

Project 505 6050

Ontwikkeling methoden van onderzoek voor voedings- en voedermiddelen
met behulp van NIRS (Projectleider R. Frankhuizen)

RAPPORT 88.77 NOVEMBER 1988

De bepaling van totaal oliegehalte in
lijnzaad met NIRS

R. Frankhuizen en M.A.H. Tusveld

Medewerker: R.G. Coors

Afdeling Algemene Chemie

Goedgekeurd door: ir L.G.M.Th. Tuinstra

Rijks-Kwaliteitsinstituut voor land- en tuinbouwprodukten (RIKILT)

Bornsesteeg 45, 6708 PD Wageningen

Postbus 230, 6700 AE Wageningen

Telefoon 08370-19110

Telex 75180 RIKIL

Telefax 08370-17717

Copyright 1988, Rijks-Kwaliteitsinstituut voor land- en tuinbouw-
produkten.

Overname van de inhoud is toegestaan mits met duidelijke bronvermel-
ding

VERZENDLIJST

INTERN

directeur
sectorhoofden
produktcoördinator dierlijke produkten
projectleider
afdeling Algemene Chemie (5x)
projectbeheer
circulatie
bibliotheek

EXTERN BIBLIOTHEEK
 LANDBOUWUNIVERSITEIT
 WAGENINGEN

Directie Landbouwkundig Onderzoek

 sector Plantaardige Productie

 sector Algemeen en Management

Directie Voedings- en Kwaliteitsaangelegenheden

Directie Akker- en Tuinbouw

Agralin

Directeur Stichting voor Plantenverdeling (SVP) Wageningen

Ir P. Keyzer, Stichting voor Plantenveredeling (2x)

Directeur Proefstation voor de Akkerbouw en de Groenteteelt in de vol-
le grond (PAGV), Lelystad

Directeur Rijksproefstation voor Zaandonderzoek (RPvZ), Wageningen

Directeur Centrum voor Agrobiologisch Onderzoek (CABO), Wageningen

Drs B.G. Muuse, Instituut voor Bewaring en Verwerking van Landbouwpro-
dukten (IBVL), Wageningen

Ir M. Miedema, Consulentschap in Algemene Dienst voor de Kwaliteit en
Bewaring in de Akker- en Tuinbouw (CAD/KB), Wageningen

ABSTRACT

De bepaling van totaal oliegehalte in lijnzaad met NIRS

Analysis of total oil content in whole linseed by NIRS (in Dutch)

REPORT 88.77 NOVEMBER 1988

R. Frankhuizen and M.A.H. Tusveld

State Institute for Quality Control of Agricultural Products.
RIKILT, P.O. Box 230, 6700 AE Wageningen, the Netherlands

8 figures, 8 references, 1 annex

By using research Near Infrared Reflectance Spectrometer (Technicon Infra Alyzer - 500) investigations were performed to measure total oil content in whole linseed.

Therefore 40 samples were selected by using spectral subtraction (Picks) from a group of 200 samples with different composition, breed, harvest and origin. The total oil content was determined by petroleum-ether-extraction (= ref. method). By multiple linear regression (MLR) analyses an equation was elaborated with a MLR-coefficient (R) of 0.989 and a standard error of calibration (SEC) of 0.43%. The calibration was tested with forty samples of divergent composition by comparing the predicted contents (by NIRS) with results obtained by the reference method. The Standard error of Prediction (SEP) was 0.66%.

It can be stated that with a 95% certainty the predicted values by NIRS will be within $\pm 1.3\%$ of the values obtained by the reference method.

Keywords: Near Infrared Reflectance Spectroscopy, NIRS, Linseed, oil content

INHOUD	Blz.
ABSTRACT	1
1 INLEIDING	5
2 MATERIALEN EN METHODEN	5
2.1 Monstermateriaal	5
2.2 Methoden van onderzoek	6
2.2.1 Chemische analyses	6
2.2.2 NIRS analyse	6
2.2.3 Calibratieprocedure	6
3 RESULTATEN	7
3.1 Calibratieset	7
3.2 Toetsset	10
3.3 Bepaling van het oliegehalte	11
4 DISCUSSIE	11
5 CONCLUSIE	16
LITERATUUR	17
BIJLAGEN	
A NIRS DATABANK - ALLE CALIBRATIES OLIEGEHALTE	
B CALIBRATIESET	
C TOETSSET	
D MONSTERS LIJNZAAD	

1 INLEIDING

Overproduktie van bestaande gewassen in de EEG leidt tot problemen voor de akkerbouw. Onderzoek naar teelt van alternatieve gewassen is in dit verband belangrijk. Naast introductie van nieuwe gewassen wordt ook aandacht geschonken aan nieuwe toepassingen van bestaande akkerbouwprodukten.

Vlasteelt is in Nederland gericht op vezel- en zaaizaadproduktie. Oliewinning uit het vlaszaad (lijn- of slagzaad) vindt in Nederland vrijwel uitsluitend plaats met lijnzaad geïmporteerd van buiten de EEG. De ontwikkeling van rassen, specifiek aangepast aan de Nederlandse teeltomstandigheden en gericht op de produktie van lijnzaad, kan een bijdrage leveren aan de oplossing voor de hierboven geschetste problemen in de akkerbouw.

Op de Stichting voor Plantenveredeling (SVP) werkt men aan de ontwikkeling van olievlas. Eén van de belangrijkste selectie doelen is verhoging van het oliegehalte van het zaad. Standaard bepalingsmethoden daarvoor zijn ongeschikt voor de selectieprogramma's door hun tijds- en arbeidsintensieve en destructieve karakter. Een snelle en efficiënte, niet destructieve bepalingsmethode is noodzakelijk. Nabij Infrarood Reflectie Spectroscopie (NIRS) kan mogelijk een dergelijk alternatief bieden.

Teneinde de geschiktheid van een dergelijke NIRS bepalingsmethode te onderzoeken is een samenwerkingsproject gestart tussen het Rijks-Kwaliteitsinstituut voor land- en tuinbouwprodukten (RIKILT) en de SVP.

2 MATERIAAL EN METHODEN

2.1 Monstermateriaal

Door de SVP zijn 200 vlaszaadmonsters geselecteerd uit een totaal bestand van 1500. Er is geprobeerd een zo groot mogelijke variatie te krijgen in ras, teeltwijze, plaats van herkomst en oogstjaar.

2.2 Methoden van onderzoek

2.2.1 Chemische analyse

Het totaal oliegehalte is bepaald volgens RIKILT analysemethode A0104: een petroleumether-extractie m.b.v. Prolabo.

2.2.2 NIRS-analyse

De NIRS-analyse is door het RIKILT uitgevoerd met behulp van een Technicon Infra Alyzer-500 (IA-500) gekoppeld aan een HP-1000 minicomputer. Dit instrument is een computergestuurde spectrometer uitgerust met een monochromator. Hiermee zijn spectra opgenomen over een golflengtegebied van 1100-2500 nm, waarbij om de 4 nm de reflectie werd gemeten.

Voor een uitgebreide beschrijving van de apparatuur en het gebruik in de praktijk wordt verwezen naar het 'Operation Manuël' van de Technicon Infrarood Analyzer-500 (Operation 1983).

2.2.3 Calibratieprocedure

Alle 200 monsters zijn bij gebruik van een gesloten monstercup in enkelvoud ingelezen. De gemeten reflectiewaarden, verkregen bij gebruik van 350 golflengten, zijn opgeslagen op een "fixed hard disc" in de $\log 1/R$ (R = reflectie) vorm.

Met behulp van spectraalanalyse (Pickscomputerprogramma) zijn uit de 200 monsters 40 monsters geselecteerd voor de calibratieset. Deze selectie vond plaats aan de hand van spectraalverschillen veroorzaakt door verschillen in chemische en fysische samenstelling cq. eigenschappen van de monsters (Honings et al, 1985).

Met behulp van een "multiple lineaire regressie" programma ("Step up search" en "All combination search") zijn verschillende ijklijnen berekend. Hiervoor zijn golflengten geselecteerd en calibratie factoren berekend die in combinatie de hoogste multiple correlatiecoëfficiënt (R) en laagste standard error of calibration (SEC) gaven tussen de met NIRS berekende en de met de referentie methode bepaalde oliegehalten.

Tevens is nagegaan of met 1e of 2e afgeleide spectra betere resultaten verkregen kunnen worden.

Aan de hand van een toetsset zijn de verkregen ijklijnen op hun betrouwbaarheid getoetst. Om een zo representatief mogelijke toetsset te krijgen zijn 40 monsters willekeurig gekozen uit de resterende monsterset. De ijklijn die de toetsmonsters het best voorspelt, d.w.z. die de kleinste verschillen geeft tussen de met NIRS vastgestelde waarden en de chemisch bepaalde waarden, is geselecteerd als beste.

3 RESULTATEN

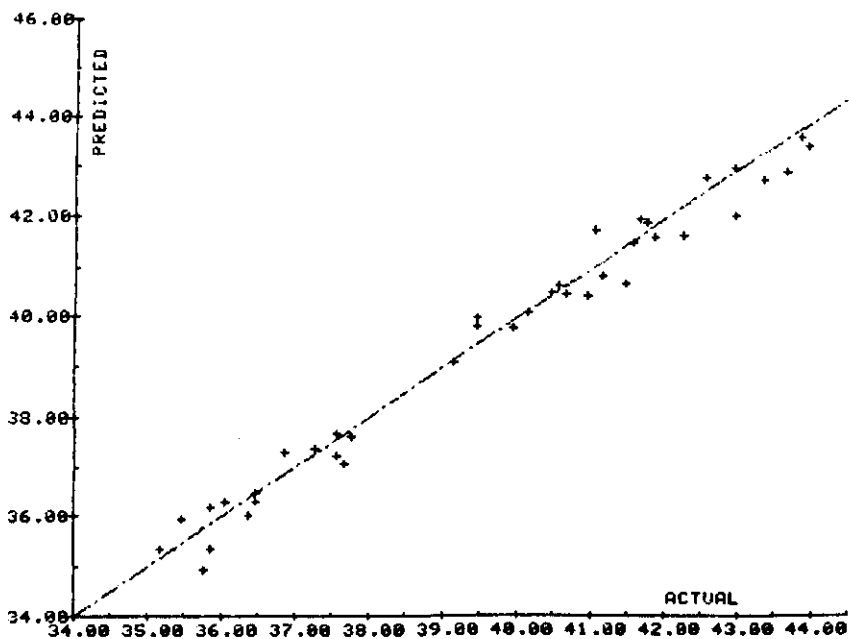
3.1 Calibratieset

Aan de hand van de calibratieset is een groot aantal berekeningen uitgevoerd (bijlage A). Bijlage B toont de met de referentiemethode bepaalde oliegehalten.

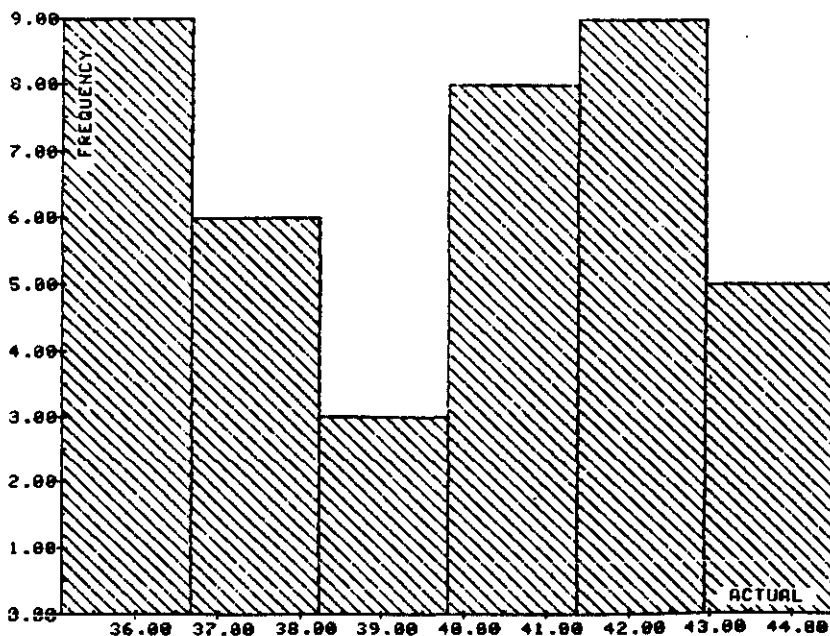
De beste calibraties voor het oliegehalte werden verkregen m.b.v. een verfijnde "all combination search" (met een kleinere stapgrootte rondom de oorspronkelijk geselecteerde golflengten zoeken) en m.b.v. "step up search" bij gebruik van 4 golflengten. Bij beiden werd een multiple correlatiecoëfficiënt (R) berekend van 0.989, tussen de chemisch bepaalde oliegehalten en de met NIRS voorspelde gehalten, met daarbij een SEC van 0,43% (figuur 1).

De oliegehalten in de monsters varieerden van 35,1 tot 44,5% (figuur 2).

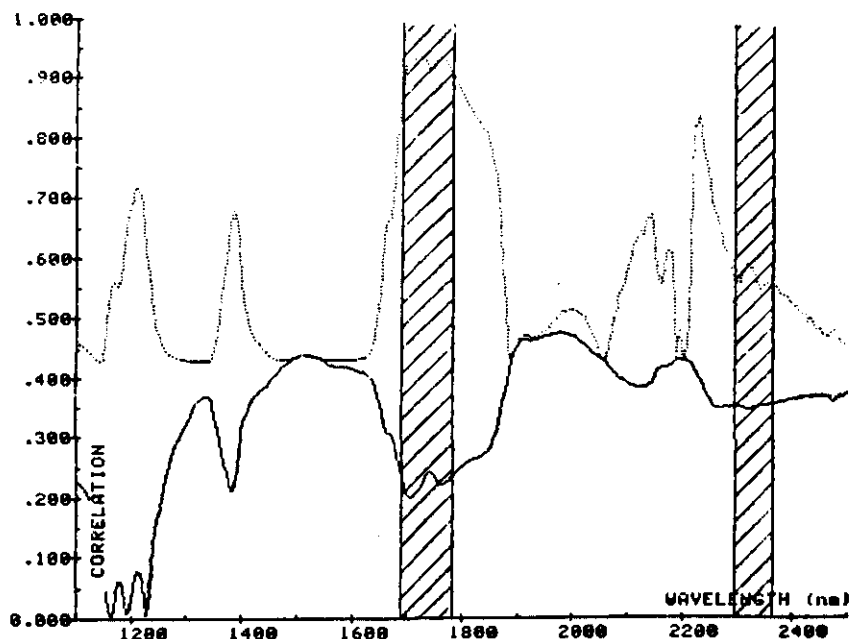
Uit het lineaire correlatiediagram, waarbij correlaties met het oliegehalte zijn uitgezet tegen de absorptie bij 350 golflengten (figuur 3), blijkt dat er geen specifieke oliebanden (Roy and Bahl 1982) correleren met het oliegehalte. Pas wanneer een combinatie van 2 golflengten (1724 en 2192 nm) wordt gebruikt ontstaan er hoge correlaties met de oliebandjes rond de 1740 nm.



Figuur 1
Verband tussen de oliegehalten van lijnzaadmonsters bepaald volgens de referentiemethode en voorspeld met NIRS (ijklijn all comb. search)



Figuur 2
Frequentieverdeling van de oliegehalten van de calibratieset vlaszaden (n=40).



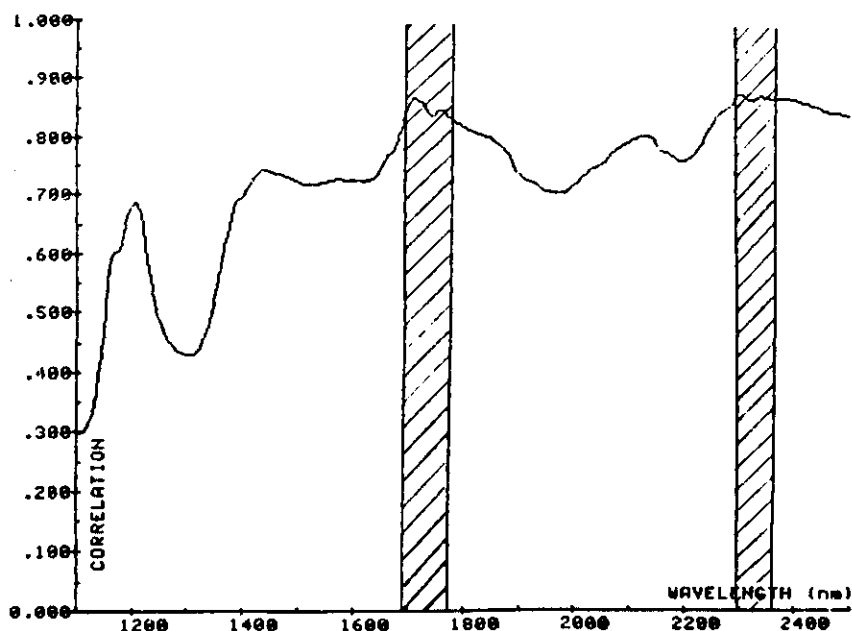
Figuur 3

Correlatiediagram van olie in vlaszaad

- - lineair correlatiediagram: correlaties met oliegehalte zijn uitgezet tegen de absorptie bij 350 golflengten
- - meervoudig correlatiediagram: de hoogst correlerende golflengte (uit het lineaire diagram) wordt uitgezet tegen de absorptie bij alle andere golflengten
- //////// - golflengtegebied waar olie specifieke absorptie vertoont.

In verband met de slechte lineaire correlatie van specifieke oliebandjes in het NIR-spectrum met het oliegehalte van hele zaden, zijn eveneens enkele berekeningen uitgevoerd aan gemalen vlaszaadmonsters (de zaden zijn gedurende 1 min. gemalen m.b.v. een Ika-Universalmühle). Hiervoor zijn dezelfde referentiecijfers gebruikt als voor berekeningen aan het hele zaad.

Uit het hierbij horende correlatiediagram (figuur 4) blijkt dat de specifieke oliebandjes bij 1700/1740 nm en 2304/2344 nm (Roy and Bahl 1982) nu wel hoog correleren met het oliegehalte.



Figuur 4 Lineair correlatiediagram van olie in gemalen vlaszaad
///// - golflengtegebied waar olie specifieke absorptie vertoont.

Bij calibratieberekeningen (step up search) aan het gemalen zaad zijn dan ook minder golflengten nodig om vergelijkbare R en SEC te verkrijgen; bij 3 golflengten wordt een R berekend van 0.993 en een SEC van 0.35%.

Aangezien het voor een eventueel veredelingsprogramma (op het SVP) van groot belang is dat er non-destructief wordt gemeten, is hier verder niet op doorgegaan. Bovendien is het malen van de monsters arbeidsintensief.

3.2 Toetsset

De met behulp van de calibratieset verkregen 'beste' ijklijnen zijn aan de hand van een toetsset met 40 onbekende monsters op hun betrouwbaarheid getoetst.

De met behulp van 'step-up search' verkregen ijklijn voorspelt de oliegehalten van de monsters met een standard error of prediction (SEP) van 0.76%, terwijl de ijklijn verkregen m.b.v. 'all combination search' de gehalten voorspelt met een SEP van 0.66% (zie bijlage C).

Eén monster uit deze testset wordt voorspeld met een afwijking van 1.8% van de chemisch (3x in duplo) bepaalde waarde.

Nieuwe berekeningen aan de calibratieset waaraan dit monster is toegevoegd geven geen noemenswaardige verschillen in golflengtekeuze, R en SEC. Het betreffende monster wordt op basis van de student-test ($t=2.9$) een uitschieter.

3.3 Bepaling van het oliegehalte

De ijklijn verkregen m.b.v. de 'verfijnde' all combination search blijkt aan de hand van de toetsset de kleinste verschillen te geven tussen de chemisch bepaalde oliegehalten en de met NIRS voorspelde gehalten (SEP = 0.66%).

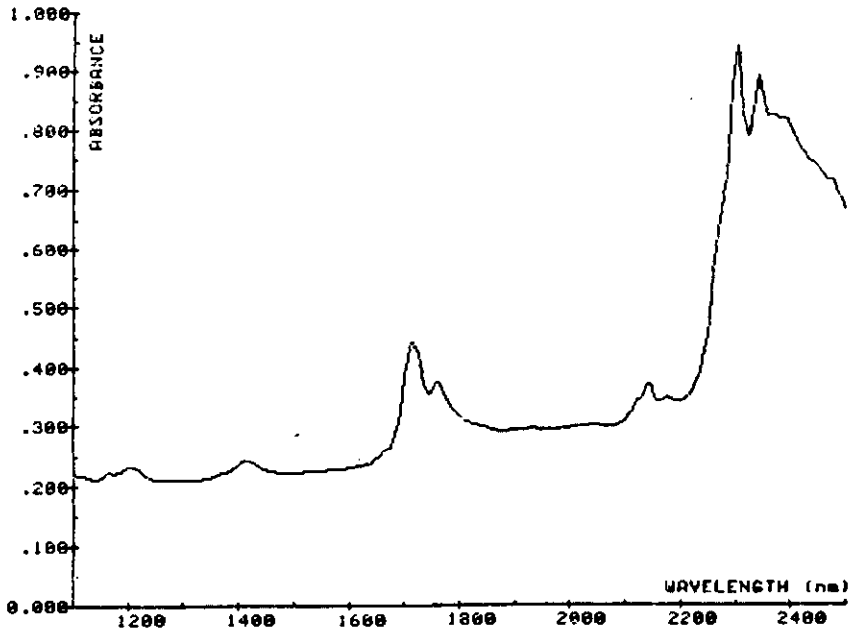
Aan de hand van deze beste ijklijn zijn van de resterende 120 vlaszaadmonsters uit de aangeboden monsterset de oliegehalten met NIRS bepaald. Zie bijlage D.

Voor 95% van de monsters ligt het oliegehalte bepaald met NIRS binnen $\pm 1,3\%$ van het oliegehalte bepaald met de referentiemethode (tweezijdig, 95% betrouwbaarheidsinterval).

4 DISCUSSIE

Olie heeft in het nabij infrarood golflengtegebied een aantal karakteristieke absorptiebandjes (Roy and Bahl 1982, Holman and Edmondson 1956, Law and Tkachuk 1977, Wheeler 1959, Godda 1960) (Fig 5). Door variatie in monsterdeeltjesgrootte, wederzijdse beïnvloeding van componenten in het monster en overlapping van absorptiegebieden van de afzonderlijke componenten kan niet volstaan worden met een enkele meting bij de in de literatuur aangegeven karakteristieke absorptiegolflengten. De methode is dan ook grotendeels empirisch.

Een groot aantal berekeningen moet uitwijzen welke golflengte in het te onderzoeken produkt onder de gekozen omstandigheden de meest specifieke is en welke combinatie van golflengten de gehalten in de monsters het best voorspelt.



Figuur 5
Nabij Infrarood Spectrum van een monster lijnolie, verkregen met be-
hulp van een vloeistoftransreflectiecel.

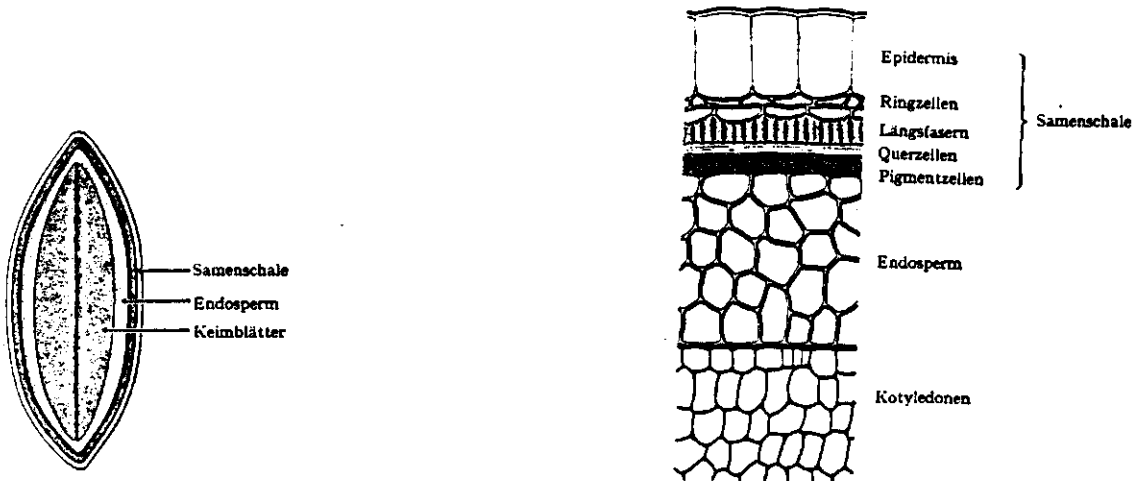


Fig. 6 Dwarsdoorsnede van lijnzaad (vergroting 20x) Fig. 7 Dwarsdoorsnede van lijnzaad (vergroting 200x)

Bron: Mikroskopische Untersuchung pflanzlicher Lebensmittel van Gustav Gassner.

Bij de bepaling van het oliegehalte in hele vlaszaadmonsters m.b.v. NIRS wordt het verklaren van de golflengtekeuze nog eens extra bemoeilijkt. De olie is nl. niet homogeen verdeeld over het zaadje en de penetratiediepte van de electromagnetische straling, waarmee het monster wordt aangestraald, is te gering om het monster te doorstralen.

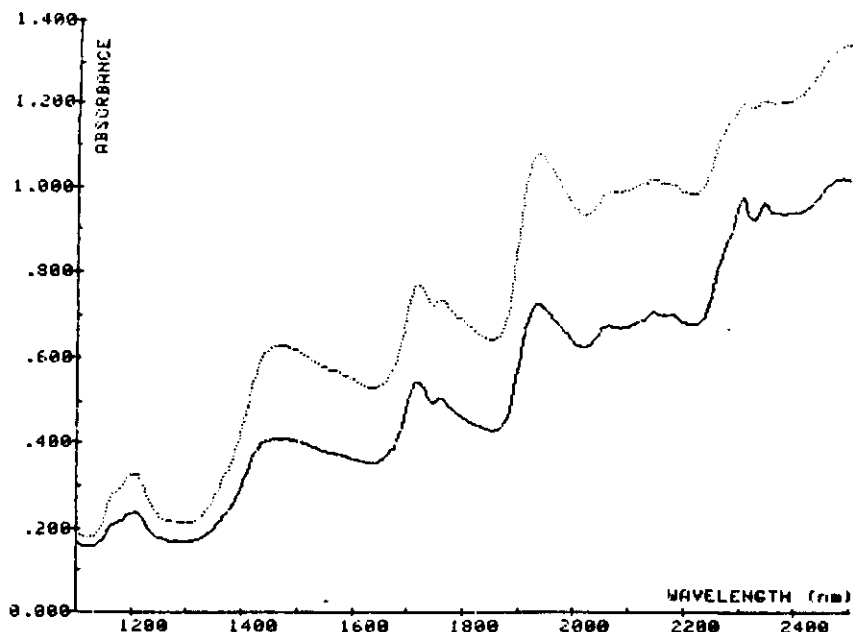
Uit de figuren 6 en 7 blijkt dat een vlaszaad grofweg in drieën verdeeld kan worden. De buitenste laag (de zaadhuid) is vrij hard, moeilijk doordringbaar en bevat veel eiwitten en koolhydraten en praktisch geen olie. De overige twee lagen, het endosperm en de kiembladen, zijn erg olierijk.

Wanneer licht met een golflengte van 1100-2500 nm op een vlaszaadmonster valt wordt een gedeelte van het licht direct op het oppervlak gereflecteerd. Een ander deel zal het monster binnendringen om uiteindelijk ook gereflecteerd te worden. Slechts een klein deel van het gereflecteerde licht, alleen dat deel dat tot in het endosperm en/of de kiembladen is binnengedrongen, bevat informatie over de in de kern aanwezige olie, terwijl er veel meer informatie is over de eiwit- en koolhydraatrijke zaadhuid.

Vandaar dat een lineair correlatiediagram voor het oliegehalte in vlaszaden (zie figuur 3) de hoogste correlaties vertoont met eiwitbanden (ca. 2000 nm). Pas wanneer combinaties van golflengten worden gebruikt gaan de specifieke oliegolflengten hoog correleren; er wordt dan gecorrigeerd op de invloed van eiwit en koolhydraten.

Dit verklaart eveneens de hoge oliecorrelaties die gevonden worden bij metingen aan het gemalen produkt (fig. 4). Immers door het malen is de olie niet langer geconcentreerd binnen in het zaad, maar is het homogeen verdeeld over het monster. Ook in het NIR-spectrum van een gemalen monster komen de vetpieken (vooral bij 2304/2344 nm) beter tot uitdrukking (figuur 8).

De bepaling van het oliegehalte aan gemalen vlaszaadmonsters is dan ook voor wat betreft de golflengtekeuze een stuk eenvoudiger, maar zoals eerder vermeld is het voor eventuele veredelingsdoeleinden van belang dat de zaden non-destructief worden gemeten.

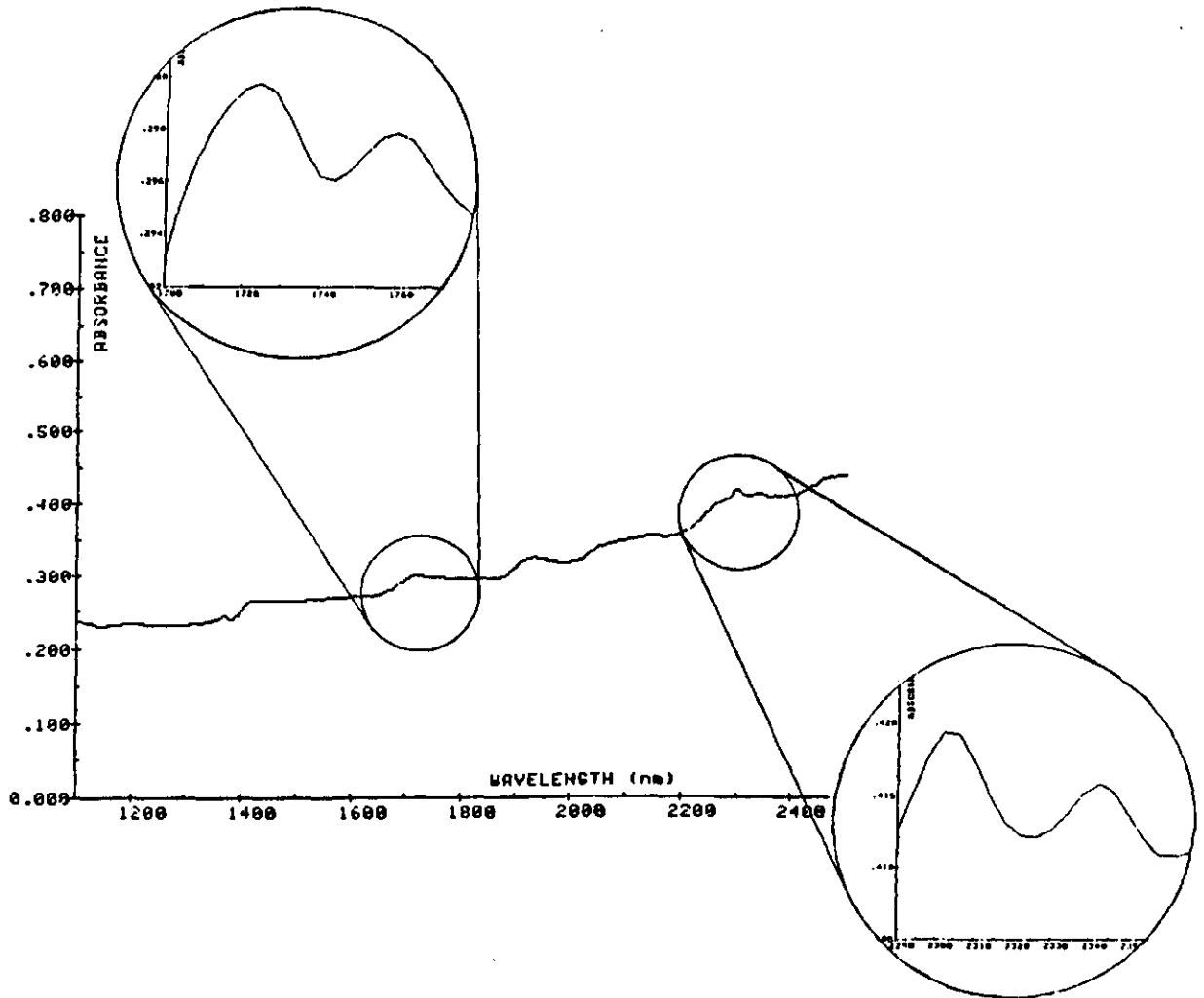


Figuur 8 NIR-spectra van monsters vlaszaad: gemalen monster (-----) en ongemalen monster (.....)

Naast de bovengenoemde structuur problemen is er een tweede oorzaak voor de weinig specifieke golflengtekeuze aan te wijzen, n.l. de relatie absorptie versus concentratie. Uitgangspunt is dat deze lineair is. Bekend is echter dat het percentage olie wat chemisch bepaald wordt afhankelijk is van het gebruikte extractiemiddel. In dit geval is gebruik gemaakt van petroleumether. Dit extractiemiddel levert oliegehalten op die het best corresponderen met de door de lijnolie-industrie winbare oliegehalten. In het geextraheerde monstermateriaal blijven echter 'wasachtige stoffen' achter die op dezelfde 'olie karakteristieke' plaatsen in het NIR-golflengtegebied absorptie vertonen (figuur 9).

Over de variatie in concentratie en dus ook in de bijdrage van de 'wasachtige stoffen' aan de totale olie absorptie in het NIR golflengtegebied is weinig bekend. Het lijkt echter waarschijnlijk dat de meer dan gemiddelde afwijking van een monster in de testset veroorzaakt wordt door een afwijkend gehalte aan wasachtigen.

Door de invloed van zowel de structuur en de variatie in het percentage wasachtigen is de uiteindelijke golflengtekeuze voor de bepaling van het oliegehalte weinig specifiek en grotendeels empirisch tot stand gekomen.



Figuur 9

NIR-spectrum van een chloroform-methanol extract genomen van een vlaszaadmonster dat reeds met petroleumether was geextraheerd. Hierbij zijn de voor olie karakteristieke plaatsen in NIRS-golflengtegebied uitvergroot.

5 CONCLUSIE

Voor een calibratieset van 40 vlaszaadmonsters is met behulp van NIRS een ijklijn voor de bepaling van het oliegehalte opgesteld met een R van 0.989 en een SEC van 0.41%. Hiervoor werden 4 golflengten geselecteerd. De golflengtekeuze is, vanwege de structuur van het vlaszaad in combinatie met reflectiemeting, grotendeels empirisch.

Voorspelling van 40 'onbekende' monsters (toetsset) aan deze ijklijn levert een SEP van 0.66% tussen de oliegehalten bepaald met de referentiemethode en de gehalten bepaald met NIRS. Voor de bepaling van het oliegehalte met behulp van NIRS aan willekeurige vlaszaadmonsters betekent dit dat voor 95% van de monsters het oliegehalte binnen $\pm 1.3\%$ van het met NIRS bepaalde gehalte ligt.

LITERATUUR

Gassner, Gustav. Mikroskopische Untersuchung pflanzlicher Lebensmittel. 4. Auflage in der Bearbeitung von Friedlich Bothe. Stuttgart, Gustav Fischer Verlag, 1973.

Godda, R.F., Adv. Anal. Chem. Instrum. 1960. 1, blz. 347.

Honings, D.E. et al. Unique Sample selection via Near Infrared Spectral Subtraction. Anal. Chem. 1985, 57, blz. 2299-2303.

Hollman, R.T. and Edmondson, P.R. Near Infrared Spectra of fatty Acids and some related Substances. Anal. Chem., 1956, 28, blz. 1533.

Law, D.P. and Tkatchuk. R. Cereal Chem. 1977, 54, blz. 256.

Operation Manual Technicon Infra Alyzer-500. 1983, publication no. TA-8-2512-00.

Roy R.B. and Bahl J. Theoretical basis for the analysis of fats and oils by NIRA. 2nd Annual NIRA Symposium June 1982, Tarrytown, New York, USA.

Wheeler, D.H. Chem. Rev. 1959, 59, blz. 629.

9-11-1988

NIRS
DATA
BANK

RIKILT - Rijks-Kwaliteitsinstituut voor
land- en tuinbouwprodukten
Postbus 230, 6700 AE Wageningen, Nederland.

VLASZAAD
ALLE CALIBRATIES OLIEGEHALTE

VORM DATA	ZOEKMETHODE	GOLFLENGTES	R	BIAS	SEC	F	DELETED	IT-MONSTERS	IH-MONSTERS	DPM
A	RUWE DATA STEP UP	1980	0.47	60.0	2.52	11	-	-	?	N=40
B	RUWE DATA STEP UP	2192 1724	0.94	53.6	1.01	135	-	-	?	N=40
C	RUWE DATA STEP UP	2188 1724 1100	0.95	56.8	0.95	103	-	-	?	N=40
D	RUWE DATA STEP UP	1680 1780 1136 1164	0.99	49.9	0.43	410	-	-	?	N=40
E	RUWE DATA STEP UP	1680 1776 1132 1164 1124	0.99	48.7	0.42	351	-	-	?	N=40
F	RUWE DATA ALL COMB S.P.	1142 1156 1674	0.98	48.7	0.61	264	-	-	?	N=40
G	RUWE DATA RONDOM ZOEKEN	1144 1156 1668	0.98	49.5	0.59	291	-	-	?	N=40
H	RUWE DATA ALL COMB S.P.	1142 1156 1674 1800	0.99	50.6	0.45	370	-	-	?	N=40
I	RUWE DATA RONDOM ZOEKEN	1144 1164 1676 1798	0.99	50.1	0.43	408	-	-	?	N=40
J	1e AFG.614 STEP UP	1636	0.86	38.3	1.47	107	-	-	?	N=40
K	1e AFG.614 STEP UP	1988 1756	0.93	44.4	1.05	124	-	-	?	N=40
L	1e AFG.614 STEP UP	1904 1756 1244	0.97	39.5	0.68	212	-	-	?	N=40
M	1e AFG.614 STEP UP	1904 1756 1244 2304	0.98	34.2	0.63	185	-	-	?	N=40
N	2e AFG.630 STEP UP	1228	0.93	25.0	1.07	233	-	-	?	N=40
O	2e AFG.630 STEP UP	1228 1776	0.94	21.5	0.97	146	-	-	?	N=40
P	2e AFG.630 STEP UP	1228 1776 1916	0.97	37.6	0.72	187	-	-	?	N=40
Q	2e AFG.630 STEP UP	1228 1780 1344 1312	0.98	34.9	0.55	246	-	-	?	N=40

File name DCVLAC,C
File date 5:17 PM MON., 7 NOV., 1988
File ID CAL.SET VOOR DE BEPALING VAN OLIE IN VLASZAAD (N=40) OKT.'88

Sample #	Sample ID	OLIEGEHALTE ¹⁾
1.00	1	37.2
2.00	2	36.3
3.00	3	39.4
4.00	4	37.5
5.00	18	35.1
6.00	27	36.4
7.00	29	40.9
8.00	33	37.7
9.00	50	39.4
10.00	56	39.9
11.00	59	41.4
12.00	60	42.9
13.00	66	43.3
14.00	71	44.5
15.00	72	37.6
16.00	85	40.4
17.00	88	36.8
18.00	89	35.4
19.00	95	41.6
20.00	100	40.1
21.00	107	41.8
22.00	115	37.5
23.00	118	40.6
24.00	120	43.9
25.00	123	41.7
26.00	127	41.5
27.00	129	42.5
28.00	141	42.2
29.00	142	41.1
30.00	153	41.0
31.00	156	43.6
32.00	164	42.9
33.00	169	43.8
34.00	172	40.5
35.00	180	39.1
36.00	186	36.4
37.00	190	35.7
38.00	196	35.8
39.00	197	35.8
40.00	200	36.0

1) Oliegehalte bepaald volgens referentiemethode

File name DCVLAT,C
 File date 4:25 PM MON., 14 NOV., 1988
 File ID TESTSET VOOR DE BEPALING VAN OLIE IN VLASZAAD (N=40) NOV.'88

Sample #	Sample ID	OLIEGEHALTE 1)	PREDICTION 2)
1.00	10	39.700	39.3873
2.00	14	35.300	35.9696
3.00	15	40.200	39.2809
4.00	20	38.700	38.5238
5.00	26	37.000	37.8179
6.00	28	38.100	39.0979
7.00	30	38.300	38.9174
8.00	32	38.400	37.7765
9.00	37	40.900	41.4812
10.00	38	39.900	39.8887
11.00	40	38.800	39.2525
12.00	48	40.300	40.5405
13.00	49	39.700	40.3530
14.00	61	39.400	39.2034
15.00	73	37.500	38.0305
16.00	80	38.400	40.2083
17.00	84	39.700	39.6153
18.00	90	39.100	40.2371
19.00	93	39.500	39.0625
20.00	96	39.000	39.6553
21.00	106	39.800	40.2540
22.00	109	42.700	41.7985
23.00	112	38.000	37.5117
24.00	117	40.200	39.6691
25.00	119	38.200	37.7681
26.00	128	43.600	42.5761
27.00	136	38.000	38.0422
28.00	139	42.500	42.5710
29.00	140	42.000	41.7685
30.00	144	41.200	42.2351
31.00	150	41.800	42.2429
32.00	152	40.200	39.8471
33.00	160	41.300	41.2361
34.00	163	42.200	41.7206
35.00	174	40.600	39.9327
36.00	175	38.400	38.2763
37.00	178	35.600	36.8628
38.00	181	39.700	39.2828
39.00	183	35.700	35.5127
40.00	185	36.600	36.3118

Standard Error of Prediction
 .6558

- 1) Oliegehalte bepaald volgens referentiemethode
- 2) Oliegehalte voorspeld met NIRS op de ijklijn verkregen na all combination search: R=0.989 / SEC=0.43 %

SEP = Standard error of Prediction = standaardafwijking van de verschillen in oliegehalte bepaald volgens de referentiemethode en voorspeld met NIRS.

File name DCVLAS,C
File date 5:00 PM MON., 7 NOV., 1988
File ID 120 VLASZAADMONSTERS: OLIEGEHALTE BEPAALD MET NIRS. NOV.'88

Sample #	Sample ID	OLIEGEHALTE ¹⁾
1.00	5	36.1095
2.00	6	39.2703
3.00	7	37.4360
4.00	8	39.5360
5.00	9	36.5620
6.00	11	37.9151
7.00	12	36.3147
8.00	13	36.0389
9.00	16	37.1058
10.00	17	35.3508
11.00	19	37.7088
12.00	21	36.6758
13.00	22	38.5329
14.00	23	38.2811
15.00	24	38.4906
16.00	25	37.5948
17.00	31	38.3644
18.00	34	39.1135
19.00	35	37.5631
20.00	36	38.9595
21.00	39	40.4507
22.00	41	39.8809
23.00	42	40.0105
24.00	43	40.6593
25.00	44	41.6882
26.00	45	39.8538
27.00	46	38.3598
28.00	47	39.6848
29.00	51	39.1588
30.00	52	39.4416
31.00	53	43.0546
32.00	54	42.6809
33.00	55	42.5377
34.00	57	39.0344
35.00	58	41.0735
36.00	62	42.3225
37.00	63	43.1895
38.00	64	41.6162
39.00	65	43.0900
40.00	67	43.3010
41.00	68	40.1553
42.00	69	41.6037
43.00	70	43.4517
44.00	74	40.2895
45.00	75	37.6345
46.00	76	39.3803
47.00	77	38.0296
48.00	78	40.5138
49.00	79	39.0125
50.00	81	39.5122
51.00	82	38.5550
52.00	83	38.6365
53.00	86	40.3561

File name DCVLAS,C
File date 5:00 PM MON., 7 NOV., 1988
File ID 120 VLASZAADMONSTERS: OLIEGEHALTE BEPAALD MET NIRS, NOV.'88

Sample #	Sample ID	OLIEGEHALTE 1)
54.00	87	39.3523
55.00	91	40.4651
56.00	92	38.1356
57.00	94	39.6852
58.00	97	39.7024
59.00	98	40.2494
60.00	99	41.1224
61.00	101	39.4066
62.00	102	39.7256
63.00	103	38.6727
64.00	104	40.5322
65.00	105	39.0443
66.00	108	42.7334
67.00	110	43.0267
68.00	111	38.1211
69.00	113	39.7030
70.00	114	39.6573
71.00	116	41.3417
72.00	121	40.5902
73.00	122	42.8745
74.00	124	42.6263
75.00	125	42.3077
76.00	126	42.8007
77.00	130	41.8746
78.00	131	41.8167
79.00	132	41.5029
80.00	133	40.3477
81.00	134	41.4856
82.00	135	41.5104
83.00	137	42.6194
84.00	138	42.2026
85.00	143	41.6338
86.00	145	41.7871
87.00	146	41.7928
88.00	147	37.6523
89.00	148	42.8768
90.00	149	43.0860
91.00	151	41.5923
92.00	154	41.3400
93.00	155	42.1409
94.00	157	42.3924
95.00	158	42.6463
96.00	159	42.6667
97.00	161	42.7620
98.00	162	42.4115
99.00	165	41.3174
100.00	166	40.6674
101.00	167	41.8552
102.00	168	42.4171
103.00	170	39.6439
104.00	171	41.0842
105.00	173	38.3036
106.00	176	37.4540

e name DCVLAS,C
e date 5:00 PM MON., 7 NOV., 1988
e ID 120 VLASZAADMONSTERS: OLIEGEHALTE BEPAALD MET NIRS, NOV.'88

Sample #	Sample ID	OLIEGEHALTE ¹⁾
107.00	177	36.8742
108.00	179	40.9750
109.00	182	32.3362
110.00	184	36.3466
111.00	187	37.0008
112.00	188	36.5523
113.00	189	35.4059
114.00	191	37.1192
115.00	192	36.2720
116.00	193	36.8037
117.00	194	36.3783
118.00	195	34.5868
119.00	198	36.0945
120.00	199	36.6924

1) Oliegehalte bepaald met NIRS aan de hand van de beste ijklijn