

DIPLOMADOLGOZAT

Krassóné Józsa Ildikó

2024



Magyar Agrár- és Élettudományi Egyetem

Budai Campus

Élelmiszertudományi és Technológiai Intézet

Élelmiszermérnök mesterképzési szak

**Szójaliszt minták fehérje és zsír tartalmának meghatározása közeli
infravörös spektroszkópiával**

Belső konzulens:	Dr. Kovács Zoltán, Lukács Mátyás Krisztián Tudománystratégiai Rectori Megbízott, Nemzetközi ügyekért felelős intézeti tanácsadó, egyetemi tanár, doktorandusz hallgató
Belső konzulens intézete/tanszéke:	Élelmiszertudományi és Technológiai Intézet / Élelmiszeripari Méréstechnika és Automatizálás Tanszék
Külső konzulens:	- -
Készítette:	Krassóné Józsa Ildikó

2024

TARTALOMJEGYZÉK

1. BEVEZETÉS ÉS CÉLKITŰZÉS	2
2. IRODALMI ÁTTEKINTÉS	3
2.1. SZÓJABAB TERMESZTÉSÉNEK ÉS FELHASZNÁLÁSÁNAK ÁLTALÁNOS ISMERTETÉSE.....	3
2.2. A SZÓJALISZT KÉSZÍTÉSE ÉS FELHASZNÁLÁSÁNAK LEHETŐSÉGEI	5
2.3. ÉLELMISZEREK FEHÉRJETARTALMÁNAK VIZSGÁLATI MÓDSZEREI	6
2.4. ÉLELMISZEREK ZSÍRTARTALMÁNAK VIZSGÁLATI MÓDSZEREI.....	7
2.5. KÖZELI INFRAVÖRÖS SPEKTROSKÓPIA JELLEMZÉSE	8
3. ANYAG ÉS MÓDSZER.....	10
3.1. A VIZSGÁLATHOZ FELHASZNÁLT ANYAGOK.....	11
3.2. AZ ADATELEMZÉSHEZ HASZNÁLT MÓDSZEREK.....	17
4. EREDMÉNYEK ÉS ÉRTÉKELÉS	18
4.1. A VIZSGÁLT SZÓJALISZT KEVERÉKEK NIR SPEKTRUMAINAK ÉRTÉKELÉSE	18
4.2. A VIZSGÁLT SZÓJALISZTKEVERÉKEK NIR SPEKTRUMAIN SZÁMÍTOTT FŐKOMPONENS ELEMZÉS EREDMÉNYEI.....	22
4.3. A VIZSGÁLT SZÓJALISZTKEVERÉKEK NIR SPEKTRUMAI ALAPJÁN ÉPÍTETT FEHÉRJE ÉS ZSÍR BECSLŐ REGRESSZIÓS MODELLEK EREDMÉNYEI	25
4.3.1 REGRESSZIÓS EREDMÉNYEK AZ ASZTALI KÉSZÜLÉKKEL.....	25
4.3.2. REGRESSZIÓS EREDMÉNYEK A KÉZI KÉSZÜLÉKKEL	27
4.4. FÜGGETLEN BECSLÉS A KÉT KÉSZÜLÉK ADATAIBÓL FEHÉRJE ÉS ZSÍRTARTALOMRA ...	30
5. KÖVETKEZTETÉSEK ÉS JAVASLATOK.....	32
6. ÖSSZEFOGLALÁS	34
7. IRODALOMJEGYZÉK	35
8. TÁBLÁZATOK ÉS ÁBRÁK JEGYZÉKE.....	40

1. BEVEZETÉS ÉS CÉLKITŰZÉS

A szójabab [*Glycine max* (L.) Merrill, Leguminosae család, Papilionoidae alcsalád] napjainkban az egyik legnépszerűbb élelmiszeripari növény, a földön az öt legfontosabb vetett növény között van (Lévay, 2023, Berk, 1992). Bár a növényt Kínában termesztették először az adatok szerint, ma már a világ minden táján termesztik, olaj vagy fehérjetartalmáért (Berk, 1992). A szója esszenciális és nem-esszenciális aminosavakat is tartalmaz, az esszenciális aminosavak közül egyedül a metionin tartalma alacsonyabb, mint a WHO/FAO/UNU (WHO, 2007) által felnőttek számára javasolt beviteli szükséglet (Grossien és Witard, 2018).

A szójababból élelmiszeripari termékek széles skálája állítható elő, a melléktermékként keletkező termékek felhasználásának is széles a skálája, állati takarmányként, ipari célokra használják, vagy szennyvízként kerül a vizekbe és a talajba.

A szójaliszt a szójaolaj gyártásánál a szójabab feldolgozása során keletkező melléktermék, amelynek magas a fehérje- és szénhidrát tartalma, emellett nyomelemeket és ásványi anyagokat is tartalmaz. A szójaliszt felhasználási területeit nézve széles a spektrum, például állati takarmányozás, vagy ipari felhasználás. Az ipari felhasználás egyik módja a fermentáció. A szójaliszt a fermentációs iparban gyakran használt nitrogénforrás.

Antibiotikum gyártásnál komplex nitrogénforrások használata általános gyakorlat. Úgy gondolják, hogy elősegítik a fiziológias állapot létrehozását a tropofázisban, ami elősegíti az antibiotikum termelést az idiofázisban (Martin and McDaniel, 1977). Polién antibiotikumok (pl.: Amphotericin B, Nystatin) gyártásánál jó választásnak bizonyult a szójaliszt, a kiegyensúlyozott tápanyagtartalma, az alacsony foszfortartalma és a lassú hidrolízise miatt (Stanbury, Whitaker, Hall, 1995).

Vállalatunknál évtizedek óta folyik antibiotikumok gyártása biológiai fermentációval. Néhány antibiotikum fermentációja során a táptalajhoz felhasznált alapanyagok között megtalálható a szójaliszt. Jelenleg a beérkezett szójaliszt alapanyag vizsgálata hagyományos módszerekkel történik, amelyek sokszor idő-, vegyszer- és munkaerőigényesek, és az alapanyagminták roncsolásával jár.

A diplomamunka célja, a vállalathoz beérkezett fermentációs alapanyagként használt szójaliszt fehérjetartalmának és zsírtartalmának roncsolásmentes, gyors és pontos meghatározása közeli infravörös spektroszkópiával. A mérések kézi és asztali készülékkel lettek elvégezve, annak érdekében, hogy a kapott eredmények összehasonlíthatóak legyenek, és a kézi készülékkel akár helyben, mintavétel nélkül, zsákon keresztül meghatározható legyen a szójaliszt fehérje- és zsírtartalma.

2. IRODALMI ÁTTEKINTÉS

Az irodalmi áttekintés során először a szójabab és termesztésének, felhasználásának általános ismertetése a cél, utána a szójababból a szójaliszt előállításának és felhasználásának lehetőségei kerülnek bemutatásra, azután az élelmiszerek fehérjetartalmának vizsgálati módszereinek ismertetése következik, kiemelten a közeli infravörös spektroszkópiára (NIR) fókuszálva.

2.1. Szójabab termesztésének és felhasználásának általános ismertetése

A szójabab [*Glycine max* (L.) Merrill, Leguminosae család, Papilionoidae alcsalád] napjainkban az egyik legnépszerűbb élelmiszeripari növény, a földön az öt legfontosabb vetett növény között van (Lévay, 2023, Berk, 1992). Bár a növényt Kínában termesztették először az adatok szerint, ma már a világ minden táján termesztik, olaj vagy fehérjetartalmáért (Berk, 1992).

Kínában már a XV. században is termesztették, de a XIX. századtól már az USA-ban is ipari méretekben kezdték feldolgozni. A szójabab növényi fehérjeforrás (34-52%), aminek olaj-tartalma 17-27%. Esszenciális zsírsav forrás, és tokoferol-tartalma magasabb, mint a napraforgóé vagy a repcéé. Kiváló szterinforrás (1800-4500 mg/kg). Legjelentősebb termőterületek: USA, Brazília, Argentína, Kína, és India. (Cossuta, 2022)

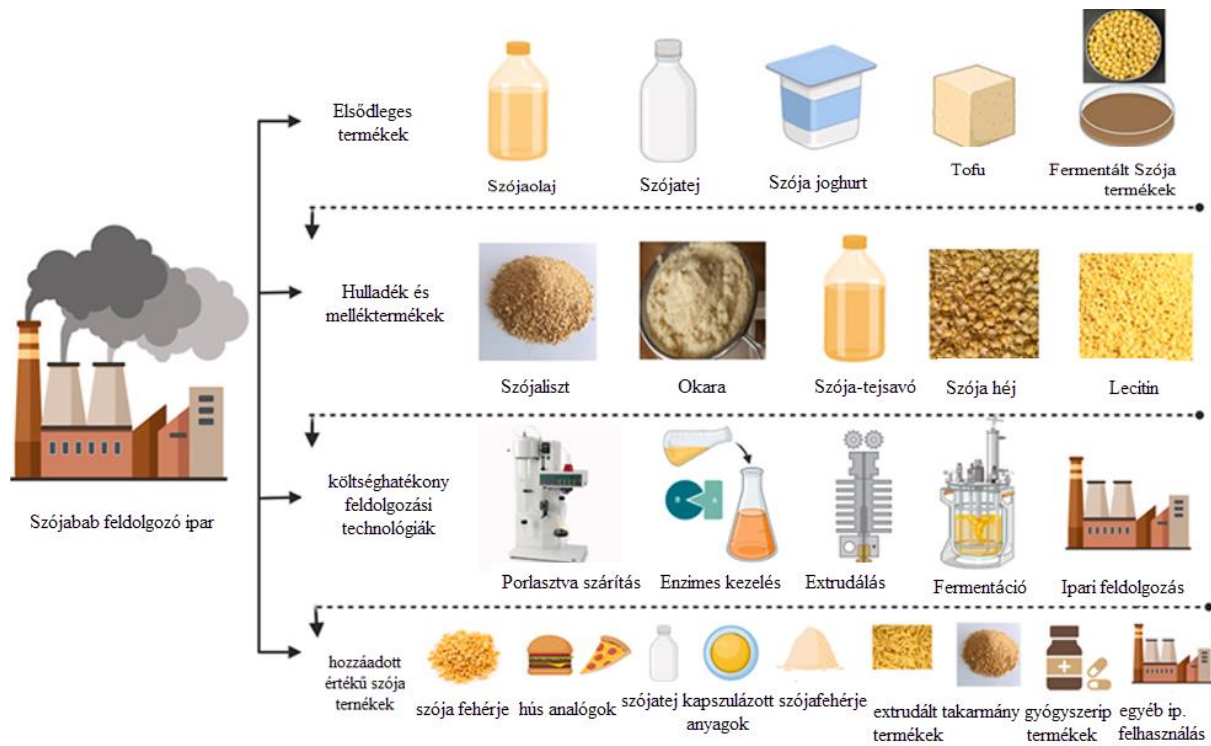
Magyarországon 1873 óta folyik a termesztése, kisebb-nagyobb mennyiségekben. Termesztése során a hő- és csapadékgigény kielégítése mellett a talaj nitrogén és mikroelem tartalmára is ügyelni kell, hogy a termés megfelelő tápanyagtartalommal rendelkezzen. A szójafehérje aminosav összetétele teljesnek tekinthető, mivel az esszenciális aminosavak megtalálhatóak benne (Lévay, 2023). A szója esszenciális és nem-esszenciális aminosavakat is tartalmaz, az esszenciális aminosavak közül egyedül a metionin tartalma alacsonyabb, mint a WHO/FAO/UNU (WHO, 2007) által felnőttek számára javasolt beviteli szükséglet (Grossien és Witard, 2018).

A szójababból élelmiszeripari termékek széles skálája állítható elő, a melléktermékként keletkező termékek felhasználásának is széles a skálája, állati takarmányként, ipari célokra használják, vagy szennyvízként kerül a vizekbe és a talajba.

Az 1. ábra a szójabab feldolgozásának termékeit és a keletkező melléktermékeket, valamint költséghatékony feldolgozási technológiákat és a hozzáadott értékű termékeket mutatja be (P. Singh, K. Krishnaswamy, 2022).

1. ábra: Szójabab feldolgozásának fő- és melléktermékei, költséghatékony feldolgozási technológiák és hozzáadott értékű termékek

Forrás: https://ars.els-cdn.com/content/image/1-s2.0-S092422442200365X-ga1_lrg.jpg



Az 1. ábráról leolvasható, hogy a szójababból gyártott fő termékek a szójaolaj, szójatej, joghurt, tofu és fermentált termékek. A főbb melléktermékek a szójaliszt, szója tejsavó, lecitin, szójabab héj, okara.

Mivel a fehérje az egyik legalapvetőbb szükséglete testünknek, a megfelelő mennyiségű és minőségű fehérje bevitel az egészségünk egyik alapfeltétele. A fehérjék bevitelének nagy részét jelenleg a húsból fedezzük, és csak kisebb részét visszük be növényi alapú táplálkozással. A növényi fehérjék a fehérjebevitel mellett számos pozitív hatással rendelkezhetnek az egészségünkre nézve, például vérnyomás- és koleszterincsökkentő, vagy antioxidáns hatást is kimutattak labor körülmények között. Ezeknek a hatásoknak az igazolásához azonban további vizsgálatokra van szükség (Marventano et al., 2017).

A szójabab feldolgozása során előkezelés (tisztítás, héjtalanítás, kondicionálás, forralás vagy pörkölés) után mechanikai úton, vagy extrakcióval nyerik ki az olajat. A szójaolaj gyártásánál szélesebb körben használják az extrakciót. A folyamat eredménye a nyers szójaolaj és a zsírtalanított pehely (Banaszkiewicz, 2011)

2.2. A szójaliszt készítése és felhasználásának lehetőségei

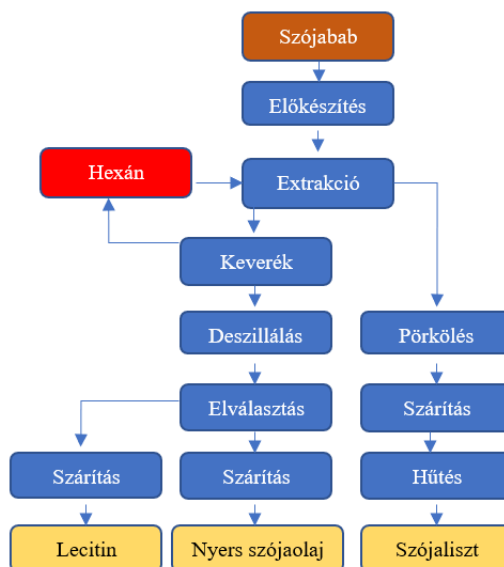
A szójabab feldolgozása során, szójaolaj készítésekor a szójaolaj és a keletkező szójadara aránya kb. 20-80%.

A szójaliszt a szójaolaj gyártásánál a szójabab feldolgozása során keletkező melléktermék, amelynek magas a fehérje- és szénhidrát tartalma, emellett nyomelemeket és ásványi anyagokat is tartalmaz.

A szójabab egyik feldolgozási technológiáját a 2. ábra mutatja be, ahol a szójababból oldószeres extrakcióval nyerik ki a szójaolajat, melléktermékként pedig szójalecitin és szójaliszt keletkezik. A szójalisztet az extrakció után pörköléssel, szárítással és hűtéssel állítják elő.

2. ábra: Szójaliszt feldolgozás sematikus ábrája

Forrás: (PDF) Prevention of. (researchgate.net)



A szójaliszt felhasználási területeit nézve széles a spektrum, például állati takarmányozás, vagy ipari felhasználás. A szójaliszt kémiai összetételét, fehérje tartalmát és a fehérje hasznosulásának és metabolizálható energiatartalmát vizsgálva csirkéken arra a következtetésre jutottak, hogy a szójaliszt származási helyétől függően (USA, Brazília, Argentína) változik a szójaliszt kémiai összetétele, a fehérje minőségi indikátorai és a tápanyag tartalma (Aguirre et al., 2022).

A szójaliszt takarmányozási tápértékét növelni lehet mikrobiológiai fermentációval. Probiotikus mikroorganizmusok használatával a fermentált szójaliszt tápértéke növekedik a

nem fermentált szójaliszthez képest. Emellett a hidrolízis mértéke is növekedik, és csökken az ureáz aktivitás is. A fermentációs folyamatban részt vevő mikroorganizmusok képessége, hogy növeljék a szójaliszt fehérje-, esszenciális aminosav-, makro- és mikroelem tartalmát, emellett csökkentik az antinutritív tényezőket, ami előre jelzi, hogy ez a technológia felhasználható az állattenyésztés fejlesztésében (Sukhikh et al., 2022).

Az ipari felhasználás egyik módja a fermentáció. A szójaliszt a fermentációs iparban gyakran használt nitrogénforrás. Fementációs inokulum táptalajoknál, néhány egyszerű sóval kiegészítve hatékony táplevest alkot az tenyészet gyors növekedéséhez (Fekete-Karaffa, 2013).

Antibiotikum gyártásnál komplex nitrogénforrások használata általános gyakorlat. Úgy gondolják, hogy elősegítik a fiziológiás állapot létrehozását a trofofázisban, ami elősegíti az antibiotikum termelést az idiofázisban (Martin és McDaniel, 1977). Polién antibiotikumok (pl.: Amphotericin B, Nystatin) gyártásánál jó választásnak bizonyult a szójaliszt, a kiegyensúlyozott tápanyagtartalma, az alacsony foszfortartalma és a lassú hidrolízise miatt (Stanbury, Whitaker, Hall, 1995).

2.3. Élelmiszerek fehérjetartalmának vizsgálati módszerei

Többféle módszerrel lehet meghatározni az élelmiszeripari termékek fehérje- vagy nitrogéntartalmát, amelyből meghatározható a fehérjetartalom. Az alábbiakban háromféle módszer elvét mutatom be, de a három módszer közül a NIR spektroszkópiával foglalkozom részletesen (2.5. pont).

A Dumas módszert napjainkban a nitrogén kvantitatív meghatározására használják, bár eredetileg ismeretlen gázok molekulatömegének meghatározására lett kifejlesztve (Jiménez and Ladha, 1993).

A módszer lényege, hogy ismert tömegű mintát oxigén jelenlétében elégetnek, rézzel megkötik a keletkező gázokat, majd víztelenítik, miközben a szén-dioxidot megkötik, végül a nitrogén mennyiségét univerzális detektorral meghatározzák. Ezzel szemben a Kjeldahl módszer kénsavas forralással alakítja át a szerves nitrogént ammónia nitrogénné. A felszabaduló nitrogént desztillálják, összegyűjtik, majd titrálás után a nyersfehérje tartalmat kiszámolják. A Dumas módszer az utóbbi időkben lett egyre elterjedtebb a fehérje vizsgálatok terén szemben a Kjeldahl módszerrel – köszönhetően az égetéses nitrogén analízis fejlődésének, – annak ellenére, hogy a módszert több, mint 50 évvel a Kjeldahl módszer előtt Jean-Baptiste Dumas már bemutatta (Kjeldahl, 1883, Serrano et al., 2013).

A hagyományos módszereknél a mérési idő akár 3 óráig is eltarthat, a mintákat magas hőmérsékleten kell kezelni, a Kjeldahl módszer esetében pedig erős savat (kénsav) is kell a mintához adni. Ezeknek a módszereknek a kivitelezése az egészségre és a környezetre is veszélyes. A fentiekben látható, hogy a fent jellemzett két technológia költséges és időigényes, és csak a minták roncsolásával végezhető el. A Kjeldahl módszerrel csak szerves és ammónium formában jelenlévő nitrogéntartalom mérhető. Mindkét módszer (Kjeldahl és Dumas) csak a nitrogéntartalmat képes mérni, így nem tesz különbséget a fehérje és nem fehérje eredetű nitrogéntartalom között. Ezekkel a hagyományos módszerekkel nem tartható fel, ha a mért mintában nitrogéntartalmú hamisítóanyag található.

A szójabab vagy szójalisztben található fehérjék mérhetőek egyéb, modernebb módszerekkel is, például folyadékkromatográfiával (HPLC) vagy gázkromatográfiával (GC), infravörös (IR), vagy közeli infravörös spektroszkópiával (NIR). Oomah és társai (1994) HPLC-vel vizsgálták szójababot, aminek az elválasztása és érzékenysége megfelelőnek bizonyult a fehérjék azonosítására. A gázkromatográfiát például fehérjék szagprofiljának elemzésére is használják (Singh et al., 2021). Azonban a felsorolt módszerek közül a legkevesebb mintaelőkészítést és legrövidebb mérési időt igénylő módszer a közeli infravörös spektroszkópia (NIR), amely a dolgozat mintáinak a mérésére is használtam. A NIR módszert részletesen a 2.5. fejezet tárgyalja.

2.4. Élelmiszerek zsírtartalmának vizsgálati módszerei

A Soxhlet extrakció, egy szilárd-folyadék extrakció, amelyhez Franz Ritter Von Soxhlet német mezőgazdász vegyész 1879-ben mutatta be először Soxhlet laboratóriumi extraktorát, amelyet tejzsír meghatározásához használt (Jensen, 2007). A Soxhlet extrakció az egyik legnépszerűbb technika analitok kinyerésére szilárd anyagokból. Az 1879-es felfedezése óta napjainkig a legtöbb analitikai laboratóriumban rutinszerűen használják. Napjainkig is a Soxhlet extrakció a sztenderd, amihez a modern extrakciós technikák teljesítményét mérik (A. Zyglér, et al., 2012). A folyamat lényege, hogy az extrahálandó mintát egy feltétbe helyezik, majd az extrahálószer egy lombikból elpárologtatják, amely lekondenzálva átfolyik a szilárd anyagon, amelyből kioldja a kívánt komponenst, a nem kívánt komponenseket pedig nem. Az extrakció addig folytatódik, amíg elfogy a tiszta oldószer. Ezután az oldószer elpárologtatják (visszanyerik, így a következő mérésnél felhasználható), és a kicsapódó kívánt komponenst tömegállandóságig szárítják. A mérés hátránya, hogy hosszú ideig tart, és a minta roncsolásával jár.

Precízebb analitikai módszereket, többek között gázkromatográfiás (GC) méréseket sikerrel alkalmaznak, például a szója földrajzi eredetének meghatározására, zsírsavösszetétel alapján (Soni et al., 2023). A GC analízis mellett, olcsóbb és költséghatékonyabb mérési módszer a közeli infravörös spektroszkópia (NIR), amely a szója zsírsavösszetételének gyors meghatározására is alkalmazható (Kran et al., 2017).

2.5. Közeli infravörös spektroszkópia jellemzése

Napjaink gyorsan fejlődő technikája lehetővé teszi a roncsolásmentes, gyors mérési módszerek elterjedését, melyek ipari alkalmazása is egyre gyakoribb, és a vizsgált termékben az esetlegesen jelenlévő hamisítóanyagokat is képesek kimutatni. Az élelmiszer összetevők nagy részének van abszorpciós csúcsa a 800-2500nm-es közeli infravörös tartományban, ezért ez a tartomány különösen alkalmas az élelmiszerek összetételének megbecslésére. A NIR spektroszkópia egy olyan másodlagos analitikai módszer, amely képes kvantitatív becslést adni a komponensek koncentrációjáról a NIR abszorpciós jellemzők alapján (Ingle et al., 2016)

A NIR spektroszkópiás mérések Lambert és Beer törvényén alapulnak, és a mennyiségi mérések gyorsan és könnyen elvégezhetőek. A NIR-t sokféle élelmiszeripari alkalmazásban használják. Általános alkalmazása az élelmiszeripar minden szektorában fellelhető, ide tartoznak például a hús-, gabona és tejtermékek (Shadow, 1998).

Az abszorpciós sávok a NIR régióban elsősorban felharmonikusok, ezért az elnyelés intenzitás általában gyenge. Mindazonáltal, ez a módszer előnye, mivel azoknak az abszorpciós kötéseknek, amelyeknek megfelelő intenzitása van a NIR tartományban olyan funkcionális csoportok, ahol a hidrogén atom szén, nitrogén vagy oxigén atomhoz kapcsolódik, amelyek gyakoriak az élelmiszerek fő összetevőiben, mint a fehérjék, zsírok, víz, vagy szénhidrátok. Ami a szója és más egészséges élelmiszer összetételi tartományát illeti, minél szélesebb az összetételi tartomány, vélhetően annál pontosabb a kalibráció (C. Baianu et al, 2011). Ezt a megállapítást a dolgozat mintáinak előkészítése és mérése során is alkalmaztam.

A NIR spektroszkópiát széleskörűen használják tejkészítmények jellemzőinek vizsgálatára (pl.: fehérje, zsír) (Etzion et al, 2004, Kawasaki et al, 2008).

Ingle és társai (2016) fehérjeporok fehérjetartalmának vizsgálata során NIRS és Dumas módszer hatékonyságát vetették össze. A vizsgálatok során kézi berendezést használtak, melynek előnye, hogy közvetlenül a mintába helyezhető, így a mérés egyszerűen és gyorsan

elvégezhető. A tanulmány során megállapították, hogy a gyors NIR módszer pontossága összehasonlítható a Dumas módszerrel, és számos előnnyel rendelkezik, mint például a gyorsasága, költséghatékonysága, könnyű kezelhetősége (a technikusok egy alapoktatás után is megtanulják kezelni).

Az elmúlt időben a kézi NIR berendezések egyre jobban elterjedtek. Annak ellenére, hogy a kézi készülékek nem használják a teljes NIR tartományt, csak egy részét, általában az is elegendő különböző élelmiszer-komponensek kimutatásához. Bázár és társai (2016) 900-1700 nm közötti tartományban vizsgáltak többek között kukoricakeményítőt és teljes tejport különböző koncentrációban tartalmazó keverékeket kézi berendezéssel. A becslési modellek pontosan illeszkedtek ezekben az esetekben ($R^2 > 0.952$), ez is bizonyítja, hogy a kézi készülék is alkalmas lehet élelmiszerek komponenseinek pontos kimutatására.

A minőségi és biztonsági ellenőrzés az iparban elengedhetetlen, hogy a termékek magas biztonsága megfeleljen a törvényi és a vásárlói elvárásoknak. A roncsolásmentes, alacsony költségű és felhasználóbarát rutin vizsgálati technikák - amelyeket akár az operátorok, mint végfelhasználók is elvégezhetnek, - iránti kereslet növekszik. Az elmúlt években az érzékelési technológiák fejlődése és előrelépése segítségével a közeli infravörös (NIR) spektrométerek miniatürizálása egy új korszakba lépett. A miniatürizált NIR készülékek új generációja kompakt készülék, amely kicsi és könnyű, amelyek képesek elvégezni helyben (az üzemben vagy a farmon) a termékek vizsgálatát. A hagyományos kémiai mérésekkel összehasonlítva a rutin kémiai összetétel vizsgálatoknál, a NIRS előnyei közé sorolható a gyors és roncsolásmentes mintelőkészítés, a minimális mintaelőkészítés, a vegyszermentesség és a kevesebb munkaerőigény (Pu et al, 2021).

A közeli infravörös spektroszkópia roncsolásmentes technika, amely sikerrel alkalmazható élelmiszerek zsírtartalom meghatározásához is. Chiaohwei és társai (2018) olívaolaj zsír tartalmának mérési eredményeit hasonlították össze Soxhlet és NIR módszerekkel mérve, és a két mérés korrelációs koefficiense 0.995 lett.

Zaukuu és társai (2020) asztali és kézi NIRS készülékkel vizsgálták tejsavófehérje porban karbamid, glicin, taurin és melamin jelenlétét. Emellett a kézi készülék használatakor összehasonlították a mérési eredményeket optikai üvegen és polietlén (LDPE) zsákon keresztül mérve a mintákat. Bár mind a polietilénzsákon keresztül, mind az üvegküvetttával kézi eszközzel végzett mérések megfelelőek a nitrogénben gazdag hamisítóanyagok azonosítására, a 0,5 m/m% hamisítóanyagot tartalmazó mintáknál még vannak kihívások.

Egy másik tanulmányban 3 asztali és 1 kézi NIRS készülék méréseit hasonlították össze, tejsavó, borjú, és borsó fehérjéhez keverték hamisítószerket. A kézi készülékkel történt

méréseknél itt is használtak üveg küvettát és polietilén zsákokat. Ezeknél a méréseknél a mérési eredmények pontosabbak voltak a PE zsákokon keresztül mérve, mint a küvettákkal (Lukács et al, 2024).

A kézi NIRS készülékeket széles körben alkalmazzák az élelmiszeripari minőségbiztosításban (Rukundo et al, 2020, Limm et al, 2018, Eliaerts et al, 2019). Ezek a közlemények a hordozhatóság és a helyszíni mérések előnyeit mutatják be, de fontos figyelembe venni a főbb hiányosságokat, mint például a standard küvetták vagy mintatartók elérhetősége, illetve azok hiánya, amikor folyékony vagy por mintákat kell mérni. A mintatartók külső vagy belső tulajdonságai befolyásolhatják a NIRS méréseknél kapott spektrális tulajdonságokat. A mintatartó ebben az esetben bármilyen tárgy, ami tartja vagy tárolja a mintát a mérés során (Zaukuu et al., 2020). Az irodalomban sokféle mintatartó megtalálható az üveg küvettától (Grassi et al., 2014), a műanyag küvettákon keresztül a kvarcig (Karunathilaka et al. 2018, Bázár et al. 2010).

A minták mérésének során az asztali készülékkel szemben a kézi készüléknél nagyon fontos a készülék pozicionálása, hogy jól feküdjön fel a PE zsákban lévő mintára, így a mérés pontossága is javítható. Bár a NIR-t nagyon sokféle élelmiszeripari alkalmazásban használják, kézi és asztali készülékkel vizsgált szójalisztek tápanyagtartalmának meghatározásáról legjobb tudásom szerint nincs elérhető feljegyzés.

Vállalatunknál jelenleg a hagyományos módszerekkel történik a szójaliszt fehérje- és zsírtartalom meghatározása. Az alapanyagok minősítése során cél, hogy gyors, költséghatékony és kevesebb munkaerőigénnyel járó mérési módszerek kerüljenek gyakorlatba. Ezért diplomamunkám céljául tűztem ki, hogy a NIR készülékek használatával a fenti előnyöket kihasználva, a vállalat által adaptálható, megbízható mérési módszert találjak.

3. ANYAG ÉS MÓDSZER

Ezt a részt két fő pont szerint ismertetem. Az első részben a felhasznált anyagokat és a használt készülékeket ismertetem, a második részben a kiértékeléshez használt statisztikai módszereket taglalom.

3.1.A vizsgálathoz felhasznált anyagok

Vállalatunk fermentációs alapanyagként használja a szójalisztet, amelyek különböző forrásokból, minősített gyártó és beszállító által kerülnek megvásárlásra. A vállalat által vásárolt szójalisztek Kínából, Észak-Amerikából, Európából vagy Indiából származnak, az egyes tételek pontos termesztési helye nem ismert, de a beszállító által garantált a fent felsorolt származási hely. Mivel a vállalati minták fehérje és zsírtartalma szűk tartományon belül mozog (52,6 – 55%, 0,9 – 1,5%), a második mintasor elkészítésének a célja a fehérje és zsírtartalom tartományok kiszélesítése a külső mintákkal. A tartományszélesítéshez használt étkezési szójaliszt és szójafehérje izolátum a Dénes Natúra Kft. által forgalmazott termékek. A Dénes Natúra Kft.-től vásárolt termékek származási helye Kína.

A vállalathoz beérkezett alapanyagok (továbbiakban: vállalati minták) és a Dénes Natúra Kft.-től (továbbiakban: külső minták) vásárolt minták (sojaliszt és sojafehérje) fehérje- és zsírtartalma a gyártói bizonylatokról az 1. táblázatban található.

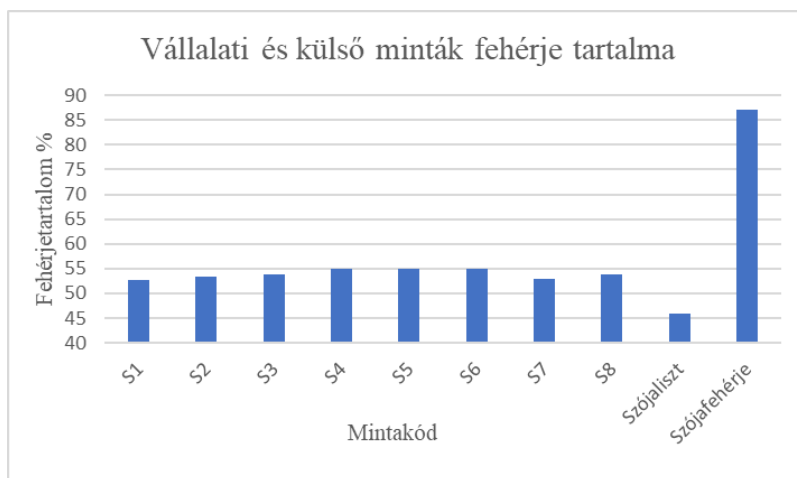
1. táblázat: A vállalati és külső minták fehérje- és zsírtartalma
Forrás: saját táblázat

Minta kód	Vállalati minták (%)								Külső minták (g/100g)	
	S1	S2	S3	S4	S5	S6	S7	S8	Szója-liszt	Szója-fehérje
Fehérje	52,6	53,4	53,9	55	55	55	53	53,9	46	87
Zsír*	0,9	1,5	1,5	1,3	1	1	1,3	1,3	2	3,3

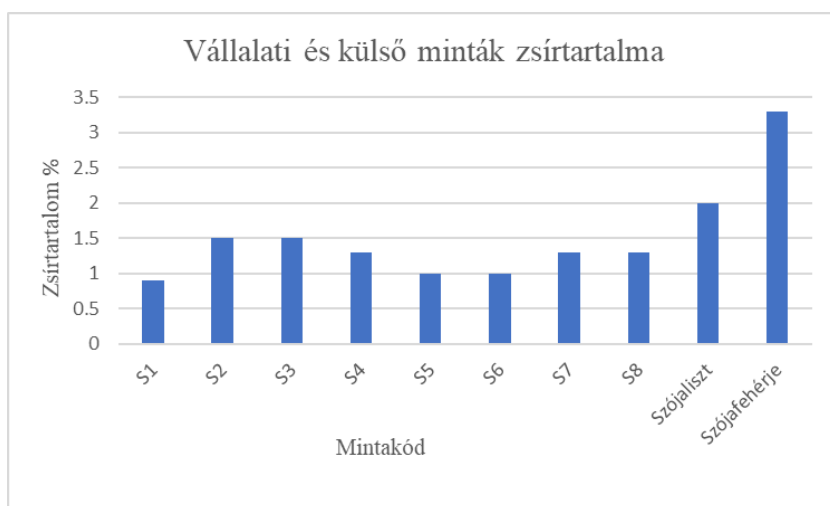
*a vállalati minták esetén szárazanyagtartalomra számolva, a külső mintáknál g/100g

A mérésekhez felhasznált alapanyagok fehérje- és zsírtartalom adatait a 3. ábra és a 4. ábra grafikusán mutatja be annak szemléltetésére, hogy a külső minták fehérje és zsírtartalma mennyiben tér el a vállalati mintákétól. Ezekre a mintákra azért volt szükség, mert ezeknek a segítségével volt készíthető olyan mintaszett, amely megfelelő volt a NIR modellezéshez.

3. ábra: A felhasznált anyagok (vállalati és külső) fehérje tartalma a beszállítói adatok alapján
 Forrás: saját ábra, beszállítói adatok alapján



4. ábra: A felhasznált anyagok (vállalati és külső) zsírtartalma a beszállítói adatok alapján
 Forrás: saját ábra, beszállítói adatok alapján



A táblázatból (1. táblázat) és a diagramokról (3. ábra és 4. ábra) jól látható, hogy a vállalathoz érkezett minták fehérjetartalma egységes képet mutat, amíg a vásárolt szójafehérje fehérjetartalma alacsonyabb, a szójafehérje izolátum fehérjetartalma sokkal magasabb. A zsírtartalom a külső mintáknál magasabb (2% és 3%), amíg a vállalathoz beérkezett mintáknál ez az érték kisebb vagy egyenlő, mint 1.5%.

A mérések elvégzése előtt két minta sor készült.

A minták (15g/minta) a vállalat laboratóriumában, digitális gyorsmérlegen (Mettler Toledo, XSR6002S, kalibrálás érvényes: 2024.10.31.) lettek kimérve (5. ábra). A minták alacsony sűrűségű polietilén zsákokba lettek belemérve.

5. ábra: Minták méréséhez használt mérleg és az elkészült minták

Forrás: saját kép



Az egyik mintasorban kizárólag a vállalathoz beérkezett szójaliszt sarzsokból, összesen 8 különböző sarzsból lett minta véve, és minden sarzsból egy tiszta minta és egy-egy vegyes minta (50-50%) készült (2. táblázat). Egy minta tömege összesen 15g. Minden mintából 3 ismétlés készült. Tehát összesen 36x3db minta készült a vállalathoz beérkezett sarzsokból. A minták számozása a 2. táblázatban látható. A tiszta (egy sarzsból készült) mintáknál az SxSx (Pl.: S1S1), a kevert (két különböző sarzsból készült) mintáknál SxSy (pl. S1S2) mintakód volt használva.

A másik mintasor mintáinál (3. táblázat) a vállalathoz beérkezett mintákhoz különböző mennyiségben a Dénes Natúra Kft.-től vásárolt étkezési szójaliszt és szójafehérje izolátum lett hozzákeverve, illetve készült minta tisztán a Dénes Natúra Kft.-től vásárolt szójalisztból és a szójafehérje izolátumból is.

A 3. táblázatból leolvasható az egyes sarzsok mennyisége a mintákban. Ezeknél a mintáknál a porok makronutriens-tartalmának modellezése volt a cél és nem a mennyiségi változás. A minták keverésével a fehérje tartalom a fenti 52,6 – 55%-ról 46 – 87%-ra, amíg a zsírtartalom 0,9 – 1.5%-ról 0,9 – 3,3%-ra bővült. Ezeknél a mintáknál a bonyolultabb összetétel miatt nem lehetett a fent alkalmazott könnyen követhető számozást alkalmazni, így a minták sorszáma az azonosító: S1, S2, ..., Sn. Minden mintából 3 ismétlés készült. Összesen tehát 34x3db minta készült az 3. táblázat szerint.

Az elkészült minták két készüléken lettek párhuzamosan mérve (6. ábra). A kézi mérésekhez a NIR-S-G1 (Innospectra Co, Shinchu, Taiwan) típusú készülék volt használva. A készülék a 900-1700 nm-es tartományban mér. A minták először a kézi készülékkel lettek mérve, a minták tárolására használt PE zsákokon keresztül.

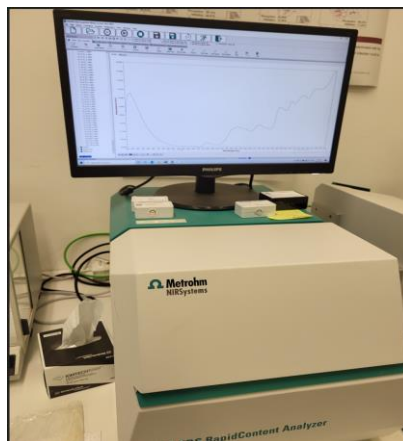
A kézi mérés után a minták a NIRS XDS RapidContent Analyser (Metrohm USA) asztali készüléken lettek mérve, 400-2500nm-es tartományban, optikai üveg küvettával.

A két mintasor NIR mérési adatait az alábbi módon jelöltük a diagramokon:

- a vállalati minták (Real) és a
- külső mintákkal kevert vállalati minták (Extra) .

6. ábra: A mérésekhez használt kézi és asztali készülék

Forrás: kézi készülék: www.isuzuoptics.com/en/products/NIR-G1, asztali készülék: saját kép



2. táblázat: A vállalati mintákból készült mintasor mennyiségi összetétele, és a beszállítói adatok alapján kalkulált fehérje és zsírtartalma

Forrás: saját táblázat

Mintakód	Alapanyagok (g)		Kalkulált	
	Minta 1, g	Minta 2, g	fehérje %	zsír %
S1S1	7,5	7,5	52,60	0,90
S1S2	7,5	7,5	53,00	1,20
S1S3	7,5	7,5	53,29	1,20
S1S4	7,5	7,5	53,80	1,10
S1S5	7,5	7,5	53,80	0,95
S1S6	7,5	7,5	53,80	0,95
S1S7	7,5	7,5	53,25	1,10
S1S8	7,5	7,5	53,25	1,10
S2S2	7,5	7,5	53,40	1,50
S2S3	7,5	7,5	53,69	1,50
S2S4	7,5	7,5	54,20	1,40
S2S5	7,5	7,5	54,20	1,25
S2S6	7,5	7,5	54,20	1,25
S2S7	7,5	7,5	53,65	1,40
S2S8	7,5	7,5	53,65	1,40
S3S3	7,5	7,5	53,97	1,50
S3S4	7,5	7,5	54,49	1,40
S3S5	7,5	7,5	54,49	1,25
S3S6	7,5	7,5	54,49	1,25
S3S7	7,5	7,5	53,94	1,40
S3S8	7,5	7,5	53,94	1,40
S4S4	7,5	7,5	55,00	1,30
S4S5	7,5	7,5	55,00	1,15
S4S6	7,5	7,5	55,00	1,15
S4S7	7,5	7,5	54,45	1,30
S4S8	7,5	7,5	54,45	1,30
S5S5	7,5	7,5	55,00	1,00
S5S6	7,5	7,5	55,00	1,00
S5S7	7,5	7,5	54,45	1,15
S5S8	7,5	7,5	54,45	1,15
S6S6	7,5	7,5	55,00	1,00
S6S7	7,5	7,5	54,45	1,15
S6S8	7,5	7,5	54,45	1,15
S7S7	7,5	7,5	53,90	1,30
S7S8	7,5	7,5	53,90	1,30
S8S8	7,5	7,5	53,90	1,30

3. táblázat: A vállalati és a külső mintákból készült mintakeverékek összetétele, és a beszállítói adatokból kalkulált fehérje és zsírtartalma

Forrás: saját táblázat

Mintakód	Alapanyagok (g)								Szója- liszt, g	Szója- fehérje, g	Kalkulált	
	s1	s2	s3	s4	s5	s6	s7	s8			fehérje (%)	zsír (%)
S1	-	-	-	-	-	-	-	-	15,00	-	46,0	2,0
S2	0,38	-	-	-	-	-	-	-	14,25	0,38	47,2	2,0
S3	-	1,73	-	-	-	-	-	-	12,75	0,53	48,5	1,9
S4	-	-	1,17	-	-	-	-	-	12,75	1,08	49,7	2,0
S5	-	-	-	7,28	-	-	-	-	7,50	0,23	51,0	1,7
S6	-	-	-	-	8,37	-	-	-	6,00	0,63	52,2	1,9
S7	-	-	-	-	-	7,08	-	-	6,45	1,47	53,5	2,0
S8	-	-	-	-	-	-	5,67	-	7,05	2,28	54,7	1,8
S9	-	-	-	-	-	-	-	10,43	3,00	1,58	55,9	1,8
S10	5,13	-	-	-	-	-	-	-	6,75	3,12	57,2	2,0
S11	-	10,53	-	-	-	-	-	-	2,25	2,22	58,4	1,5
S12	-	-	11,25	-	-	-	-	-	1,20	2,55	59,7	1,5
S13	-	-	-	7,43	-	-	-	-	3,75	3,83	60,9	2,0
S14	-	-	-	-	2,88	-	-	-	6,75	5,37	62,2	2,4
S15	-	-	-	-	-	3,21	-	-	6,00	5,79	63,4	2,5
S16	-	-	-	-	-	-	7,98	-	1,50	5,52	64,6	1,9
S17	-	-	-	-	-	-	-	4,56	4,05	6,39	65,9	2,4
S18	5,28	-	-	-	-	-	-	-	3,00	6,72	67,1	2,3
S19	-	7,77	-	-	-	-	-	-	0,75	6,48	68,4	2,0
S20	-	-	5,85	-	-	-	-	-	1,80	7,35	69,6	2,2
S21	-	-	-	2,79	-	-	-	-	3,75	8,46	70,8	2,6
S22	-	-	-	-	3,98	-	-	-	2,25	8,78	72,1	2,7
S23	-	-	-	-	-	1,80	-	-	4,50	8,70	73,3	2,7
S24	-	-	-	-	-	-	2,73	-	2,25	10,02	74,6	2,7
S25	-	-	-	-	-	-	-	1,53	2,85	10,62	75,8	2,9
S26	2,25	-	-	-	-	-	-	-	1,80	10,95	77,1	2,8
S27	-	3,48	-	-	-	-	-	-	0,45	11,07	78,3	2,7
S28	-	-	1,59	-	-	-	-	-	1,50	11,91	79,5	2,9
S29	-	-	-	0,78	-	-	-	-	1,65	12,57	80,8	3,1
S30	-	-	-	-	2,10	-	-	-	0,15	12,75	82,0	3,1
S31	-	-	-	-	-	1,28	-	-	0,30	13,43	83,3	3,1
S32	-	-	-	-	-	-	0,39	-	0,60	14,01	84,5	3,2
S33	-	-	-	-	-	-	-	0,45	0,08	14,48	85,8	3,2
S34	-	-	-	-	-	-	-	-	-	15,00	87,0	3,3

Mindkét készüléknél diffúz reflektancia spektrum került felvételre a mintákból.

A két mintasorozat (n = 36, 34) három párhuzamossal és három konszekutív méréssel, valamint a két műszer egy összesen 1260 spektrumból álló adatbázist eredményezett. Mivel a vállalati és az Extra minták nem egy napon lettek mérve, ezért a második mérési napon a

vállalati mintákból 10db véletlenszerűen választott minta újra lemérésre került, amely további 30db spektrumot eredményezett, mindkét készüléken. Ezzel a kísérletek során 660 spektrumból álló adatbázis került felállításra, készülékenként. A minták kimérése alatt a hőmérséklet, a mérési napokon a laboratóriumban a hőmérséklet és a páratartalom volt monitorozva Voltcraft DL-121TH készülékkel.

3.2. Az adatelemzéshez használt módszerek

Az eredmények R-project szoftverrel lettek értékelve (v. 4.3.3, (2024) The R Foundation for Statistical Computing, Vienna, Austria; R csomag: aquap2: Kovács és Pollner, 2016).

A nyers spektrumokon a zaj és az alapjeleltolódás mérséklésére eltérő előkezelési műveleteket alkalmaztunk, különböző kombinációban:

- Savitzky-Golay szűrő (sgol): simítást, vagy n-edik derivált számítást végez az adathalmazon (Kovács és Pollner, 2016)
- standard normal variate (snv), amely transzformált NIR adatok sztenderd normál variációját számolja ki automatikus skálázással.
- detrending (deTr): a megadott adatkészlet trendmentesítése, minden megfigyeléshez számít egy lineáris modellt. A kapott modell együtthatói az abszorpciós értékek módosításához van használva.
- multiplikatív szóráskorrekció (msc), amely a spektrumokat oly módon korrigálja, hogy azok legközelebb legyenek egy referenciasepektrumhoz, általában az adathalmaz átlagához, a spektrumok léptékének és eltolásának megváltoztatásával.

Az snv, deTr és msc eljárások eredményei a kezelések után nem mutatott nagy eltérést egymástól, ezért Saviczky-Golay szűrővel (2. polinommal és 25 ponton) és msc-vel kezelt előkezelési kombináció került kiválasztásra a további elemzésekhez.

Az adatmátrix dimenziócsökkentéséhez, illetve a feltáró adatelemzéshez főkomponens elemzést (PCA) alkalmaztunk. A főkomponens elemzést, ami egy többváltozós statisztikai eljárás, Karl Pearson alkotta meg. Lényege, hogy egy adathalmaz - ahol a változók kölcsönös kapcsolatban állnak egymással – dimenzióit lecsökkenti úgy, hogy a varianciát a lehető legjobban megtartja (Pearson, K., 1901).

A fehérje és zsírtartalmat becslő modell készítéséhez parciális legkisebb négyzetek regresszióját használtam (PLS). A PLS regresszió a folytonos és látens változók lineáris kapcsolatát írja le. Minél több látens változó van használva, annál pontosabban illeszkedik a modell, viszont annál nagyobb a valószínűsége, hogy a hiba van modellezve (túlillesztés)

(Lukács, 2016). A keresztvalidáció során a hiba minimumát kerestük, és a látens változók ideális számát határoztuk meg. A validáció a konszekutív mérések (egyszerre 3) együttes kihagyásával, iteratív becsléssel lett elvégezve, így elkerülhető a túlillesztés (Kovács et al., 2010).

A modellek robusztusságának biztosítása érdekében az adatokból mintasoronkénti becslés lett elvégezve (test set prediction), a következő módon, a becslés a 3 ismételtsből 2 ismételtsre építi a modellt egyet pedig a becslésre használ. A becslés 3-szor lett elvégezve, mind az 1-es, mind a 2-es, mind a 3-as ismételtsre.

4. EREDMÉNYEK ÉS ÉRTÉKELÉS

Ebben a fejezetben elsőként a nyers és kezelt spektrumok elemzése, majd a feltáró értékelések eredményei, végül pedig a regressziós modellek fejlesztésének eredményei kerülnek bemutatásra.

4.1. A vizsgált szójaliszt keverékek NIR spektrumainak értékelése

A 7. ábra a nyers spektrumok és az alapvonal eltolódással már kezelt spektrumokat szemlélteti. A 7A. ábrán az asztali készülékkel felvett kezeletlen spektrumok láthatóak, mely alapján jól látható, hogy a kezeletlen spektrumoknál az alacsonyabb hullámhosszokon, <1800nm, kisebb az alapvonal eltolódás, amíg a magasabb hullámhosszokon nagyobb. Az alapvonal eltolódás és a szórás-korrektúra kezeléssel (7. ábra) 1800nm felett is minimalizálható ez a különbség.

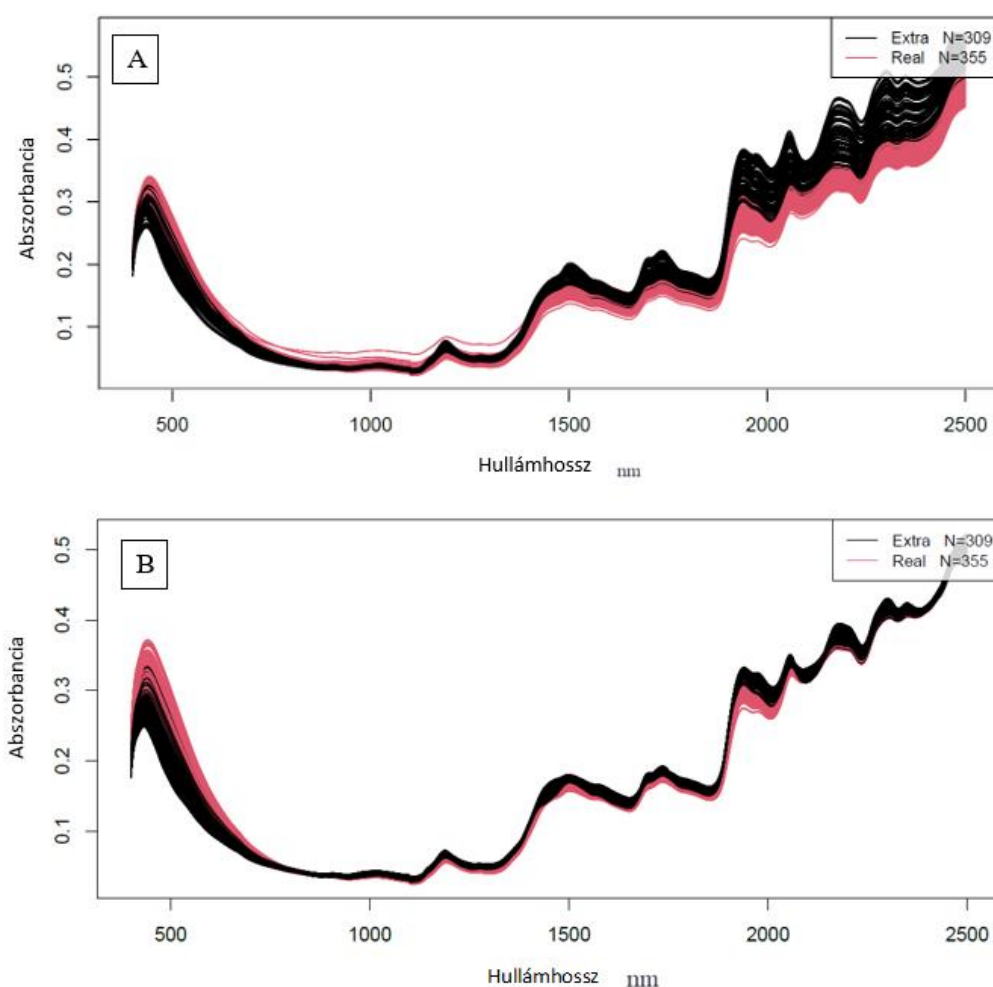
A 8. ábra az eredeti spektrumok és alatta az alapvonal eltolódással már kezelt spektrumokat mutatja, a kézi készülékkel felvett spektrumok esetében. Az ábrán jól látható, hogy a kezeletlen spektrumoknál a teljes spektrumon közel egységes az alapvonal eltolódás. Az alapvonal eltolódás és a szórás-korrektúra kezeléssel (8. ábra) minimalizálható ez a különbség.

Az asztali készüléken kapott adatok előzetes vizsgálata, és az alapvonal eltolódás és az adatok msc-vel való kezelése után az eredeti 400-2500nm-es teljes spektrum helyett az 1100-2100nm-es tartomány adatait használtuk a további értékelések során. Az 1100nm-es alsó hullámhossz azért lett választva, mert az asztali készülék két detektorral dolgozik, és 1100nm-nél vált át a két detektor között, továbbá az 1100nm alatti hullámhosszokon nem volt jellemző csúcs, amely a minták kiértékelésben fontos lett volna. A 2100nm-es hullámhossz feletti tartományt azért nem használtuk a továbbiakban, mert e felett a tartomány felett a tapasztalatok

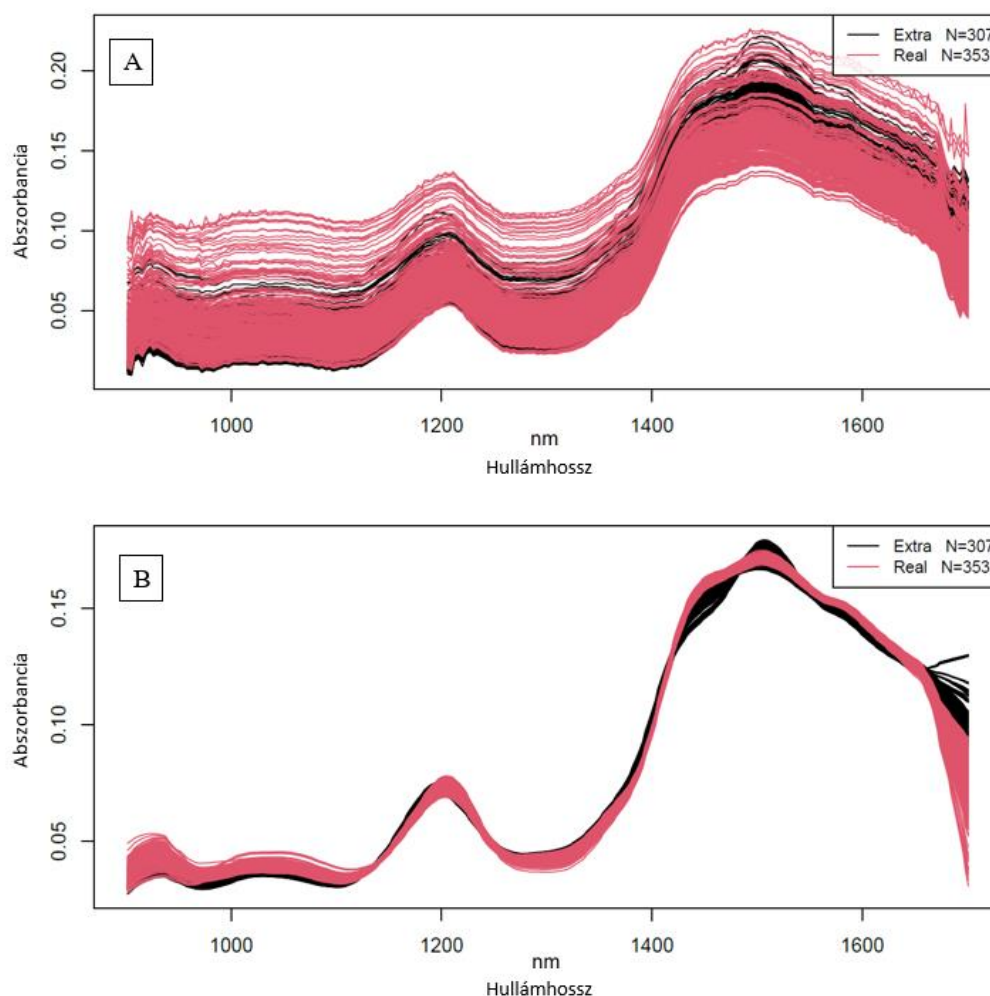
alapján az adatok használhatósága nehézkes és az irodalmi adatok szerint a zaj szintje jelentősebb (Esbensen et al, 2014).

A kézi készülékkel mért adatok előzetes vizsgálata alapján és az elvégzett kezelések után (alapvonal eltolódás és msc) az 1100-1600nm-es tartományt elemeztük tovább. Ennél a készüléknél az 1100nm alatti adatoknál nem volt jellemző csúcs, 1600nm felett pedig a kezelések után sem értékelhetőek a spektrumok, ahogy az a 8. ábrán látható.

7. ábra: A vállalati minták (Real) és a külső mintákkal kevert (Extra) minták kezeletlen (A) és alapvonal simítással és msc-vel kezelt (B) teljes spektrumai az asztali készülékkel
Forrás: saját diagram



8. ábra: Az vállalati minták (Real) és a külső mintákkal kevert minták (Extra) kezeletlen (A) és alapvonal simítással és msc-vel kezelt (B) teljes spektrumai a kézi készülékkel

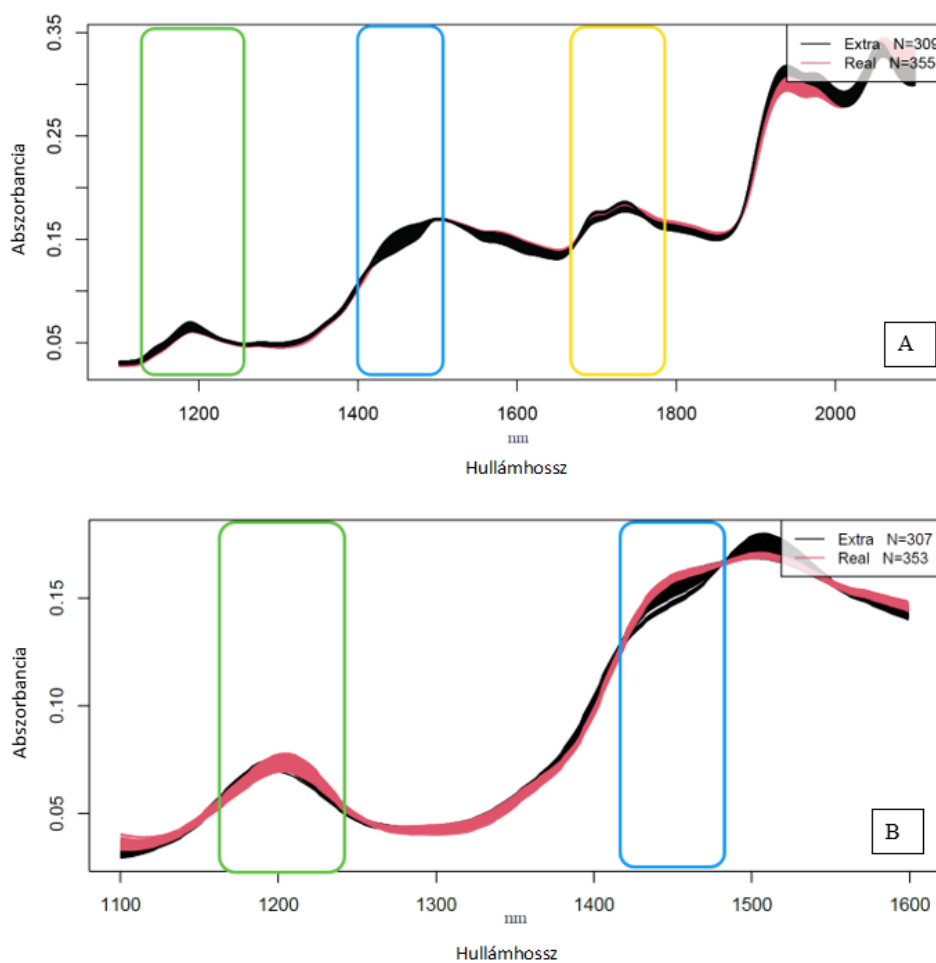


A dolgozat későbbi pontjaiban elemzett tartományok kiválasztása a hullámhossztartományok hasonlósága és szakirodalmi adatok alapján történt. A következő ábrán (9. ábra) a vállalati minták (Real) és a külső mintákkal kevert (Extra) minták kiválasztott hullámhossztartománya látható az asztali készüléken (A) és a kézi készülékkel (B). Az asztali készüléknél a kiválasztott hullámhossz tartomány 1100-2100nm, amíg a kézi készüléknél az 1100-1600nm-es tartomány. A zölddel jelölt 1200nm körüli tartomány mindkét készülék esetén megtalálható, hasonló intenzitással. Az abszorpciós sáv a C-H második felharmonikusnak felel meg. Ebben a tartományban a nagy molekulák, például a fehérjék találhatóak meg (Baianu, Guo, 2011). A kékkel jelölt 1450-1550nm hullámhossztartomány is megfigyelhető mindkét mérés esetében. Az abszorpciós sáv 1450nm-nél megfelel mind az O-H és a N-H első felharmonikusnak. Ez az eredmény hozzárendelhető az aszpartámsav jelenlétének a szójalisztben (Sato, Takahashi és Matsunaga 2002, Shi et al. 2010). A harmadik,

sárgával jelölt tartomány az 1700-1800nm-es tartomány, amelyet csak az asztali készülékkel felvett spektrumokon lehet látni, mivel a kézi készülék ebben a tartományban már nem mér. Az abszorpciós sáv a C-H első felharmonikusnak felel meg. Az 1720-1760nm-es spektrum régióban a lipidek mutathatóak ki (Parrini et al., 2023).

9. ábra: A vállalati minták (Real) és a külső mintákkal kevert (Extra) minták rövidített és alapvonal eltolódással és msc-vel kezelt spektrumai az asztali készüléken (A) és a kézi készülékkel (B)

Forrás: saját diagram



A következő, 4.2. fejezetben a kezelt, és a kiválasztott spektrumtartományokkal számított főkomponens elemzés eredményei kerülnek bemutatásra

4.2. A vizsgált szójalisztkeverékek NIR spektrumain számított főkomponens elemzés eredményei

A főkomponens elemzés (PCA) elvégzése után a diagramokon jó látható, hogy az adatok az 1-es főkomponens (PC1) mentén különülnek el egymástól a legjobban, a legtisztább elkülönülést a 3. főkomponensnél (PC3) lehet megfigyelni, így a továbbiakban ennek a két főkomponensnek a felhasználásával lettek az adatok elemezve. Az első két fő komponens a teljes variancia 99%-át írja le. A 10. ábra az asztali készüléken mért minták 1-es és 3-as főkomponenseivel végzett, msc és Saviczky-Golay szűrővel kezelt adatokat ábrázolja. A 10. ábra az asztali készüléken mért (A) minták fehérjetartalmát, a (B) zsírtartalmát, a (C) a PCA loadings vektorokat ábrázolja.

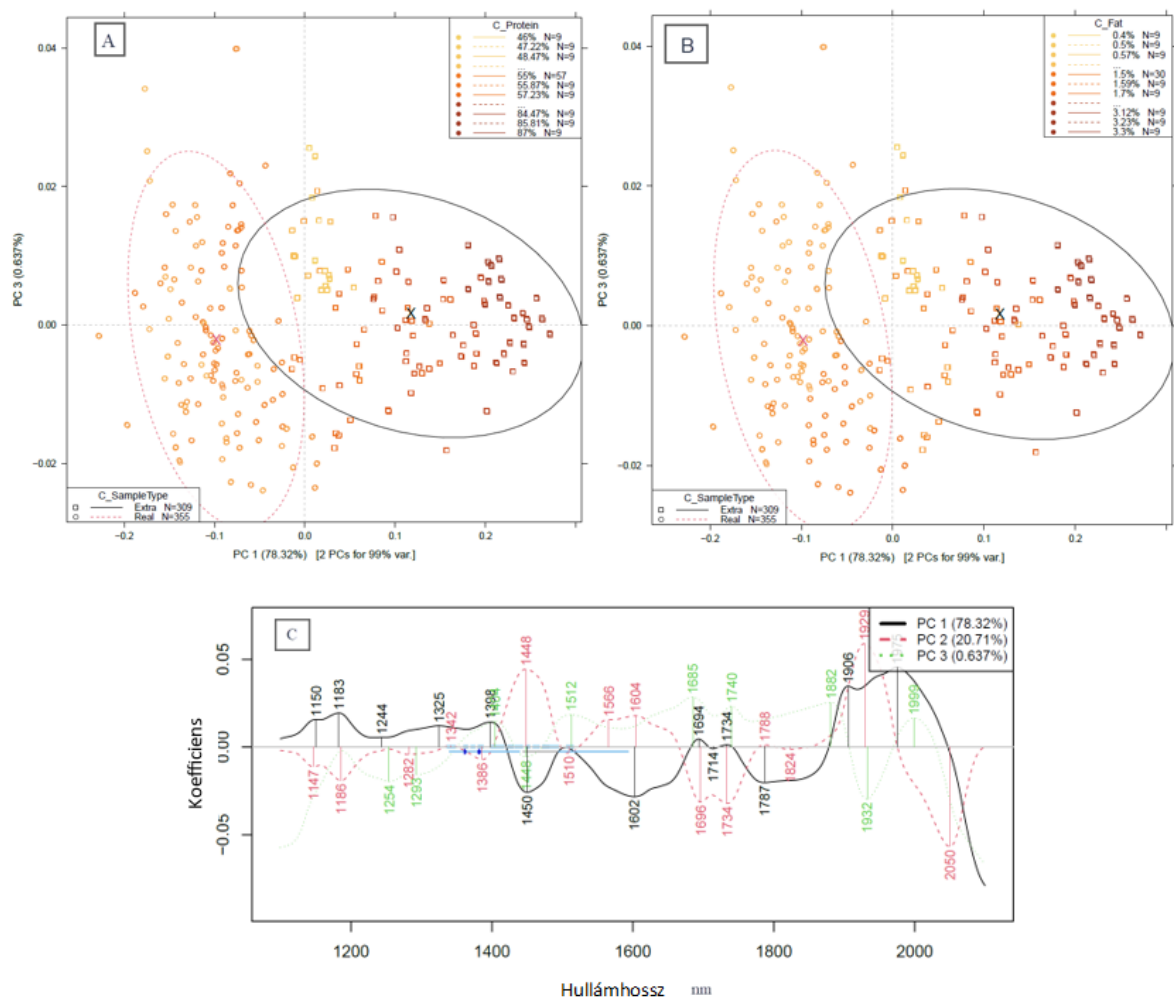
A loadings diagramról (10. ábra, C) leolvashatóak a jellemző hullámhosszok, 1450nm, 1602nm, 1694-1787nm tartomány. Az előbb felsorolt tartomány feletti csúcsokat ebben a dolgozatban nem vesszük figyelembe, mivel az 1900nm-es tartomány felett már a víz jelenléte zavarhatja a mérés pontosságát.

A kézi készülékkel mért minták főkomponens elemzésének elvégzése után megfigyelhető, hogy az adatok ennél a készüléknél is az egyes (PC1) és hármas (PC3) főkomponens mentén különülnek el egymástól a legjobban, így a továbbiakban ennek a két főkomponensnek a felhasználásával lettek az adatok elemezve. Az asztali készülék adataival szemben ebben az esetben 5 főkomponens írja le az adatok 99%-át. A 11. ábra az 1-es és 3-as főkomponenssel végzett, msc és Saviczky-Golay szűrővel kezelt adatokat ábrázolja. A 11. ábra (A) a minták fehérjetartalmát, a (B) a minták zsírtartalmát, a (C) a PCA loadings vektorokat ábrázolja.

A loadings diagramról (11. ábra, C) leolvashatóak a jellemző hullámhosszok, 1179nm, 1224nm, 1397nm, 1451nm, 1508nm.

10. ábra: Főkomponens elemzés eredményei az asztali készülék adataiból, az 1-es és 3-as főkomponensek használatával, a fehérje- (A) és zsírtartalom (B) adatokra, és a loadings (C) vektorok

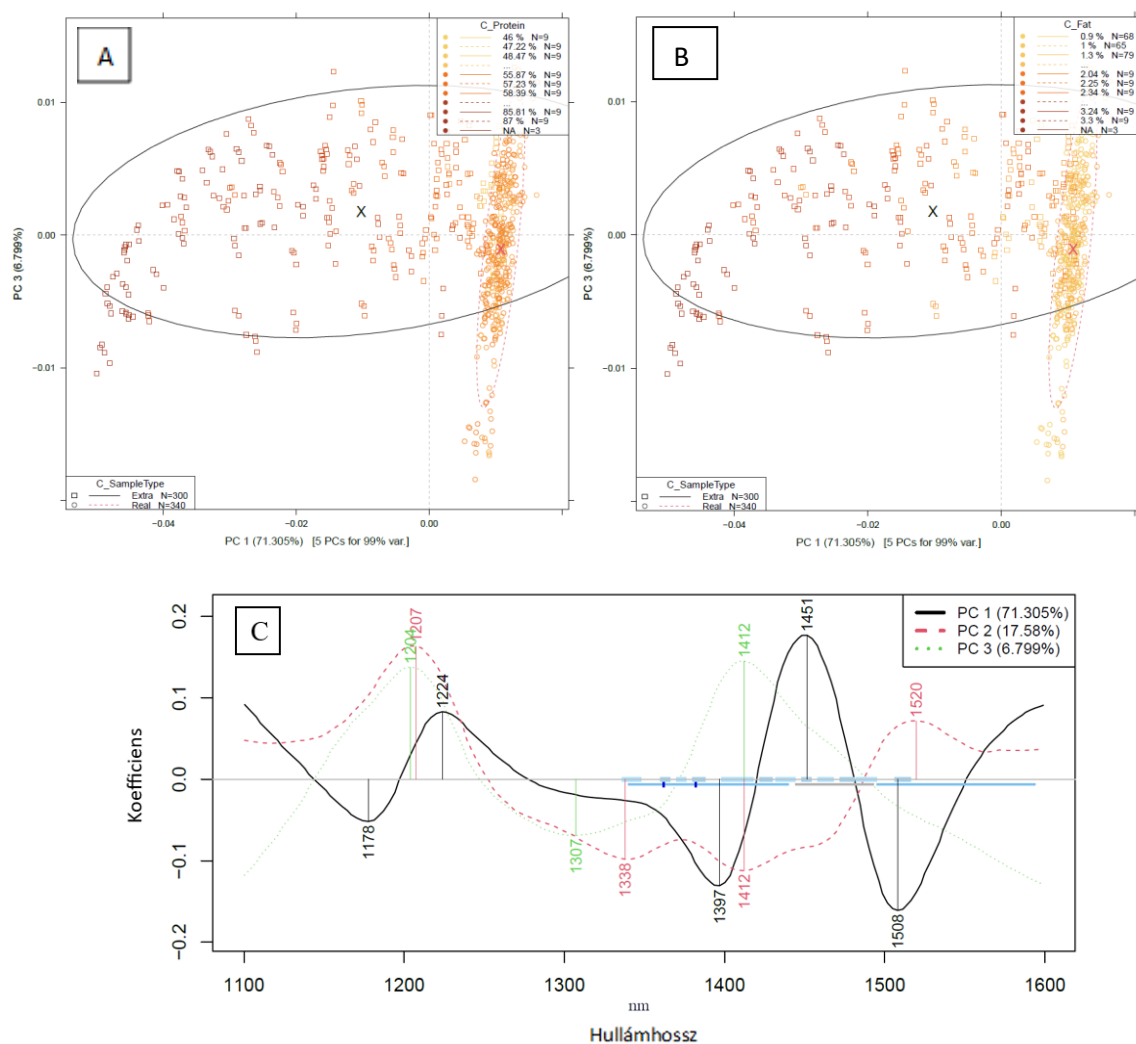
Forrás: saját diagram



I

11. ábra: Főkomponens elemzés eredményei a kézi készülék adataiból, az 1-es és 3-as főkomponensek használatával, a fehérje- (A) és zsírtartalom (B) adatokra, és a loadings (C) vektorok

Forrás: saját diagram



Annak ellenére, hogy a külső mintákkal kevert vállalati mintákból (Extra) készült adatsor a PCA score-ok alapján egyértelműen elkülönül, jellemzően követi a koncentráció növekedést. Az elkülönülés a Real és az Extra minták adatainak esetében egyértelmű, és ez az elkülönülés is jól mutatja, hogy a tartomány szélesítés segíthet a későbbi modellezésben.

A főkomponens elemzés után a regresszió analízis lett elvégezve.

4.3.A vizsgált szójalisztkeverékek NIR spektrumai alapján épített fehérje és zsír becselő regressziós modellek eredményei

4.3.1 Regressziós eredmények az asztali készülékkel

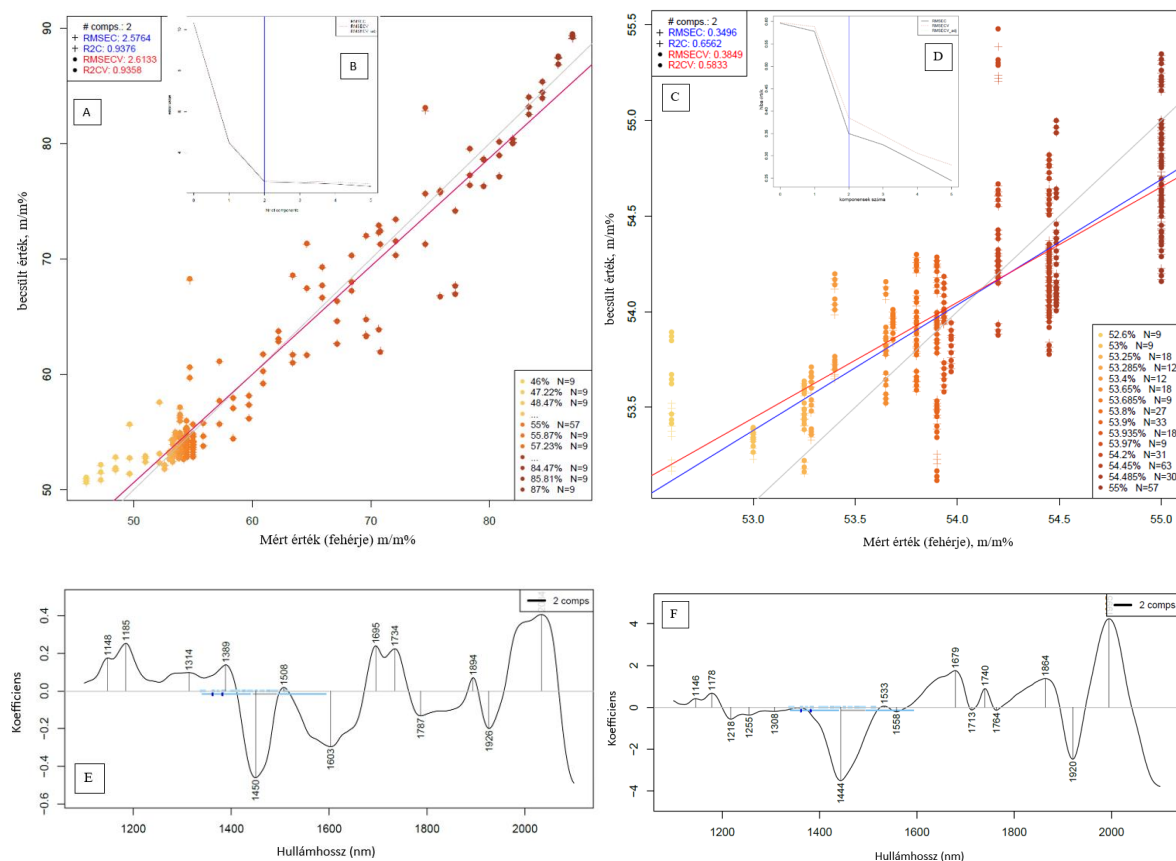
Az asztali készüléken mért spektrumok fehérje tartalom becslésére felállított PLS regressziós modell validált formáját a 12. ábra mutatja. Annak érdekében, hogy igazolható legyen, hogy a tartománybővítéssel az adatok becslése pontosabb, a vállalati (Real) adatok regressziója is el lett végezve. Az adatokat a 4. táblázat tartalmazza. A modell alapján az 1100-2100nm-es tartományt a vállalati minták és a külső mintákkal kevert vállalati minták keresztvalidált eredményét (Real és Extra) (12. ábra, A) használva $R^2CV=0,9358$ korrelációval lehet megbecsülni a valós fehérjetartalmat, 2,6133m/m%-os hibával. Kizárólag a vállalati (Real) adatokat használva (12. ábra, C) a $R^2CV=0,5833$ és a hiba 0,3849m/m%. A látens változók optimális száma 2-ben lett megállapítva. PLSR regressziós vektorok (12. ábra E és F), sgol simítással (2, 21, 0) és msc-vel kezelve.

4. táblázat: A vállalati minták (Real) és a külső mintákkal kevert minták (Extra) regressziós és keresztvalidált adatai az asztali készülékkel fehérje és zsírtartalomra

Forrás: saját munka

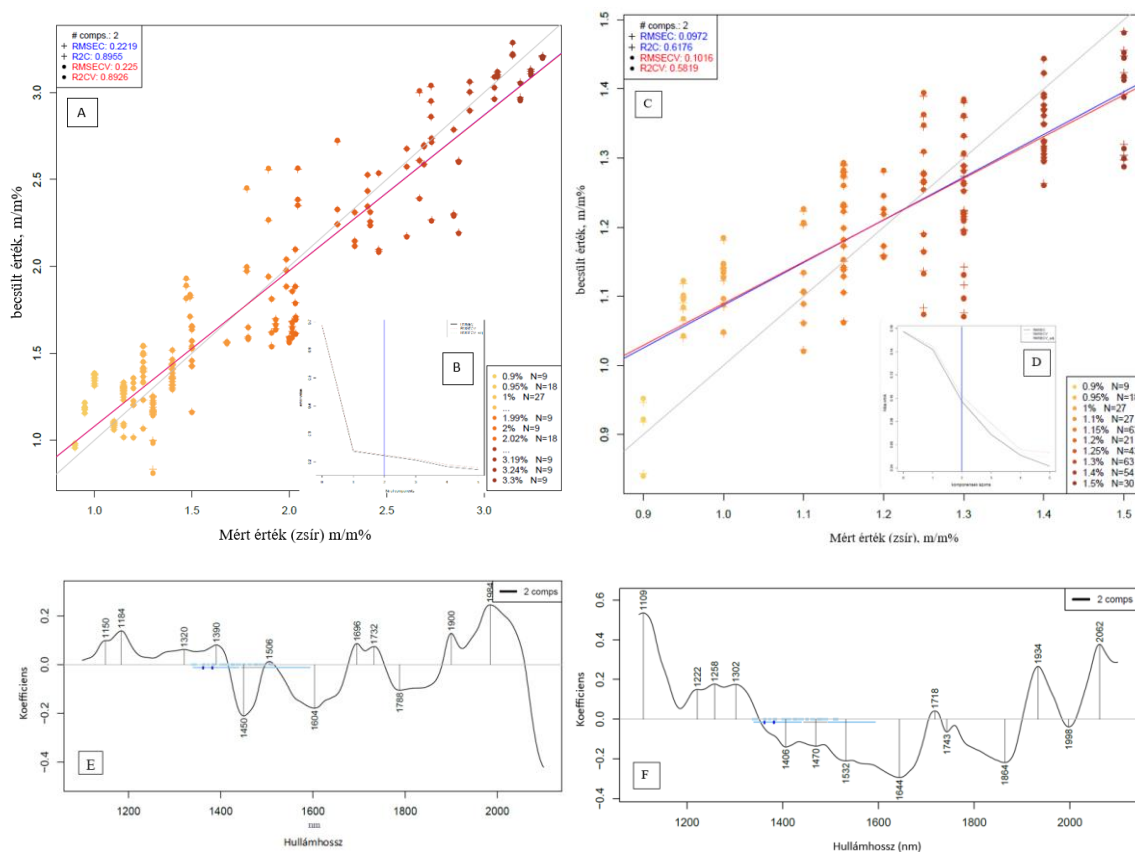
	Minta	R^2	RMSEC	R^2CV	RMSECV
			m/m%		m/m%
Fehérje	Real	0,6562	0,3496	0,5833	0,3849
	Real + Extra	0,9376	2,5764	0,9358	2,6133
Zsír	Real	0,6176	0,0972	0,5819	0,1016
	Real + Extra	0,8955	0,2219	0,8926	0,225

12. ábra Az asztali készülékkel mért Real és Extra minták fehérjetartalmának keresztvalidált verziója (A), a szükséges látens változók számának meghatározása (B), a vállalati (Real) minták fehérjetartalmának keresztvalidált verziója (C), a szükséges látens változók számának meghatározása (D) valamint a regressziós vektorok (Real + Extra: E, Real: F) Forrás: Saját diagram



Ugyanez a vizsgálat az asztali készüléken mért minták zsírtartalmának becslésére is el lett végezve. A felállított PLS regressziós modell validált formáját a 13. ábra mutatja. A zsírtartalmak PLSR regressziós vektorát a 13. ábra, C ábrázolja. Annak érdekében, hogy igazolható legyen, hogy a tartománybővítéssel az adatok becslése pontosabb, a vállalati (Real) adatok regressziója is el lett végezve. Az adatokat a 4. táblázat tartalmazza. A modell alapján az 1100-2100nm-es tartományt és az külső mintákkal kevert vállalati minták keresztvalidált eredményét (Real és Extra) használva $R^2CV=0,8926$ korrelációval lehet megbecsülni a valós fehérjetartalmat, 0,225m/m%-os hibával. Kizárólag a vállalati (Real) adatokat használva a $R^2CV=0,5819$ és a hiba 0,1016m/m%. A látens változók optimális száma 2-ben lett megállapítva. PLSR regressziós vektorok (12. ábra E és F), szög simítással (2, 21, 0) és msc-vel kezelve.

13. ábra: Az asztali készülékkel mért Real és Extra minták zsírtartalmának keresztvalidált verziója (A), a szükséges látens változók számának meghatározása (B), a vállalati (Real) minták zsírtartalmának keresztvalidált verziója (C), a szükséges látens változók számának meghatározása (D) valamint a regressziós vektorok (Real + Extra: E, Real: F)
 Forrás: Saját diagram



4.3.2. Regressziós eredmények a kézi készülékkel

A kézi készülékkel mért fehérjetartalmak becslésére felállított PLS regressziós modell validált formáját a 14. ábra mutatja. A fehérje tartalmak PLSR regressziós vektorát a 14. ábra, C ábrázolja. Annak érdekében, hogy igazolható legyen, hogy a tartománybővítéssel az adatok becslése pontosabb, a vállalati (Real) adatok regressziója is el lett végezve. Az adatokat az 5. táblázat tartalmazza. A táblázatból kiolvasható, hogy a Real minták mérésére, amikor az adatok nagyon szűk tartományon belül változnak, a kézi készülék nem alkalmas, a keresztvalidált korrelációs (R^2CV) érték fehérjére 0,1488, míg zsírra 0,0431. Az átlagos hibaértékek (RMSECV) 0,5489 és 0,2396m/m%. A modell alapján az 1100-1600nm-es tartományt és az összes minta eredményét (Real és Extra) használva 0,9033 R^2CV értékkel, 3,2101m/m%-os hibaértékkel (RMSECV) lehet megbecsülni a valós fehérjetartalmat. A látens

változók optimális száma 2-ben lett megállapítva. PLSR regressziós vektorok (12. ábra E és F), sgol simítással (2, 21, 0) és msc-vel kezelve.

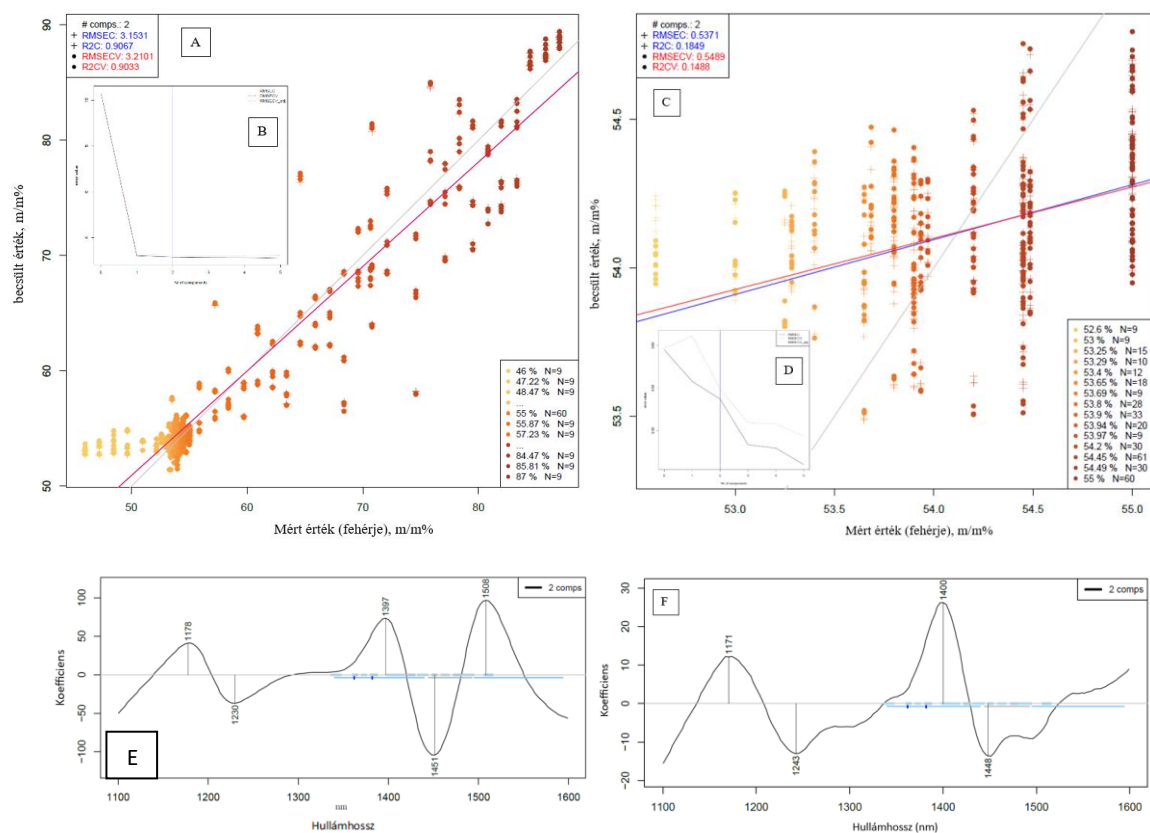
5. táblázat: A vállalati minták (Real) és a külső mintákkal kevert (Extra) minták regressziós, keresztvalidált adatai a kézi készülékkel fehérje és zsírtartalomra

Forrás: Saját táblázat

	Minta	R^2	RMSEC	R^2CV	RMSECV
			m/m%		m/m%
Fehérje	Real	0,1849	0,5374	0,1488	0,5489
	Real + Extra	0,9067	3,1531	0,9033	3,2101
Zsír	Real	0,1202	0,2297	0,0431	0,2396
	Real + Extra	0,8344	0,2842	0,8285	0,2892

14. ábra: A kézi készülékkel mért Real és Extra minták fehérjetartalmának keresztvalidált verziója (A), a szükséges látens változók számának meghatározása (B), a vállalati (Real) minták fehérjetartalmának keresztvalidált verziója (C), a szükséges látens változók számának meghatározása (D) valamint a regressziós vektorok (Real + Extra: E, Real: F)

Forrás: Saját diagram

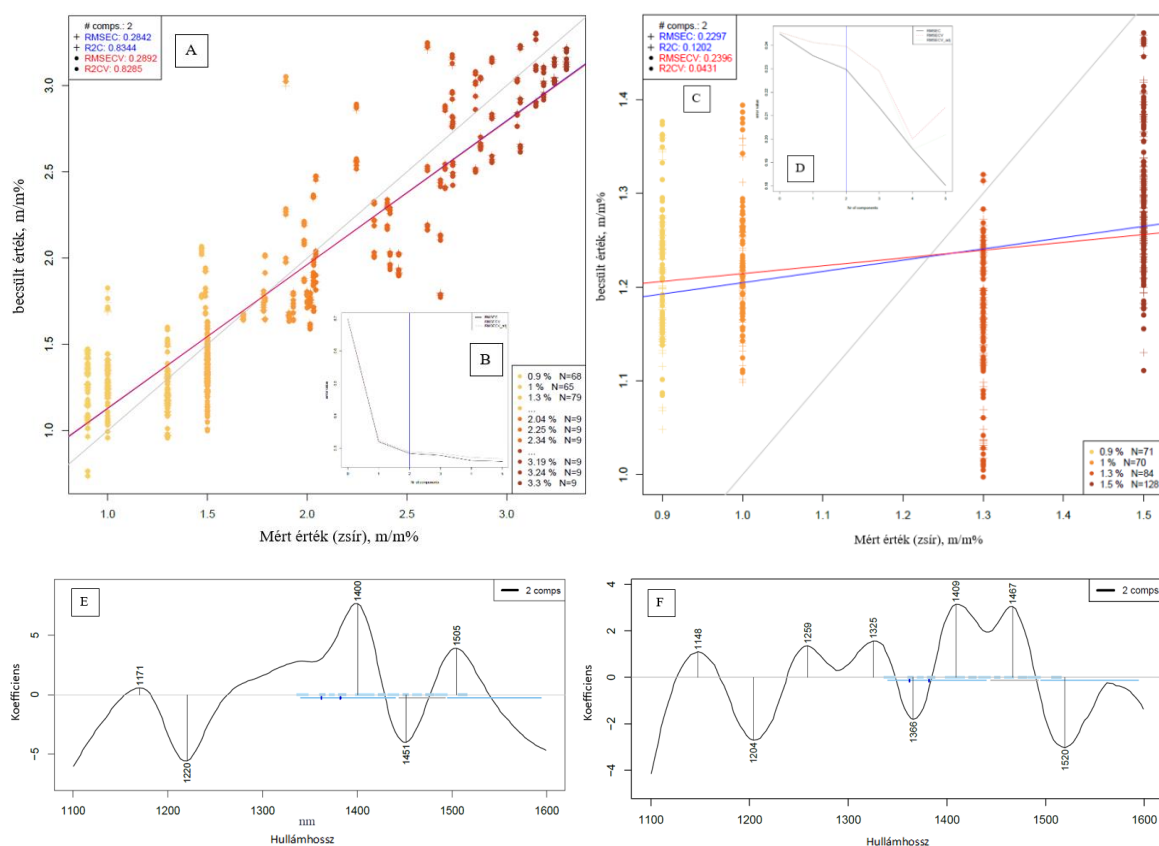


A vizsgálat a kézi készülékkel mért minták zsírtartalom becslésére is el lett végezve. A felállított PLS regressziós modell validált formáját a 15. ábra A mutatja. A PLSR regressziós vektorát a zsírtartalom a 15. ábra C ábrázolja. Annak érdekében, hogy igazolható legyen, hogy a tartománybővítéssel az adatok becslése pontosabb, a vállalati (Real) adatok regressziója is el lett végezve. Az adatokat az 5. táblázat tartalmazza. A modell alapján az 1100-1600nm-es tartományt és az összes minta eredményét (Real és Extra) használva 0,8285 R^2CV érték mellett lehet megbecsülni a valós zsírtartalmat. A látens változók optimális száma 2-ben lett megállapítva. PLSR regressziós vektorok (15. ábra E és F), sgol simítással (2, 21, 0) és msc-vel kezelve.

Az eredmények vizsgálatának utolsó lépése a független becslések elvégzése volt, ami a 4.5. pontban kerül kiértékelésre.

15. ábra: A kézi készülékkel mért Real és Extra minták zsírtartalmának keresztvalidált verziója (A), a szükséges látens változók számának meghatározása (B), a vállalati (Real) minták zsírtartalmának keresztvalidált verziója (C), a szükséges látens változók számának meghatározása (D) valamint a regressziós vektorok (Real + Extra: E, Real: F)

Forrás: Saját diagram



4.4. Független becslés a két készülék adataiból fehérje és zsírtartalomra

Végezetül a fent elemzett adatok független becslése lett elvégezve a 3-3 adatsorra az asztali és a kézi készüléknél is. A mintasoronkénti becslési eredményeket és az átlag értékeket a 6. táblázat tartalmazza. Az eredményekből és az átlagukból kiolvasható, hogy mind az asztali, mind a kézi készülék nagy biztonsággal képes a fehérje és zsírtartalom meghatározására:

- fehérjére az asztali készülék 0,9501, a kézi készülék 0,9103 pontosságot (R^2_{pr}), 2,5655 és 3,1819m/m% (RMESP) átlagos hibával;
- zsírtartalomra az asztali készülék 0,8946, a kézi készülék 0,7953 pontossággal (R^2_{pr}), 0,2231 és 0,2984m/m% (RMSEP) átlagos hibával adott eredményt.

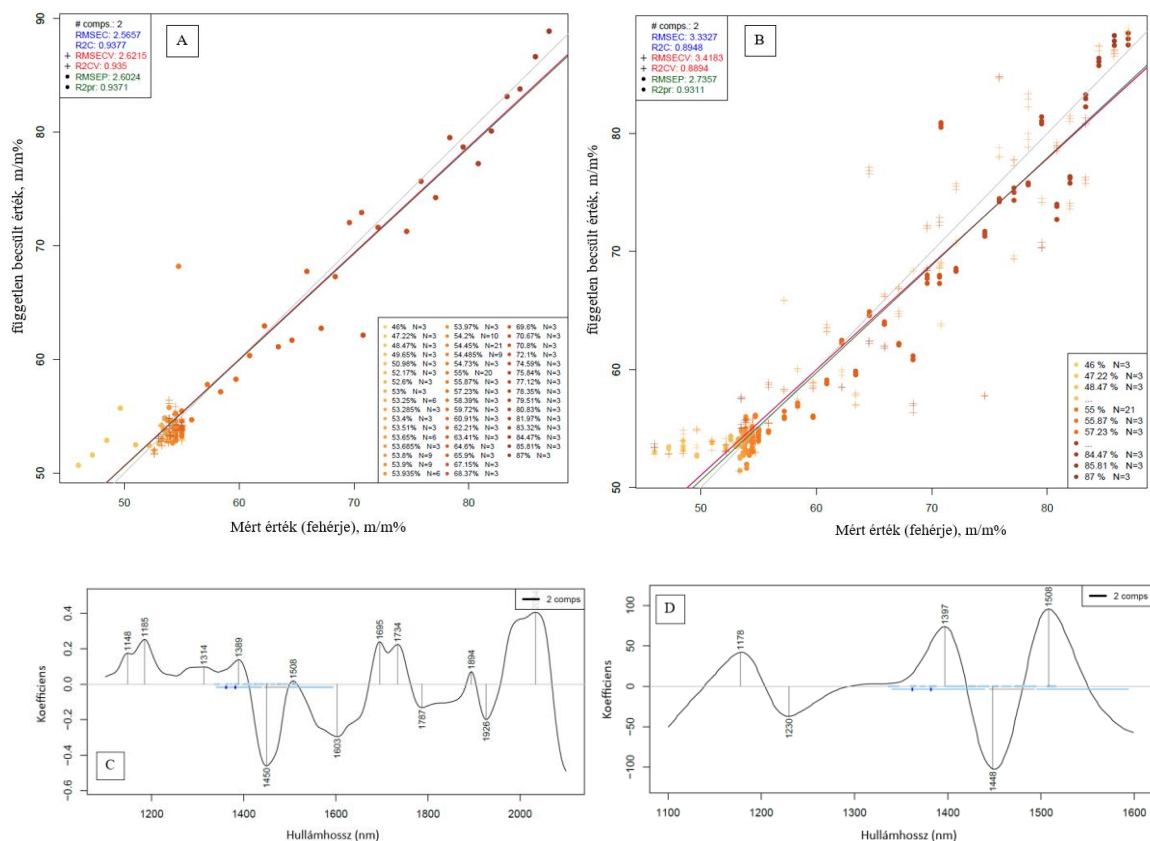
A csatolt diagramok az asztali (16. ábra, A és 17. ábra, A) és a kézi (16. ábra, B és 17. ábra, B) készülék független becslési adatait és a regressziós vektorokat (16. ábra, C, D és 17. ábra, C, D) tartalmazzák fehérje- és zsírtartalomra, a 3-3 mintasor első adatsorának ábráit.

6. táblázat: Független becslés eredményei az asztali és kézi készülék 3-3 mintasorára, és az átlagolt eredmények

Forrás: Saját táblázat

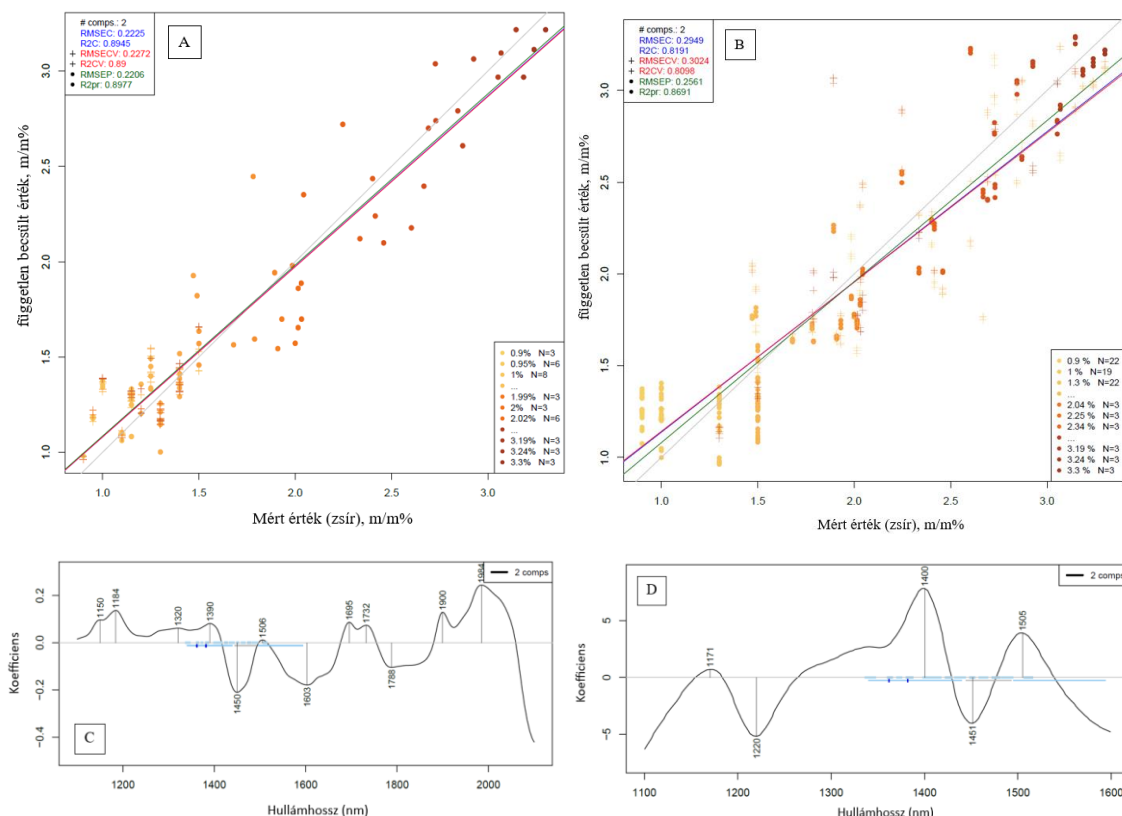
Készülék	Tartalom	R1		R2		R3		Átlag	
		R^2_{pr}	RMSEP m/m%	R^2_{pr}	RMSEP m/m%	R^2_{pr}	RMSEP m/m%P	R^2_{pr}	RMSEP m/m%
Asztali	Fehérje	0,9371	2,6024	0,3941	2,6418	0,943	2,4523	0,9501	2,5655
	Zsír	0,8977	0,2206	0,8951	0,2229	0,8909	0,2259	0,8946	0,2231
Kézi	Fehérje	0,9311	2,7357	0,9026	3,224	0,8973	3,5861	0,9103	3,1819
	Zsír	0,8691	0,2561	0,7997	0,3096	0,7171	0,2984	0,7953	0,2984

16. ábra: Független becslés az asztali (A) és kézi (B) készülékkel mért fehérjetartalmakra, és a becslések regressziós vektorai (C, D)
 Forrás: Saját diagram



17. ábra: Független becslés az asztali (A) és kézi (B) készülékkel mért zsírtartalmakra, és a becslések regressziós vektorai (C, D)

Forrás: Saját diagram



5. KÖVETKEZTETÉSEK ÉS JAVASLATOK

A dolgozatban bemutatott eredmények alapján a közeli infravörös spektroszkópia nagy pontossággal alkalmas a szójaliszt minták fehérje és zsírtartalmának gyors és roncsolásmentes vizsgálatára. A vizsgálatok során elemeztem a csak a vállalati mintákból készült mintasort (Real) és a külső mintákkal kevert vállalati mintákat és a vállalati mintákat együttesen is (Real + Extra). Az eredmények elemzése során bebizonyosodott, hogy a tartományszélesítés alkalmazásával (külső mintákkal kevert vállalati minták) robusztusabb modell építhető a pontosabb fehérje és zsírtartalom meghatározásához. Továbbá az is igazolást nyert, hogy az adatok kezelése fontos a pontos értékelés szempontjából. Mind az adatsimítás, mind a további kezelések fontosak, hogy a mérési hibából eredő eltérések kizárhatóak legyenek a vizsgálatokból.

Az adatok elemzéséből kiderül, hogy az asztali készülék pontosabb eredményeket szolgáltat, mint a kézi készülék. Az asztali készülék mérési spektruma szélesebb, az alapvonal

eltolódása kisebb, mint a kézi készüléké. A dolgozatban a használt készülékek szűkített spektrumtartományával dolgoztam (asztali készülék: 1100-2100nm, kézi készülék: 1100-1600nm), ami elegendőnek bizonyult a minták fehérje és zsírtartalmának kiértékeléséhez.

A főkomponens elemzés során az asztali készüléknél két komponens írta le az adatok 99%-át, ezt a kézi készüléknél öt komponens adta. Ennek a különbségnek az oka feltehetőleg az, hogy kézi mérésnél a mérések a PE zsákon keresztül lettek elvégezve, ahol a minta rétegvastagsága nem volt pontosan kimérve, amíg az asztali készüléknél a küvettába közel azonos rétegvastagságú minta került.

A vállalati minták mérésénél, amikor az adatok nagyon szűk tartományon belül változnak, a kézi készülék nem alkalmas a fehérje és zsírtartalom pontos meghatározására.

A regresszió elemzés mindkét készüléknél két komponensre adta a legjobb értékeket.

A kézi készülék a független becslési adatok alapján közel azonos korrelációval (R^2_{pr} : asztali: 0,9501, kézi készülék: 0,9103) de nagyobb hibával (RMSECV: asztali: 2,5655, kézi készülék: 3,1819m/m%) képes a szójaliszt fehérjetartalmak mérésére. A szójaliszt zsírtartalmának mérésére az asztali készülékkel jobb modellt lehetett építeni, a kézi készülék korrelációja mindössze $R^2_{pr}=0,7953$, ezzel szemben az asztali készülék korrelációja $R^2_{pr}=0,8946$.

A Zaukuu és társai (2020) által végzett vizsgálatokkal összhangban az ebben a dolgozatban végzett vizsgálatok eredményei is azt mutatják, hogy az asztali készülék alkalmasabb a fehérje és zsírtartalom meghatározására, magasabb korrelációs értékkel és kisebb hibával, összehasonlítva a kézi készülékkel.

Emellett a kézi mérésnél a PE zsákon keresztül mért mintáknál javasolt egységesíteni a minta rétegvastagságát, amellyel valószínűleg csökkenthető az alapvonaleltolódás mértéke.

Bár a fenti eredmények alapján a fehérje és zsírtartalom mérés nagy pontossággal mérhető akár a kézi, akár az asztali készülékkel, javasolt a tartományok további kiegészítése, több beszállítótól származó mintával, a minél nagyobb variabilitás elérésének érdekében.

6. ÖSSZEFOGLALÁS

A diplomamunka célja a vállalat által vásárolt, fermentációs alapanyagként használt szójaliszt fehérje és zsírtartalmának meghatározása volt, a hagyományos módszereknél gyorsabb, és kevesebb mintaelőkészítést igénylő és roncsolásmentesen mérő NIR készülékkel. Jelenleg a vállalat hagyományos módszerekkel határozza meg a beérkezett alapanyagok fehérje és zsírtartalmát. A mérésekhez a vállalat által vásárolt szójalisztokból és máshonnan vásárolt szójalisztból és szójafehérje izolátumból készült két mintasor (Real és Extra) volt használva. Az egyik mintasor csak a vállalathoz beérkezett mintákból készült (Real), a másik mintasor a vállalati és a máshonnan vásárolt anyagok keverésével készült (Extra). Mivel a vállalati minták fehérje és zsírtartalma egységesnek tekinthető (fehérjetartalom: 52,6-55%, zsírtartalom: 0,9-1,5%), így szükséges volt ezeknek a paramétereknek a tartományszélesítésére, amelyet a máshonnan vásárolt anyagokkal lehetett megtenni (fehérjetartalom: 46-87%, zsírtartalom: 0,9-3,3%).

A vizsgálatok asztali és kézi NIR készülékkel is el lettek végezve. A két különböző készülék mérési adatai azért fontosak, hogy a vállalat kiértékelhesse, hogy a jövőben melyik mérés irányában kíván előrelépni, a gyors és roncsolásmentes vizsgálatok közül.

A kapott eredmények rámutatnak, hogy megfelelően kialakított adatbázis birtokában bármelyik készülékkel (asztali vagy kézi NIR) történt vizsgálat megfelelő eredményt ad a beérkezett anyagok tényleges fehérje és zsírtartalmára vonatkozóan. Az eredményekből az is megállapítható, hogy nincs szükség a teljes közeli infravörös tartományban való mérésekre ahhoz, hogy a beérkezett alapanyagok fehérje és zsírtartalma megállpítható legyen. Az irodalmi áttekintésben is említett (Bázár et al., 2016, Zaukuu et al., 2020) és a mérések során is alkalmazott kézi készülék, szűkebb mérési tartománnyal is megfelelő lehet a fehérje és zsírtartalom megbízható és gyors kimutatására.

7. IRODALOMJEGYZÉK

1. Aguirre, L., L. Cámara, G. Fondevila, A. de Juan, J. Mabrouk and G. Mateos. (2022) Chemical composition, protein quality, and protein digestibility and metabolizable energy content of commercial soybean meals from different origins in 21-day old broilers. Poultry Science Association 2022 Meeting, Abstract 249. Chemical composition, protein quality, and protein digestibility and metabolizable energy content of commercial soybean meals from different origins in 21-day old broilers - Soy Meal Info Center
2. Baianu, I., Guo, J. (2011) NIR Calibrations for Soybean Seeds and Soy Food Composition Analysis: Total Carbohydrates, Oil, Proteins and Water Contents. *Nat Prec* (2011). doi.org/10.1038/npre.2011.6611.1
3. Bázar, Gy., Kovács, Z., Pintér, Zs., Darvish, B., Hoffmann, I. (2016), Testing the ability of a handheld food scanner to predict primary nutrients in model mixtures. 1st International Conference on Biosystems and Food Engineering, Budapest, Hungary December 8, 2016.
4. Bázar, Gy., Szabó, A., Romvári, R. NIR based quality control of frying fat samples by means of Polar Qualification Systems, *Food Control*. 2010, 21, 992-997
5. Chiaohwei Lee, Juan J. Polari, Kirsten E. Kramer, and Selina C. Wang, (2018) Near-Infrared (NIR) Spectrometry as a Fast and Reliable Tool for Fat and Moisture Analyses in Olives ACS Omega. 2018 Nov 30; 3(11): 16081–16088. Published online 2018 Nov 28. doi: [10.1021/acsomega.8b02491](https://doi.org/10.1021/acsomega.8b02491)
6. Cossuta Dániel, Növényolajgyártás alapjai, Kővári Katalin Innovációs Központ, Bunge Zrt. (2022)
http://oktatas.ch.bme.hu/oktatas/konyvek/mezgaz/BMEVEMKA610_Mezogazdasagi_iparok_technologiaja/novenyolajgyartas_short_Cossuta.pdf
7. Consultation WFUE (2007) *Protein and Amino acid Requirements in Human Nutrition. World Health Organization Technical Report Series.*
8. Eliaerts, J., Meert, N., Dardenne, P., Van Durme, F., Baeten, V., Samyn, N., De wael, K. (2019) Evaluation of a calibration transfer between a benchtop and portable mid-InfraRed spectrometer for cocaine classification and quantification. *Talanta*, 2019, 209, 120481.
9. Esbensen, K.H., Geladi, P., Larsen, A. (2014) Myth: Light Travels to and from the sample in a Fiber-Optic Cable without Problems, *NIR News*, 2014, 25, 25-26.

10. Etzion, Y., Linker, R., Cogan, U., Shmulveich, I. (2004). Determination of protein concentration in raw milk by mid-infrared Fourier transform infrared/attenuated total reflectance spectroscopy. *Journal of Dairy Science*, 87, 2779-2788.
11. Fekete Erzsébet – Karaffa Levente (2013) *Ipari Biotechnológia* Debreceni Egyetem Természettudományi és Technológiai Kar Biomérnöki Tanszék 2013 https://maddock.hatter.it.unideb.hu/portal/displayDocument/Szervezeti%20t%C3%A1r/Egy%C3%A9b%20szervezeti%20egys%C3%A9gek/Biotechnol%C3%B3giai%20Int%C3%A9zet/Dokumentumt%C3%A1r/ipari_biotechnologia_egyetemi_e-jegyzet.pdf
12. Grass, S., Amigo, J.M., Lyndgaard, C.B., Foschino, R., Casiraghi, E. (2014) Beer fermentation: Monitoring of process parameters by FI-NIR and multivariate data analysis, *Food Chem.* 2014, 155, 279-286
13. I. C. Baianu, Jun Guo, Randall L. Nelson, Tiefeng You, Doina M. Costescu, (2011) NIR Calibrations for Soybean Seeds and Soy Food Composition Analysis: Total Carbohydrates, Oil, Proteins and Water Contents [v.2]
14. Karn, A., Crystal Heim, C., Flint-Garcia, S., Bilyeu, K., & Gillman, J., (2017) Development of Rigorous Fatty Acid Near-Infrared Spectroscopy Quantitation Methods in Support of Soybean Oil Improvement. *Journal of the American Oil Chemists' Society*, Volume 94, pages 69–76, (2017)
15. Kawasaki, M., Kawamura, S., Tsukahara, M., Morita, S., Komiya, M., Natsuga, M. (2008) Near-infrared spectroscopic sensing system for on-line milk quality assessment in a milking robot. *Computers and Electronics in Agriculture*, 63, 22-27.
16. Kjeldahl, J.(1883) A new method for the determination of nitrogen in organic matter *Zeitschrift fur Analytische Chemie*, 22, pp. 366-382
17. John-Lewis, Z.Z., Balkis, A., Lukács, M., Bodor, Zs., Vitális, F., Gillay, B., Gillay, Z., Friedrich, L., Kovács, Z. (2020) Detecting Low Concentration of Nitroen-Based Adulternts in whey Protein Powder Using Benchtop and Handheld NIR spectrometers and the Feasibility of Scanning through Plastic Bag. *Molecules* 2020, 25, 2522
18. Kovács, Z, Dalmadi, I., Lukács, L., Sipos, L., Szántia-Kőhegyi, K., Kókai, Z., Fekete, A. (2010). Geographical origin identification of pure Sri Lanka tea infusions with electronic nose, electronic tongue and sensory profile analysis. *Journal of Chemometrics*, 24(3-4), 121-130.
19. Kovács, Z.& Pollner, B. (2016). aquap2: Multivariate Data Analysis Tools for R including Aquaphotomics Methods. *Aquaphotomics: Understanding Water in Biology – 2nd International Symposium*. Kobe, Japan, 2016. <http://aquaphotomics.com>

20. Lévay László (2023), Lajtamag, Agrárágazat – a szója termesztése már az előző évben elkezdődik Szept 12, 2023 | tudástár <https://lajtamag.hu/tudastar/agraragazat-a-szoja-termesztese-mar-az-elozo-evben-elkezdodik>
21. Limm, W., Karunathilaka, S.R., Yakes, B.J., Mossoba, M.M. (2018) A portable mid-infrared spectrometer and a non-targeted chemometric approach for the rapid screening of economically motivated adulteration of milk powder. *Int. dairy J.* 2018, 85, 177-183.
22. Lukács Mátyás, 2016 Sportolókat célzó étrend-kiegészítők műszeres analizálásának modern lehetőségei, Diplomamunka
23. Lukacs, M, John-Lewis, Z.Z., Bazar, Gy., Pollner, B., Fodor, M., Kovacs, Z. 2024, Comparison of Multiple NIR Spectrometers for Detecting Low-Concentration Nitrogen-Based adulteration in Protein Powders. *Molecules* 2024, 29, 781
24. Martin, J. F. and McDaniel, L.E. (1977) Production of polyene macrolide antibiotics. *Adv. appl. Microbiol.* 21, 1-52.
25. Martin Wierup, Thor Kristoffersen (2014): Prevention of Salmonella contamination of finished soybean meal used for animal feed by a Norwegian production plant despite frequent Salmonella contamination of raw soybeans, 1994-2012 Available from: *Acta Veterinaria Scandinavica* volume 56, Article number: 41 <https://actavetscand.biomedcentral.com/articles/10.1186/s13028-014-0041-7>
26. Oomah, B.D., Voldeng, H., & Fregeau-Reid, J.A. (1994) Characterization of soybean proteins by HPLC *Plant Foods for Human Nutrition* 45: 251-263
27. Parrini, S., Sirtori, F., Čandek-Potokar, M., Charneca, R., Crovetto, A., Djurkin Kušec, I., Sanchez, E., Cebrian, M.M.I., Garcia, A. H., Karolyi, D., Lebre, B. Ortiz, A., Riera, N., Petig, M., da Costa Pires, P. J., Tejerina, D, Razmaite, V., Aquilani, C., Bozzi, R. (2023) Prediction of fatty acid composition in intact and minced fat of European autochthonous pigs breeds by near-infrared spectroscopy. *Sci Rep* **13**, 7874 (2023). DOI:10.1038/s41598-023-34996-x
28. Pearson, K. (1901). On Lines and Planes of Closest Fit to Systems of Points in Space *Philosophical Magazine* **2** (11), 559–572. DOI:10.1080/14786440109462720
29. Prashant D. Ingle, 1 Roney Christian, Piyush Purohit, Veronica Zarraga, and Erica Handley, Keith Freel and Saleem Abdo (2016), Determination of Protein Content by NIR Spectroscopy in Protein Powder Mix Products, *Journal of AOAC International* Vol. 99 (2), 360-363 doi.org/10.5740/jaoacint.15-0115

30. P. Singh, K. Krishnaswamy, 2022, Sustainable zero-waste processing system for soybeans and soy by-product valorization; Trends in Food Science & Technology, Volume 128, Pages 331-344
<https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S092422442200365X>
31. Pu, Y.; Pérez-Marín, D.; O'Shea, N.; Garrido-Varo, A. (2021) Recent Advances in Portable and Handheld NIR Spectrometers and Applications in Milk, Cheese and Dairy Powders. *Foods* 2021, 10, 2377. doi.org/10.3390/foods10102377
32. R.R. Jiménez, J.K. Ladha (1993) Automated elemental analysis: a rapid and reliable but expensive measurement of total carbon and nitrogen in plant and soil samples *Communications in Soil Science and Plant Analysis*, 24 (15–16) (1993), pp. 1897-1924
33. Rukundo, I.R., Danao, M.G.G., Weller, C.L., Wehling, R.L., Eskridge, K.M. (2020), Use of handheld near-infrared spectrometer and partial least squares regression to quantify metanil yellow adulteration in turmeric powder. *J. Near Infrared Spectrosc.* 2020, 28, 81-92
34. Sato, T., M. Takahashi, and R. Matsunaga. 2002. Use of NIR spectroscopy for estimation of FA composition of soy flour. *Journal of the American Oil Chemists' Society* 79: 535–37. doi: 10.1007/s11746-002-0517-3
35. Shi, G., L. Han, Z. Yang, L. Chen, and X. Liu. 2010. Near-infrared calibration transfer for quantitative analysis of fish meal mixed with soybean meal. *Journal of Near Infrared Spectroscopy* 18: 217–23. doi:10.1255/jnirs.8781562
36. Serrano, S., Ricón, F., & García-Olmo, J., (2013), Cereal protein analysis via Dumas method: Standardization of a micro-method using the EuroVector Elemental Analyser. *Journal of Cereal Science*, 58(1), 31-36
37. Singh, A., Shi, Y., Magreault, P., Kitts, D. D., Jarzębski, M., Siejak P., and Pratap-Singh A., (2021) A Rapid Gas-Chromatography/Mass-Spectrometry Technique for Determining Odour Activity Values of Volatile Compounds in Plant Proteins: Soy, and Allergen-Free Pea and Brown Rice Protein *Molecules* 2021, 26(13), 4104; <https://doi.org/10.3390/molecules26134104>
38. Soni, K., Frew, R., Kebede, B., 2023, A review of conventional and rapid analytical techniques coupled with multivariate analysis for origin traceability of soybean. Published online: 03 Feb 2023, doi.org/10.1080/10408398.2023.2171961
39. Stanbury, Peter F, Whitaker, Allan, Hall, Stephen J., (1995) Principles of fermentation technology, 2nd edition, page 102.

40. Stefan H. M. Gorissen and Oliver C. Witard (2018) Characterising the muscle anabolic potential of dairy, meat and plant-based protein sources in older adults *Proceedings of the Nutrition Society* (2018), 77, 20–31 doi:10.1017/S002966511700194X
41. Stefano Marventano, Maria Izquierdo Pulido, Claudia Sánchez-González, Justyna Godos, Attilio Speciani, Fabio Galvano and Giuseppe Grosso (2016) Legume consumption and CVD risk: a systematic review and meta-analysis Published online by Cambridge University Press: 31 August 2016 [Legume consumption and CVD risk: a systematic review and meta-analysis | Public Health Nutrition | Cambridge Core](#)
42. Sukhikh, S., Kalashnikova, O., Ivanova, S., Prosekov, A., Krol, O., Kriger, O., Fedovskikh, N. and Babich, O. (2022), Evaluating the Influence of Microbial Fermentation on the Nutritional Value of Soybean Meal *Fermentation* 2022, 8(9), 458; <https://doi.org/10.3390/fermentation8090458>
43. Teresa Banaszkiwicz (2011) Nutritional Value of Soybean Meal, Published: 12 September 2011, DOI: 10.5772/23306 <https://www.intechopen.com/chapters/19972>
44. Zeki Berk (1992), Technology of production of edible flours and protein products from soybeans Fao agricultural services bulletin no. 97, Food and Agriculture Organization of the United Nations Rome 1992; <https://www.fao.org/3/t0532e/t0532e02.htm>
45. Jensen, William B. (December 2007). "The Origin of the Soxhlet Extractor". *Journal of Chemical Education*. **84** (12): 1913–1914
46. A. Zygler, M. Słomińska, J. Namieśnik, (2012) Comprehensive Sampling and Sample Preparation, Volume 2: Theory of Extraction Techniques, Pages 65-82
47. Shadow, W. 1998. Rapid Analysis for the Food Industry Using Near-Infrared Spectroscopy. Perten Instruments North America, Inc., 1-17.

8. TÁBLÁZATOK ÉS ÁBRÁK JEGYZÉKE

1. táblázat: A vállalati és külső minták fehérje- és zsírtartalma.....	11
2. táblázat: A vállalati mintákból készült mintasor mennyiségi összetétele, és a beszállítói adatok alapján kalkulált fehérje és zsírtartalma	15
3. táblázat: A vállalati és a külső mintákból készült mintakeverékek összetétele, és a beszállítói adatokból kalkulált fehérje és zsírtartalma	16
4. táblázat: A vállalati minták (Real) és a külső mintákkal kevert minták (Extra) regressziós és keresztvalidált adatai az asztali készülékkel fehérje és zsírtartalomra	25
5. táblázat: A vállalati minták (Real) és a külső mintákkal kevert (Extra) minták regressziós, keresztvalidált adatai a kézi készülékkel fehérje és zsírtartalomra	28
6. táblázat: Független becslés eredményei az asztali és kézi készülék 3-3 mintasorára, és az átlagolt eredmények	30
1. ábra: Szójabab feldolgozásának fő- és melléktermékei, költséghatékony feldolgozási technológiák és hozzáadott értékű termékek	4
2. ábra: Szójaliszt feldolgozás sematikus ábrája.....	5
3. ábra: A felhasznált anyagok (vállalati és külső) fehérje tartalma a beszállítói adatok alapján	12
4. ábra: A felhasznált anyagok (vállalati és külső) zsírtartalma a beszállítói adatok alapján	12
5. ábra: Minták méréséhez használt mérleg és az elkészült minták.....	13
6. ábra: A mérésekhez használt kézi és asztali készülék.....	14
7. ábra: A vállalati minták (Real) és a külső mintákkal kevert (Extra) minták kezeletlen (A) és alapvonal simítással és msc- vel kezelt (B) teljes spektrumai az asztali készülékkel	19
8. ábra: Az vállalati minták (Real) és a külső mintákkal kevert minták (Extra) kezeletlen (A) és alapvonal simítással és msc-vel kezelt (B) teljes spektrumai a kézi készülékkel.....	20
9. ábra: A vállalati minták (Real) és a külső mintákkal kevert (Extra) minták rövidített és alapvonal eltolódással és msc-vel kezelt spektrumai az asztali készüléken (A) és a kézi készülékkel (B).....	21
10. ábra: Főkomponens elemzés eredményei az asztali készülék adataiból, az 1-es és 3-as főkomponensek használatával, a fehérje- (A) és zsírtartalom (B) adatokra, és a loadings (C) vektorok.....	23

11. ábra: Főkomponens elemzés eredményei a kézi készülék adataiból, az 1-es és 3-as főkomponensek használatával, a fehérje- (A) és zsírtartalom (B) adatokra, és a loadings (C) vektorok.....	24
12. ábra Az asztali készülékkel mért Real és Extra minták fehérjetartalmának keresztvalidált verziója (A), a szükséges látens változók számának meghatározása (B), a vállalati (Real) minták fehérjetartalmának keresztvalidált verziója (C), a szükséges látens változók számának meghatározása (D) valamint a regressziós vektorok (Real + Extra: E, Real: F).....	26
13. ábra: Az asztali készülékkel mért Real és Extra minták zsírtartalmának keresztvalidált verziója (A), a szükséges látens változók számának meghatározása (B), a vállalati (Real) minták zsírtartalmának keresztvalidált verziója (C), a szükséges látens változók számának meghatározása (D) valamint a regressziós vektorok (Real + Extra: E, Real: F).....	27
14. ábra: A kézi készülékkel mért Real és Extra minták fehérjetartalmának keresztvalidált verziója (A), a szükséges látens változók számának meghatározása (B), a vállalati (Real) minták fehérjetartalmának keresztvalidált verziója (C), a szükséges látens változók számának meghatározása (D) valamint a regressziós vektorok (Real + Extra: E, Real: F).....	28
15. ábra: A kézi készülékkel mért Real és Extra minták zsírtartalmának keresztvalidált verziója (A), a szükséges látens változók számának meghatározása (B), a vállalati (Real) minták zsírtartalmának keresztvalidált verziója (C), a szükséges látens változók számának meghatározása (D) valamint a regressziós vektorok (Real + Extra: E, Real: F).....	29
16. ábra: Független becslés az asztali (A) és kézi (B) készülékkel mért fehérjetartalmakra, és a becslések regressziós vektorai (C, D).....	31
17. ábra: Független becslés az asztali (A) és kézi (B) készülékkel mért zsírtartalmakra, és a becslések regressziós vektorai (C, D)	32

Köszönetnyilvánítás

Szeretném megköszönni konzulenseimnek, Dr. Kovács Zoltánnak és Lukács Mátyásnak, a rengeteg segítséget és szakmai támogatást, amit a dolgozat írásához nyújtottak az elmúlt hónapokban. Nélkülük ez a dolgozat nem jöhetett volna létre.

Ezen felül köszönöm a Magyar Agrár- és Élettudományi Egyetem Élelmiszertudományi és Technológiai Intézet Élelmiszeripari Méréstechnika és Automatizálás Tanszék és a közreműködő vállalat dolgozóinak segítségét, amiért a mérések lehetőségét biztosították.

NYILATKOZAT

a diplomadolgozat nyilvános hozzáféréséről és eredetiségéről

A hallgató neve: Krassóné Józsa Ildikó
A Hallgató Neptun kódja: T10QX9
A dolgozat címe: Szójaliszt minták fehérje és zsír tartalmának meghatározása közeli infravörös spektroszkópiával
A megjelenés éve: 2024
A konzulens intézetének neve: Élelmiszertudományi és Technológiai Intézet
A konzulens tanszékének a neve: Élelmiszeripari Méréstechnika és Automatizálás Tanszék

Kijelentem, hogy az általam benyújtott diplomadolgozat egyéni, eredeti jellegű, saját szellemi alkotásom. Azon részeket, melyeket más szerzők munkájából vettem át, egyértelműen megjelöltem, és az irodalomjegyzékben szerepeltettem.

Ha a fenti nyilatkozattal valótlan állítottam, tudomásul veszem, hogy a záróvizsga-bizottság a záróvizsgából kizár és a záróvizsgát csak új dolgozat készítése után tehetek.

A leadott dolgozat, mely PDF dokumentum, szerkesztését nem, megtekintését és nyomtatását engedélyezem.

Tudomásul veszem, hogy az általam készített dolgozatra, mint szellemi alkotás felhasználására, hasznosítására a Magyar Agrár- és Élettudományi Egyetem mindenkori szellemi tulajdon-kezelési szabályzatában megfogalmazottak érvényesek.

Tudomásul veszem, hogy dolgozatom elektronikus változata feltöltésre kerül a Magyar Agrár- és Élettudományi Egyetem MATER Hallgatói Dolgozatok repozitóriumba. Tudomásul veszem, hogy a megvédett és

- nem titkosított dolgozat a védést követően
- titkosításra engedélyezett dolgozat a benyújtásától számított 5 év eltelte után nyilvánosan elérhető és kereshető lesz az Egyetem MATER Hallgatói Dolgozatok repozitóriumban.

Kelt: 2024 év Április hó 25 nap


Hallgató aláírása

NYILATKOZAT

Krassóné Józsa Ildikó (hallgató Neptun azonosítója: T10QX9) konzulenseként nyilatkozom arról, hogy a diplomadolgozatot áttekintettem, a hallgatót az irodalmi források korrekt kezelésének követelményeiről, jogi és etikai szabályairól tájékoztattam.

A záródolgozatot/szakdolgozatot/diplomadolgozatot/portfóliót a záróvizsgán történő védésre javaslom / nem javaslom¹.

A dolgozat állam- vagy szolgálati titkot tartalmaz: igen nem^{*2}

Kelt: Budapest, 2024 év április hó 21 nap

Kovács Zoltán
belső konzulens

¹ A megfelelő aláhúzendő.

² A megfelelő aláhúzendő.