

Project 505.3021

Onderzoek naar de samenstelling van koolzaad: relatie tussen  
'klassiek' verkregen gegevens en NIRS

Projectleider R. Frankhuizen

Rapport 89.34

Mei 1989

Koolzaad: Onderzoek naar correlaties  
chemische analyse - NIRS deel II

Mw M.A.H. Tusveld en R. Frankhuizen

Medewerkers: R.G. Coors, J.J. van Oostrom, H.J. van der Kamp,  
A. de Koning, D.P. Venema en H.C.H. Kleijnen

Goedgekeurd door: dr J. de Jong

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 tuinbouwprodukten

Uit deze uitgave mag niets worden gereproduceerd en/of openbaar gemaakt door middel van fotokopie, microfilm, foto-offset of welk ander medium dan ook zonder schriftelijke toestemming van de directeur.

#### VERZENDLIJST

##### INTERN:

directeur

dr H. Herstel

N.J.G. Broex

dr J. de Jong

R. Frankhuizen

mw M.A.H. Tusveld

H.J. van der Kamp

J.J. van Oostrom

mw D.P. Venema

H.C.H. Kleijnen

J.F. Labrijn

A. de Koning

R.G. Coors

##### EXTERN:

drs C. Noome van D.J. van der Have BV (3x)

INHOUD	<u>blz</u>
1 INLEIDING	3
2 MATERIAAL	4
3 METHODEN	4
3.1 Chemische analyses	4
3.2 NIRS	5
3.2.1 NIRS-analyse	6
3.2.2 Toets en definitieve calibratie	7
4 RESULTATEN EN DISCUSSIE	7
4.1 Chemische analyses	7
4.2 Toets en definitieve calibraties IA-500	8
4.3 Calibraties IA-400	13
4.4 Monstergrootte m.b.t. NIRS	15
4.5 Chemische analyses aan één koolzaadje	17
5 CONCLUSIES	18
6 AANBEVELING	18
LITERATUUR	19
BIJLAGEN	
A LIJST VAN 13 KOOLZAADMONSTERS MET VERHOOGD ERUCAZUURGEHALTE	
B RESULTATEN VOCHT-, OLIE-, RUWE CELSTOF- EN RUW EIWITBEPALING	
C RESULTATEN GLUCOSINOLAATBEPALING	
D RESULTATEN VETZUURSAMENSTELLING	

( )

( )

## 1 INLEIDING

Eind 1988 is op het RIKILT, in opdracht van de BV Koninklijk Kweekbedrijf en Zaadhandel D.J. van der Have, een onderzoek gestart naar de mogelijkheden om met behulp van een scannende NIR-spectrometer (IA-500) de samenstelling van koolzaad te bepalen.

Het onderzoek bestond uit twee fasen (zie RIKILT-brief dd. 1988-05-24, kenmerk 1894), te weten: 1. Selectie van geschikte monsters

2. Opstellen en toetsen ijklijnen.

Fase 1 is in december 1988 afgerond. De resultaten gaven aanleiding door te gaan met fase 2 (RIKILT-rapport 88.75).

In een bespreking van 1989-01-26 zijn nieuwe afspraken en een tijdsplanning gemaakt voor het vervolgonderzoek (zie RIKILT-brief dd. 1989-02-07, kenmerk 0432).

Het hierna beschreven vervolgonderzoek heeft betrekking op de componenten vocht, olie, ruwe celstof, ruw eiwit en glucosinolaten, alsook de vetzuren C16:0, C18:1, C18:2, C18:3 en C22:1 in hele koolzaadmonsters. Hiervoor zijn 50 extra koolzaadmonsters geselecteerd uit de aanwezige monstervoorraad. Tevens zijn door D.J. van der Have BV extra monsters aangeleverd met een verhoogd erucazuurpercentage (C22:1). Met behulp van deze monsters zijn de eerder berekende ijklijnen getoetst. Vervolgens zijn de nieuwe monsters aan de oorspronkelijke calibratieset toegevoegd, waardoor de uiteindelijk berekende ijklijnen robuuster en evenwichtiger van opbouw zijn dan de eerder berekende ijklijnen. Daarnaast is nagegaan in hoeverre de bepaling van genoemde componenten met behulp van een InfraAlyzer-400 (een filterapparaat) mogelijk is. Tot slot is enig oriënterend onderzoek uitgevoerd naar de minimale monstergrootte voor NIRS en/of chemisch onderzoek. Nagegaan is of een monstergrootte van ca. 2 gram voldoende is om NIRS-metingen aan uit te voeren. Bovendien is de mogelijkheid nagegaan om met behulp van NIRS aan één zaadje te meten en om van één zaadje chemisch de vetzuursamenstelling en/of het glucosinolaatgehalte te bepalen.

## 2 MATERIAAL

Van de BV Koninklijk Kweekbedrijf en Zaadhandel D.J. van der Have werden 248 monsters koolzaad van verschillende herkomst, oogstjaar en ras ontvangen. Met behulp van spectraalanalyse zijn hieruit 28 monsters geselecteerd, waarmee voor de verschillende componenten ijklijnen zijn berekend (zie RIKILT-rapport 88.75).

In de 2e fase van het onderzoek zijn nog eens 50 monsters geselecteerd uit het totaal aanbod van 248 koolzaadmonsters. Daarnaast zijn er nog 13 koolzaadmonsters met een verhoogd erucazuurgehalte (C22:1) aangeleverd door D.J. van der Have BV (zie bijlage A).

## 3 METHODEN

### 3.1 Chemische analyses

De 50 nieuw geselecteerde koolzaadmonsters zijn op alle componenten chemisch geanalyseerd. De 13 monsters met een verhoogd erucazuurgehalte zijn alleen geanalyseerd op de vetzuursamenstelling.

Alle chemische analyses zijn uitgevoerd aan de hele zaden.

- Het vochtgehalte is bepaald volgens RIKILT voorschrift D18A. Hierbij worden de zaden gedroogd bij  $102^{\circ}\text{C} \pm 2^{\circ}\text{C}$  tot constant gewicht. Het gehalte is berekend in de waar.
- Het oliegehalte is bepaald volgens RIKILT voorschrift A104. Hiervoor worden de zaden gekneusd met een kogelslagmolen en vervolgens met petroleumether geëxtraheerd. Het gehalte is berekend in de waar.
- De ruwe celstof is bepaald volgens RIKILT voorschrift A410. Hierbij wordt gebruik gemaakt van de Fibertec. Het principe van de methode is overeenkomstig EEG-methode 2354/VI/82E.

De bepaling is uitgevoerd in het schroot, verkregen na kneuzen en ontvetten van het koolzaad. Het gehalte is berekend in de waar.

- Het ruw eiwit is bepaald volgens EEG-methode 72/199/EEG. Het gehalte is berekend in de waar.

- De glucosinolaatgehalten zijn bepaald volgens RIKILT voorschrift A466. Bij deze methode worden de monsters koolzaad gemalen in een koffiemolen. Vervolgens worden de glucosinolaten geëxtraheerd met kokend water. De glucosinolaten worden gebonden aan een Sephadex anionenwisselaar, enzymatisch gedesulfateerd, geëluëerd en van elkaar gescheiden met reversed phase HPLC. In afwijking met het voorschrift werd aan het loopmiddel 0,05% tetramethylammoniumchloride toegevoegd. Sinigrin of glucotropaeolin dienen als interne standaard. De detectie van de glucosinolaten geschiedt via UV-absorptie bij 229 nm. Het gehalte is berekend in de waar.
- De vetzuursamenstelling is gaschromatografisch bepaald conform NEN 6334 gebruikmakend van een capillaire kolom. Hiervoor zijn de vetzuren die gebonden zijn in triglyceriden omgezet in de corresponderende methylesters volgens NEN 6302 methode 5, waarbij gebruik wordt gemaakt van methanolische KOH.

De bepaling is uitgevoerd in de olie verkregen bij de bepaling van het oliegehalte. De vetzuurgehalten zijn berekend als % vetzuur van het totaal vetzuur.

Gaschromatografische condities:

Kolom : CP Wax 57 CB, 25 m x 0.22 mm ID, Df 0.24 µm

Temperatuur : 220°C

Draaggas : Helium 1.2 bar

Detector : FID

Injectie : Split 1:100

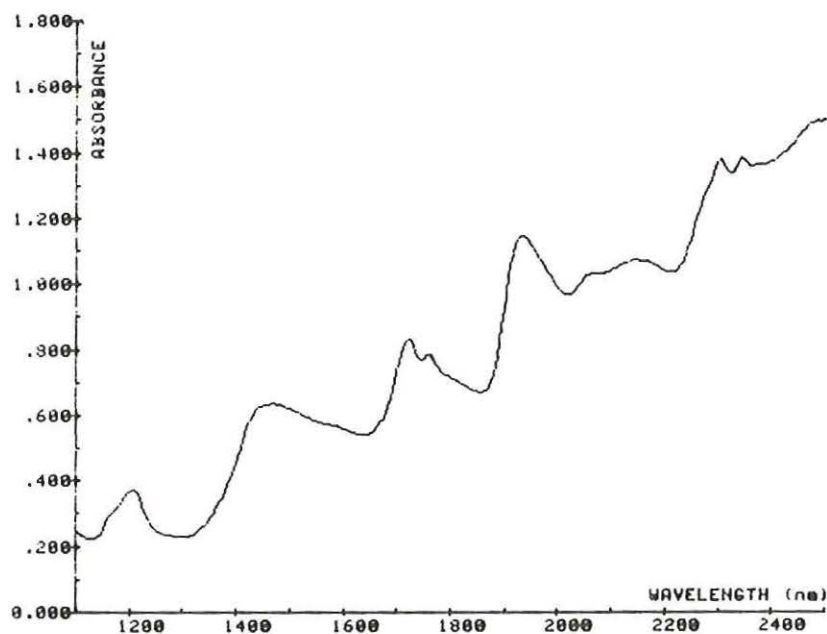
### 3.2 NIRS

De NIRS-analyse is uitgevoerd met behulp van een Technicon Infra Analyzer-500 (IA-500), gekoppeld aan een HP-1000 minicomputer. Dit instrument is een computergestuurde spectrometer, uitgerust met een monochromator. Hiermee zijn spectra opgenomen over het golflengtegebied van 1100-2500 nm.

### 3.2.1 NIRS-analyse

Uit de 248, door van der Have BV aangeleverde, koolzaadmonsters is een selectie gemaakt van 28 calibratiemonsters. Met behulp van deze monsters zijn in fase 1 van het onderzoek (zie RIKILT-rapport 88.75) voor de verschillende componenten NIRS-ijklijnen opgesteld. Van de resterende 220 monsters is aan de hand van deze ijklijnen de samenstelling voorspeld. Afhankelijk van de samenstelling zijn 50 monsters geselecteerd die als toetsmonster kunnen dienen, maar die tevens een positieve bijdrage leveren aan de opbouw van de range indien ze toegevoegd worden aan de calibratieset.

Vervolgens zijn van deze monsters nieuwe NIR-spectra opgenomen, zodat de NIRS-metingen op hetzelfde tijdstip plaatsvonden als de chemische analyses. Tevens zijn NIR-spectra opgenomen van de monsters met een verhoogd erucazuurgehalte. Daartoe zijn de monsters bij gebruik van een gesloten monstercup in enkelvoud ingelezen in de InfraAlyzer-500. Hierbij werd over het golflengtegebied van 1100-2500 nm om de 4 nm de reflectie gemeten in de  $\log 1/R$  ( $R$  = reflectie) vorm (zie figuur 1).



Figuur 1. NIR-spectrum van een monster koolzaad.



### 3.2.2 Toets en definitieve calibratie

Voor de 50, respectievelijk 13 nieuwe koolzaadmonsters zijn de chemisch bepaalde gehalten van de verschillende componenten ingevoerd in de computer en gekoppeld aan de bijbehorende NIR-spectra.

Vervolgens zijn de gehalten van de verschillende componenten voorspeld met behulp van de reeds berekende ijklijnen en zijn de standaardafwijkingen tussen beide methoden berekend. Deze standaardafwijkingen van de verschillen tussen de chemisch bepaalde gehalten en de met NIRS voorspelde gehalten (SEP = Standard Error of Prediction) zijn een maat voor de nauwkeurigheid van de ijklijnen.

Indien de SEP in dezelfde orde van grootte ligt als de voor de ijklijn berekende SEC (Standard Error of Calibration) kan gesteld worden dat de ijklijn betrouwbaar is. Indien de SEP groter is dan ca. 2x de SEC dan moet gesteld worden dat de calibratiemonsters niet voldoende representatief zijn voor de totale populatie koolzaadmonsters. De calibratieset zal uitgebreid moeten worden en er zullen nieuwe calibratieberekeningen moeten worden uitgevoerd met als doel het verkrijgen van 'robuuste' en betrouwbare ijklijnen.

## 4 RESULTATEN EN DISCUSSIE

### 4.1 Chemische analyses

Alle resultaten van de chemische analyses zijn het gemiddelde van een duplobepaling.

- De resultaten van de vocht-, olie-, ruwe celstof- en ruw eiwitbepalingen van de 50 nieuw geselecteerde koolzaadmonsters zijn vermeld in bijlage B.
- De resultaten van de glucosinolaatbepalingen zijn weergegeven in bijlage C. Hierbij is zowel het totaalgehalte weergegeven als de som van de alkylglucosinolaten en de som van de indolglucosinolaten.
- In bijlage D zijn de resultaten vermeld van de vetzuursamenstelling. De isomeren van eicoseenzuur (C20:1) en docoseenzuur (C22:1) zijn in de tabel gesommeerd. Docoseenzuur bevat als hoofdcomponent (minimaal 98%) het erucazuur (cis 13-docoseenzuur), reden waarom C22:1 in dit verslag verder aangeduid wordt als erucazuur.

#### 4.2 Toets en definitieve calibraties IA-500

##### Vocht

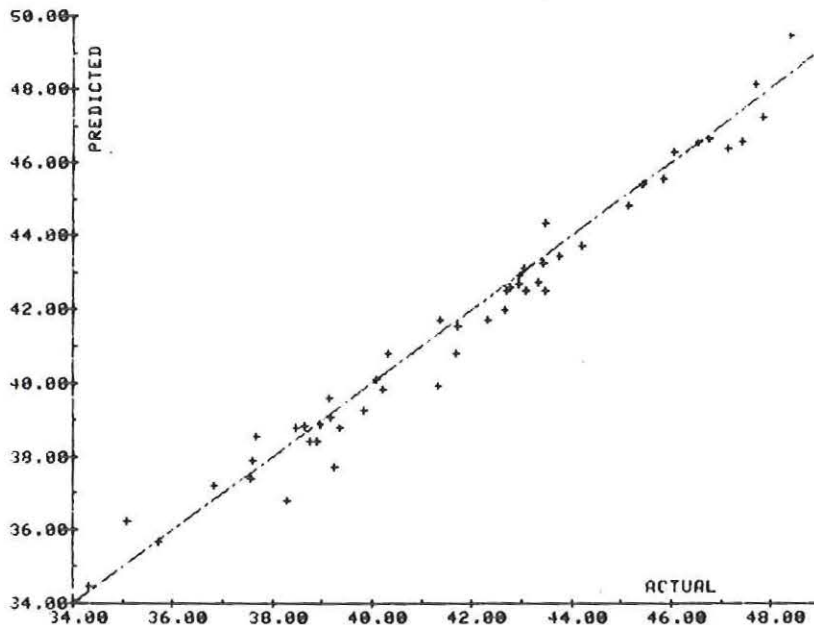
Met behulp van de 50 op samenstelling geselecteerde monsters is de eerder berekende ijklijn ( $R=0,99/SEC=0,09\%/n=28/range: 5.52-7.96\%$ ) getoetst op zijn betrouwbaarheid. Hiervoor werd een SEP berekend van  $0,15\%$ . Gesteld kan worden dat de ijklijn betrouwbaar is en dat het vochtgehalte van onbekende koolzaadmonsters voldoende nauwkeurig bepaald kan worden met behulp van NIRS.

Om de ijklijn nog robuuster te maken zijn de 50 toetsmonsters toegevoegd aan de calibratieset ( $n=28$ ) en zijn nieuwe calibratieberekeningen uitgevoerd. Hiervoor werd zowel met de step up zoekmethode (5 golflengten) als met de 1e afgeleide rekentechniek (4 golflengten) een SEC berekend van  $0,13\%$  en een  $R$  van  $0,98$ . De range van de uitgebreide calibratieset bedraagt  $5,38-8,14\%$  ( $n=78$ ).

##### Olie

Ook de eerder berekende ijklijn voor olie ( $R=0,99/SEC=0,51\%/n=28/range: 31,96-47,96\%$ ) is met behulp van de 50 nieuwe monsters getoetst op zijn betrouwbaarheid. Hierbij werd een SEP berekend van  $0,68\%$ . Er kan gesteld worden dat de ijklijn betrouwbaar is en dat het oliegehalte van onbekende koolzaadmonsters met behulp van NIRS voldoende nauwkeurig bepaald kan worden (zie figuur 2).

Vervolgens zijn de monsters van de calibratieset en de toetsset samengevoegd en zijn nieuwe calibratieberekeningen uitgevoerd. Dit resulteerde met behulp van de 1e afgeleide rekentechniek (bij gebruik van 5 golflengten) in een  $R$  van  $0,99$  en een SEC van  $0,61\%$ . Met behulp van de all combination zoekmethode werden 4 golflengten geselecteerd en werd een  $R$  berekend van  $0,99$  en een SEC van  $0,63\%$ . Hierbij kan opgemerkt worden dat de golflengtekeuze (na all combination search) voor de uitgebreide calibratieset ( $n=78$ ) exact dezelfde is als voor de oorspronkelijke calibratieset ( $n=28$ ).



Figuur 2. De oliegehalten van 50 koolzaadmonsters bepaald met behulp van de referentiemethode zijn uitgezet tegen de met NIRS (met behulp van de ijklijn met  $R=0,99$  en  $SEC=0,51\%$ ) voorspelde gehalten.

#### Ruw eiwit

Toetsing van de eerder berekende ijklijn voor ruw eiwit ( $R=0,99/$   $SEC=0,33\%/n=28/range: 15,64-29,46\%$ ) met de 50 op samenstelling geselecteerde monsters leverde een SEP op van  $0,87\%$ . Er moet gesteld worden dat de calibratiemonsters onvoldoende representatief zijn voor de totale populatie koolzaadmonsters en dat de calibratieset uitgebreid moet worden. Daartoe zijn de 50 monsters toegevoegd aan de 28 calibratiemonsters, zodat de range beter van opbouw en meer representatief wordt. Vervolgens zijn met een totaal van 78 monsters nieuwe calibratieberekeningen uitgevoerd.

Met behulp van de 1e afgeleide rekentechniek, waarbij 5 golflengten werden geselecteerd, werd een R berekend van  $0,99$  en een SEC van  $0,42\%$ . Met behulp van de all combination rekenmethode werd een R berekend van  $0,99$  en een SEC van  $0,43\%$  (4 golflengten).

#### Ruwe celstof

Ruwe celstof is een moeilijk te definiëren component, daarnaast is de variatie in de gehalten erg klein (5-7 %) waardoor een erg ongunstige verhouding SEC:range ontstaat. Conclusie van eerder uitgevoerd onderzoek was dan ook dat voor een meer betrouwbare bepaling van de component met NIRS de range aanzienlijk uitgebreid moet worden.

Toetsing van de eerder berekende ijklijn voor ruwe celstof ( $R=0,93/$  SEC=0,22 %/n=28/range: 5,05-7,07 %) met de 50 op samenstelling geselecteerde monsters leverde een SEP op van 1,32 %. In tegenstelling tot de bepaling van ruw eiwit leverde toevoeging van de nieuwe monsters aan de calibratieset geen significante verbetering op. Hierbij kan opgemerkt worden dat de geselecteerde golflengten geheel andere waren dan de eerder voor de calibratieset (n=28) geselecteerde golflengten. Hieruit zou geconcludeerd kunnen worden dat de eerder geselecteerde golflengten weinig karakteristiek zijn voor de component ruwe celstof. Anderzijds blijkt, uit de keuze van golflengten en enkele statistische grootheden, dat voor de uitgebreide calibratieset nog minder karakteristieke golflengten geselecteerd worden. De oorzaak moet waarschijnlijk gezocht worden in het feit dat enerzijds de component ruwe celstof een moeilijk te definiëren component is en anderzijds dat door het karakter van de empirische referentiemethode de nauwkeurigheid van de referentiewaarden te wensen overlaat. Hierdoor en doordat de range erg smal blijft is het niet mogelijk met NIRS een betrouwbare ijklijn op te stellen voor de bepaling van deze component in koolzaad.

Gesteld moet worden dat de eerder berekende ijklijn (n=28) nog de meest betrouwbare is maar hooguit voor semi-kwantitatieve doeleinden (klasse-indeling in bijv. laag, middel en hoog ruwe celstofgehalte) toegepast kan worden.

#### Glucosinolaat

De ijklijn voor het totaal glucosinolaatgehalte in koolzaad ( $R=0,99/$  SEC=3,34  $\mu\text{mol/g}$ /n=28/range: 7-130  $\mu\text{mol/g}$ ) is eveneens getoetst op zijn betrouwbaarheid met behulp van de 50 nieuw geselecteerde monsters. De SEP bedroeg 5,33  $\mu\text{mol/g}$ . Gesteld kan worden dat de ijklijn betrouwbaar is en dat het totaal glucosinolaatgehalte van onbekende koolzaadmonsters redelijk nauwkeurig bepaald kan worden m.b.v. NIRS.

Om de ijklijn betrouwbaarder/nauwkeuriger te maken is de calibratieset aangevuld met de 50 monsters. Het monster met een glucosinolaatgehalte van 130  $\mu\text{mol/g}$  is uit de calibratieset verwijderd omdat dit monster een te grote invloed had op de 'ligging' van de ijklijn. De range voor het totaal glucosinolaatgehalte (voor  $n=76$ ) bedraagt 7-102  $\mu\text{mol/g}$ . Nieuwe calibratieberekeningen leverden met behulp van de 1e afgeleide rekentechniek een R van 0,99 en een SEC van 2,76  $\mu\text{mol/g}$ . Hiervoor werden 4 golflengten geselecteerd.

Tevens is op verzoek een ijklijn opgesteld voor het lage concentratiegebied van glucosinolaat (tot 40  $\mu\text{mol/g}$ ). Hiervoor werd een calibratieset samengesteld met 62 monsters. Met behulp van de 1e afgeleide rekentechniek werden nagenoeg dezelfde golflengten geselecteerd als voor de totale range en werd een R berekend van 0,99 en een SEC van 2,03  $\mu\text{mol/g}$ .

#### Vetzuursamenstelling

Voor wat de vetzuursamenstelling van koolzaad betreft, is de aandacht uitgegaan naar de meest relevante vetzuren, nl. C16:0, C18:1, C18:2, C18:3 en C22:1.

#### C16:0

De eerder berekende ijklijn voor C16:0 ( $R=0,92/SEC=0,26\%/n=28/range: 3,1-5,5\%$ ) is op zijn betrouwbaarheid getoetst met behulp van de 50 nieuw geselecteerde koolzaadmonsters én de 13 koolzaadmonsters met een verhoogd erucazuurgehalte. Bij de voorspelling van deze monsters op de ijklijn voor C16:0 werd een SEP berekend van 0,40 %. Gesteld kan worden dat de ijklijn betrouwbaar is en dat het gehalte aan C16:0 in de olie van onbekende koolzaadmonsters voldoende nauwkeurig bepaald kan worden.

Om de ijklijn nog robuuster te maken is ook hier de calibratieset uitgebreid met de nieuwe monsters ( $n=28+50+13=91$ ) en zijn nieuwe calibratieberekeningen uitgevoerd. Hiervoor werd zowel met de step up zoekmethode (5 golflengten) als met de 1e afgeleide rekenmethode (5 golflengten) een R berekend van 0,91 en een SEC van 0,28 %.

C18:1

Ook de eerder opgestelde ijklijn voor C18:1 ( $R=0,91/SEC=7,2\%/n=28/$  range: 10,8-66,3 %) is met behulp van de 63 nieuwe monsters getoetst op zijn betrouwbaarheid. Er werd een SEP berekend van 17,3 %. Gesteld moet worden dat deze ijklijn nog onvoldoende betrouwbaar is. Dit wordt voor een belangrijk deel veroorzaakt doordat de range van de calibratieset verre van ideaal is opgebouwd. Door de calibratieset uit te breiden met de 63 nieuwe monsters wordt dit enigszins verbeterd (C18:1-gehalten tussen 20-55 % komen praktisch niet voor bij koolzaden, zodat een ideaal opgebouwde range niet te realiseren is). Nieuwe berekeningen aan 91 monsters leverde met behulp van de afgeleide rekentechniek een ijklijn met een R van 0,98 en een SEC van 4,0 % (5 golflengten).

C18:2

Bij de toetsing van de ijklijn voor C18:2 ( $R=0,94/SEC=0,83\%/n=28/$  range: 11,8-22,2 %) met de 63 nieuwe monsters werd een SEP berekend van 0,99 %. Ook hier kan gesteld worden dat de eerder berekende ijklijn betrouwbaar is en dat C18:2-gehalten in onbekende monsters koolzaad nauwkeurig bepaald kunnen worden. Toevoeging van de toetsmonsters aan de oorspronkelijke calibratieset resulteerde met behulp van de afgeleide rekentechniek in een ijklijn met een R van 0,99 en een SEC van 0,81 %. Hierbij werden 5 golflengten geselecteerd.

C18:3

Ook de eerder opgestelde ijklijn voor C18:3 ( $R=0,95/SEC=0,57\%/n=28/$  range: 6,8-12,6 %) is getoetst op zijn betrouwbaarheid. Voorspelling van de 63 koolzaadmonsters leverde een SEP van 1,30 %. Gesteld kan worden dat met behulp van deze ijklijn de gehalten aan C18:3 in onbekende koolzaadmonsters m.b.v. NIRS onvoldoende nauwkeurig bepaald kunnen worden.

Na uitbreiding van de calibratieset met de 63 monsters zijn derhalve nieuwe calibratieberekeningen uitgevoerd. Hierbij werd met behulp van de afgeleide rekenmethode, met 5 golflengten, een R berekend van 0,91 en een SEC van 0,60 %. Met behulp van de all combination zoekmethode werd een R berekend van 0,89 en een SEC van 0,67 % (4 golflengten).

C22:1

Als laatste vetzuur is het erucazuur, C22:1, bekeken. Toetsing van de eerder berekende ijklijn ( $R=0,92/SEC=6,58\%/n=28/range: 0,0-48,4\%$ ) met de 63 nieuwe koolzaadmonsters leverde een SEP van 10,6 %.

Om de nauwkeurigheid te vergroten zijn ook hier de toetsmonsters aan de calibratiemonsters toegevoegd en zijn nieuwe berekeningen uitgevoerd. De beste resultaten werden verkregen met de 1e afgeleide rekenmethode. Gebruikmakend van 3 golflengten werd een R berekend van 0,99 en een SEC van 3,28 %. Bij een keuze van 5 golflengten bleef de R gelijk en werd een SEC berekend van 3,04 %. De all combination zoekmethode leverde een R van 0,99 en een SEC van 3,24 %. Hierbij werden 4 golflengten geselecteerd.

#### 4.3 Calibraties IA-400

Aangezien de BV Koninklijk Kweekbedrijf en Zaadhandel D.J. van der Have niet in het bezit is van een InfraAlyzer-500, maar wel beschikt over een InfraAlyzer-400, zijn eveneens de mogelijkheden nagegaan om de gehalten van de verschillende componenten in koolzaad te bepalen met behulp van een IA-400.

In tegenstelling tot de IA-500, die uitgerust is met een monochromator waarmee het hele golflengtegebied van 1100-2500 nm kan worden gescand, is de IA-400 uitgevoerd met een filterwiel met 19 'vaste' filters. Met behulp van een filtersimulatieprogramma zijn de ruwe data, verkregen met de IA-500, omgezet in data die overeenkomen met data afkomstig van de 19 'vaste' filters van de IA-400. Daarna zijn met het all combination rekenprogramma correlaties berekend tussen de chemisch bepaalde gehalten van de verschillende componenten en de reflectiewaarden van de 19 filters. De resultaten zijn weergegeven in tabel 1.

Tabel 1. Resultaten van de calibratieberekeningen (na filtersimulatie) voor de verschillende componenten in koolzaad m.b.v. de IA-400.

Component	R	SEC	filters (n)	range	n
vocht	0,96	0,20	5	5,38 - 8,14 %	78
olie	0,98	0,70	5	31,96 - 48,30 %	78
ruw eiwit	0,99	0,48	5	15,64 - 29,46 %	77
ruwe celstof	0,87	0,29	4	5,05 - 7,07 %	28
glucosinolaat	0,89	12,1	6	7 - 102 umol/g	75
" "	0,84	4,39	5	7 - 40 umol/g	62
C16:0	0,87	0,33	5	3,0 - 5,5 %	89
C18:1	0,95	6,18	5	10,2 - 66,6 %	89
C18:2	0,93	0,95	5	11,0 - 22,8 %	89
C18:3	0,68	1,07	4	6,3 - 12,6 %	89
C22:1	0,97	4,67	5	0,0 - 52,1 %	89

De resultaten van de calibratieberekeningen met getransformeerde data, als zijnde afkomstig van de IA-400, zijn over het algemeen goed te noemen. Bij de meeste componenten wordt maar iets aan nauwkeurigheid ingeleverd (grotere SEC) ten opzichte van de met de IA-500 berekende ijklijnen.

Voor wat betreft de glucosinolaten moet gesteld worden dat het met behulp van de 19 standaardfilters in de IA-400 niet mogelijk is om deze gehalten in koolzaad met ongeveer dezelfde nauwkeurigheid te bepalen als met behulp van de IA-500. Glucosinolaat vertoont in het nabij infrarode golflengtegebied met name specifieke absorptie in het gebied van 1600-1650 nm. Om een goede correlatie te verkrijgen moeten meerdere golflengten uit dit gebied geselecteerd worden (Biston, 1986/ Renard, 1986).

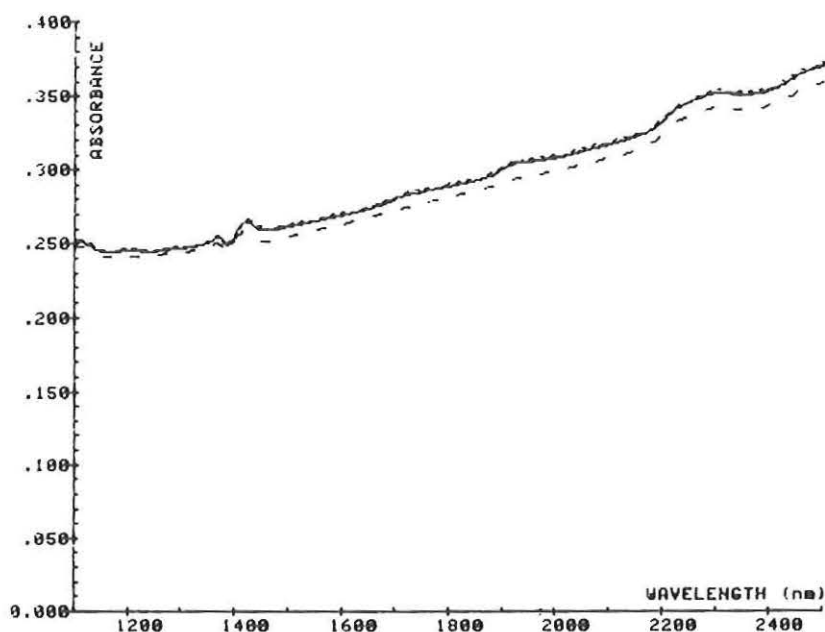
Het standaard filterwiel van de IA-400 bevat echter geen enkele filter in dit golflengtegebied, waardoor een nauwkeurige bepaling van het glucosinolaatgehalte met de standaard IA-400 niet tot de mogelijkheden behoort.



#### 4.4 Monstergrootte m.b.t. NIRS

Nagegaan is of een monstergrootte van ca. 2 gram voldoende is om NIRS onderzoek aan uit te voeren. Hiervoor werd een standaard 'gesloten' monstercup voorzien van een inert plaatje, met als doel de inhoud van de cup te verkleinen. Met een spot van  $2 \text{ cm}^2$  kan aan 2,5 gram probleemloos gemeten worden. Bij een monstergrootte kleiner dan 1,5 gram ontstaan met behulp van genoemde monstercup problemen in verband met onvoldoende laagdikte. Enige verbetering kan verkregen worden door de effectieve monsterinhoud van de cup te vergroten (diameter aan te stralen oppervlak verkleinen en laagdikte van het monster vergroten). Hiervoor dient het diafragma van de InfraAlyzer eveneens verkleind te worden. Verwacht wordt dat met een minimale monstergrootte van ca. 1 gram metingen verricht kunnen worden met behulp van de opgestelde ijklijnen.

Tevens is nagegaan of met behulp van NIRS aan één koolzaadje gemeten kan worden. Hiervoor werd de bodem van een open monstercup opgehoogd (weglengte verkleinen) en voorzien van een inert plaatje. Vervolgens is met het standaard diafragma (spot:  $2 \text{ cm}^2$ ) een reflectiespectrum opgenomen (zie figuur 3).

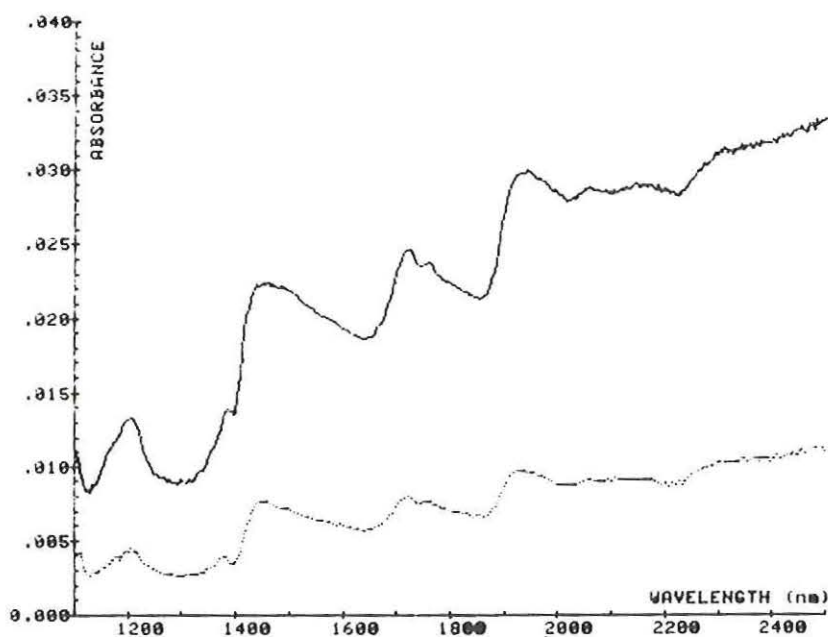


Figuur 3. NIR-spectra van enkele, afzonderlijk gemeten, koolzaadjes.

De spectra bevatten op het eerste gezicht zeer weinig informatie. Indien er echter gecorrigeerd wordt met behulp van een blanco-meting (zelfde meetomstandigheden, zonder zaadje) wordt de absolute absorptie van het koolzaad zichtbaar (figuur 4).

Hoewel het absorptieniveau erg laag ligt, blijkt er toch specifieke informatie (o.a. over het vocht-, olie- en eiwitgehalte) in het spectrum van één koolzaadje aanwezig te zijn. Het een en ander kan verbeterd worden door een kleinere spotdiameter te gebruiken. Hiervoor wordt het diafragma van het systeem praktisch geheel gesloten. Nieuwe opnamen van enkelvoudige koolzaadjes hebben tot gevolg dat het totale absorptieniveau ca. 3x hoger ligt dan bij het eerste experiment (zie ook figuur 4).

Hoewel metingen met behulp van een kleinere spotdiameter een verbetering geven in het absorptieniveau blijft het totale niveau zo'n 50 tot 100x lager dan bij metingen aan ca. 2,5 gram koolzaad (standaard meetomstandigheden). Dit zou verbeterd kunnen worden door meer licht/energie op het koolzaadje aan te stralen, bijv. door in combinatie met een klein diafragma het licht met behulp van convergerende lenzen aan te stralen op het koolzaadje. Dit behoort echter niet tot de mogelijkheden van de IA-500.



Figuur 4. NIR-spectra van één koolzaadje.

----- opname van het spectrum met een spot van 2 cm<sup>2</sup>.

\_\_\_\_\_ opname van het spectrum met een zeer kleine spot.

#### 4.5 Chemische analyses aan één koolzaadje.

Om NIRS-ijklijnen op te stellen voor enkelvoudige koolzaadjes is het noodzakelijk dat de samenstelling van deze zaadjes bekend is. Hiervoor moeten chemische analyses worden uitgevoerd.

Bepaling van het vocht-, olie-, ruw eiwit- en ruwe celstofgehalte aan één zaadje behoort echter niet tot de mogelijkheden in verband met een té kleine monsterhoeveelheid. Voor wat betreft de bepaling van het glucosinolaatgehalte en de vetzuursamenstelling lijken er analytisch gezien geen onoverkomelijke problemen te bestaan.

Voor de bepaling van het glucosinolaatgehalte van één zaadje dient de monstervoorbereiding te worden aangepast en moet het totale extract op een ingekorte analytische kolom gebracht worden.

Voor een toetsmonster (nr. 019) werd voor  $n=10$  zaadjes gemiddeld 19,4  $\mu\text{mol/g}$  glucosinolaat gevonden met een variatie coëfficiënt van 35 %. De minimale en maximale waarden bedroegen 10 en 35  $\mu\text{mol/g}$ . Voor het totale monster was eerder een gehalte van 22  $\mu\text{mol/g}$  vastgesteld. Blijkbaar spreiden de gehalten aan glucosinolaten tussen koolzaadjes aanzienlijk. Het is echter niet aan te geven of dit door genetische- dan wel door groeiomstandigheden is ontstaan.

Voor de bepaling van de vetzuursamenstelling van één zaadje dienen eveneens de monstervoorbereiding en de apparaatcondities aangepast te worden in verband met de monsterhoeveelheid.

Naar de spreiding in de vetzuursamenstelling tussen zaadjes is (nog) geen onderzoek uitgevoerd. In monster nr. 109 werd wel aangetoond dat dit monster uit een mengsel moet bestaan. Er werden zowel zaadjes aangetroffen met een laag erucazuurgehalte ( $<1$  %) als met een hoog erucazuurgehalte ( $>40$  %). Eerder was voor het totale monster een erucazuurgehalte van 13,8 % bepaald.

## 5 CONCLUSIES

- Correlatieberekeningen tussen chemisch bepaalde gehalten aan vocht, olie, ruw eiwit, glucosinolaten en de vetzuren C16:0, C18:1, C18:2, C18:3 en C22:1 én de NIR-reflectiewaarden tonen aan dat de NIRS-methode gebruikt kan worden voor een kwantitatieve bepaling van deze componenten in koolzaad. Voor de bepaling van ruwe celstof behoort slechts een semi-kwantitatieve toepassing tot de mogelijkheden (bv. klasse-indeling in laag, middel en hoog ruwe celstofgehalte).
- De nauwkeurigheid van de bepaling van genoemde componenten is het grootst bij gebruik van een scannende Nabij Infrarood Reflectie meter (IA-500). Bij gebruik van een vastfilter-instrument (IA-400) wordt met name voor de bepaling van het glucosinolaatgehalte een minder goede nauwkeurigheid verkregen.
- De minimale monsterhoeveelheid voor de bepaling van de samenstelling van koolzaad met behulp van de IA-500 met een aangepaste monstercup bedraagt ca. 1 gram. NIRS-metingen aan één zaadje behoren tot de mogelijkheden zij het dat het absorptieniveau 50 tot 100 x lager is dan van metingen aan de "standaardmonsterhoeveelheid". Hierdoor is een kwantitatieve toepassing van NIRS-metingen aan enkelvoudige koolzaadjes met de huidige meetconfiguratie niet mogelijk. Chemische bepaling van het glucosinolaatgehalte en het gehalte aan de meest relevante vetzuren van één koolzaadje levert weinig problemen op.

## 6 AANBEVELING

- De ijklijnen zijn gebaseerd op monsters van oogstjaar 1983 tot 1988. Alvorens metingen aan monsters van de nieuwe oogst (1989) uit te voeren, dienen de ijklijnen met behulp van een aantal (ca. 10) monsters die representatief zijn voor de nieuwe oogst te worden getoetst.
- De opgestelde ijklijnen zijn ontwikkeld met behulp van de Bran + Luebbe - Technicon IA-500. Aanschaf van dit apparaat door van der Have BV geeft dan ook de grootste garantie met betrekking tot de overzetbaarheid van de opgestelde ijklijnen. Ook met behulp van de IA-400 is de overzetbaarheid van de ijklijnen gegarandeerd, maar de

bepaling van de gehalten van de verschillende componenten is minder nauwkeurig dan met behulp van een IA-500. Dit geldt in het bijzonder voor de bepaling van glucosinolaat. De nauwkeurigheid van deze bepaling met behulp van een IA-400 kan wellicht verbeterd worden door installatie van, voor deze component, meer specifieke interferentiefilters.

De overzetbaarheid van de ijklijnen naar andere scannende NIR-systemen dan wel naar tiltingfiltersystemen kan door ons niet gegarandeerd worden.

- Indien hoge prioriteit wordt toegekend aan het niet-destructief meten van enkelvoudige koolzaadjes biedt het gebruik van Nabij-Infrarood Transmissie Spectroscopie, bij gebruik van een "optical bench" gekoppeld aan fibers, het meeste perspectief.

#### LITERATUUR

Biston, R. et al. Analysis of quality parameters of whole rapeseed by NIRS. Proceedings CEC workshop glucosinolates in rapeseeds, analytical aspects. October 1-3, 1986, Gembloux (Belgium).

EEG methode 72/199/EEG. Derde Richtlijn, gepubliceerd in publikatieblad L123, 29 mei 1972.

NEN 6302. Onderzoeksmethoden voor plantaardige en dierlijke oliën en vetten. Bereiding van methylesters van vetzuren voor gaschromatografie en infraroodspectrofotometrie. 1e druk, januari 1980, Ned. Normalisatie-instituut, Delft.

NEN 6334. Onderzoeksmethoden voor plantaardige en dierlijke oliën en vetten. Gaschromatografische analyse van methylesters van vetzuren. 1e druk, juli 1980, Ned. Normalisatie-instituut, Delft.

Renard, M. et al. Glucosinolates analysis in whole rapeseed by near infrared reflectance spectroscopy. Proceedings CEC workshop glucosinolates in rapeseeds, analytical aspects. October 1-3, 1986, Gembloux (Belgium).

RIKILT rapport 88.75; Frankhuizen, R. en M.A.H. Tusveld. Raapzaad: onderzoek naar correlaties chemische analyse - NIRS. December 1988, RIKILT, Wageningen.

RIKILT voorschrift A104. Oliezaden - Bepaling van het oliegehalte - gravimetrisch. Januari 1981, RIKILT, Wageningen.

RIKILT voorschrift A410. Diervoeders - Bepaling van het gehalte aan ruwe celstof - Fibertec. Mei 1985, RIKILT, Wageningen.

RIKILT voorschrift D18A. Bepaling vochtgehalte van koolzaad, 1e oplage, 1968-01-17, Rijkszuivelstation, Leiden.

RIKILT voorschrift A466. Cruciferen - Bepaling van glucosinolaten - HPLC, 2e oplage, juni 1987, RIKILT, Wageningen.

## LIJST VAN 13 KOOLZAADMONSTERS MET VERHOOGD ERUCAZUURGEHALTE

OBJ	PEDIGREE	ORIGINE
NIR-251	BRALIN	BUGG 1988 (688-02)
NIR-252	BRALIN (HBn2)	FIJNEN 1987 (687-01)
NIR-253	HBn1	OOGST 1982
NIR-254	EMERALD	
NIR-255	BELLO	
NIR-256	BLAKO	
NIR-257	FORA	
NIR-258	OLYMPIADE	
NIR-259	CANARD	
NIR-260	BLAKO	
NIR-261	WINDAL 14-80	
NIR-262	WINDAL 10-80	
NIR-263	EMERALD 43-80	





## RESULTATEN VOCHT-, OLIE-, RUWE VEZEL- EN RUW EIWITBEPALING

Monster code	Vocht %	Olief %	Ruwe celstof %	Ruw eiwit %
1	6,8	42,6	8,3	18,9
19	6,7	43,2	8,2	21,7
21	7,1	42,2	9,6	20,5
22	7,3	41,6	6,7	22,4
27	7,0	40,1	7,4	23,5
31	7,4	41,2	7,9	21,5
32	7,6	39,3	7,4	22,1
38	7,2	43,4	5,3	19,4
39	7,3	44,1	6,5	18,7
42	6,1	43,7	7,5	20,2
48	6,9	41,3	7,4	21,0
51	6,8	40,2	7,5	21,9
57	6,7	41,6	7,4	21,2
58	7,3	39,0	6,2	22,5
59	7,3	39,8	6,6	21,9
63	7,0	37,6	6,6	23,6
66	7,9	36,7	7,2	25,0
68	8,1	35,0	6,6	23,8
70	7,3	39,1	6,1	23,4
77	6,9	43,0	4,9	20,2
79	7,2	42,6	4,8	20,0
81	7,5	38,6	5,0	23,4
82	8,0	34,2	4,4	28,2
85	7,2	42,7	4,8	20,0
86	7,8	38,9	4,4	23,7

Monster code	Vocht %	Olie %	Ruwe celstof %	Ruw eiwit %
89	6,3	45,0	4,0	22,5
94	7,8	39,1	4,5	25,1
95	7,3	38,2	5,4	24,0
96	7,3	43,3	5,4	18,4
101	7,7	35,6	5,7	26,0
102	7,7	37,5	5,5	24,9
103	7,9	38,8	5,5	24,2
109	6,9	42,8	5,1	21,1
110	7,7	38,4	6,1	23,1
119	7,2	40,0	4,9	23,7
120	6,9	43,4	4,9	23,1
127	6,8	42,9	4,9	23,0
131	7,1	38,5	4,9	25,5
134	7,4	37,5	5,1	24,9
144	6,2	47,3	5,6	16,2
146	5,8	47,6	4,8	17,4
151	6,2	46,0	5,5	17,1
159	5,8	48,3	5,0	16,6
164	6,0	45,3	4,8	17,1
178	6,3	45,7	5,3	16,8
179	6,8	42,8	5,5	17,8
183	6,1	46,7	5,5	16,5
232	5,4	47,7	5,2	17,5
238	5,8	47,0	4,8	16,4
247	5,7	46,4	5,3	16,8

## RESULTATEN GLUCOSINOLATEN

Glucosinolaatgehalte in umol per gram koolzaad

monster nr.	ALKYL	INDOL	TOTAAL
1	29	5	34
19	17	5	22
21	53	4	56
22	15	4	20
27	85	6	91
31	14	5	19
32	15	5	20
38	15	4	19
39	7	3	10
42	53	5	58
48	11	5	16
51	85	5	90
57	23	5	27
58	21	4	25
59	12	5	17
63	98	5	102
66	5	5	10
68	17	4	21
70	20	5	25
77	8	3	11
79	8	3	11
81	7	4	12
82	18	5	23
85	8	3	11
86	6	4	11
89	5	4	9
94	10	3	13
95	20	5	25
96	58	4	63
101	10	4	14
102	5	5	10
103	9	5	14
109	82	5	87
110	83	4	87
119	9	4	13
120	5	4	8
127	6	5	10
131	6	5	11
134	6	4	10
144	13	3	16
146	24	4	28
151	22	4	42
159	10	3	13
164	30	4	34
178	22	4	26
179	25	4	29
183	43	3	47
232	24	5	29
238	34	4	37
247	25	4	29



## RESULTATEN VETZUURSAMENSTELLING

Gehalte van de belangrijkste vetzuren (% vetzuur/totaal vetzuur)

Nr.	C16:0	C16:1	C18:0	C18:1	C18:2	C18:3	C20:0	C20:1	C22:0	C22:1	C22:2	C24:1	REST
1	4.6	0.3	1.8	65.6	18.2	7.0	0.6	1.1	0.3	0.0	0.0	0.0	0.4
19	4.6	0.3	1.7	60.1	19.4	11.1	0.6	1.2	0.3	0.2	0.0	0.0	0.4
21	5.5	0.3	1.5	56.1	21.8	12.2	0.5	1.1	0.3	0.3	0.0	0.0	0.4
22	4.5	0.3	1.6	60.1	20.0	10.6	0.6	1.3	0.3	0.1	0.0	0.0	0.4
27	5.0	0.4	1.4	58.8	21.0	10.3	0.5	1.3	0.3	0.7	0.0	0.0	0.4
31	4.5	0.3	1.6	64.0	19.5	7.7	0.5	1.2	0.3	0.0	0.0	0.0	0.4
32	5.0	0.3	1.6	62.4	20.4	7.9	0.6	1.2	0.3	0.0	0.0	0.0	0.4
38	5.0	0.4	1.6	65.6	18.3	7.3	0.5	1.0	0.1	0.0	0.0	0.0	0.1
39	4.6	0.3	2.0	64.3	18.7	7.8	0.6	1.1	0.3	0.0	0.0	0.0	0.4
42	4.9	0.3	1.6	64.2	18.5	8.3	0.5	1.0	0.2	0.0	0.0	0.0	0.4
48	4.3	0.3	1.5	61.9	20.7	9.1	0.5	1.2	0.2	0.0	0.0	0.0	0.3
51	4.7	0.3	1.6	60.9	20.9	9.6	0.5	1.0	0.2	0.0	0.0	0.0	0.4
57	4.4	0.3	1.6	64.5	18.0	9.0	0.5	1.0	0.3	0.0	0.0	0.0	0.4
58	4.5	0.3	1.3	58.6	21.4	11.2	0.5	1.4	0.3	0.1	0.0	0.0	0.4
59	4.1	0.3	1.5	61.6	19.1	10.7	0.5	1.3	0.3	0.2	0.0	0.0	0.3
63	3.2	0.3	1.0	15.5	11.1	7.9	0.7	8.8	0.5	48.6	0.5	0.8	1.1
66	4.9	0.3	1.6	62.5	18.5	9.9	0.6	1.1	0.3	0.0	0.0	0.0	0.4
68	5.0	0.3	1.4	56.4	22.8	11.4	0.5	1.3	0.4	0.0	0.0	0.0	0.5
70	4.4	0.3	1.5	61.6	19.3	9.8	0.6	1.2	0.3	0.0	0.0	0.0	0.9
77	4.5	0.3	1.4	64.0	18.8	9.0	0.5	1.0	0.2	0.0	0.0	0.0	0.3
79	4.5	0.3	1.4	63.8	19.0	8.9	0.5	1.0	0.2	0.0	0.0	0.0	0.3
81	4.5	0.3	1.7	63.1	19.1	9.0	0.6	1.1	0.3	0.0	0.0	0.0	0.3
82	4.4	0.3	1.6	66.6	17.1	7.6	0.6	1.2	0.3	0.0	0.0	0.0	0.4
95	4.5	0.3	1.4	64.0	18.8	9.0	0.5	1.0	0.2	0.0	0.0	0.0	0.3
96	4.4	0.3	2.1	64.7	17.5	8.8	0.6	1.0	0.3	0.0	0.0	0.0	0.4
99	4.5	0.3	1.3	58.1	21.0	12.1	0.5	1.2	0.3	0.0	0.0	0.0	0.6
94	4.7	0.4	1.4	63.8	18.9	8.4	0.5	1.1	0.3	0.0	0.0	0.0	0.7
95	4.4	0.3	1.7	63.6	19.6	8.1	0.5	1.0	0.3	0.0	0.0	0.0	0.6
96	3.5	0.3	1.6	13.3	13.3	8.3	1.0	9.1	0.7	46.8	0.6	0.6	0.9
101	4.6	0.4	1.7	61.8	19.0	8.0	0.6	1.6	0.3	1.6	0.0	0.0	0.5
102	4.7	0.4	1.8	65.2	17.8	7.8	0.6	1.0	0.3	0.0	0.0	0.0	0.6
103	4.0	0.3	1.5	61.9	19.1	10.8	0.5	1.1	0.3	0.1	0.0	0.1	0.5
109	4.2	0.2	1.4	41.4	18.9	9.6	0.4	8.9	0.2	13.8	0.0	0.3	0.7
110	3.2	0.3	1.4	13.5	12.7	8.2	0.9	8.0	0.7	49.0	0.6	0.7	0.7
119	4.7	0.4	2.0	62.3	18.9	9.3	0.6	1.0	0.3	0.0	0.0	0.0	0.5
120	4.5	0.3	1.4	62.1	18.9	10.6	0.4	1.0	0.2	0.0	0.0	0.0	0.5
127	4.3	0.3	1.6	60.7	18.6	12.4	0.5	1.0	0.2	0.0	0.0	0.0	0.5
131	4.0	0.3	1.7	61.6	21.0	8.5	0.6	1.4	0.3	0.2	0.0	0.0	0.5
134	4.8	0.4	1.7	63.6	19.5	7.8	0.5	1.0	0.3	0.0	0.0	0.0	0.4
144	5.2	0.3	1.5	62.3	18.8	9.7	0.5	1.0	0.2	0.0	0.0	0.0	0.5
146	4.9	0.3	1.6	63.1	17.8	9.3	0.5	1.5	0.2	0.4	0.0	0.0	0.4
151	5.2	0.3	1.5	62.3	18.5	9.7	0.4	1.1	0.2	0.2	0.0	0.0	0.5
159	4.4	0.3	1.5	63.3	18.6	10.1	0.4	0.9	0.2	0.0	0.0	0.0	0.4
164	5.2	0.3	1.5	60.3	19.7	10.8	0.5	0.9	0.2	0.0	0.0	0.0	0.5
178	5.0	0.3	1.5	61.5	19.2	10.2	0.5	1.1	0.3	0.0	0.0	0.0	0.4
179	5.0	0.3	1.3	60.6	18.9	11.7	0.4	1.0	0.2	0.0	0.0	0.0	0.4
183	5.2	0.3	1.5	61.9	19.3	9.6	0.5	1.0	0.3	0.0	0.0	0.0	0.5
232	4.9	0.3	1.6	63.2	17.9	9.3	0.5	1.5	0.2	0.4	0.0	0.0	0.4
238	5.1	0.3	1.5	61.5	18.8	10.0	0.5	1.1	0.2	0.4	0.0	0.0	0.5
247	5.0	0.3	1.3	60.7	19.9	10.7	0.4	1.0	0.2	0.0	0.0	0.0	0.4
251	3.3	0.3	1.3	11.6	13.4	9.3	0.8	8.1	0.7	49.3	0.7	0.6	0.7
252	3.4	0.3	1.6	13.1	13.3	8.5	1.0	9.2	0.7	47.1	0.6	0.6	0.7
253	3.5	0.2	0.8	10.2	15.0	8.4	0.6	6.3	0.6	52.1	0.9	0.7	0.7
254	3.1	0.3	1.0	11.7	14.3	8.9	0.6	8.1	0.5	49.1	0.8	0.7	0.8
255	3.3	0.2	1.1	13.5	13.2	9.4	0.7	10.4	0.5	45.7	0.5	0.7	0.7
256	3.7	0.3	1.0	14.2	15.2	9.1	0.6	11.3	0.4	42.1	0.5	0.7	0.9
256	3.0	0.2	1.2	13.1	13.8	8.8	0.7	7.8	0.6	48.5	0.6	0.9	1.0
258	3.1	0.2	1.1	20.2	11.0	6.3	0.7	10.2	0.6	44.7	0.3	0.7	1.0
259	3.2	0.2	1.0	14.1	13.2	9.2	0.6	8.7	0.5	46.5	0.6	0.8	1.3
260	3.9	0.2	0.9	12.8	15.8	9.6	0.6	11.2	0.4	41.7	0.5	0.9	1.6
261	3.1	0.2	1.0	14.9	12.6	7.5	0.6	8.7	0.5	48.9	0.4	0.7	0.9
262	3.3	0.2	1.1	12.5	13.4	9.5	0.7	9.7	0.5	46.5	0.6	0.8	1.1
263	3.6	0.3	1.0	11.5	13.6	9.2	0.6	7.3	0.5	49.3	0.7	1.0	1.3

Verklaring van de gebruikte symbolen:

C16:0	Palmitinezuur	C20:0	Eicosaanzuur
C16:1	Palmitoliezuur	C20:1	Eicoseenzuur (som van isomeren)
C18:0	Stearinezuur	C22:0	Beheenzuur
C18:1	Oliezuur	C22:1	Docoseenzuur (erucazuur + isomeren)
C18:2	Linolzuur	C22:2	Docosadieenzuur
C18:3	Linoleenzuur	C24:1	Tetracoseenzuur