

以近紅外線分光光度計偵測整粒稻穀 脂肪酸度含量

李汪盛、蕭介宗

摘 要

本研究重點在利用近紅外線分光光度計偵測整粒稻穀脂肪酸度含量，稻穀含水率為 13%，穀溫為 25°C。利用部份最小平方法所建立之整粒稻穀脂肪酸度含量校正線，驗證樣本之判定係數 (r_{val}^2) 為 0.87，驗證標準偏差 (SEP) 為 0.83 mg KOH/100g 乾物質。粉碎稻穀脂肪酸度含量校正線，驗證樣本之判定係數 (r_{val}^2) 為 0.94，驗證標準偏差 (SEP) 為 0.73 mg KOH/100g 乾物質。當穀溫由 10°C 變化至 40°C，穀溫對於稻穀脂肪酸度含量校正線之影響為穀溫每上升 1°C 脂肪酸度預測值將增加 0.24 mg KOH/100g 乾物質。

前 言

根據 Satake 及 Yamashita 之研究，粗蛋白質含量、直鏈澱粉含量、含水率及脂肪酸度含量對於白米食味有重要相關^(14,17)。台灣地處亞熱帶，稻穀儲藏之含水率通常為 13%，Chrastil 曾指出稻穀儲藏期間蛋白質及直鏈澱粉含量變化甚小；至於脂肪酸度含量，由於稻穀儲藏期間脂肪氧化而產生變化，而影響品質⁽⁶⁾。因此，可以藉由觀察稻穀脂肪酸度含量之變化而監控米質變化。Goto 指出糙米脂肪酸度超過 20-25 mg KOH/100g 乾物質時，米質變差⁽⁸⁾。綜合上述文獻可推知，脂肪酸度含量為一觀察稻穀儲藏期間米質變化之重要指標。傳統化學分析方法對於脂肪酸度含量之分析曠日廢時而且易造成環境污染。近紅外線分析技術具有快速、正確及無污染等優點，值得深入研究。

材料與方法

一、材料

臺中區農業改良場提供之 83 年一、二期，84 年一、二期粳、秈、糯稻，總計 50 種品種，產地則為彰化縣大村鄉、埤頭鄉、南投縣名間鄉及台中縣大甲鎮，每一樣本材料約 3 kg。

二、化學分析方法

整粒稻穀脂肪酸度化學成分分析時之含水率之測定：依據 AOAC 14.003 之真空烤箱乾燥法測定

之⁽⁴⁾，整粒稻穀在壓力小於 25 mmHg 之真空烤箱內，先以 60°C 乾燥 24 小時(避免澱粉糊化)後，再將溫度提升到 98-100°C 乾燥至恆重(約 72 小時)以測定含水率。

稻穀所含之粗脂肪及脂肪酸度之測定：主要參照 AOAC 939.05 之 Titrimetric method⁽⁵⁾。以 Soxhlet 連續抽萃裝置用乙醚為溶劑連續迴流抽萃 16 小時，抽出物經烘乾後稱重，視為粗脂肪含量。粗脂肪以溶媒 (95%乙醚：乙醇 = 2：1) 溶解後(AOAC 方法之溶媒為 Toluene-Alcohol 溶液，甲苯(Toluene)具毒性，故取代為乙醚)，以 phenolphthalein 為指示劑並以 0.178N KOH-Ethanol 標準溶液中中和滴定到溶液呈橙→粉紅色止。將中和 100 g 乾重稻米之游離脂肪酸所需之 KOH 之 mg 數，視為脂肪酸度。

以上各成分含量的測定皆以二重複試驗的方式進行，取其平均值；若重複分析值差異相差 5% 以上時，則再進行分析一次，分析值以較接近二者的平均為成分含量值。另外，由於整粒與粉碎的樣本是由同一個基本樣品均分而來，對於粉碎的樣本而言，除了含水率在粉碎的過程中因溫度的升高而散失外，其餘成分含量的變化甚微。因此，除含水率外，其他成分不重複進行化學分析，而直接用整粒稻米分析的結果做為參考值。

三、有關建立校正線之相關理論

本研究採用有關建立校正線之相關理論如多重線性迴歸(Multiple Linear Regression；MLR)，部份最小平方迴歸分析(Partial Least-Squares Regression；PLSR)等及 PCR 及 PLSR 模式選擇最佳因子的方法，請參考 Geladi 及 Kowalski、Marten 及 Naes、Haaland 及 Thomas 等研究^(7,9,11)。

四、有關性能評估的相關統計定義

下列有關性能評估的相關統計符號說明如下：Y 為校正組之實驗室化學成分分析值， Y_{sep} 驗證組之實驗室化學成分分析值， \hat{Y} 為校正線預測值， \bar{Y}_c 為校正組之實驗室化學成分分析值之平均值， \bar{Y}_p 為校正線預測值之平均值， n_{cal} 為校正樣本數目， n_{val} 為驗證樣本數目，n 為校正線波長數，A 為 PLSR 校正線使用之因子數目，當下述定義應用於 PLSR 模式時，n 可以被置換成 A。

1. 校正標準偏差(SEC)：

$$SEC = \left[\frac{\sum_{i=1}^{n_{cal}} (Y - \hat{Y})^2}{(n_{cal} - n - 1)} \right]^{1/2}$$

2. 證標準偏差(SEP)：

$$SEP = \left[\frac{\sum_{i=1}^{n_{val}} (Y_{sep} - \hat{Y})^2}{(n_{val} - n - 1)} \right]^{1/2}$$

3.相關係數(r)：

$$r = \left[\frac{\sum (\hat{Y} - \bar{Y}_p)^2}{\sum (Y - \bar{Y}_c)^2} \right]^{1/2}$$

4.判定係數為 r^2 ， r_{cal}^2 表示校正樣本之判定係數， r_{cv}^2 表示交叉驗證樣本之判定係數， r_{val}^2 表示驗證樣本之判定係數。

5.校正線 F 值：

$$F = \frac{\frac{\sum (\hat{Y} - \bar{Y}_p)^2}{n}}{\frac{\sum (Y - \hat{Y})^2}{n_{cal} - n - 1}}$$

$$F = \frac{r^2}{(1-r)^2} * \frac{n_{cal} - n - 1}{n}$$

6.系統誤差指數(ISV)：

ISV=校正線係數總和 (不包括常數項)。

7.隨機誤差指數(IRV)：

IRV=(校正線係數平方總和)1/2，(不包括常數項)。

8.RPD：

Williams 及 Sobering 提出利用驗證樣本之標準偏差(SD)與驗證標準偏差(SECV 或 SEP)之比值 (SD/SECV 或 SD/SEP = RPD)作為不同模式間性能之比較⁽¹⁶⁾。根據 Williams 及 Sobering 之研究結果，模式之實用等級分類如下：RPD ≥ 10(優)；10 > RPD ≥ 7(非常好)；7 > RPD ≥ 5(好)；5 > RPD ≥ 3(普通)；RPD < 3(失敗)。

9.聚合標準偏差(Pooled standard deviation；PSD)：

$$PSD = \sqrt{\frac{\sum d_i^2}{2m}}$$

其中 m 為樣本數， d_i 為同一樣本之二重複化學分析之差值。

10.可被解釋變異(Explained variance)：

可被解釋變異(%)=判定係數(r^2)×100 %

11.平均誤差(Bias)：

$$Bias = \frac{\sum_{i=1}^{n_{val}} (Y_{sep} - \hat{Y})}{n_{val}}$$

12.校正之均方根誤差(Root mean square error of calibration; RMSEC)：

$$\text{RMSEC} = \left(\frac{\sum_{i=1}^{n_{\text{cal}}} (Y - \hat{Y})^2}{n_{\text{cal}}} \right)^{0.5}$$

13.交叉驗證之均方根誤差(Root mean square error of cross validation; RMSEV)

$$\text{RMSEV} = \left(\frac{\sum_{i=1}^{n_{\text{val}}} (Y_{\text{sep}} - \hat{Y})^2}{n_{\text{val}}} \right)^{0.5}$$

14. 界外值之剔除：

$$(Y - \hat{Y}) > \left(3 \times \text{RMSEC} \times \sqrt{\frac{n_{\text{cal}} - 1 - A}{n_{\text{cal}}}} \right)$$

結果與討論

迴歸理論與實際經驗均證實近紅外線的測量精度受限於參考之化學分析值。脂肪酸度之二重複化學分析誤差之聚合標準偏差(pooled standard deviation; PSD)為 0.66 mg KOH/100g 乾物質。驗證樣本之標準偏差為 3.33 mg KOH/ 100 g 乾物質，脂肪酸度校正樣本與驗證樣本化學分析之相關統計資料，如表 1 所示。整粒稻穀脂肪酸度校正樣本與驗證樣本之頻率分佈情形，如圖 1。

表 1.脂肪酸度校正樣本與驗證樣本化學分析之相關統計資料

Table 1. Results from calibration and validation sets for fat acidity reference analyses

	Calibration set	Validation set
Mean	19.80	20.01
Standard deviation	3.37	3.33
Minimum	13.02	13.76
Maximum	27.85	26.32
Varieties	50	30
Sample size	90	50
PSD ^z	0.66	0.64

z Pooled standard deviation (PSD) of duplicate analyses

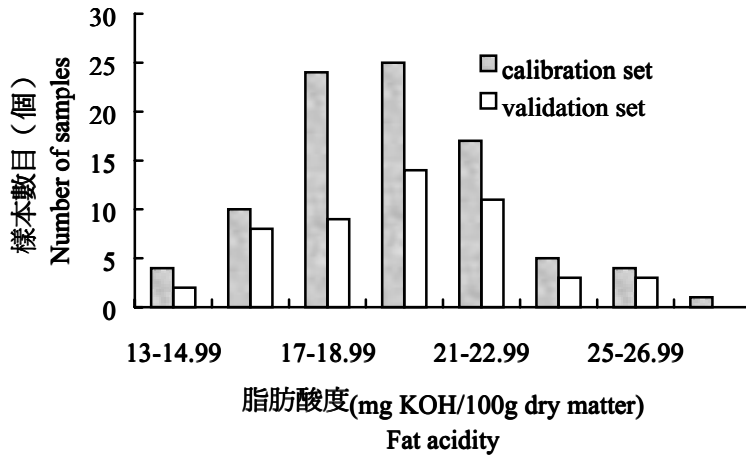


圖 1. 脂肪酸度校正樣本與驗證樣本之頻率分佈圖
Fig. 1. Distribution of calibration and validation sets.

一、利用 MLR 方法決定整粒稻穀與粉碎稻穀之脂肪酸度

原始光譜及二階差分光譜脂肪酸度之逐步迴歸分析結果，如表 2 所示。由表中原始光譜模式可發現，使用七個波長至九個波長之校正線，交叉驗證之判定係數雖然由 0.89 上升至 0.92，但 SEP 卻由 0.94 上升至 1.27。因此，超過 7 個波長以上之校正線不應該使用。由表中 F 統計值可發現使用 5 個波長之校正線 F 值最大，因此，如果所建立之校正線是用來轉移至其他儀器使用，則應選取 F 值最大之校正線；但本校正線的目的用在 Bran+Luebbe InfraAlyzer 500 儀器，校正線之選取應以 SEC 或 SEP 最小值為準。另外 RPD 值亦可做為校正線選取之參考。RPD 值大於或等於 3 表示該校正線具實用性；小於 3 則表示校正線尚需改進。由表中 RPD 值大小可決定最佳的校正線為使用 7 個波長之校正線，驗證樣本之判定係數為 0.88，SEP 為 0.94。

近紅外線分光光度計之偵測精度受粒徑之影響，為了證實此一論點，特別將整粒稻穀樣本予以粉碎，重新建立粉碎稻穀之脂肪酸度校正線做為比較之用。實驗結果顯示，使用 8 個波長之驗證樣本判定係數為 0.91，SEP 為 0.90。粉碎樣本所建立之校正線大約較整粒樣本所建立之校正線增加預測能力約 3%。粉碎樣本 8 個波長之 MLR 校正線，如式 1 所示：

$$\begin{aligned} \text{脂肪酸度 (mg KOH/100g 乾物質)} = & 93.4321 - 397.444 \text{ Log } (1/R_{1428}) + 574.7509 \text{ Log } (1/R_{1620}) - 617.567 \\ & \text{Log } (1/R_{1672}) + 497.3156 \text{ Log } (1/R_{1728}) - 237.602 \text{ Log } (1/R_{1928}) + 356.8059 \text{ Log } (1/R_{2000}) - 985.59 \\ & \text{Log } (1/R_{2288}) + 652.1175 \text{ Log } (1/R_{2468}) \dots\dots\dots(1) \end{aligned}$$

表 2. 整粒稻穀脂肪酸度 MLR 校正線之性能相關統計資料

Table 2. Multiple linear regression (MLR) model performance for fat acidity of whole-kernel samples model.

Model	No. of terms	r_{cal}^2	SEC	F	r_v^2	SECV	r_{val}^2	Bias	S_{val}	SEP	RPD	Rating ^z
Log (1/R)	1	0.13	2.23	-	0.09	2.29	-	-	-	2.42	1.4	NS
	2	0.31	1.98	-	0.27	2.06	-	-	-	2.63	1.3	NS
	3	0.76	1.17	-	0.74	1.23	-	-	-	1.24	2.7	NS
	4 ^y	0.82	1.01	132	0.79	1.09	0.83	-0.36	1.04	1.09	3.1	F
	5 ^x	0.89	0.80	174	0.87	0.87	0.86	0.17	0.99	1.01	3.3	F
	6 ^w	0.90	0.77	153	0.87	0.87	0.87	-0.20	1.02	0.99	3.4	F
	7 ^v	0.91	0.74	142	0.89	0.79	0.88	-0.15	1.01	0.94	3.5	F
	8	0.92	0.68	-	0.91	0.70	-	-	-	1.21	2.8	NS
	9	0.93	0.65	-	0.92	0.69	-	-	-	1.27	2.6	NS
Second difference ^v	1	0.26	2.05	-	0.23	2.11	-	-	-	2.34	1.4	NS
	2	0.49	1.71	-	0.46	1.77	-	-	-	1.78	1.9	NS
	4	0.74	1.21	-	0.71	1.28	-	-	-	1.31	2.5	NS
	7	0.82	1.00	-	0.78	1.12	-	-	-	1.34	2.5	NS
	9	0.87	0.87	-	0.83	0.99	-	-	-	2.50	1.3	NS

*The recommended model for whole-kernel rough rice calibration, wavelengths selected (λ_i , nm): 1196, 1376, 1604, 1680, 1780, 2100, 2380, coefficients (B_0, B_1, \dots, B_i): -2.098, 752.657, -861.416, -1655.365, -862.59, 2620.984, 190.064, -196.91.

^z Rating of RPD: F = Fair (3-5); NS = Not Satisfactory (<3); RPD, ratio of standard deviation (SD) of the data in validation set to SEP = SD/SEP.

^y wavelengths selected (λ_i , nm): 1652, 1756, 1100, 1576, coefficients (B_0, B_1, \dots, B_i): -3.014, -1700.378, 2232.697, 164.209, -701.381.

^x wavelengths selected (λ_i , nm): 1680, 1756, 1176, 1604, 1380, coefficients (B_0, B_1, \dots, B_i): -4.477, -1255.998, 2492.569, 506.550, -1174.626, -582.063.

^w wavelengths selected (λ_i , nm): 1692, 1756, 1184, 1600, 1380, 1272, coefficients (B_0, B_1, \dots, B_i): -3.974, -1774.46, 2985.682, 801.879, -1135.618, -674.853, -228.31.

^v Second differences were computed as three segment second central difference. The moving average was 24 nm, the derivative segment was 24 nm, and the gap between derivative segments was 30 nm; r_{cal}^2 , coefficient of determination of calibration; SEC, standard error of calibration; r_v^2 , coefficient of determination of cross validation; SECV, standard error of cross validation; r_{val}^2 , coefficient of determination of validation; SEP, standard error of prediction; Bias, the mean of the reference values minus NIR predicted values; S_{val} , slope of validation; F, F values.

二、利用 PLSR 迴歸分析方法決定整粒稻穀及粉碎稻穀之脂肪酸度

整粒稻穀與粉碎稻穀之脂肪酸度 PLSR 模式校正結果，如圖 2 所示。由圖 2 可發現模式之可被解釋變異(explained variance)隨著使用之因子數增加而增加，然而超過某一因子數之後即發生增加減緩或減少趨勢，由圖 2 亦可發現模式之 RMSEV 亦有類似情況發生。根據 Unscrambler 軟體之建議，針對整粒稻穀與粉碎稻穀之 PLSR 校正線分別為 9 個及 12 個因子之校正線。整粒稻穀 9 個因子之校正線與粉碎稻穀之 12 個因子之校正線之校正及驗證結果，如表 3。比較 PLSR 與 MLR 模式可發現，PLSR 模式在預測能力方面有相當的提升，整粒樣本 RPD 由 3.5 提升至 4.0；粉碎樣本 RPD 由 3.7 提升至 4.6，此分析結果與劉等分析結果相同⁽²⁾，PLSR 分析方法優於 MLR 分析方法。圖 3 為粉碎稻穀近紅外線預測值與化學分析值之關係圖，使用模式為 12 個因子之 PLSR 校正線。

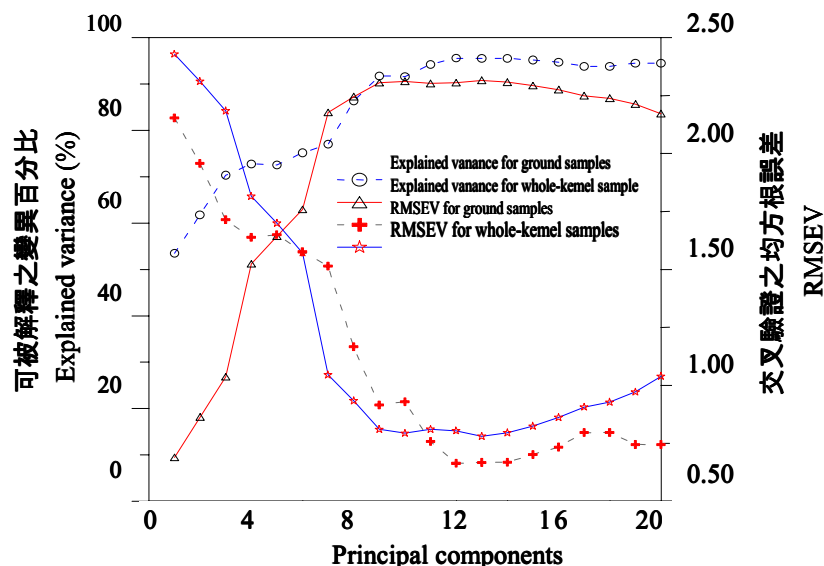


圖 2. 整粒稻穀脂肪酸度校正線分析中可被解釋之變異百分比和校正樣本交叉驗證之均方根誤差 (root mean square error of cross validation ; RMSEV)與主成分間之關係圖。

Fig. 2. Percentage of explained variance and estimated predictive root mean square error of cross validation (RMSEV) for fat acidity in different particle sizes as a function of the number of principal components (PC) in the calibration models.

表 3. 整粒稻穀與粉碎稻穀脂肪酸度校正線校正及驗證性能之相關統計資料

Table 3. Near-infrared reflectance spectroscopy (NIRS) calibration and validation results for fat acidity of both whole-kernel and ground rough rice using partial-least-squares regression (PLSR) model.

	Calibration set		Validation set	
	Whole kernel	Ground	Whole kernel	Ground
Mean	19.8	19.8	20.01	20.01
SD	3.37	3.37	3.33	3.33
PC	9	12	-	-
r_{cal}^2	0.93	0.97	-	-
SEC	0.66	0.68	-	-
r_{cv}^2	0.90	0.95	-	-
SECV	0.81	0.71	-	-
r_{val}^2	-	-	0.87	0.94
SEP	-	-	0.83	0.73
Bias	0.03 ^z	-0.01 ^z	0.21 ^y	0.16 ^y
Slope	0.99 ^x	1 ^x	0.98 ^w	0.99 ^w
RPD	-	-	4.0	4.6
Rating	-	-	F	F

^z Bias for cross validation; ^y Bias for validation; ^x Slope for cross validation; ^w Slope for validation.

r_{cal}^2 , coefficient of determination of calibration; SEC, standard error of calibration; r_{cv}^2 , coefficient of determination of cross validation; SECV, standard error of cross validation; r_{val}^2 , coefficient of

determination of validation; SEP, standard error of prediction; RPD, ratio of SEP to SD; F, fair (RPD = 3 to 5).

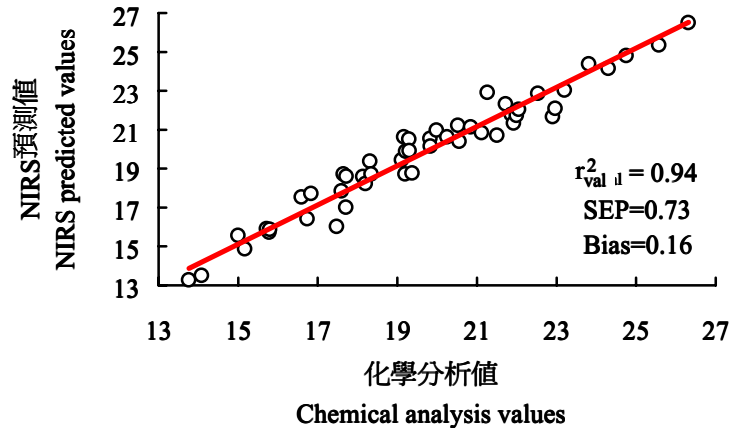


圖 3. 粉碎稻穀脂肪酸度近紅外線預測值與化學分析值之關係圖，使用模式為 12 個因子之 PLSR 校正線。

Fig. 3. Relationship between fat acidity measured by chemical analysis and by NIRS employing a 12-PC PLSR model for ground samples.

不同波長範圍整粒稻穀之脂肪酸度 PLSR 模式校正結果，如表 4 所示，使用 1100-2500 nm 波長之校正線有較高之判定係數(r_v^2)為 0.9，若我們仔細檢視圖 4 之迴歸係數與相對應之使用波長圖，我們可以發現 1204, 1372, 1408, 1724, 1756, 1896, 1980, 2048 及 2268 nm 等波長存在某些重要資訊。1408 及 1980 nm 接近水的強吸收峰 1409 及 1910 nm。根據前述之整粒稻穀 MLR 校正線 1196, 1376 及 1780 nm 等波長似乎相當重要。圖 4 包含兩個正吸收峰(接近 1196 及 1780 nm)及一個負吸收峰(接近 1372 nm)。Osborne and Fearn 引用 Holeman 及 Edmondson 之研究結果指出脂肪酸包含 CH₂ 第一泛音(overtone)吸收波長 1740 及 1770 nm 及 =CH 第一泛音吸收波長 1680 nm，這兩個波長 1740 及 1770 nm 在圖 4 亦可被發現^(10,13)。另外由於氫鍵引起之 r_v^2 增加及 SECV 降低亦可由不同波段校正結果中被發現，如 1100 至 1396 nm 與 1100 至 1496 nm 或 1500 至 1796 nm 與 1500 至 1996 nm 之校正結果。使用較小範圍之校正線 1500 至 1996 nm 似乎優於其他範圍如 1100 至 1396 nm 或 1100 至 1496 nm 或 1500 至 1796 nm 或 2108 至 2500 nm。最差校正結果為使用波長範圍 2108 至 2500 nm 之校正線，判定係數僅 0.49，SECV 為 1.83 mg KOH/100g 乾物質。

表 4. 不同波長範圍之整粒稻穀脂肪酸度 PLSR 模式校正結果

Table 4. Calibration results for fat acidity of whole-kernel rough rice using partial-least-squares regression model at different wavelength regions.

Wavelength (nm)	PC	No. of samples	r_v^2	SECV	Bias
1100-2500	9	90	0.90	0.82	0.03
1100-1396	10	90	0.58	1.65	-0.02
1100-1496	13	90	0.62	1.56	-0.02
1100-1852	8	90	0.85	0.98	-0.02
1500-1796	8	90	0.58	1.65	-0.03

1500-1996	12	90	0.66	1.48	-0.02
2108-2500	7	90	0.49	1.83	-0.01

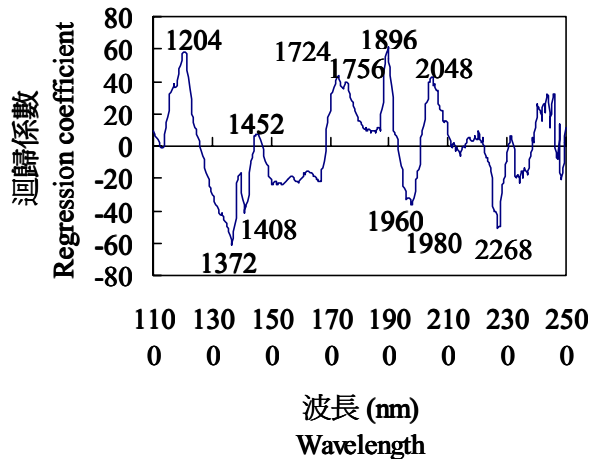


圖 4. 整粒稻穀脂肪酸度 9 個因子之 PLSR 校正線迴歸係數與使用波長之關係圖。

Fig. 4. Regression coefficients in calibration models on all wavelengths of 9-PC PLSR model for fat acidity analysis of whole-kernel rough rice.

本研究結果與與其他文獻脂肪酸度校正線性能之比較，如表 5。彭等整粒稻穀、粉碎稻穀、整粒白米及粉碎白米脂肪酸度校正線， r_{cal}^2 分別為 0.7、0.7、0.84 及 0.68，SEC 為 8.36、8.60、1.79 及 2.58 mg KOH/100g 乾物質，但 SEP 分別為 8.74、19.57、3.44 及 4.90 mg KOH/100g 乾物質，無實用性⁽¹⁾。鍾與蕭整粒稻穀脂肪酸度校正線， r_{cal}^2 雖達 0.88，SEC 為 0.82 mg KOH/100g 乾物質，但無驗證結果且其校正樣本為單一品種「台中 189 號」⁽³⁾。本研究針對整粒稻穀及粉碎稻穀以 PLSR 模式建立脂肪酸度校正線之 r_{cal}^2 分別為 0.93 及 0.97，SEC 分別為 0.66 及 0.68 mg KOH/100g 乾物質， r_{val}^2 分別為 0.87 及 0.94，SEP 分別為 0.83 及 0.73 mg KOH/100g 乾物質，RPD 分別為 4.0 及 4.6，已達實用階段，本研究脂肪酸度校正線之性能優於彭等及鍾與蕭之研究。

表 5. 脂肪酸度校正線性能之比較

Table 5. Comparison of different calibration performance of fat acidity.

	彭等 ⁽²⁾			鍾與蕭 ⁽³⁾		本研究				
	r_{cal}^2	SEC	SEP	r_{cal}^2	SEC	r_{cal}^2	SEC	r_{val}^2	SEP	RPD
整粒稻穀	0.70	8.36	8.74	0.88	0.82	0.93	0.66	0.87	0.83	4.0
粉碎稻穀	0.70	8.60	19.57			0.97	0.68	0.94	0.73	4.6
整粒白米	0.84	1.79	3.44							
粉碎白米	0.68	2.58	4.90							

三、穀溫對脂肪酸度近紅外線校正線之影響

Niernberger 及 Williams 等針對不同穀溫對近紅外線校正線之影響曾經做過徹底之研究^(12,15)。

鍾與蕭亦針對不同穀溫對含水率、蛋白質、直鏈澱粉及脂肪酸度近紅外線校正線之影響提出研究結果⁽³⁾。本文根據鍾與蕭所提供之不同溫度(10、20、30、40°C)之整粒稻穀 50 個原始光譜並以所發展之 25°C 穀溫下之整粒稻穀 9 個因子 PLSR 近紅外線校正線預測之結果如表 6 所示。穀溫對所發展之校正線之影響為每°C 上升 0.24 mg KOH/100g 乾物質。利用雙尾 t 檢定，檢定結果發現不同穀溫之平均偏差之 t 值分別為 7.61、3.61、5.8 及 8.39 均大於 2.68，表示穀溫對近紅外線之預測結果之影響不能忽略。各個溫度之平均偏差與穀溫之關係，如圖 5。

表 6. 不同溫度下之整粒稻穀光譜利用上述所發展之整粒稻穀脂肪酸度 9 個因子 PLSR 模式之預測結果

Table 6. Statistical Results for testing the effect of four different whole kernel rough rice temperatures on prediction accuracy of NIRS calibration.

Grain temperature	10°C	20°C	30°C	40°C
Bias ^z	-2.55	-0.96	1.74	4.52
SD ^y	2.37	1.88	2.12	3.81
T ^x	7.61	3.61	5.8	8.39

^z Bias: Mean for NIRS calculated minus chemical analysis values (mg KOH/100g dry matter).

^y SD: Standard deviation (mg KOH/100g dry matter).

^x $t = \frac{|\text{Bias}|}{\text{SD} / \sqrt{m}}$, m = number of samples, m=50.

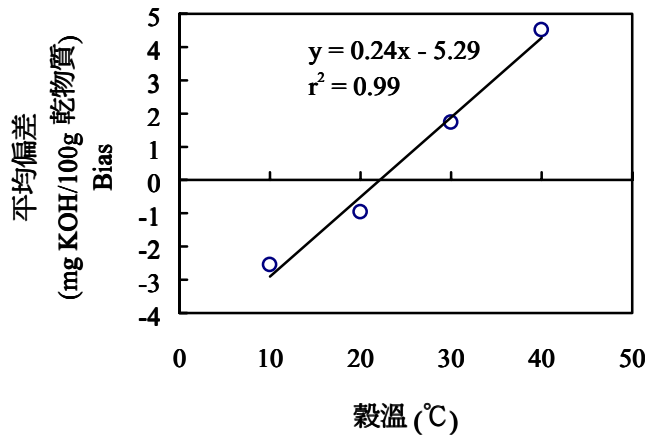


圖 5. 平均偏差與穀溫之關係圖

Fig. 5. Relationship between bias and grain temperature.

結 論

利用近紅外線分光光度計偵測整粒稻穀脂肪酸度含量，使用波長範圍 1100-2500 nm，稻穀含水率為 13%，穀溫為 25°C，校正樣本為 90 個，驗證樣本為 40 個，品種總數為 50 種。利用 9 個因子之部份最小平方法所建立之整粒稻穀脂肪酸度含量校正線，驗證樣本之判定係數 (r_{va1}^2) 為 0.87，驗證標準偏

差 (SEP) 為 0.83 mg KOH/100g 乾物質。利用 12 個因子之部份最小平方法所建立之粉碎稻穀脂肪酸度含量校正線，驗證樣本之判定係數 (r_{val}^2) 為 0.94，驗證標準偏差 (SEP) 為 0.73 mg KOH/100g 乾物質。當穀溫由 10°C 變化至 40°C，穀溫對於稻穀脂肪酸度含量校正線之影響為穀溫每上升 1°C 脂肪酸度預測值將增加 0.24 mg KOH/100g 乾物質。

參考文獻

- 1.彭智平、李汪盛、蕭介宗。1997。以近紅外線分光光度計測定影響稻米食味之主要成分。農業工程學報 43(2): 56-72。
- 2.劉昌群、彭智平、蕭介宗。1997。稻米近紅外線光譜之多變數分析。農業機械學刊 6(3): 9-19。
- 3.鍾鎮錫、蕭介宗。1997。穀溫及含水率對近紅外線分光光度計偵測稻穀品質的影響。農業機械學刊 4(3): 1-14。
- 4.AOAC. 1984. Official methods of analysis. 13 edition. Association of Official Analytical Chemists. Washington, DC.
- 5.AOAC. 1990. Official methods of analysis. 15 edition. Washington, D. C.: Association of Official Analytical Chemists.
- 6.Chrastil, J. 1994. Effect of storage on the physicochemical properties and quality factors of rice. Pages 49-81 in: Rice Science and Technology. W. E. Marshall and J. I. Wadsworth, eds. Marcel Dekker: New York.
- 7.Geladi, P. and Kowalski, B. R. 1986. Partial least-squares regression: A tutorial. Analytica Chimica Acta. 185: 1-17.
- 8.Goto, K. 1996. The relationship between rice storage and quality. A Seminar on Cold Storage Technique for Rice. National Chung-Shing University: Taichung, Taiwan.
- 9.Haaland, D. M. and Thomas, E. V. 1988. Partial least-squares methods for spectral analyses. Anal. Chem. 60: 1193-1202.
- 10.Holman, R. T., and Edmondson, P. R. 1956. Near infrared spectra of fatty acids and related substances. Anal. Chem. 28: 1533-1538.
- 11.Marten, H. and Naes, T. 1989. Methods for calibration. In "Multivariate calibration". New York: John Wiley & Sons.
- 12.Niernberger F. F. 1981. Niernberger hints temperature may cause N.I.R. problems. Milling and Baking News 60 (21 April): 33-34.
- 13.Osborne, B. G., and Fearn, T. 1986. Near infrared spectroscopy in food analysis, pp. 21-42. Longman Scientific & Technical, England.
- 14.Satake, T. 1990. Studies on modern milling technology (in Japanese), pp. 59-185. Tokyo University Shuppankai.
- 15.Williams, P.C., Norris, K. H., and Zarowski, W. S. 1982. Influence of temperature on estimation of protein and moisture in wheat. Cereal Chem. 59: 473-7.
- 16.Williams, P.C. and Sobering, D.C. 1993. Comparison of commercial near infrared transmittance and reflectance instruments for analysis of whole grains and seeds. J. Near Infrared Spectrosc. 1: 25-32.

17. Yamashita, R. 1993. New technology in grain postharvesting, Farm Machinery Industrial Research Corp., Tokyo 101, Japan.

Determining the Fat Acidity of Rough Rice by Near-Infrared Reflectance Spectroscopy

Wang-Sheng Li and Jai-Tsung Shaw

Summary

Near-infrared reflectance spectroscopy (NIRS) was used to develop calibration curves for determining the fat acidity of whole-kernel and ground rough rice with 13% moisture content at 25°C. Partial-least-squares regression (PLSR) uses the optimal calibration curve for whole-kernel rough rice to measure the coefficient of determination of validation (r_{val}^2) and standard error of prediction (SEP) of 0.87 and 0.83 mg of KOH/100g of dry matter, respectively. However, the optimal calibration curve for ground rough rice has a higher of validation (r_{val}^2) and lower SEP of 0.94 and 0.73 mg of KOH/100g of dry matter, respectively. From 10 to 40°C, the temperature effect causes an increase of 0.24 mg of KOH/100g of dry matter/°C in the predicted fat acidity of whole-kernel rough rice.

Key words: Near-infrared reflectance spectroscopy, Fat acidity, Rough rice.