

MODELOWANIE ZAWARTOŚCI MATERIAŁU PORĄŻONEGO  
FUZARIOZĄ W ROZDROBNIONYM ZIARNIE PSZENICY  
NA PODSTAWIE ODBICIOWYCH WIDM OPTYCZNYCH  
REJESTROWANYCH W RÓŻNYCH ZAKRESACH DŁUGOŚCI FALI

*Grażyna Balcerowska<sup>1</sup>, Ryszard Siuda<sup>1</sup>, Czesław Sadowski<sup>2</sup>*

<sup>1</sup>Institut Matematyki i Fizyki, Uniwersytet Technologiczno-Przyrodniczy  
ul. Kaliskiego 7, 85-796, Bydgoszcz  
e-mail: gbalcer@utp.edu.pl

<sup>2</sup>Katedra Fitopatologii, Uniwersytet Techniczno-Przyrodniczy  
ul. Kordeckiego 20, 85-255 Bydgoszcz

**Streszczenie.** W pracy przedstawiono zastosowanie spektroskopii odbiciowej do wykrywania porażenia fuzariozą w rozdrobnionym ziarnie kilku odmian pszenicy ozimej. Pomiar spektrometryczny wykonano dla próbek o różnym stopniu rozdrobnienia (trzy frakcje o rozmiarach cząstek <0,18 mm, >0,18 mm i <0,25 mm lub 0,355 mm, >0,25 mm lub 0,355 mm) w szerokim zakresie długości fal od 200 nm do 2500 nm. Modele kalibracji wielowymiarowej budowano przy użyciu metody PLS w trzech podzakresach długości fal: UV (200-400 nm), VIS (400-800 nm) i NIR (800-2500 nm). Otrzymane wyniki pokazują, że zakres ultrafioletu pozwala w wielu wypadkach na zbudowanie modeli kalibracyjnych jakościowo lepszych w stosunku do modeli opartych na widmach NIR, a szczególnie zysk obserwuje się dla najdrobniejszej frakcji materiału, gdzie wydajność modeli jest bardzo dobra (RER>35).

**Słowa kluczowe:** fuzarioza, odbiciowa spektroskopia dyfuzyjna, kalibracja wielowymiarowa, spektroskopia bliskiej podczerwieni (NIRS)

#### WSTĘP

Spektroskopia bliskiej podczerwieni (NIRS – Near Infrared Spectroscopy) jest metodą analizy instrumentalnej znajdującą szerokie zastosowanie także w badaniu produktów rolniczych, co wynika z faktu selektywnej absorpcji promieniowania elektromagnetycznego przez podstawowe ich składniki. Właściwości absorpcyjne substancji determinowane są przez drgania rozciągające i zginające wiązań

chemicznych, głównie pomiędzy atomami wodoru, węgla, tlenu i azotu. Stąd rejestrowane widma dostarczają informacji o molekularnych pasmach głównych grup funkcyjnych, z których składają się białka, tłuszcze czy węglowodany (Osborne i in. 1993).

Ilościowe wyznaczanie zawartości określonej substancji na podstawie widma optycznego próbki polega na wykorzystaniu matematycznego modelu zależności pomiędzy zawartościami (stężeniami) składników w poszczególnych próbkach a wartościami absorpcji promieniowania przy różnych długościach fali. Postać tej zależności wyznacza się najczęściej metodami liniowej kalibracji wielowymiarowej (Næs i in. 2002, Osborne i in. 1993, Vandeginste i in. 1997). Zastosowanie metod optycznych do wykrywania porażenia grzybami w ziarnie zbóż, w szczególności pszenicy, cieszy się dużym zainteresowaniem ponieważ pomiary optyczne, w przeciwieństwie do metod chemicznych, są łatwiejsze do wykonania, wyniki można otrzymać w krótszym czasie i mniejszym nakładem kosztów, pod warunkiem, że możliwe okaże się zbudowanie wiarygodnych modeli kalibracyjnych. W publikowanych pracach opisywano zastosowania metod optycznych do wykrywania fuzariozy w zastosowaniu do ziarna nierozdrobnionego (Pettersson i Åberg 2003), w tym także do pojedynczych ziarniaków (Delwiche i Kim 2000, Dowell i in. 2006), jak i do ziarna, które przed pomiarami rozdrabniano i przesiewano (Kos i in. 2003, Kos i in. 2004, Siuda i in. 2006). Celem pracy jest ocena przydatności spektroskopii odbiciowej do wykrywania fuzariozy w próbkach ziarna o różnym stopniu rozdrobnienia, otrzymanych przez zmieszanie w różnych proporcjach materiału kontrolnego i porażonego fuzariozą.

#### MATERIAŁ I METODY

Próbki sporządzano dla ziarna kilku odmian pszenicy ozimej (Kris z roku 2004, Turnia – 2005 oraz Satyna, Tonacja i Trend - wszystkie z roku 2006). Ziarno kontrolne pochodziło z poletek, na których pszenica rosła w warunkach naturalnych, natomiast ziarno porażone – z poletek, na których uprawy w okresie kwitnienia inokulowano zarodnikami *Fusarium culmorum*. Zarówno materiał kontrolny jak i porażony rozdrabniano albo młynkiem ZM1 (Retsch), albo (uprawy z roku 2006) młynkiem ZM 200 (Retsch). Rozdrobniony materiał przed mieszaniem próbek był przesiewany za pomocą odpowiednio dobranych sit na wytrząsarce AS 200 (Retsch). Dla odmiany Kris przygotowano próbki z najdrobniejszej frakcji materiału, o rozmiarach cząstek <0,18 mm. W takim wypadku niepożądane efekty związane z wielokrotnym rozproszeniem promieniowania w najmniejszym stopniu zaburzają widma. W przypadku pozostałych odmian jednym z celów było określenie wpływu granulacji zmielonego materiału na wyniki kalibracji. Do analizy wybrano frakcje o rozmiarach cząstek <0,180 mm (drobna) –

dla wszystkich odmian,  $>0,180$  i  $<0,25$  mm (średnia) oraz  $> 0,25$  mm (gruba) – dla odmiany Turnia,  $>0,180$  i  $<0,355$  mm (średnia) oraz  $> 0,355 < 0,7$  mm (gruba) – dla odmian Satyna, Tonacja i Trend. Liczba próbek dla danej odmiany i frakcji, zawierających mieszaninę materiału kontrolnego i porażonego o udziale zmieniającym się od 0 do 100% (wyliczanym jako stosunek masy materiału porażonego do całkowitej masy próbki), wahała się od 18 do 32.

Pomiary spektrofotometryczne wykonywano metodą rozpraszania dyfuzyjnego, rejestrując widma odbiciowe w postaci  $\log(1/R)$ , gdzie R współczynnik odbicia, w zakresie długości fali od 200 do 2500 nm, co 2 nm, za pomocą spektrofotometru Cary 5000 firmy Varian. Dla każdej próbki rejestrowano po 5 widm w dwóch położeniach kuwetki różniących się obrotem o  $90^\circ$ . Do analizy używano widma średniego z 10 widm zarejestrowanych dla każdej próbki. Dla danej odmiany i frakcji otrzymano zestaw widm, które po wstępnym przygotowaniu w celu zredukowania niepożądanych efektów fizycznych (np. poprzez ich zróżniczkowanie) (Osborne i in. 1993) posłużyły do budowy modeli kalibracyjnych.

Wszystkie operacje numeryczne wykonano w środowisku Matlab (Mathworks Inc., Natick, MA, USA), do kalibracji wielowymiarowej użyto jednego z pakietów Matlab - PLS\_Toolbox3.0 (Eigenvector Research, Inc., Wenatchee, USA).

### Model kalibracyjny i jego parametry jakości

Zagadnienie kalibracji wielowymiarowej wiąże się z dwoma macierzami danych – macierzą danych (X), której wiersze stanowią widma (wartości absorbancji w funkcji długości fali pochodzące od kolejnych próbek) oraz macierzy danych referencyjnych (Y), zawierającą w kolumnach wartości kalibrowanego parametru wyznaczonego dla tych samych próbek. W niniejszym opracowaniu występuje tylko jeden parametr (jedna kolumna w macierzy Y) - procentowa zawartość materiału porażonego w danej próbce. Podstawowe równanie liniowej kalibracji wielowymiarowej ma w takim wypadku postać

$$y = X \cdot b, \quad (1)$$

gdzie b oznacza wektor współczynników o liczbie współrzędnych odpowiadających liczbie długości fal, przy których mierzono wartości absorbancji i nazywa się modelem kalibracyjnym (Næs i in. 2002, Vandeginste i in. 1997), a macierz Y zastąpiona jest wektorem y. Zadanie kalibracji polega na wyznaczeniu współczynników b na podstawie znajomości macierzy widm oraz wektora wartości parametru kalibrowanego, co pozwala na oszacowanie wartości tego parametru dla nowych próbek na podstawie pomiarów ich widm.

Najpowszechniej stosowaną metodą kalibracji jest metoda PLS (Partial Least Squares) (Næs i in. 2002, Vandeginste i in. 1997). Metoda ta należy do tzw. me-

to globalnych, tzn. do kalibracji użyty zostaje cały rejestrowany zakres widma. Mimo że takie podejście daje więcej szukanych zmiennych niż mamy równań do dyspozycji (liczba współczynników  $b$  jest zwykle znacznie większa od liczby próbek), rozwiązanie jest możliwe ponieważ opiera się na wprowadzeniu układu kilku nowych zmiennych nazywanych ukrytymi składowymi (Latent Variables – LV). W celu zbudowania modelu kalibracyjnego jak najlepszej jakości stosuje się podział danych na zbiory: kalibracyjny – do budowy modelu, walidacyjny – do testowania modelu, testowy – do sprawdzania jakości modelu dla próbek nie używanych na etapach kalibracji i walidacji. W przypadku mało licznych zbiorów próbek nie wydziela się zbioru testowego a stosuje się tzw. walidację krzyżową, polegającą na tym, że zbiór kalibracyjny jest wykorzystywany także w walidacji. Popularną metodą walidacji krzyżowej jest metoda „leave-one-out”, polegająca na wydzieleniu po kolei jednego widma z zestawu i budowaniu modelu na pozostałych (Vandeginste i in. 1997).

Dopasowanie modelu do danych oraz błędy (niedokładności) tego dopasowania opisywane są przez parametry statystyczne, takie jak:

– współczynnik determinacji,  $R^2$

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^m (\hat{y}_i - y_i)^2}{\sum_{i=1}^m (y_i - \bar{y})^2}, \quad (1)$$

gdzie  $y_i$  – wartość referencyjna,  $\hat{y}_i$  – wartość wyliczona na podstawie modelu,  $\bar{y}$  – wartość średnia wartości referencyjnych,  $m$  – liczba próbek;

– średni błąd kwadratowy kalibracji, RMSEC (Root Mean Square Error of Calibration)

$$RMSEC = \sqrt{\frac{1}{m} \sum_{i=1}^m (y_i - \hat{y}_i)^2}, \quad (2)$$

– średni błąd kwadratowy walidacji krzyżowej RMSECV (Root Mean Square Error of Cross-Validation), liczony analogicznie jak RMSEC lecz zamiast danych ze zbioru kalibracyjnego stosuje się dane ze zbioru walidacyjnego;

– błąd zakresu, RER (Range to Error Ratio), zdefiniowany jako:

$$RER = \frac{\max(y) - \min(y)}{RMSECV}, \quad (3)$$

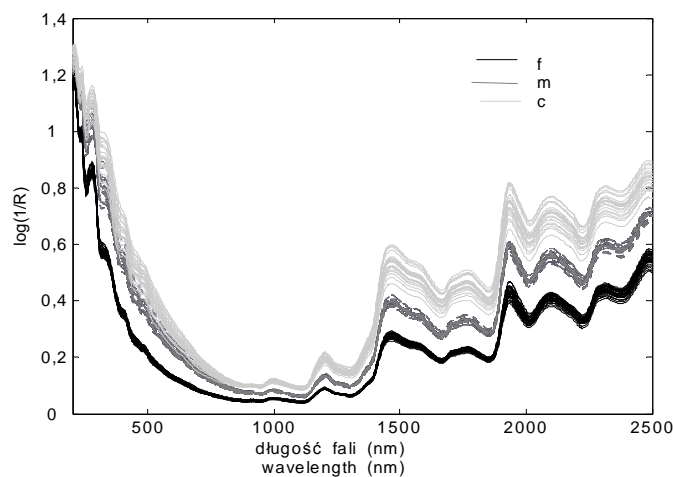
gdzie  $\max(y)$  i  $\min(y)$  oznaczają odpowiednio wartość maksymalną i minimalną wartości referencyjnych.

Wszystkie te parametry statystyczne wylicza się dla danej liczby ukrytych składowych. Wybór odpowiedniej liczby ukrytych składowych jest sprawą kluczową. Wyznaczenie tej liczby przebiega zwykle w ten sposób, że dla kilkunastu składowych (zwykle 10-20) wylicza się błąd RMSECV, i tę liczbę składowych przy której wartość RMSECV osiąga minimum lub pierwsze minimum lokalne wybiera się do kalibracji. Model jest tym lepszy im mniejszą wartość osiągają błędy RMSEC i RMSECV, wartość RER jest jak największa, a liczba ukrytych składowych jak najmniejsza. Gdy wartość RER przekracza 20 model uznaje się za dobrej jakości (Roberts i in. 2004), modele z wartością RER poniżej 10 można stosować jedynie w celach przesiewowych.

#### WYNIKI I DYSKUSJA

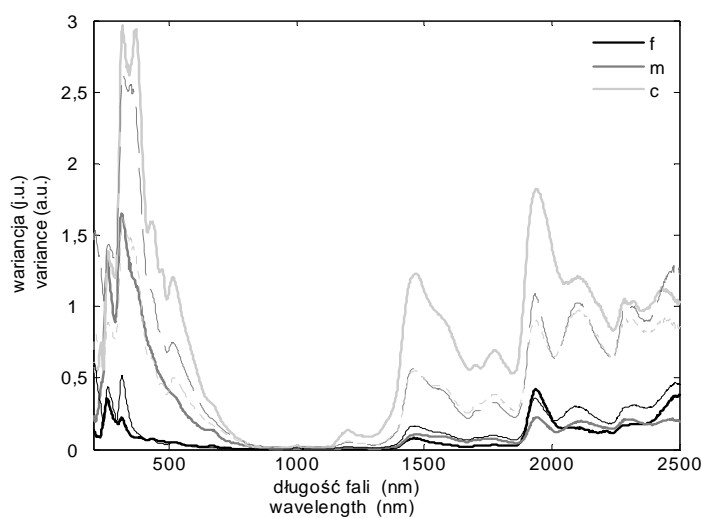
Zestaw widm odbiciowych odmiany Turnia dla trzech frakcji materiału (f – drobna, m – średnia, c – gruba) przedstawia rysunek 1. Jak wynika z rysunku, w całym mierzonym zakresie długości fal wartość absorbancji,  $\log(1/R)$ , rośnie wraz ze wzrostem rozmiaru cząstek materiału. Poza tym widma próbek najdrobniejszej frakcji ( $<0,18$  mm) wykazują największą jednorodność, natomiast próbki frakcji grubej ( $>0,25$  mm) są najbardziej zróżnicowane. Jak wiadomo z literatury, w zakresie bliskiej podczerwieni (od około 1100 nm) wartość absorbancji próbek produktów rolniczych wykazuje silną zależność od długości fali, stąd wyższe wartości absorbancji dla dłuższych fal, a efekt jest tym wyraźniejszy im większy rozmiar cząstek. Ze wzrostem rozmiaru cząstek rośnie udział efektów związanych z wielokrotnym rozpraszaniem promieniowania i stąd mniejsza wartość współczynnika odbicia.

Zróżnicowanie widm w ramach frakcji dobrze obrazuje wariancja wyliczona dla poszczególnych długości fal. Z rysunku 2, który ilustruje zmienność w widmach dwóch wybranych odmian Turnia i Trend wynika, że im grubsza frakcja tym wariancja większa. Można zauważyć, że na wartość wariancji zawartej w danym zespole widm wpływa nie tylko zróżnicowanie rozmiarów cząstek frakcji ale i inne efekty. Ponadto w zakresie bliskiej podczerwieni to zróżnicowanie ma charakter nie tylko addytywny (przesunięcie widm w poszczególnych frakcjach o stałą wartość absorbancji w stosunku do ich widma średniego), ale i multiplikatywny tzn. proporcjonalny do wartości  $\log(1/R)$ . Duża wariancja w zakresie ultrafioletu może wskazywać na przydatność tego zakresu w dalszej analizie. Dla pozostałych odmian zestawy widm wykazują podobne właściwości.



**Rys. 1.** Widma odbiciowe odmiany Turnia dla trzech frakcji rozmiarów cząstek: f – drobna, m – średnia, c – gruba

**Fig. 1.** Reflectance spectra of Turnia variety for three particle size fractions: f – fine, m – medium, c – coarse



**Rys. 2.** Zależność wariancji zawartej w zespołach mierzonych widm od długości fali. Zestawy widm rejestrowano dla 3 frakcji rozdrobnionego ziarna: f – drobna, m – średnia, c – gruba, odmiany Turnia (pogrubione krzywe) oraz Trend

**Fig. 2.** Dependence of variance within the recorded sets of spectra vs. spectral wavelength. The sets of spectra were recorded for three fractions of ground grain: f – fine, m – medium, c – coarse, of Turnia (bold line) and Trend varieties

Istnieją metody obróbki numerycznej widm redukujące niepożądane skutki efektów fizycznych związanych z wielokrotnym odbiciem promieniowania na cząstkach o zróżnicowanych rozmiarach. W przypadku widm NIR powszechnie stosowane są metody takie jak SNV (Signal Normal Variate), MSC (Multiplicative Scatter Correction) oraz jej rozszerzona wersja EMSC (Extender Multiplicative Scatter Correction) (Dhanoa i in. 1994, Næs i in. 2002, Martens i Stark 1991). Dobre efekty można również uzyskać stosując różniczkowanie widm, jednokrotne lub wielokrotne (Næs i in. 2002). Wcześniejsze wyniki otrzymane przez autorów pracy dla ziarna pszenicy odmiany Kris wskazują na szczególną przydatność różniczkowania widm (Siuda i in. 2006). W związku z tym wszystkie widma poddano jednokrotnemu różniczkowaniu z użyciem 11-punktowego filtru Savitzkiego-Golaya (Savitzky i Golay 1964).

W celu określenia jak zależą modele kalibracyjne od zakresu, w którym rejestrowano widma, z widm wybrano trzy podzakresy: UV (200 nm do 400 nm), VIS (400 nm-800 nm) i NIR (800 nm-2500 nm). Tabele 1-3 przedstawiają parametry jakości modeli kalibracyjnych otrzymanych z użyciem metody PLS dla poszczególnych odmian i frakcji. Tabele nie zawierają współczynnika determinacji ze względu na jego wysoką wartość ( $>0,9$ ).

Z tabeli 1 wynika, że w przypadku frakcji drobnej parametry statystyczne wszystkich modeli z zakresu UV wskazują na ich bardzo dobrą jakość (RER  $>27$ ). Zakres widzialny działa nieco gorzej, ale modele nadal są dobrej jakości. Z wyjątkiem odmiany Tonacja (RER ok. 16) parametr RER osiągnął wartość powyżej 20. W przypadku zakresu NIR obserwuje się zdecydowane pogorszenie jakości modeli, RER przyjmuje wartości od ok. 12 do ok. 15. W przypadku frakcji średniej (tab. 2) w obszarze UV tylko dla odmiany Turnia wartość RER przekracza 20, natomiast dla pozostałych odmian osiąga wartość od ok. 12 do 16. W dwóch przypadkach (Satyna i Trend) modele z zakresu widzialnego (RER odpowiednio ok. 18 i 16) okazały się lepsze w porównaniu do zakresu UV. Zdecydowanie niezadowolające modele uzyskano dla odmiany Tonacja w zakresach VIS i NIR, dla których RER spadł poniżej 10. Jak wynika z tabeli 3, dla frakcji grubej tylko w przypadku odmiany Turnia uzyskano model dobrej jakości (RER  $>30$ ) stosując obszar NIR.

W celu dokonania ogólnej oceny jakości uzyskanych modeli wyniki parametrów dla danej frakcji i zakresu spektralnego uśredniono dla wszystkich odmian. Wartość średnią RER przedstawia rysunek 3. W przypadku frakcji średniej i grubej ze względu na to, że próbki odmiany Turnia miały inne rozmiary cząstek niż pozostałe trzy odmiany, przedstawiono dla porównania wyniki z uwzględnieniem i bez uwzględnienia tej odmiany. Jak wynika z rysunku i tabeli 3 głównie dla frakcji grubej w zakresie NIR modele dla odmiany Turnia różnią się istotnie od pozostałych, ale nie wpływa to na ogólne sformułowanie wniosków.

Bardzo dobre modele można otrzymać dla najbardziej rozdrobionego materiału na podstawie widm z zakresu UV i VIS. Im grubsza frakcja tym bardziej

jakość modeli z zakresu UV i VIS się pogarsza. W przypadku zakresu NIR jakość modeli wydaje się być niezależna od frakcji materiału.

Przeprowadzona gdzie indziej (Siuda i in. 2006, Siuda i in.) analiza struktury widm odbiciowych w zakresie UV sugerowała znaczną przydatność tego zakresu w omawianych zastosowaniach dla odmiany Kris, Turnia i Tonacja, przynajmniej w przypadku frakcji drobnej. Powyższe wyniki uzupełnione o dwie kolejne odmiany (Satyna, Trend) oraz dwie dodatkowe frakcje materiału potwierdzają ten wynik (Siuda i in.)

**Tabela 1.** Parametry jakości modeli kalibracyjnych w trzech podzakresach widm dla frakcji drobnej. Czcionką wytłuszczoną oznaczono modele najlepsze w ramach odmiany

**Table 1.** Performance parameters of calibration models in three spectral subranges of fine fraction. Bold figures distinguish the best models within the variety

Odmiana Variety	Zakres Range	Parametry jakości modelu Performance parameters			
		RMSEC (%)	RMSECV (%)	RER	LV
Kris	<b>UV</b>	<b>0,62</b>	<b>1,62</b>	<b>51,8</b>	<b>6</b>
	VIS	0,73	2,21	38,0	6
	NIR	2,21	5,70	14,7	5
Turnia	<b>UV</b>	<b>1,77</b>	<b>2,52</b>	<b>39,7</b>	<b>4</b>
	VIS	3,86	4,30	23,3	2
	NIR	4,95	8,10	12,3	5
Satyna	<b>UV</b>	<b>1,92</b>	<b>3,62</b>	<b>27,6</b>	<b>6</b>
	VIS	3,04	3,98	25,1	3
	NIR	3,25	7,38	13,6	5
Tonacja	<b>UV</b>	<b>1,75</b>	<b>2,23</b>	<b>44,8</b>	<b>4</b>
	VIS	5,32	6,09	16,4	2
	NIR	3,47	8,29	12,1	5
Trend	<b>UV</b>	<b>1,72</b>	<b>3,11</b>	<b>32,2</b>	<b>7</b>
	VIS	2,00	3,93	25,5	7
	NIR	2,64	8,63	11,6	6

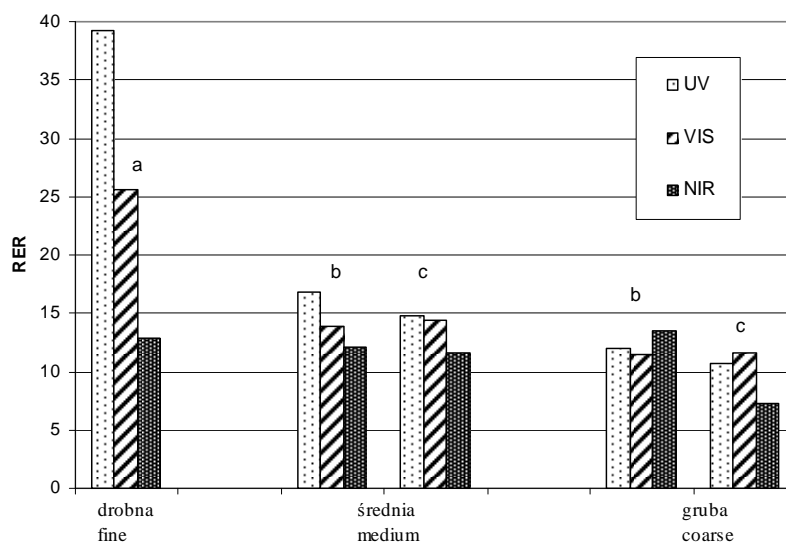


**Tabela 2.** Jak w Tabeli 1, ale dla frakcji średniej  
**Table 2.** As in Table 1 but for the medium fraction

Odmiana Variety	Zakres Range	Parametry jakości modelu – Performance parameters			
		RMSEC (%)	RMSECV (%)	RER	LV
Turnia	<b>UV</b>	<b>2,63</b>	<b>4,34</b>	<b>23,1</b>	<b>5</b>
	VIS	4,37	7,98	12,5	4
	NIR	5,45	7,44	13,4	3
Satyna	UV	4,61	6,31	15,9	5
	<b>VIS</b>	<b>4,52</b>	<b>5,48</b>	<b>18,2</b>	<b>3</b>
	NIR	3,26	7,55	13,2	5
Tonacja	<b>UV</b>	<b>4,98</b>	<b>6,11</b>	<b>16,4</b>	<b>3</b>
	VIS	5,88	10,60	9,4	7
	NIR	5,82	10,76	9,3	5
Trend	UV	6,30	8,42	11,9	4
	<b>VIS</b>	<b>3,28</b>	<b>6,42</b>	<b>15,6</b>	<b>8</b>
	NIR	3,20	8,15	12,3	6

**Tabela 3.** Jak w Tabeli 1, ale dla frakcji grubej  
**Table 3.** As in Table 1 but for the coarse fraction

Odmiana Variety	Zakres Range	Parametry jakości modelu – Performance parameters			
		RMSEC (%)	RMSECV (%)	RER	LV
Turnia	UV	3,12	6,42	15,6	7
	VIS	3,77	8,70	11,5	6
	<b>NIR</b>	<b>1,09</b>	<b>3,10</b>	<b>32,3</b>	<b>6</b>
Satyna	UV	8,18	11,27	8,9	4
	<b>VIS</b>	<b>5,02</b>	<b>6,41</b>	<b>15,6</b>	<b>4</b>
	NIR	4,43	13,41	7,5	5
Tonacja	<b>UV</b>	<b>6,65</b>	<b>8,94</b>	<b>11,2</b>	<b>4</b>
	VIS	6,84	10,44	9,6	5
	NIR	5,78	16,17	6,2	5
Trend	<b>UV</b>	<b>5,24</b>	<b>8,26</b>	<b>12,1</b>	<b>6</b>
	VIS	5,91	10,60	9,4	6
	NIR	5,42	12,60	7,9	5



**Rys. 3.** Uśredniona wartość RER w zależności od frakcji rozdrobnionego materiału w trzech analizowanych zakresach spektralnych: UV, VIS i NIR, a) dla wszystkich analizowanych odmian, b) dla odmian: Turnia, Satyna, Tonacja, Trend, c) jak w b) lecz bez odmiany Turnia  
**Fig. 3.** Mean RER values in dependence on fraction of ground grain within the recorded spectral ranges: UV, VIS and NIR a) for all analysed varieties, b) for varieties Turnia, Satyna, Tonacja, Trend, c) the same as in b) but without the Turnia variety

#### PODSUMOWANIE

Na podstawie przedstawionych wyników można sformułować następujące wnioski:

1. Im drobniejsza frakcja materiału próbek tym lepsze modele kalibracyjne.
2. Zakres UV daje lepsze wyniki kalibracji w stosunku do zakresu VIS, szczególnie zysk jest widoczny w stosunku do obszaru NIR.
3. Kalibracja w zakresie UV i dla drobnej frakcji pozwala na zbudowanie modeli bardzo dobrej jakości ( $RER > 35$ ).

#### PIŚMIENNICTWO

- Delwiche S. R., Kim M.S., 2000. Hyperspectral imaging for detection of scab in wheat. Proc. SPIE 4203, 13-20.
- Dhanoa M.S., Lister S.J., Sanderson R., Barnes R.J., 1994. The link between Multiplicative Scatter Correction (MSC) and Standard Normal Variate (SNV) transformations of NIR spectra. J. Near Infra. Spectr. 2, 43-47.

- Dowell F.E., Maghirang E.B., Graybosch R.A., Baenziger P.S., Baltensperger D.D., Hansen L.E., 2006. An automated near-infrared system for selecting individual kernels based on specific quality characteristics. *Cereal Chemistry*, 83, 537-543.
- Kos G., Lohninger H., Krska R., 2003. Development of a method for determination of *Fusarium* fungi on corn using mid-infrared spectroscopy with attenuated total reflection and chemometrics. *Anal. Chem.*, 75, 1211-1217.
- Kos G., Lohninger H., Krska R., 2004. A comparative study of mid-infrared diffuse reflection (DR) and attenuated total reflection (ATR) spectroscopy for the detection of fungal infection on RWA2-corn. *Anal. Bioanal. Chem.*, 378, 159-166.
- Martens H., Stark E., 1991. Extended multiplicative signal correction and spectral interference subtraction: new pre-processing methods for near infrared spectroscopy. *J. Pharm. Biomed. Anal.*, 9, 625-635.
- Næs T., Isaksson T., Fearn T., Davies T., 2002. A user-friendly guide to Multivariate Calibration and Classification. NIR Publications, Chichester, UK.
- Osborne B.G., Fearn T., Hindle P.H., 1993. *Practical NIR Spectroscopy with Applications in Food and Beverage Analysis*. Longman Group UK Ltd., 2<sup>nd</sup> ed.
- Pettersson H., Åberg L., 2003. Near infrared spectroscopy for determination of mycotoxins in cereals. *Food Control* 14, 229-232.
- Roberts C.A., Workman J.Jr., Reeves III J.B., 2004. *Near-Infrared Spectroscopy in Agriculture*. American Society of Agronomy, Inc., Crop Science Society of America, Inc., Soil Science Society of America, Inc., Madison, Wisconsin, USA.
- Savitzky A., Golay M.J.E., 1964. Smoothing and differentiation of data by simplified least squares procedures. *Anal. Chem.* 36, 1627-1639.
- Siuda R., Balcerowska G., Kupcewicz B., Lenc L.. A modified approach to evaluation of DON content in scab damaged ground wheat by use of diffuse reflectance spectroscopy. *Food Analytical Methods*, przesłane do publikacji.
- Siuda R., Balcerowska G., Sadowski Cz., 2006. Comparison of the usability of different spectral ranges within the near ultraviolet, visible and near infrared ranges (UV-VIS-NIR) region for the determination of the content of scab-damaged component in blended samples of ground wheat. *Food Add. Contam.*, 23, 1201-07.
- Vandeginste B. G. M., Massart D. L., Buydens L. M. C., de Jong S., Lewi P.J., Smeyers-Verbeke J., 1997. *Handbook of Chemometrics and Qualimetrics: Part B*. Elsevier, Amsterdam Lausanne New York Oxford Shannon Singapore Tokyo.

MODELLING OF CONTENT OF FUSARIUM INFESTED MATERIAL  
IN GROUND WHEAT BASED ON OPTICAL SPECTRA RECORDED  
IN DIFFERENT WAVELENGTH RANGES

*Grażyna Balcerowska<sup>1</sup>, Ryszard Siuda<sup>1</sup>, Czesław Sadowski<sup>2</sup>*

<sup>1</sup>Institute of Mathematics and Physics, University of Technology and Life Sciences  
ul. Kaliskiego 7, 85-796 Bydgoszcz  
e-mail: gbalcer@utp.edu.pl

<sup>2</sup>Faculty of Phytopathology, University of Technology and Life Sciences  
ul. Kordeckiego 20, 85-255 Bydgoszcz

**Abstract.** The paper presents application of diffuse reflectance spectroscopy for detection of fusariosis in ground grain of several winter wheat cultivars. Spectral measurements were made for series of samples of different particle sizes (three fractions: particle size <0.18 mm, >0.18 mm and <0.25 mm or 0.355 mm, >0.25 mm or 0.355 mm) in a wide spectral range from 200 nm to 2500 nm. Calibration models were built using the PLS method for three sub-ranges: UV (200-400 nm), VIS (400-800nm) and NIR (800-2500 nm). The study demonstrates that ultra-violet reflectance spectroscopy in several cases has greater potential for prediction of infested material content than the most common NIRS. A special gain is observed for the finest fraction, where the efficiency of the models is very good (RER>35).

**Keywords:** fusariosis (FHB – Fusarium head blight), diffuse reflectance spectroscopy, multivariate calibration, Near Infrared Spectroscopy (NIRS)