m., buvo dar ir drėgna, o tai pailgino javų vegetaciją ir sutrukdė javapjūtę. Minėtina, kad 1996 ir 1998 m. meteorologinės sąlygos buvo taip pat mažiau palankios grūdams bręsti, o drėgmės perteklius sudarė sąlygas plisti grybinėms ligoms.

*Grūdų mėginių analizavimas pamatiniais metodais.*

Grūdams paruošti analizėms naudoti malūnai:

– LM 3303 („Perten instruments“, Švedija) – diskinis malūnas (su 1-ojo tipo disku) grūdams paruošti drėgmės kiekio analizei,

– LM 3100 („Perten instruments“, Švedija) – plaktukinis malūnas (su 0,8 mm skersmens sietu) paruošti viso grūdo miltams, nustatant baltymų bei krakmolo kiekį.

Analizės metodai:

– grūdų drėgnis % – svorio metodu, džiovinimo spintoje džiovinant iki pastovaus svorio (2 h +130 °C temperatūroje) (LST ISO 712<sup>1</sup>),

– baltymų kiekis % SM, apskaičiuotas azoto kiekį padauginus iš koeficiento 5,7, suminio azoto kiekį nustatant Kjeldalio metodu (mėginiai analizuoti pagal šiuo metu galiojantį standartą LST EN ISO 20483<sup>2</sup>). Naudotas pusiau automatinis azoto analizatorius „Kjeltec system 1002“ („Foss Tecator AB“, Švedija),

– krakmolo kiekis % SM, ištirtas poliarimetru ADP 410 („Bellingham & Stanley Ltd“, JK), išmatavus tirpalo poliarizacijos plokštumos sukio kampą, kai krakmolas hidrolizintas druskos rūgšties tirpale, o baltymams nusodinti ir tirpalui nuskaidrinti naudotas amonio molibdatas<sup>3</sup>.

*Mėginių skenavimas taikant AIR spektroskopiją.* Visi mėginiai nuskenuoti monochromatoriumi NIRS-6500 („Perstorp Analytical“, JAV) turinčiu transporto modulį, mėginius supylus specialią kiuvetę, skirtą stambiagrūdžiams mėginiams analizuoti („Natural Product Cup“, Cell&Lid IH-0314). Spektrai (log 1/R) nuo 400 iki 2500 nm registruoti 2 nm intervalu.

*Duomenų pateikimas ir statistinė analizė.* Grūdų mėginių analizės pamatiniais metodais įvairių metų duomenys pateikti kaip vidurkis, standartinis nuokrypis (SD) ir mažiausia bei didžiausia reikšmės. Spektrai ir atitinkamų rodiklių histogramos gautos naudojant *WinISI II* programų paketo („Infrasoft International LLC“, JAV) grafinę programą *Plot Spectra and Scores*.

---

<sup>1</sup> LST ISO 712:2000. Grūdai ir grūdų produktai. Drėgmės kiekio nustatymas. Įprastinis pamatinis metodas (ISO 712:1998).

<sup>2</sup> LST EN ISO 20483:2007. Varpinių ir ankštinių javų grūdai. Azoto kiekio nustatymas ir žalio baltymo kiekio apskaičiavimas. Kjeldalio metodas (ISO 20483:2006).

<sup>3</sup> Grūdų sąlyginio krakmolingumo nustatymo taisyklės. LRŽŪM 2003 04 08 įsak. Nr. 3D-145. Internetė: <<http://www.zum.lt/min/word/isak-2003/3D-145p.pdf>>

## Rezultatai ir jų aptarimas

**Duomenų bazės sudarymas ir jos charakteristika.** Duomenų bazei sudaryti naudotų žieminių bei vasarinių kviečių grūdų, išaugintų Lietuvos žemdirbystės instituto, Lietuvos žemės ūkio universiteto, augalų veislių tyrimo stočių bandymų, ūkininkų ar žemės ūkio bendrovių laukuose, kokybė įvairiais metais buvo nevienoda. Auginimo metais meteorologinės sąlygos skyrėsi ne tik oro temperatūra, bet ir drėgmės kiekiu. Be to, visais tyrimų metais buvo nevienodas kviečių veislių santykis bei taikytų agrotechnikos priemonių intensyvumas. Didžiausius augintų bei tirtų kviečių plotus užėmė ir kartu didžiausią kalibracinės bazės duomenų dalį sudarė veislių 'Zentos' ir 'Ada' grūdų mėginiai. Nors 1995–2008 derliaus metais iš viso nuskenauta ir bendroje duomenų bazėje saugoma per 4 000 kviečių grūdų spektrų, kalibracinėms lygtims kurti panaudotas 1 661 spektras mėginių, kurių ištirtas baltymų kiekis, įvertinta 523 mėginių drėgmė ir 394 – krakmolo kiekis (1 lentelė). Nevienodos tyrimų metų meteorologinės sąlygos turėjo įtakos grūdų kokybei. Saulėtais, šiltais metais grūdai subrendo turėdami daugiau baltymų, o lietingais dažniausiai buvo krakmolingesni. Tai, kad į duomenų bazę pateko įvairiomis meteorologinėmis sąlygomis augusių kviečių grūdų mėginių spektrai, laikytina teigiamu kriterijumi.

**1 lentelė.** Kviečių grūdų optinių spektrų duomenų bazės cheminė charakteristika, vertinant pamatiniais metodais nustatyto drėgnio, baltymų ir krakmolo verčių kaitą tyrimų metais

**Table 1.** Chemical characterization of wheat grain optical spectra data base in relation to the variation of moisture, protein and starch values measured by reference methods in the experimental year

Metai Year	Baltymai / Protein %		Drėgnis / Moisture %		Krakmolas / Starch %	
	n	vidurkis / mean ±SD	n	vidurkis / mean ±SD	n	vidurkis / mean ±SD
1995	8	9,50 ± 1,23	59	12,6 ± 0,34		–
1996	19	10,0 ± 1,28	33	13,4 ± 0,84		–
1997	40	10,7 ± 1,81	86	12,0 ± 0,81		–
1998	66	9,92 ± 1,44	70	12,7 ± 0,56		–
1999	47	11,4 ± 1,24	45	13,5 ± 1,12		–
2000	195	11,9 ± 1,73		–		–
2001	187	12,5 ± 1,61		–		–
2002	278	12,3 ± 1,27		–		–
2003	367	12,9 ± 1,58		–		–
2004	103	10,8 ± 2,52		–		–
2005	46	12,0 ± 1,61		–		–
2006	74	14,7 ± 1,46		–	138	64,1 ± 1,77
2007	156	11,4 ± 1,65	142	12,8 ± 1,50	133	69,6 ± 1,45
2008	75	10,8 ± 2,07	88	10,8 ± 1,20	123	69,6 ± 2,72

Žinoma, kad optimali temperatūra kviečių žydėjimo–grūdų užmezgimo tarpsniu yra +21,0 ± 1,7 °C, o grūdų pildymosi metu – +20,7 ± 1,4 °C /Porter, Gawith, 1999/. Šių tyrimų metu pakankamai šiltas, artimas kviečių optimaliam poreikiui buvo 1997, 1999, 2001, 2002, 2003 bei 2006 m. grūdų formavimosi bei brendimo laikotarpis, todėl ir baltymų kiekis dažniausiai buvo didesnis tais metais nei vėsesniais bei lietingais.

Tyrimų metais kviečių grūduose baltymų kiekis kito nuo 6,7 iki 17,3 %. Tai, kad mažiausios baltymų kiekio vertės kasmet nesiekė 10 %, rodo, kad duomenų bazėje buvo mėginiai iš laukų, kuriuose augalams trūko azoto. Tačiau ir nepalankiais sukaupti didesniai baltymų kiekiui metais mėginiai turėjo 11,5 % ir daugiau baltymų, t. y. atitiko II superkamų kviečių grūdų kokybės klasę<sup>4</sup> (ją atitinkantys grūdai, įvertinus ir kitus kokybės rodiklius, malūnuose dažniausiai naudojami miltams gaminti). Didesnės baltymų kiekio vertės (16,4–17,3 %) 2001, 2003, 2006 bei 2008 m. dažniausiai buvo gautos ištyrus vasarinių kviečių grūdus. Šalies klimato sąlygomis brandusių žieminių kviečių baltymų kiekio vertės dažniausiai esti mažesnės, palyginti su vasariniais. Švedijoje 22 metus tirtų įvairių veislių žieminių kviečių grūdų baltymingumas buvo 10,6–16,7 % /Johansson et al., 2000/. Kuriant kalibracines lygtis yra palanku, kad baltymų kiekio vertėmis kai kurie mėginiai gerokai išsiskyrė iš visos mėginių grupės. Nors į kalibracinę duomenų bazę pateko 14 derliaus metų spektrai, tačiau duomenų bazės pagrindą – 77 % spektrų – sudarė 6 metų grūdų mėginiai.

Tyrimų metais krakmolo kiekis grūduose svyravo 14,5 proc. vnt. ribose, t. y. nuo 59,4 iki 73,9 %. Mažiausiai krakmolo grūduose nustatyta tais metais, kai juose sukaupta daugiausia baltymų. Tačiau kai iš grūdų gaminamas etanolis, didesnis kiekis krakmolo ir atitinkamai mažesnis baltymų yra netgi pageidautinas, nes iš tokio pat kiekio grūdų gaunama didesnė etanolio išeiga /Smith et al., 2006/. Mėginių grupėse krakmolo kiekio įvairovė yra pakankama, kad būtų sukurtos tinkamos analizei kalibracinės lygtys.

Septynerių derliaus metų skenuotų grūdų drėgnis buvo nuo 8,6 iki 18,0 % – įvairiais tyrimų metais vidurkis svyravo nuo 10,8 iki 13,5 %. Į duomenų bazę pateko spektrai ir džiovintų aktyviai ventiliuojant, ir šviežiai nukultų, nedžiovintų grūdų, kurių drėgnis priklausė nuo kritulių bei temperatūros režimo paskutinėmis jų brandimo dienomis. Tai platus grūdų drėgnio diapazonas, leidžiantis drėgnį įvertinti ir iš karto po pjūties, ir sandėliuojant.

Priklausomai nuo permainingų meteorologinių sąlygų, skirtingo dirvožemio ir derliui gauti taikytų agronominių priemonių bei genetinės įvairovės grūdų vystymosi bei brandos tarpsniu, duomenų bazėje sukaupti optiniai ir grūdų kokybės komponentų duomenys kinta pakankamai plačiu intervalu.

Kiekvienam rodikliui nustatyti spektrometru NIRS-6500, lygtims kurti sudarytos atskiros duomenų bazės. Jose kiekvienas optinis spektras turi atitikmenį su pamatiniais metodais nustatyto rodiklio verte. Lygtims kurti buvo naudoti ne visų mėginių optiniai ir cheminiai duomenų bazės duomenys. Dalis jų buvo atmesta lygčių kūrimo metu arba dėl per didelio optinių duomenų (Mahalanobio atstumo H) nuokrypio nuo statistinio vidurkio, arba dėl rodiklio verčių nuokrypio nuo vertės, nustatytos kuriama lygtimi.

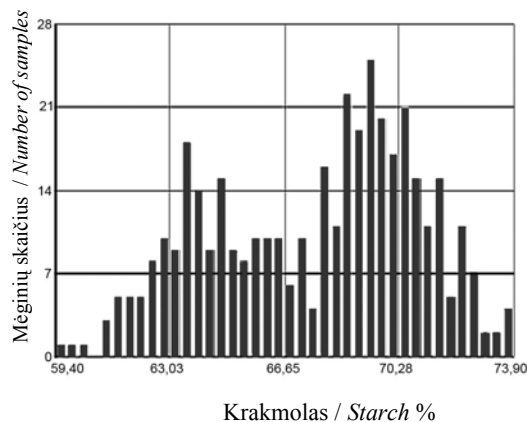
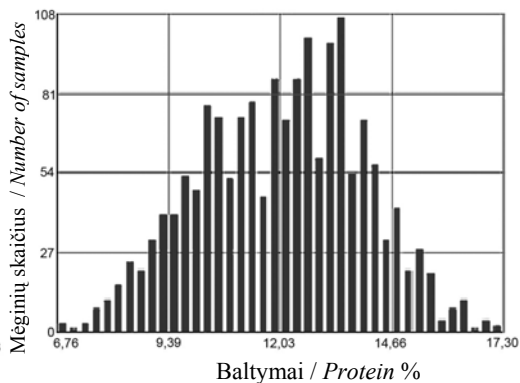
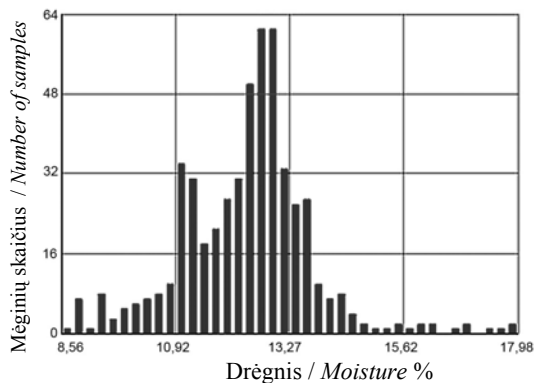
Duomenų bazei kurti naudotų kviečių grūdų išanalizuotų mėginių drėgnio, baltymų ir krakmolo verčių histogramos pateiktos 3 paveiksle.

Drėgnio kiekis sudarė 8,6–18,0 % bendros grūdų masės, standartiniam nuokrypiui esant 1,36, o vidutinei vertei – 12,4 %. Dauguma, t. y. 80 %, mėginių buvo 10,9–13,7 % drėgnio, o 11 % mėginių nustatytas 8,6–10,9 % drėgnis (labai sausi, perdžiovinti grūdai). Likusių 9 % mėginių drėgnis kito nuo 13,7 iki 18,0 %, tad grūdus prieš sandėliuojant dažniausiai reikėtų džiovinti.

---

<sup>4</sup> LST 1524:2003. Kviečiai. Supirkimo ir tiekimo reikalavimai.





	Drėgnis Moisture %	Baltymai Protein %	Krakmolas Starch %
n	523	1661	394
Vidurkis / Mean	12,4	12,6	67,6
Standartinis nuokrypis / SD	1,36	1,93	3,25
Nuo / From	8,6	6,7	59,4
Iki / To	18,0	17,3	73,9

Duomenų kaitos statistika  
Statistics of data variation

**3 paveikslas.** Kviečių grūdų drėgnio, baltymų ir krakmolo verčių duomenų bazės histogramos ir jų kaita

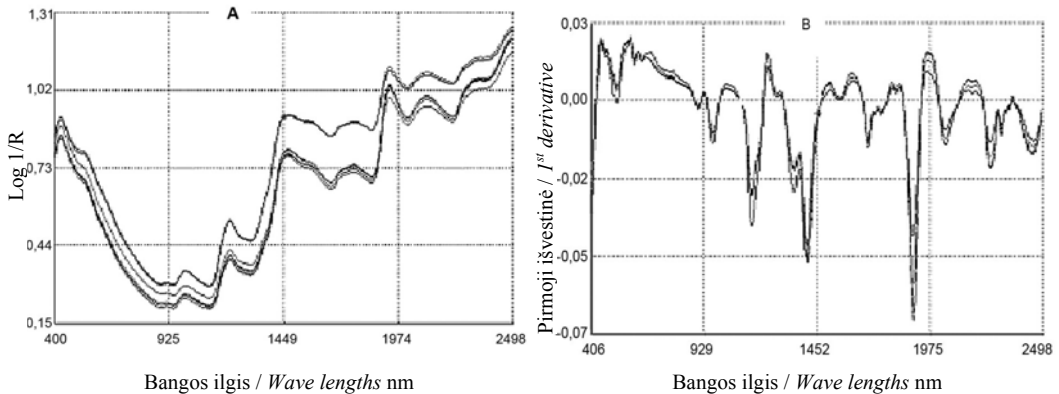
**Figure 3.** Histograms of wheat grain moisture, protein and starch values in the data base and their variation

Baltymų kiekis grūduose sudarė 6,7–17,3 % SM, standartiniam nuokrypiui esant 1,93, o vidutinei vertei – 12,6 %. Tyrimų metais užaugintiems kviečių grūdams būdingos baltymų kiekio vertės svyravo nuo 8,3 iki 15,7 % SM. Duomenų bazėje kuriant lygtis tokie mėginiai sudaro daugumą (96 %) ištirtų mėginių. Pagal šį kokybės požymį išsiskyrė tik pavieniai mėginiai: 30 mėginių grūdų baltymų kiekis sudarė daugiau kaip 15,7 %, o mažesnis nei 8,3 % baltymų kiekis rastas 40 mėginių iš 1661.

Krakmolo kiekio vertės mėginiuose, įtraukuose į lygčių, nustatančių šį rodiklį, duomenų bazę, svyravo nuo 59,4 iki 73,9 % SM, vidutinė vertė – 67,6 %, variaciją apibūdinantis standartinis nuokrypis – 3,25. Duomenų bazėje būdingiausios krakmolo kiekio vertės svyravo nuo 62,3 iki 72,8 % SM. Tokie duomenų bazės lygčių kūrimo mėginiai sudaro apie 90 % mėginių. Tačiau, kaip matyti 3 paveiksle, krakmolo rodiklio verčių pasiskirstymas yra ne toks tolygus kaip baltymų kiekio.

**Įvairių kviečių grūdų mėginių AIR spektrai ir skirtumai.** Kalibracinių lygčių kūrimo duomenų bazes sudaro optiniai duomenys, užregistruoti kaip atspindžio (log 1/R, kai R – jungčių atspindžio energija) spektrai (4 pav.), ir kiekvienam iš jų suteiktos atitin-

kamos cheminės sudėties arba kitokio grūdų požymio (spalvos, stambumo, pažeistumo) reikšmės.



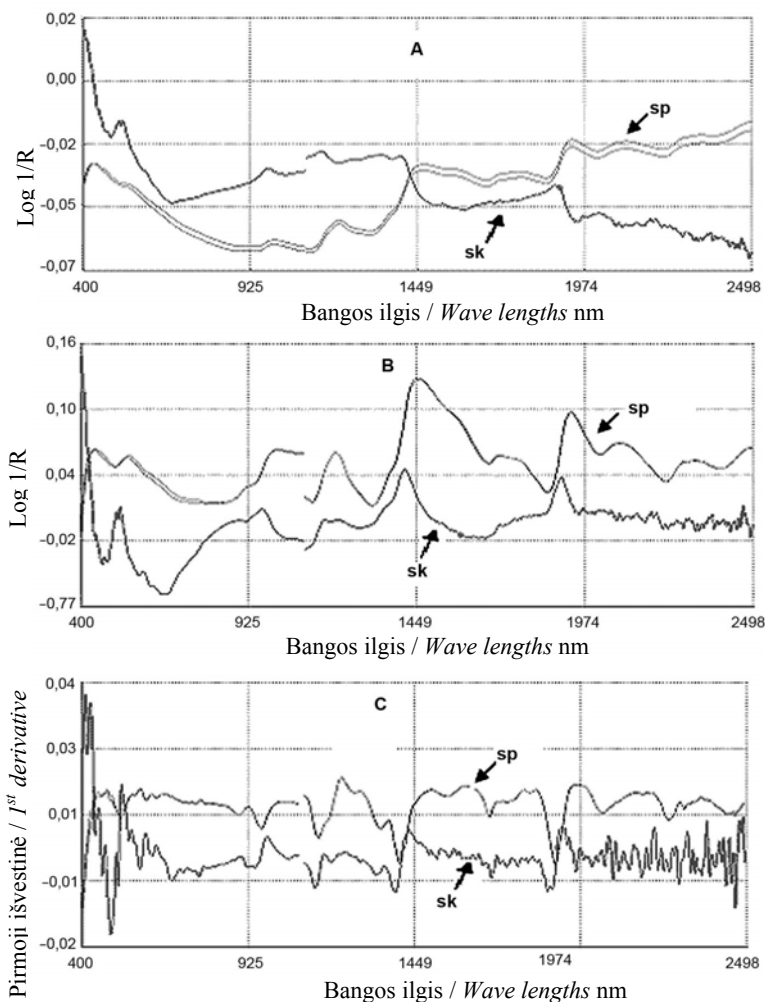
Pastaba. Spektrai gauti naudojant WinISI II programų paketą.  
 Note. Spectra obtained using WinISI II software.

**4 paveikslas.** Šešių skirtingos kokybės kviečių grūdų mėginių artimosios srities (400–2500 nm) infraraudonųjų spindulių atspindžio spektrai log 1/R: A) matematinis optinių duomenų transformavimas ir išsklaidymo koregavimas netaikytas, B) optiniai duomenys transformuoti, taikant modelį 1, 4, 4, 1 ir išsklaidymo koregavimą NSVD

**Figure 4.** Near (400–2500 nm) infrared reflectance spectra Log 1/R of the six grain samples differing in quality: A) non-scatter correction, non-mathematical treatment of spectra, B) mathematical treatment of spectra 1, 4, 4, 1 and scatter correction NSVD

Absorbcija matomoje (400–700 nm) srityje gali būti susijusi su grūdų spalva, joje nėra daug informacijos apie chemines jungtis, todėl šis segmentas retai įtraukiamas į kalibracines lygtis /Leroux et al., 1995/. Kalibracinių lygčių kūrimui naudojant matematiškai neapdorotus spektrus log 1/R, jos dažnai būna netikslios, nes grūdų stambumas gali daryti įtaką spektrų skirtumams, nesusijusiems su cheminėmis savybėmis ir sudėtimi /Butkutė, 2000/. Tad lygčių kūrimas dažniausiai yra paremtas vienaip ar kitaip apdorota optinių duomenų informacija. 4 B paveiksle ir pavaizduoti atspindžio spektrai log 1/R, kurių optiniai duomenys transformuoti, taikant modelį 1, 4, 4, 1 ir išsklaidymo koregavimą NSVD (angl. – *Standard Normal Variate and Detrend*). Kiekvieno mėginio absorbcijos grafikas nutrūksta ties 1100 nm, pereinant nuo vieno detektoriaus prie kito (šis trūkis pažymėtas 4 B pav.). Pirmosios išvestinės spektrai turi ryškesnes nei netransformuoti spektrai absorbcijos smailes. Absorbcijos smailių gausu artimosios srities infraraudonųjų spindulių srityje: 700, 1962, 2290 bei 2300 nm absorbcija gali būti siejama su krakmolu, 1506, 2184, 2300 nm – baltymais. 1150, 1400, 1790, 1900 nm srityse esančios smailės sietinos su vandens ir hidroksilo absorbcija, o 700 ir 2486 nm – su celiuliozės molekules sudarančiomis jungtimis.

Tokie absorbcijos skirtumų ypatumai, priklausomai nuo spektrų duomenų matematinio apdorojimo, atsiskleidžia ir nagrinėjant konkrečius žinomos cheminės sudėties kviečių grūdų optinius spektrus artimosios srities infraraudonųjų spindulių srityje (5 pav.).



Pastaba. Cheminė sudėtis – Nr. 422: baltymų 8,93 % SM, krakmolo 73,9 % SM, drėgnis 11,3 %; Nr. 550: baltymų 9,81 % SM, krakmolo 73,9 % SM, drėgnis 12,87 %.  
 Note. Chemical composition – No. 422: protein 8.93 % DM, starch 73.9 % DM, moisture 11.3 %; No. 550: protein 9.81 % DM, starch 73.9 % DM, moisture 12.87 %.

**5 paveikslas.** Panašios cheminės sudėties mėginių Nr. 422 bei 550 pradiniai ir matematiškai apdoroti spektrai (sp) bei absorbcijos skirtumas (sk), kai: A) netaikytas spektro išsklaidymo koregavimas (NONE) ir matematinis apdorojimas 0, 0, 1, 1, B) taikytas spektro išsklaidymo koregavimas NSVD, bet netaikytas matematinis apdorojimas 0, 0, 1, 1, C) taikytas spektro išsklaidymo koregavimas NSVD ir matematinis apdorojimas 1, 4, 4, 1

**Figure 5.** “Raw” and mathematically treated spectra (sp) and absorption difference (sk) of the samples with a similar chemical composition No. 422 and 550: A) non-scatter correction (NONE), non-mathematical treatment 0, 0, 1, 1 of spectra, B) scatter correction NSVD, non-mathematical treatment 0, 0, 1, 1 of spectra, C) scatter correction NSVD, mathematical treatment 1, 4, 4, 1 of spectra

6 A paveiksle pateikti spektrai dviejų mėginių, kurie skiriasi baltymų koncentracija, bet yra vienodo krakmolingumo ir drėgno. Palyginus abiejų mėginių absorbcijos spektrus, itin ryški absorbcijos skirtumų smailė yra 2310 nm srityje, susijusi su alkilo grupės jungčių absorbcija. Šių grupių gausu baltymų molekulėse. Sirtumai 1900 nm srityje, sietinoje su vandens ir hidroksilo absorbcija, išryškėjo tarp mėginių, turinčių itin skirtingą cheminę sudėtį, t. y. nevienodą krakmolo ir baltymų koncentraciją, spektrų (6 B pav.).

Mėginių cheminė sudėtis  
*Chemical composition of samples:*

Nr. / No. 465:

Baltymai / Protein 9,8 % SM  
Krakmolai / Starch 70,2 % SM  
Drėgnis / Moisture 11,2 %

Nr. / No. 509:

Baltymai / Protein 11,8 % SM  
Krakmolai / Starch 70,1 % SM  
Drėgnis / Moisture 11,1 %

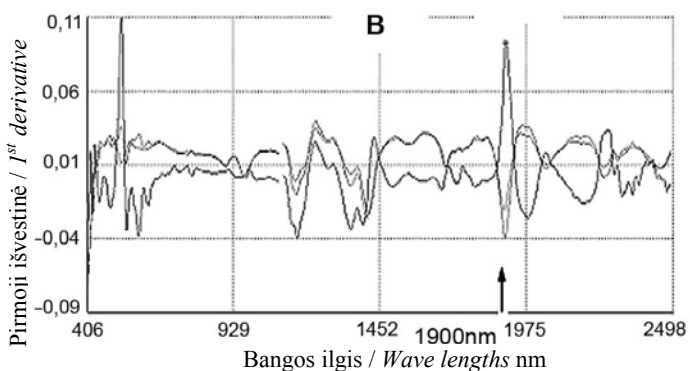
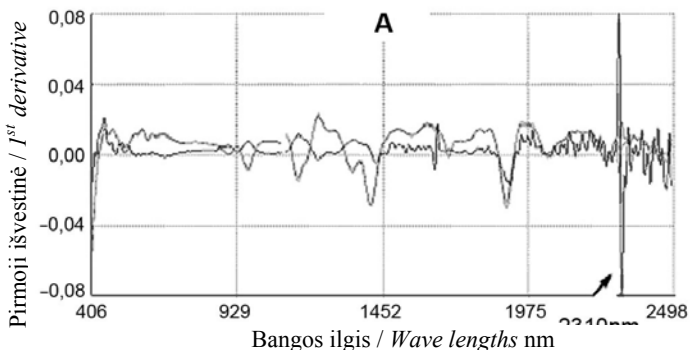
Mėginių cheminė sudėtis  
*Chemical composition of samples:*

Nr. / No. 232:

Baltymai / Protein 17,5 % SM  
Krakmolai / Starch 59,4 % SM

Nr. / No. 548:

Baltymai / Protein 9,1 % SM  
Krakmolai / Starch 73,7 % SM



**6 paveikslas.** Nurodytos cheminės sudėties kviečių grūdų mėginių spektrai ir jų skirtumai, taikant spektro išsklaidymo koregavimą NSVD ir matematinį apdorojimą 1, 4, 4, 1

**6 paveikslas.** Spectra of wheat grain samples of known chemical composition and their differences when using scatter correction NSVD and mathematical treatment 1, 4, 4, 1 of spectra

Spektrų ir jų skirtumų vertinimas yra sudėtingas, o mėginių cheminės sudėties kiekybinė analizė, remiantis tik absorbcijų tam tikruose spektro taškuose vertėmis, praktiškai neįmanoma. Siekiant greitai bei tiksliai ištirti įvairius objektus ir praktiškai taikyti AIR spektroskopiją, būtina sukurti lygtis, kurios susietų optinių ir cheminės sudėties duomenų reikšmes. Kiekvienam tiriamo produkto kokybės rodikliui reikia turėti atskirą kalibracinę lygtį. Kalibracijos tikslumas pirmiausia priklauso nuo duomenų bazėje sukauptos informacijos: objekto populiacijos, jai tirti taikomų pamatinių metodų ir analitinio darbo tikslumo, tinkamo kalibravimo rodiklių parinkimo /Butkutė, 2004;

Butkutė, Mašauskienė, 2004/. Taikant spektrų kalibravimo programą *Spectra calibrations*, iš to paties spektrų rinkinio, derinant kalibravimo parametrus, galima sukurti didelį kiekį įvairaus tikslumo kalibracinių lygčių. Nenustatytas dėsningumas, kuris parametru derinys arba kalibravimo modelis yra geriausias /Reinhard, 1992; Dardenne, Agneessens, 1994; Butkutė, 2005/, tad lygtims kurti kiekvieną sykį bandomi vis kiti įvairių regresijos metodų, spektrų matematinio transformavimo būdų, išsklaidymo koregavimo, kalibruojamo bangų intervalo arba duomenų bazių sudėties deriniai /Park et al., 1997; Butkutė, 2000; Dardenne et al., 2000/. Taikytinas bandymų ir klaidų metodas, todėl kuriant lygtis kviečių grūdų kokybei analizuoti prietaisu NIRS-6500, buvo iširta iki 47 skirtingų lygčių skaičiavimo modelių (kalibravimo parametru derinių), siekiant sukurti kuo tikslesnes analizavimo lygtis /Butkutė, Cesevičienė, 2009/.

### **Išvados**

1. Kalibracinėms lygtims kurti 1995–2008 m. sukaupia daugiau kaip 4000 žieminių ir vasarinių kviečių grūdų mėginių optinių bei cheminių duomenų bazė, kurią sudaro mėginių spektrai, nustatyti 400–2500 nm intervale, ir juos atitinkantys cheminės sudėties rodikliai (baltymų bei krakmolo kiekis ir drėgnis), nustatyti pamatiniais metodais.

2. Duomenų bazėje lygtims kurti kviečių grūdų kokybės rodiklių vertės varijavo šiam tikslui tinkamu intervalu. Jų vertės buvo: grūdų drėgnio 8,6–18,0 % (vidurkis – 12,4 %), baltymų kiekio 6,7–17,3 % (vidurkis – 12,6 %), krakmolo kiekio 59,4–73,9 % (vidurkis – 67,6 %).

3. Turinčių skirtingą cheminę sudėtį grūdų mėginių spektrai yra nevienodi. Skirtumai priklauso nuo spektrų transformavimo, o skirtingos cheminės sudėties mėginių absorbcijos spektrų skirtumų smailės ryškesnės srityse, susijusiose su atitinkamu cheminės sudėties rodiklių kiekybiniais ypatumais. 700, 1962, 2290 bei 2330 nm bangų ilgiams artimose srityse susidariusios smailės gali būti siejamos su krakmolu, 1506, 2184, 2300 nm – su baltymais, o 1150, 1400, 1790, 1900 nm bangų ilgiai sietini su vandens ir hidroksilo absorbcija. Artimosios srities infraraudonųjų spindulių atspindžio spektruose yra informacija apie mėginių cheminę sudėtį, tačiau ji gali būti gauta tik atlikus cheminių ir optinių duomenų kalibraciją.

### **Padėka**

Tyrimą parėmė Lietuvos valstybinis mokslo ir studijų fondas.

Gauta 2009 10 28

Pasirašyta spaudai 2009 12 14

### **LITERATŪRA**

1. Atwell W. A. Wheat flour: practical guides for the food industry. – St. Paul, USA, 2001, p. 15–25
2. Blanco M., Villarroya I. NIR spectroscopy: a rapid-response analytical tool // Trends in Analytical Chemistry. – 2002, vol. 21, iss. 4, p. 240–250
3. Buika G., Getautis V., Martynaitis V., Rutkauskas K. Organinių junginių spektroskopija. – Kaunas, 2007. – 277 p.

4. Butkutė B. Effect of math treatment and wavelength range on the statistics of the calibration for determination of glucosinolates content by NIRS-6500 // *Biologija*. – 2000, Nr. 2 (priedas), p. 70–73

5. Butkutė B., Cesevičienė J. Lygčių kūrimas kviečių grūdų kokybę vertinant spektrometru NIRS-6500. II. Lygčių skaičiavimo modelių palyginimas // *Žemdirbystė-Agriculture*. – 2009, t. 96, Nr. 4, p. 78–96

6. Butkutė B. Effect of the calibration model on the correlation between spectral data and nitrogen content in various agricultural objects // *Chemija*. – 2005, t. 16, Nr. 1, p. 45–52

7. Butkutė B. Factors influencing accuracy of NIRS calibrations for the prediction of quality of Lithuania-grown rapeseed // *Near infrared spectroscopy: proceedings of the 11<sup>th</sup> international conference*. – Chichester, UK, 2004, p. 405–410

8. Butkutė B., Mašauskienė A. Impact of the mathematical treatment of spectra on the robustness of NIRS calibration // *Grassland Science in Europe*. – 2004, vol. 9, p. 1037–1039

9. Corbellini M., Canevar M. G., Mazza L. et al. Effect of the duration and intensity of heat shock during grain filling on dry matter and protein accumulation, technological quality and protein composition in bread and durum wheat // *Australian Journal of Plant Physiology*. – 1997, vol. 24, p. 245–260

10. Dabkevičius Z., Sinkevičienė J., Semaškienė R., Šaluchaitė A. Lietuvoje auginamų vasarinių miežių veislių sėklos užkrėstumas mikromicetais // *Žemdirbystė-Agriculture*. – 2005, t. 92, Nr. 4, p. 106–119

11. Dahm D. J., Dahm K. D. Interpreting diffuse reflectance and transmittance: a theoretical introduction to absorption spectroscopy of scattering materials // *IM Publications*. – Chichester, UK, 2007. – 286 p.

12. Dardenne P., Agnessens R. Determination de la valeur alimentaire de luzernes par spectrometrie dans le proche infrarouge // *Congrès EUCARPIA/FAO / Document diffusé per le SNDF “Culture, exploitation et sélection de la luzerne pérenne pour différentes utilisations”*. – 1994, p. 1–6

13. Dardenne P., Sinnaeve G., Baeten V. Multivariate calibration and chemometrics for near infrared spectroscopy: which method? // *Journal of Near Infrared Spectroscopy*. – 2000, vol. 8, p. 229–237

14. Dryden G. M. Near infrared reflectance spectroscopy: application in deer nutrition. – 2003. Internetė <<http://www.rirdc.gov.au/reports/DEE/w03-007.pdf>> [žiūrėta 2008 12 01]

15. Finney K. F., Yamazaki W. T., Youngs V. L. et al. Quality of hard, soft and durum wheats // *Wheat and Wheat Improvement*. – Madison, USA, 1987, p. 677–748

16. ISI/NIRS 2, Version 3.10. Routine operation and calibration development software for near infrared instruments // *Infrasoft International. AIR Systems*. – USA, 1995. – 321 p.

17. Johansson E., Svensson G., Tsegaye S. Genotype and environment effects on bread-making quality of Swedish-grown wheat cultivars containing high-molecular-weight glutenin subunits 2+12 or 5+10 // *Acta Agriculturae Scandinavica. Section B: Soil and Plant Science*. – 2000, vol. 49, iss. 4, p. 225–233

18. Leroux Ph., Bambic S., Bard M. et al. Guide de l'utilisateur de spectrometres d'absorption dans le proche infrarouge. – Paris, 1995. – 63 p.

19. Lōiveke H., Ilumäe E., Laitamm H. Microfungi in grain and grain feeds and their potential toxicity // *Agronomy Research*. – 2004, vol. 2, No. 2, p. 195–205

20. Navarro S., Noyes R. T. The mechanics and physics of modern grain aeration management. – Florida, USA, 2002, p. 9–10

21. Osborne B. G. Near-infrared spectroscopy in food analysis // *Encyclopedia of Analytical Chemistry*. – 2000. – 14 p. Internetė <<http://www2.hcmuaf.edu.vn/data/phyenphuong/Near%20Infrared%20Spectroscopy%20in%20Food%20Analysis.pdf>> [žiūrėta 2009 12 21]

22. Park R. S., Gordon F. J., Agnew R. E. et al. The use of near infrared reflectance spectroscopy on dried samples to predict biological parameters of grass silage // *Animal Feed Science and Technology*. – 1997, vol. 68, p. 235–246
23. Porter J. R., Gawith M. Temperatures and the growth and development of wheat: a review // *European Journal of Agronomy*. – 1999, vol. 10, p. 23–36
24. Reinhard F. Ch. Entwicklung und Anwendung von Nach-Infrarot-spektroskopischen Methoden für die Bestimmung von Öl-, Protein-, Glucosinolat-, Feuchte- und Fettsäure-Gehalten in intakter Rapsaat: Dissertation des Doctorgrades. – Göttingen, 1992. – 139 p.
25. Ruckebauer P. Influence of harvest and storage conditions on trichothecenes levels in various cereals // *Trichothecenes with a special focus on DON: summary report of a workshop held in September 2003 in Dublin, Ireland / ILSI Europe*. – Brussels, 2004. – 40 p. Internet <<http://europe.ilsa.org/file/RPDON.pdf>> [žiūrēta 2004 06 06]
26. Smith T. C., Kindred D. R., Brosnan J. M. et al. Wheat as a feedstock for alcohol production // *Research review No. 61. Final report of HGCA-funded project (No. 3018)*. 2006. – 89 p. Internet <[www.lowcvp.org.uk/assets/reports/HGCA RR61 Wheat for alcohol.pdf](http://www.lowcvp.org.uk/assets/reports/HGCA_RR61_Wheat_for_alcohol.pdf)> [žiūrēta 2009 11 09]
27. Uhlen A. K., Hafskjold R., Kolhald A. H. et al. Effects of cultivar and temperature during grain filling on wheat protein content, composition, and dough mixing properties // *Cereal Chemistry*. – 1998, vol. 75, iss. 4, p. 460–465
28. Wilson J. D., Bechtel D. B., Todd T. C., Seib P. A. Measurement of wheat starch granule size distribution using image analysis and laser diffraction technology // *Cereal Chemistry*. – 2006, vol. 83, No. 3, p. 259–268
29. Workman J. Jr., Shenk J. Understanding and using the near-infrared spectrum and as an analytical method // *Near-Infrared Spectroscopy in Agriculture*. – Madison, USA, 2004, p. 3–10

## **Development of equations for wheat grain quality assessment by a NIRS-6500 spectrometer.**

### **I. Grain quality and optical data base characterization**

B. Butkutė, J. Cesevičienė  
Lithuanian Institute of Agriculture

#### **Summary**

Optical and chemical data base of over 4 000 winter and spring wheat (*Triticum aestivum* L.) samples consisting of sample spectra, recorded within 400–2500 nm range and chemical composition indicators determined by reference method were accumulated during the period 1995–2008 for the development of calibration equations. In the data base, for the development of equations, designed for the determination of wheat quality indicators by the instrument NIRS-6500, the values of the indicators were as follows: grain moisture 8.6–18.0 % (average 12.4%), protein content 6.7–17.3% (average 12.6%), starch content 59.4–73.9% (average 67.6%). The spectra of the grain samples differing in chemical composition have specific absorption peaks in the respective regions of the tested spectrum, which are related with the quantitative peculiarities of the components of chemical composition. The peaks of waves that formed in the region around 700, 1962, 2290 and 2330 nm can be linked to starch, those that formed in the region 1506, 2184, 2300 nm can be linked to protein, and those formed in the region 1150, 1400, 1790, 1900 nm can be linked to water and hydroxyl absorption. Optical differences show up depending on spectra transformation. NIR reflectance or spectra contain informative material about the chemical composition of samples, however, this information can be extracted only having done calibration of chemical and optical data.

Key words: near infrared reflectance (NIR) spectroscopy, wheat grain, moisture, protein, starch, data base.