

# 以手提式近紅外線分光光度計測定稻米蛋白質 及直鏈澱粉含量

李汪盛、蕭介宗<sup>1)</sup>

## 摘 要

利用化學分析方法分析稻米化學組成，可以用來評估稻米品質，但是費時、價格高且容易造成環境污染。本研究研發之手提式近紅外線分光光度計包括光纖探針、二極體陣列式光譜儀(範圍 950-1650 nm)及手提電腦等設備，可應用於快速偵測整粒稻穀蛋白質及直鏈澱粉含量，樣本含水率為 13 % (w.b.)，溫度為 25°C。經由標準化轉換處理後之光譜，再利用部份最小平方方法分析，分析結果顯示，利用 9 個因子之部份最小平方方法所建立之整粒稻穀直鏈澱粉含量校正線，驗證樣本之判定係數 ( $r^2$ ) 為 0.88，驗證標準偏差 (SEP) 為 0.52 %。利用 12 個因子之部份最小平方方法所建立之整粒稻穀蛋白質含量校正線，驗證樣本之判定係數為 0.88，驗證標準偏差為 0.28 %。

## 前 言

近紅外線檢測技術具有快速、價廉及環保等優點，目前在國外已經被廣泛使用於蔬果及穀類品質之偵測。而國內方面有關近紅外線檢測技術之相關研究主要以破壞性檢測為主，包括稻米之內部品質，如含水率、蛋白質、直鏈澱粉及脂肪酸度等成分之測定及各種果汁含糖量之近紅外線光譜基本分析試驗，結果良好；至於非破壞性檢測方面，主要有稻米之內部品質及少數水果，如新世紀梨、幸水梨、鳳梨、椪柑、芒果、蓮霧及迷你番茄等水果之甜度檢測，惟尚在發展階段，性能有待提升且使用之近紅外線光譜分析儀器屬於較笨重及昂貴之機型(如 Bran-Luebbe 500 型及 NIRSystem 6500 型等)，推廣不易，且較不適合於現場操作使用。本研究擬利用重量輕、價廉且攜帶方便之手提式近紅外線分光光度計進行稻米蛋白質及直鏈澱粉含量之測定並評估其實用性，此技術可做為加工線場稻米收購及計價之參考。

## 材料與方法

### 一、材料

臺中區農業改良場提供之 1994 年一、二期，1995 年一、二期，1996 年一期、秈稻，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，蛋白質與

---

1) 國立台灣大學農業機械工程學系教授

直鏈澱粉校正與驗證組樣本之數目與品種均相同，校正組包括 45 個品種，85 個樣本，驗證組包括 25 個品種，50 個樣本，校正組品種包括目前本省栽培之主要品種如台 1 號 ~ 台 11 號、台中秈 10 號、台中 189 號及高雄 139 號等。

## 二、手提式近紅外線分光光度計反射光譜之取得

將待測樣本置於 Bran+Luebbe 測量整粒樣本的標準承杯上，再使用手提式分光光度計以獲得試料之反射光譜。光纖探頭固定於暗室內，光纖之測量端置於待測樣本上方 1.2 cm 處，使用波長為 950 ~ 1650 nm，入射光照射穀物後產生之擴散反射經由同心圓光纖內環回傳至分光光度計。曝光時間 0.05 秒。使用之參考標準為陶瓷標準白板(Ceramic block)，近紅外線反射光譜資料之取得為五重複。

## 三、化學分析方法

蛋白質含量測定：是採用 AOAC<sup>(9)</sup>14.068 之 Kjeldahl method 分析氮的含量，再乘以係數 6.25，以求蛋白質含量。

直鏈澱粉含量測定：依 Juliano 等<sup>(9)</sup>之比色方法，先以純精白再來米直鏈澱粉及支鏈澱粉制定吸光值標準曲線後，然後在 620 nm 測樣本之吸光值以定樣本直鏈澱粉含量。

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。

## 三、有關建立校正線之相關理論

有關建立校正線之基本相關理論如部分最小平方迴歸分析(Partial Least-Squares Regression; PLSR)及 PLSR 模式選擇最佳因子的方法，請參考 Marten 及 Naes<sup>(10)</sup>研究，Haaland 及 Thomas<sup>(8)</sup>研究，至於標準化轉換及相乘性散射校正等光譜預處理方法，簡單說明如下：

### (一) 相乘性散射校正

Geladi 等<sup>(7)</sup>提出相乘性散射校正方法(Multiplicative scatter correction; MSC)消除待測物粒徑差異所造成之光散射。MSC 方法的基本原理為光散射與化學成分造成之吸收光譜明顯不同，因此利用很多波長，觀察其吸收光譜之變化即可區別真正之吸收值與光散射雜訊之區別。各個樣本吸收光譜散射雜訊之估計是相對於一個理想樣本之吸收光譜，此理想樣本一般以所有樣本之平均光譜表之。本研究使用之 MSC 版本為最簡單之 MSC 方法。任何樣本吸收光譜，各個波長之散射係數相同。

若  $x$  代表某樣本 NIR 吸收光譜且  $\bar{x}$  代表所有樣本之平均 NIR 吸收光譜， $e$  代表 NIR 殘差光譜(residual spectrum)，則每個樣本之吸收光譜與平均 NIR 吸收光譜之關係，表示如下：

$$X = a + b\bar{X} + E \dots\dots\dots (1)$$

其中  $a$ 、 $b$  與  $e$  之估計值可利用最小平方法求出、 $\hat{b}$ 、 $\hat{e}$ ； $\hat{b}$  稱為簡單迴歸之斜率(slope)， $\hat{a}$ 、 $\hat{b}$ 、and  $\hat{E}$  稱為截距(intercept)或偏差(bias)。MSC 處理後之光譜  $X_{MSC}$  可表示如下：

$$X_{MSC} = (X - \hat{a})/\hat{b} = \bar{x} + \hat{e}/\hat{b} \dots\dots\dots (2)$$

### (二) 標準化轉換

Barnes 等<sup>(4)</sup>提出標準化轉換(Standard normal variate transformation; SNV) 針對各個光譜

(spectrum)做正規化處理(即每條光譜之平均值為 0，標準偏差為 1)，如此可以克服不同樣本之吸收光譜因粒徑差異造成光程(pathlength)改變而產生之基線偏移(baseline shift)現象，標準化轉換過程如式 3 所示，其中 k 為波長指標，k 的範圍為(1~n)，n 為使用波長數。 $\lambda_k$ 表示第 k 個波長， $\lambda_1$ 表示起始波長， $\lambda_n$ 表示最後波長， $(\lambda_1 \sim \lambda_n)$ 表示光譜之波長範圍為 $\lambda_1$ 至 $\lambda_n$ ， $\bar{x}_{(\lambda_1 \sim \lambda_n)}$ 為波長範圍 $\lambda_1 \sim \lambda_n$ 吸收光譜之平均值，圖 1 為台農秈 20 號整粒稻穀原始光譜經過 SNV 處理前後之情形，由圖中可發現原始光譜中吸收值大者訊號加強較明顯。換言之，SNV 處理有加強峰谷之效應，但雜訊亦被放大。

$$SNV_{\lambda_k} = (x_{\lambda_k} - \bar{x}_{(\lambda_1 \sim \lambda_n)}) / \sqrt{\frac{\sum (x_{\lambda_k} - \bar{x}_{(\lambda_1 \sim \lambda_n)})^2}{n - 1}} \dots\dots\dots(3)$$

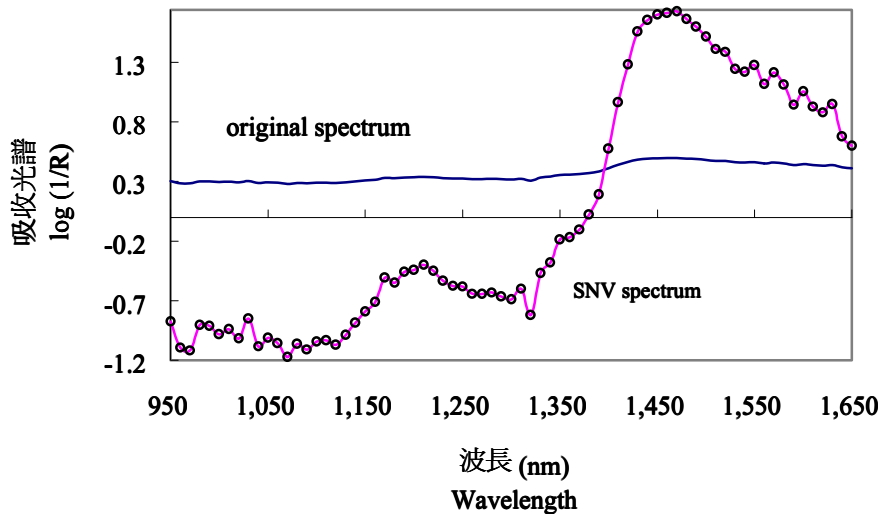


圖 1. 台農秈 20 號整粒稻穀原始光譜經過 SNV 處理前後之情形  
 Fig 1. The SNV and Log (1/R) spectra of roug rice Tanan Sen 20

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。

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) :

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

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  $r^2$

5. 校正線 F 值 :

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

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

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)<sup>1/2</sup>, (不包括常數項)。

8. RPD :

Williams 及 Sobering<sup>(13)</sup> 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。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<sub>i</sub> 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:

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

## 五、符號說明

1.  $D_w(\text{left, right, polynomial})$ :

$D$  表示差分法,  $w$  表示差分法之階次, 小括號內之  $\text{left}$  代表欲進行差分處理之點左邊使用之點數,  $\text{right}$  代表欲進行差分處理之點右邊使用之點數,  $\text{polynomial}$  代表使用之迴歸曲線次數, 迴歸區間內參與迴歸之點數為  $(\text{left} + \text{right} + 1)$  點, 如  $D_1(2, 2, 2)$  表示為 5 點 Savitsky-Golay<sup>(11)</sup> 一階差分, 使用之迴歸多項式為 2 次曲線。

2.  $D_w(\text{left, right, polynomial}) + \text{MSC}$ :

$D_w(\text{left, right, polynomial})$  符號意義同上述說明,  $+$  號表示經過  $+$  號以前之處理後再配合  $+$  號以後之處理,  $\text{MSC}$  表示進行相乘性散射校正(Multiplicative scatter correction;  $\text{MSC}$ ), 如  $D_2(2, 2, 2) + \text{MSC}$  代表經過 5 點 Savitsky - Golay 二階差分, 使用之迴歸多項式為 2 次曲線後之光譜再配合進行相乘性散射校正。

## 結果與討論

蛋白質及直鏈澱粉含量之二重複化學分析誤差之綜合標準偏差(pooled standard deviation;  $\text{PSD}$ )分別為 0.06 % (d.b.)及 0.12 % (d.b.)。驗證樣本之標準偏差為 3.33 % d.b., 蛋白質及直鏈澱粉校正與驗證樣本化學分析之相關統計資料, 如表 1 所示。

表 1. 蛋白質及直鏈澱粉含量校正與驗證樣本化學分析之相關統計資料

Table 1. The statistics of calibration and validation set for protein and amylose content analyses by wet chemicals

	Protein (% d.b.)		Amylose (% d.b.)	
	Calibration	Validation	Calibration	Validation
	Set	Set	Set	Set
Minimum	6.52	6.82	14	13.99
Maximum	11.51	11.11	25	20.99
Mean	7.98	7.91	18.00	17.71
SD	0.86	0.79	1.74	1.51
Varieties	45	25	45	25
Sample size	85	50	85	50
PSD <sup>z)</sup>	0.06	0.06	0.12	0.12

z) Pooled standard deviation of the duplicate chemical analyses.

因為利用 Optical Solutions 公司 PS-1 手提式近紅外線分光光度計在測量整粒稻穀之反射光譜時基線偏移現象相當明顯，故原始光譜資料之分析不列入考慮。蛋白質及直鏈澱粉含量校正線不同分析方法性能之相關統計資料，列於表 2。原始光譜資料利用 SNV 或二階差分方法處理可以有效克服儀器因為光程差異及表面粗糙度不同引起之基線偏移現象。差分方法或 MSC 方法對 SNV 處理後光譜之直鏈澱粉校正線性能之提升相當有限，經過相關係數相等檢定結果顯示(0.05 顯著水準)，差分方法或 MSC 處理對於 SNV 處理後光譜之校正線性能提昇沒有助益。整粒稻穀原始光譜經過 SNV 處理或差分處理後以 PLSR 建立之直鏈澱粉校正線之相關係數無顯著差異。整粒稻穀原始光譜利用 SNV 處理或利用結合 SNV 及差分處理後以 PLSR 建立之蛋白質含量校正線之相關係數差異未達顯著水準，但由表 2 中可發現  $D_1(2, 2, 2)$  及  $D_2(2, 2, 2)$  處理對於經過 SNV 處理過之光譜蛋白質含量校正線性能分別將低 5% 及 6%。

表 2. 手提式近紅外線分光光度計整粒稻穀蛋白質及直鏈澱粉校正線性能之相關統計資料

Table 2. PLSR model performances for amylose and protein content calibrations of rough rice by a portable near-infrared spectroscopy.

Contents	Spectra	Maths	PCs	Size	$r^2_{cal}$	SEC	$r^2_{cv}$	SECV
Amylose	Log (1/R)	$D_2(2, 2, 2)$	11	85	0.93	0.40	0.91	0.46
	SNV <sup>z)</sup>	No pretreatment	9	85	0.94	0.44	0.92	0.51
	SNV	MSC	9	85	0.93	0.45	0.91	0.51
	SNV	$D_1(2, 2, 2)$	12	85	0.94	0.42	0.92	0.50
	SNV	$D_2(2, 2, 2)$	11	85	0.87	0.63	0.83	0.72
	SNV	$D_1(2,2,2) + MSC$	11	85	0.92	0.49	0.89	0.57
	SNV	$D_2(2,2,2) + MSC$	18	85	0.92	0.50	0.87	0.62
Protein	Log (1/R)	$D_2(2, 2, 2)$	11	85	0.93	0.18	0.91	0.21
	SNV	No pretreatment	12	85	0.93	0.23	0.90	0.27
	SNV	$D_1(2, 2, 2)$	12	85	0.89	0.29	0.85	0.33
	SNV	$D_2(2, 2, 2)$	14	85	0.89	0.28	0.84	0.34

z) Standard normal variate transformation; SNV.

圖 2 為整粒稻穀原始光譜經過 SNV 處理後以 PLSR 模式建立之直鏈澱粉含量校正線分析中可被解釋變異(explained variance)百分比和校正樣本之均方根誤差(root mean square error of calibration; RMSEC)及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。由圖中可發現 9 個因子之直鏈澱粉校正線的預測能力可被解釋之變異達 92 %。根據 Unscrambler 軟體之建議，整粒稻穀直鏈澱粉含量之 PLSR 校正線為 9 個因子之校正線。

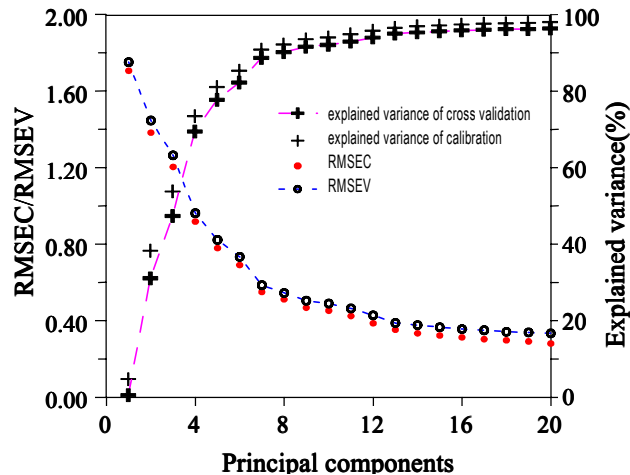


圖 2. 整粒稻穀原始光譜經過 SNV 處理後以 PLSR 模式建立之直鏈澱粉含量校正線分析中可被解釋變異百分比和校正樣本之均方根誤差及交叉驗證之均方根誤差與主成分間之關係圖

Fig 2. Relationship between explained variance, RMSEC, and RMSEV and the number of PCs in the calibration models employing a PLSR model of SNV spectra for amylose content of whole-kernel rough rice.

整粒稻穀光譜經 SNV 處理後在不同波長範圍之直鏈澱粉含量 PLSR 模式校正結果，如表 3 所示。

圖 3 為整粒稻穀原始光譜經過 SNV 處理後以 9 個因子 PLSR 模式建立之直鏈澱粉含量校正線迴歸係數與使用波長之關係圖。波長 1010 nm 及 1420 nm 接近直鏈澱粉 979 nm 及 1430 nm 之強吸收峰<sup>(12)</sup>。圖 4 為整粒稻穀原始光譜經過 SNV 處理後以 9 個因子 PLSR 模式建立之直鏈澱粉含量校正線預測值與化學分析值之關係圖。 $r^2_{val}$  為 0.88，SEP 為 0.52 % (d.b.)，RPD 為 2.90。

表 3. 整粒稻穀原始光譜經過 SNV 處理後以 PLSR 模式建立之直鏈澱粉校正線不同波長範圍校正結果

Table 3. Calibration results of amylose content of whole-kernel rough rice by using PLSR model at different wavelength regions.

Wavelength region (nm)	No of PCs	Size	$r^2_{cv}$	SECV
950-1650	9	85	0.92	0.51
970-1380	9	85	0.84	0.71
1500-1650	9	85	0.84	0.71
950-960	5	85	0.11	1.67
1390-1490	5	85	0.11	1.67
950-1100	4	85	0.22	1.36

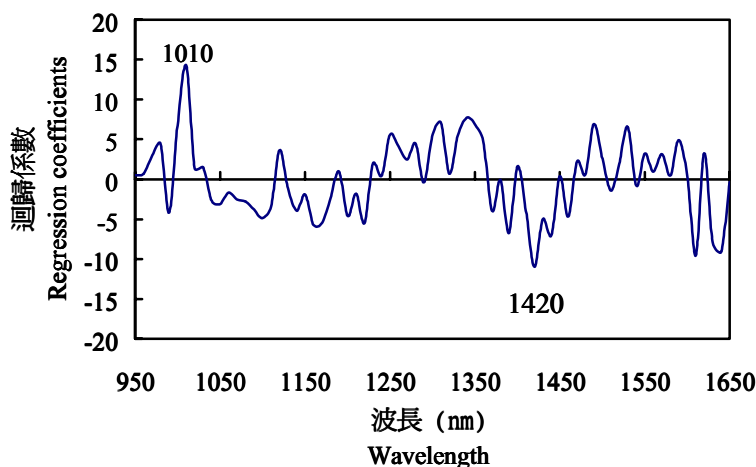


圖 3. 整粒稻穀原始光譜經過 SNV 處理後以 9 個因子 PLSR 模式建立之直鏈澱粉含量校正線迴歸係數與使用波長之關係圖

Fig 3. Regression coefficients in calibration models on all wavelengths (9-PC PLSR model for amylose content analysis of whole-kernel rough rice).

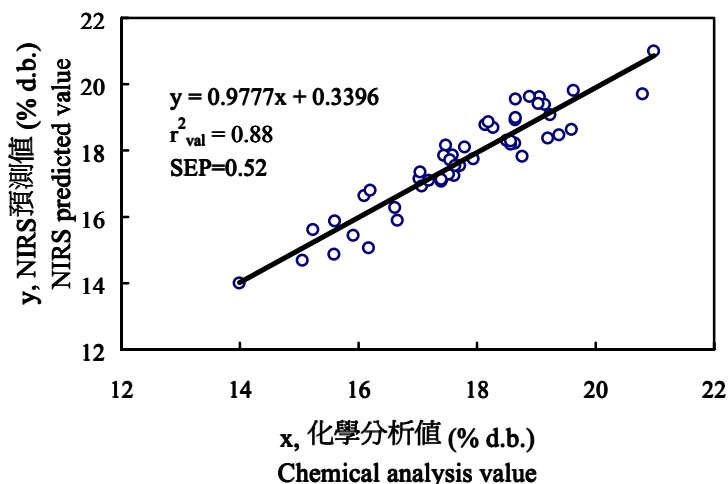


圖 4. 整粒稻穀原始光譜經過 SNV 處理後以 9 個因子 PLSR 模式建立之直鏈澱粉含量校正線預測值與化學分析值之關係圖

Fig 4. Relationship between amylose content measured by chemical analysis and by NIRS employing a 9-PC PLSR model of SNV spectra for whole-kernel rough rice.

圖 5 為整粒稻穀原始光譜經過 SNV 處理後以 PLSR 模式建立之蛋白質含量校正線分析中可被解釋變異(explained variance)百分比和校正樣本之均方根誤差(root mean square error of calibration; RMSEC)及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。由圖中可發現 12 個因子之蛋白質含量校正線的預測能力可被解釋變異達 90 %。根據 Unscrambler 軟體之建議，整粒稻穀蛋白質之 PLSR 校正線為 12 個因子之校正線。



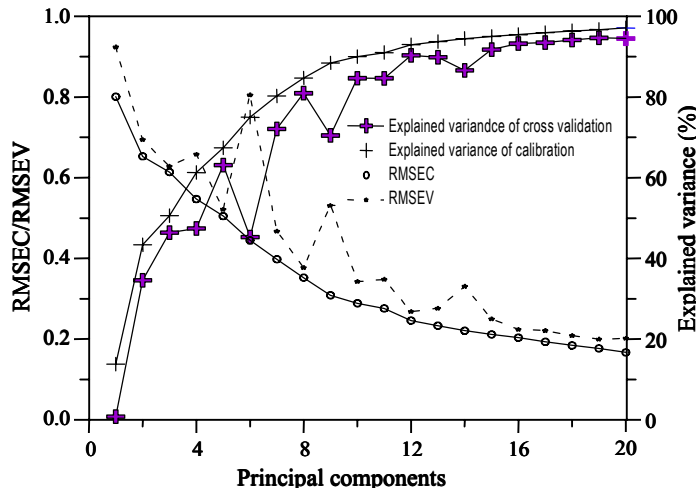


圖 5. 整粒稻穀原始光譜經過 SNV 處理後以 PLSR 模式建立之蛋白質含量校正線分析中可被解釋變異百分比和校正樣本之均方根誤差及交叉驗證之均方根誤差與主成分間之關係圖

Fig 5. Relationship between explained variance, RMSEC, and RMSEV and the number of PCs in the calibration models employing a PLSR model of SNV spectra for protein content of whole-kernel rough rice.

圖 6 為整粒稻穀原始光譜經過 SNV 處理後以 12 個因子之 PLSR 模式建立之蛋白質含量校正線迴歸係數與使用波長之關係圖。波長 1060 nm 及 1530 nm 接近蛋白質 1051 nm 及 1485 nm 之強吸收峰<sup>(12)</sup>。圖 7 為整粒稻穀原始光譜經過 SNV 處理後以 12 個因子 PLSR 模式建立之蛋白質含量校正線預測值與化學分析值之關係圖， $r^2_{val}$  為 0.88，SEP 為 0.28 % (d.b.)，RPD 為 2.82。

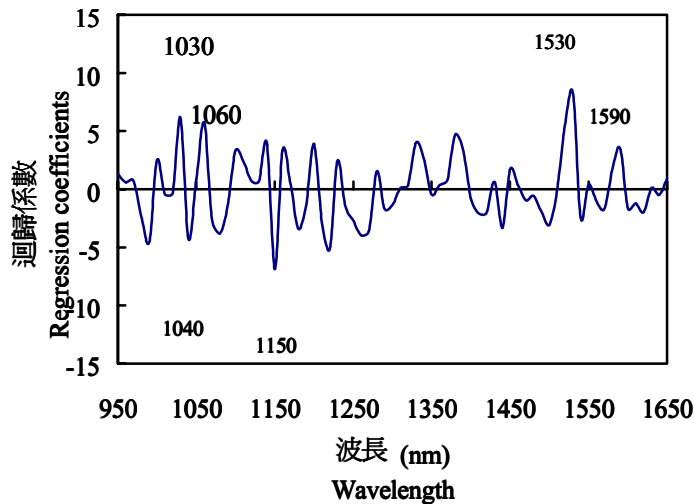


圖 6. 整粒稻穀原始光譜經過 SNV 處理後以 12 個因子之 PLSR 模式建立之蛋白質含量校正線迴歸係數與使用波長之關係圖

Fig 6. Regression coefficients in calibration models on all wavelengths (12-PC PLSR model for protein content analysis of whole-kernel rough rice).

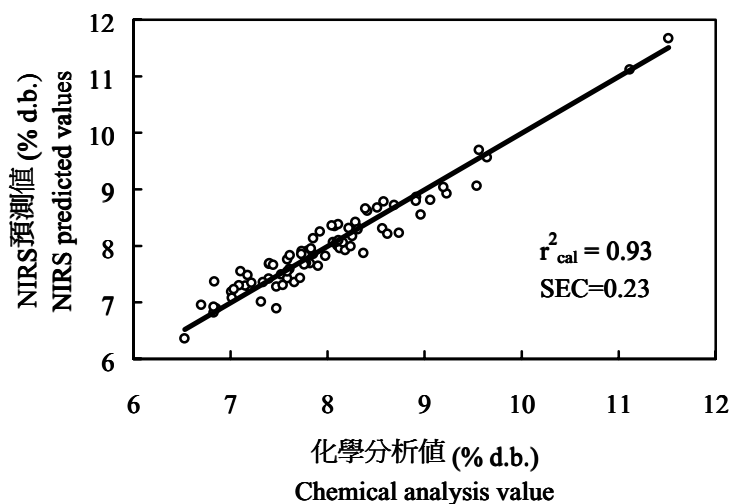


圖 7. 整粒稻穀原始光譜經過 SNV 處理後以 12 個因子之 PLSR 模式建立之蛋白質含量校正線預測值與化學分析值之關係圖

Fig 7 Relationship between protein content measured by chemical analysis and by NIRS employing a 12-PC PLSR model of SNV spectra for whole-kernel rough rice.

比較手提式近紅外線分光光度計偵測直鏈澱粉及蛋白質含量校正線性能與其他文獻，如表 4 及表 5 所示。整粒稻穀直鏈澱粉含量校正線性能， $r^2_{val}$ 、SEP 及 RPD 分別為 0.88、0.52 % (d.b.) 及 2.9；蛋白質含量校正線性能， $r^2_{val}$ 、SEP 及 RPD 分別為 0.88、0.28% (d.b.) 及 2.82。此結果與彭等<sup>(1)</sup>及鍾與蕭<sup>(2)</sup>以 Bran + Luebbe 500 型近紅外線分光光度計建立之校正線比較並不遜色；但劣於 Delwiche<sup>(5,6)</sup>以 NIR Systems 6500 型近紅外線分光光度計建立之校正線，但手提式近紅外線分光光度計具有輕巧及低價之優點。

表 4. 手提式近紅外線分光光度計與其他文獻偵測直鏈澱粉含量校正線性能之比較

Table 4. Comparison of calibration performance of amylose content of portable near-infrared spectroscopy with those of other's calibration results.

Apparatus	Sample status	Peng etc.			Chung and Shaw		Delwiche			This study				
		$r^2_{cal}$	SEC	SEP	$r^2_{cal}$	SEC	$r^2_{val}$	SEP	RPD	$r^2_{cal}$	SEC	$r^2_{val}$	SEP	RPD
Bran + Luebbe 500	R <sup>z)</sup>	0.36	2.20	2.09	0.78	0.37								
	P <sup>y)</sup>	0.43	2.03	2.79										
	WW <sup>x)</sup>	0.39	1.84	2.12										
	PW <sup>v)</sup>	0.62	1.44	3.9										
Portable NIRS	R									0.94	0.44	0.88	0.52	2.90
NIR Systems 6500	WW						0.89	1.30						
	PW <sup>v)</sup>						0.95	1.00						

z) Rough rice.

y) Powdered rough rice.

x) Whole-kernel white rice.

w) Powdered white rice.

v) Powdered white rice.

表 5. 手提式近紅外線分光光度計與其他文獻偵測蛋白質含量校正線性能之比較

Table 5. Comparison of calibration performance of protein content of portable near-infrared spectroscopy with those of other's calibration results.

Apparatus	Sample status	Peng etc.			Chung and Shaw		Delwiche			This study				
		$r^2_{cal}$	SEC	SEP	$r^2_{cal}$	SEC	$r^2_{val}$	SEP	RPD	$r^2_{cal}$	SEC	$r^2_{val}$	SEP	RPD
Bran + Luebbe 500	R <sup>z)</sup>	0.69	0.41	0.66	0.83	0.06								
	P <sup>w)</sup>	0.83	0.31	0.47										
	WW <sup>w)</sup>	0.89	0.32	0.30										
	PW <sup>w)</sup>	0.96	0.20	0.21										
Portable NIRS	R								0.93	0.23	0.88	0.28	2.82	
NIR Systems 6500	WW						0.97	0.13						
	PW <sup>w)</sup>						0.99	0.11						

z) Rough rice.

y) Powdered rough rice.

x) Whole-kernel white rice.

w) Powdered white rice.

v) Powdered white rice.

## 結 論

利用手提式近紅外線分光光度計偵測整粒稻穀蛋白質及直鏈澱粉含量，使用波長範圍 950-1650 nm，稻穀含水率為 13%，穀溫為 25°C，校正樣本為 85 個，品種總數為 45 種。利用 9 個因子之部份最小平方方法所建立之整粒稻穀直鏈澱粉含量校正線，驗證樣本之判定係數 ( $r^2_{val}$ ) 為 0.88，驗證標準偏差 (SEP) 為 0.52%。利用 12 個因子之部份最小平方方法所建立之整粒稻穀蛋白質含量校正線，驗證樣本之判定係數 ( $r^2_{val}$ ) 為 0.88，驗證標準偏差 (SEP) 為 0.28%。手提式近紅外線分光光度計偵測直鏈澱粉及蛋白質含量校正線性能與 Bran + Luebbe 500 型近紅外線分光光度計建立之校正線比較並不遜色，且具有輕巧及低價之優點。

## 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. 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。
3. AOAC. 1984. Official methods of analysis. 13 edition. Association of Official Analytical Chemists. Washington, DC.
4. Barnes, R. J., M. S. Dhanoa, and J. L. Susan. 1989. Standard normal variate transformation and de-trending of near-infrared diffuse reflectance spectra. Appl. Spectrosc. 43: 772-780.
5. Delwiche, S. R., M. M. Bean, R. E. Miller, B. D. Webb, and P. C. Williams. 1995. Apparent amylose content of milled rice by near-infrared reflectance spectrophotometry. Cereal Chem. 72(2): 182-187.

6. Delwiche S. R., K. S. Mckenzie, and B. D. Webb. 1996. Quality characteristics in rice by near-infrared reflectance analysis of whole-grain milled samples. *Cereal Chem.* 73(2): 257-263.
7. Geladi, P., D. MacDougall, and H. Martens. 1985. Linearization and scatter-correction for near-infrared reflectance spectra of meat. *Appl. Spectrosc.* 39: 491-500.
8. Haaland, D. M. and E. V. Thomas. 1988. Partial least-squares methods for spectral analyses. *Anal. Chem.* 60: 1193-1202.
9. Juliano, B. O., C. M. Perez, A. B. Blakeney, T. Castillo, N. B. Kongseree, E. T. Lapis, V. V. S. Murty, C. M. Paule, and B. D. Webb. 1981. "International cooperative testing on the amylose content of milled rice", *Starch* 33: 157-162.
10. Marten, H. and T. Naes. 1989. Methods for calibration. In: *Multivariate calibration*. New York: John Wiley & Sons.
11. Savitsky, A., and M. J. E. Golay. 1964. Smoothing and differentiation of data by simplified least squares procedure. *Anal. Chem.* 36: 1627-1638.
12. Williams, P. C. and K. H. Norris. 1990. Qualitative application of near-infrared reflectance spectroscopy. In: P. C. Williams and K.H. Norris. *Near-Infrared Technology in the Agricultural and Food Industries*. (eds.) St. Paul: American Association of Cereal Chemists.
13. Williams, P. C. and D. C. Sobering. 1993. Comparison of commercial near infrared transmittance and reflectance instruments for analysis of whole grains and seeds. *J. Near Infrared Spectrosc.* 1: 25-32.

# Determining the Amylose and Protein Content of Rough Rice by a Portable Near-Infrared Spectroscopy

Wang-Sheng Li and Jai-Tsung Shaw

## Summary

Measuring the chemical compositions of rough rice by wet chemical methods can be used for evaluating rice quality, but they are time-consuming, costly, and polluting. A portable near-infrared spectroscopy system which includes a fiber optic probe, a diode array spectrophotometer, ranging from 950 nm to 1650 nm, together with a portable computer were developed to calibrate protein and amylose content of whole-kernel rough rice at 25°C and 13% moisture content for a quick evaluation of rice quality. With standard normal variate pretreatment of each original absorbance spectrum and then analyses by partial least-squares regression, the calibration curve of amylose content by employing 9 principal-component PLSR model had r-squared of validation and SEP 0.88, 0.52 %, respectively. For protein content by employing 12 principal-component PLSR model, r-squared of validation and SEP were 0.88 and 0.28 %, respectively.

Key words: Portable Near-Infrared Spectroscopy, Rough rice, Protein and amylose contents.