

ВОЗМОЖНОСТИ СПЕКТРОСКОПИИ С ПРОСТРАНСТВЕННЫМ РАЗРЕШЕНИЕМ ПРИ ОПЕРАТИВНОМ КОНТРОЛЕ СПЕКТРАЛЬНЫХ СВОЙСТВ ПИЩЕВЫХ ПРОДУКТОВ

Белорусский государственный университет, Минск, Беларусь

Оценены возможности спектроскопии, основанной на регистрации спектрально-пространственных профилей локального коэффициента диффузного отражения широкополосного светового излучения пищевыми продуктами. Анализ результатов обработки экспериментально измеренных профилей диффузного отражения мелкодисперсных пищевых продуктов показывает возможность определения спектральных показателей приведенного рассеяния и поглощения светового излучения, что позволяет при дальнейшей обработке определять объемную концентрацию основных хромофоров, имеющих полосы поглощения в используемом диапазоне спектра.

Спектральный контроль пищевых продуктов широко используется для определения и анализа химического состава продукта, включая содержание жирных кислот, белков, углеводов и других хромофоров. Это помогает обеспечить соответствие продуктов стандартам качества, защитить потребителей от подделок и мошенничества, а также повысить эффективность производства и снизить затраты на контроль качества.

Достаточно новое направление оптического контроля неоднородных сильнорассеивающих сред – спектроскопия обратного диффузного отражения светового излучения с пространственным разрешением, основанная на использовании диффузионного приближения теории переноса излучения при многократном характере рассеяния фотонов. Это приближение при выполнении несложных условий: 1) значение показателя приведенного рассеяния μ'_s существенно превышает значение показателя поглощения μ_a излучения, 2) произведение $\mu_{\text{eff}} \cdot \rho \geq 1$, где $\mu_{\text{eff}} = \sqrt{3\mu_a(\mu_a + \mu'_s)}$, а ρ – расстояние между точкой ввода излучения в рассеивающую среду и точкой регистрации диффузно отраженного излучения, можно применять для описания локального коэффициента диффузного отражения среды $R(\lambda)$ [1]. Регистрируя спектрально-пространственные профили $R_m(\lambda, \rho_k)$ диффузного отражения при разных расстояниях ρ_k между неподвижным освещающим и подвижным приемным оптоволоконными зондами в широком участке спектра можно определять спектральные показатели $\mu'_s(\lambda)$ и $\mu_a(\lambda)$ исследуемой рассеивающей среды. При проведении их дальнейшего анализа появляется возможность оценки отклонения состава контролируемой среды от заданного или эталонного.

В докладе приводится конструкция созданного компьютеризированного комплекса на основе спектрометра AvaSpec 2048BL фирмы Avantes (Голландия) и оптоволоконной техники, а также методика регистрации и нормировки спектрально-пространственных профилей $R_m(\lambda, \rho_k)$ диффузного отражения, которая позволяет снизить влияние долговременной нестабильности спектральных характеристик используемой аппаратуры.

При исследовании оптических свойств мелкодисперсных сред обычно используют предположение об их пространственной однородности, т. е. считают, что их спектральные показатели $\mu'_s(\lambda)$ и $\mu_a(\lambda)$ не зависят от координат x, y и глубины z проникновения излучения в них. На самом деле проведенные нами экспериментальные измерения $R_m(\lambda, \rho_k)$ показывают наличие заметной неоднородности композиционных материалов, вызываемой недостаточно однородном перемешивании компонент при изготовлении. Поэтому в проведенных экспериментальных исследованиях зависимостей $\mu'_s(\lambda)$ и $\mu_a(\lambda)$ ряда пищевых продуктов нами использовался симметричный набор расстояний ρ_k между неподвижным излучающим зондом и подвижным приемным. Из них 5 положений ρ_k соответствовали смещению приемного зонда влево от излучающего зонда, а оставшиеся 5 – вправо. Такая схема

геометрии проводимых измерений позволяет сразу выявлять неоднородность измеряемых профилей $R_m(\lambda, \rho_k)$ и правильно выбирать исследуемый участок поверхности среды, в котором $R_m(\lambda, \rho_k)$ имеет примерно симметричные зависимости слева и справа от точки ввода светового излучения в среду. Это позволяет составить систему нелинейных уравнений, т. е. сформировать функцию невязки в виде суммы 10-ти разностей между измеренными $R_m(\lambda, \rho_k)$ и смоделированными с помощью диффузионного приближения $R[\lambda, \rho_k, \mu'_s(\lambda), \mu_a(\lambda)]$ зависимостями

$$f_{res}(\lambda_i) = \sum_{k=1}^{10} \left[R_m(\lambda, \rho_k) - R(\lambda, \rho_k, \mu'_s(\lambda_i), \mu_a(\lambda_i)) \right]^2 \quad (1)$$

или суммы 10-ти отношений

$$f_{res}(\lambda_i) = \sum_{k=1}^{10} \left[\frac{R(\lambda, \rho_k, \mu'_s(\lambda_i), \mu_a(\lambda_i))}{R_m(\lambda, \rho_k)} - 1 \right]^2, \quad (2)$$

минимизируя которые при варьировании формы $\mu'_s(\lambda)$, можно определять искомые зависимости $\mu'_s(\lambda)$ и $\mu_a(\lambda)$ [2]. Поскольку спектрально-пространственные профили $R_m(\lambda, \rho_k)$ диффузного отражения регистрируются в большом диапазоне значений (при изменении на 3-4 порядка) в наших исследованиях применялась функция невязки в виде (2), чтобы обеспечить одинаковый вклад в невязку как слабых, так и мощных составляющих $R_m(\lambda, \rho_k)$, регистрируемых при разных значениях ρ_k .

В докладе приводятся зарегистрированные спектрально-пространственные профили $R_m(\lambda, \rho_k)$ ряда мелкодисперсных пищевых продуктов. Обсуждаются причины возникновения отклонения зависимостей $R[\lambda, \rho_k, \mu'_s(\lambda), \mu_a(\lambda)]$, моделируемых с помощью диффузионного приближения, от измеряемых профилей $R_m(\lambda, \rho_k)$. Представлены спектральные зависимости $\mu'_s(\lambda)$ и $\mu_a(\lambda)$, получаемые в результате подгонки с использованием выражения (2), для нескольких типов мелкодисперсных пищевых продуктов. Показано, что в полученных зависимостях $\mu_a(\lambda)$ для яблок, наблюдаются 3 мощные полосы поглощения, обусловленные наличием в яблоке жидкой воды H_2O и клеток с хлорофиллом двух типов *a* и *b* [3]. Причем, получаемые зависимости $\mu_a(\lambda)$ имеют размерность $см^{-1}$, что позволяет далее определять объемную концентрацию хлорофиллов, воды и других хромофоров.

Таким образом, проведенные исследования указывают на перспективность создания малогабаритной спектральной аппаратуры диффузного отражения нового поколения, основанной на регистрации спектрально-пространственных профилей $R_m(\lambda, \rho_k)$ и методики их обработки на основе диффузионного приближения. Это позволяет определять спектральные зависимости показателей $\mu'_s(\lambda)$ и $\mu_a(\lambda)$ мелкодисперсных пищевых продуктов, которые далее можно использовать для оперативного определения объемной концентрации в них основных хромофоров, а также их органолептических свойств, что важно при оценке их деградации при длительном хранении и установлении предельных сроков годности.

Список литературы

1. Farrell, T. J. A diffusion theory model of spatially resolved, steady-state diffuse reflectance for the noninvasive determination of tissue optical properties in vivo / T. J. Farrell, M. S. Patterson, B. C. Wilson // Medical Physics. – 1992. Vol. 19. – P. 881–888.
2. Фираго В.А., Шулико К.И. Способ определения спектральных показателей приведенного рассеяния и поглощения излучения мелкодисперсными материалами и устройство для его осуществления. Положительное решение о выдаче евразийского патента по евразийской заявке № 202292115 на изобретение от 30 июня 2022 г., принятое 15.03.2023 г
3. Milne, B. Unraveling the Intrinsic Color of Chlorophyll / F. Bruce Milne, Y. Toker, A. Rubio [et al.] // Angewandte Chemie International Edition. 2015. – Vol. 54, No 7. – P. 2198–2201.