

# Primjena kemometrijskih metoda i prediktivnih matematičkih modela u razvrstavanju i analizi sirovina

---

**Bošnjaković, Zvonimir**

**Master's thesis / Diplomski rad**

**2017**

*Degree Grantor / Ustanova koja je dodijelila akademski / stručni stupanj:* **Josip Juraj Strossmayer University of Osijek, FACULTY OF FOOD TECHNOLOGY / Sveučilište Josipa Jurja Strossmayera u Osijeku, Prehrambeno-tehnološki fakultet Osijek**

*Permanent link / Trajna poveznica:* <https://urn.nsk.hr/urn:nbn:hr:109:609642>

*Rights / Prava:* [In copyright / Zaštićeno autorskim pravom.](#)

*Download date / Datum preuzimanja:* **2024-04-19**

REPOZITORIJ

**PTF**

PREHRAMBENO-TEHNOLOŠKI FAKULTET OSIJEK

**dabar**  
DIGITALNI AKADEMSKI ARHIVI I REPOZITORIJ

*Repository / Repozitorij:*

[Repository of the Faculty of Food Technology Osijek](#)



**SVEUČILIŠTE JOSIPA JURJA STROSSMAYERA U OSIJEKU**

**PREHRAMBENO-TEHNOLOŠKI FAKULTET OSIJEK**

Zvonimir Bošnjaković

**PRIMJENA KEMOMETRIJSKIH METODA I PREDIKTIVNIH  
MATEMATIČKIH MODELA U RAZVRSTAVANJU I ANALIZI SIROVINA**

DIPLOMSKI RAD

Osijek, prosinac, 2017.

Sveučilište Josipa Jurja Strossmayera u Osijeku  
Prehrambeno-tehnološki fakultet Osijek  
Zavod za procesno inženjerstvo  
Katedra za modeliranje, optimiranje i automatizaciju  
Franje Kuhača 20, 31000 Osijek, Hrvatska

**Diplomski sveučilišni studij Prehrambeno inženjerstvo**

**Znanstveno područje:** Biotehničke znanosti  
**Znanstveno polje:** Prehrambena tehnologija  
**Nastavni predmet:** Modeliranje i upravljanje u prehrambeno-tehnološkim procesima  
**Tema rada** je prihvaćena na X. redovitoj sjednici Fakultetskog vijeća Prehrambeno-tehnološkog fakulteta Osijek u akademskoj godini 2016./2017. održanoj 13. srpnja 2017.  
**Mentor:** prof. dr. sc. *Damir Magdić*  
**Komentor:** dr. sc. *Daniela Horvat*, znan. savj.

**Primjena kemometrijskih metoda i prediktivnih matematičkih modela u razvrstavanju i analizi sirovina**  
*Zvonimir Bošnjaković, 359-DI*

**Sažetak:** 24 različita kultivara pšenice tijekom 12 godina uzgajani su na poljima Poljoprivrednog instituta u Osijeku. Vrijednosti 22 svojstva zrna, brašna i tijesta određene su laboratorijskim analizama na raznim uređajima i pomoću različitih metoda. Na zapisanim setovima podataka prvo je izvedena opisna statistika te su izračunate srednje vrijednosti, standardna devijacija, koeficijent varijabilnosti, minimumi i maksimumi svakog svojstva te medijan. Opisnom statistikom objašnjena je dinamika promjena tijekom analiziranog razdoblja od 12 godina (2005.-2016.). Kemometrijskim metodama ispitivana je povezanost između svojstava pšeničnog zrna, brašna i tijesta kroz period od 10 godina (2005.-2014.). Kroz to razdoblje napravljena je analiza glavnih komponenti, klusterska analiza i regresijska analiza metodom najmanjih kvadrata te su kreirani prediktivni matematički modeli za izračunavanje tri izabrana svojstva. Nakon validacije navedenih prediktivnih modela kroz sljedeće dvije godine (2015. i 2016.) zaključeno je da je samo jednim modelom moguće predvidjeti željenu zavisnu varijablu svojstva s više od 97 % točnosti dok je točnost uostala dva modela oko 65 %. Analizom glavnih komponenti pomoću programskog paketa „Statistica ver.13“ utvrđeno je da je moguće opisati varijabilnost cijelog skupa podataka sa 95 % točnosti pomoću samo sedam glavnih komponenti tj. sedam svojstava. Klusterskom analizom grafički je prikazana povezanost vrijednosti svojstava.

**Ključne riječi:** svojstvo, kemometrija, analize, prediktivni model, povezanost

**Rad sadrži:** 68 stranica  
17 slika  
15 tablica  
45 literaturnih referenci

**Jezik izvornika:** Hrvatski

**Sastav Povjerenstva za ocjenu i obranu diplomskog rada i diplomskog ispita:**

|                                            |               |
|--------------------------------------------|---------------|
| 1. izv. prof. dr. sc. <i>Đurđica Ačkar</i> | predsjednik   |
| 2. prof. dr. sc. <i>Damir Magdić</i>       | član-mentor   |
| 3. dr. sc. <i>Daniela Horvat</i>           | član-komentor |
| 4. doc. dr. sc. <i>Antun Jozinović</i>     | zamjena člana |

**Datum obrane:** 22. prosinca 2017.

**Rad je u tiskanom i elektroničkom (pdf format) obliku pohranjen u** Knjižnici Prehrambeno-tehnološkog fakulteta Osijek, Franje Kuhača 20, Osijek.

## BASIC DOCUMENTATION CARD

GRADUATE THESIS

University Josip Juraj Strossmayer in Osijek  
Faculty of Food Technology Osijek  
Department of Process Engineering  
Subdepartment of Modelling, Optimisation and Automation  
Franje Kuhača 20, HR-31000 Osijek, Croatia

### Graduate program Food Engineering

**Scientific area:** Biotechnical sciences

**Scientific field:** Food technology

**Course title:** Modelling and management in food technology processes

**Thesis subject** was approved by the Faculty of Food Technology Osijek Council at its session no. X. held on July 13, 2017

**Mentor:** *Damir Magdić*, PhD, prof.

**Co-mentor:** *Daniela Horvat*, PhD, sci. adv.

### Application of chemometric methods and predictive mathematical models in classification and analysis of raw materials

*Zvonimir Bošnjaković*, 360-DI

**Summary:** 24 different wheat cultivars for 12 years were cultivated in the fields of the Agricultural Institute in Osijek. Values of 22 properties of grain, flour and dough were determined by laboratory analyzes on various devices by different methods. Descriptive statistics showed the dynamics of changes during the analyzed period (2005-2016) and arithmetic mean, standard deviation, variability coefficient, minimum and maximum of each property and median were calculated. The chemometric methods investigated the relationship between the properties of wheat, flour and dough over a period of 10 years (2005 - 2014). At this time, principal components analysis, cluster analysis and partial least squares regression were made, and predictive mathematical models were created to calculate the three selected properties. After validation of these predictive models over the next two years (2015 and 2016) it was concluded that only one model can predict the desired dependent variable property with more than 97% accuracy while the other two models have only about 65% accuracy. Analyzing the main components using the "Statistica ver.13" package, it has been found that it is possible to describe the variability of a complete data set with 95% accuracy using only seven main components. Cluster analysis graphically shows the relationships of property values.

**Key words:** property, chemometrics, analysis, predictive models, relationship

**Thesis contains:** 68 pages  
17 figures  
15 tables  
45 references

**Original in:** Croatian

### Defense committee:

- |                                                  |                     |
|--------------------------------------------------|---------------------|
| 1. <i>Đurđica Ačkar</i> , PhD, associate prof.   | chair person        |
| 2. <i>Damir Magdić</i> , PhD, prof.              | supervisor          |
| 3. <i>Daniela Horvat</i> , PhD, sci. adv.        | member-cosupervisor |
| 4. <i>Antun Jozinović</i> , PhD, assistant prof. | stand-in            |

**Defense date:** December 22, 2017

**Printed and electronic (pdf format) version of thesis is deposited in** Library of the Faculty of Food Technology Osijek, Franje Kuhača 20, Osijek.

*Od srca se zahvaljujem svome mentoru prof. dr. sc. Damiru Magdiću na nevjerojatnoj profesionalnosti, ljubaznosti i strpljivoj pomoći prilikom izrade diplomskog rada, brojnim savjetima i razumijevanju kao i na njegovoj genijalnoj sposobnosti da brojevima da dušu i značenje.*

*Zahvaljujem se dr. sc. Danieli Horvat na pomoći i stručnim komentarima te Poljoprivrednom institutu u Osijeku što mi je omogućio izradu ovog zanimljivog diplomskog rada.*

*Hvala kompletnom Prehrambeno-tehnološkom fakultetu što mi je usadio enormnu količinu znanja, a osim toga i temeljne ljudske vrijednosti te što me je izgradio kao osobu koja vjeruje u sebe.*

*Zahvalnost dugujem i svim mojim dragim prijateljima koji su na bilo koji način bili dio ove priče od pet godina, za sve nezaboravne trenutke tijekom studiranja, za svaki način potpore i podrške, za svaku korisnu konstruktivnu kritiku, za svaku pomoć, za sve kasne noći i za sva rana jutra.*

*Apsolutno najveću zahvalnost dugujem svojoj obitelji zbog toga što sam kroz ove godine ipak ja odradio lakši dio. Zahvaljujem im se za svu ljubav i podršku, jer su oni zaslužni za sve što danas jesam. Hvala im na razumijevanju za sve moje postupke, na nebrojenim odricanjima, te što su mi bila najveća snaga za svaki korak dalje. Ovaj rad je posvećen njima.*

## Sadržaj

|                                                                                                    |    |
|----------------------------------------------------------------------------------------------------|----|
| 1. UVOD .....                                                                                      | 1  |
| 2. TEORIJSKI DIO .....                                                                             | 3  |
| 2.1. Porijeklo i značaj pšenice .....                                                              | 4  |
| 2.2. Svojstva pšenice .....                                                                        | 4  |
| 2.2.1. Fizikalne osobine .....                                                                     | 5  |
| 2.2.2. Kemijske osobine .....                                                                      | 6  |
| 2.3. Utjecaj kakvoće brašna na konačni proizvod .....                                              | 6  |
| 2.3.1. Općenito o brašnu .....                                                                     | 6  |
| 2.3.2. Tehnološka svojstva brašna .....                                                            | 7  |
| 2.3.3. Udio i kvaliteta proteina .....                                                             | 7  |
| 2.4. Reološke osobine tijesta .....                                                                | 8  |
| 2.4.1. Farinografska svojstva .....                                                                | 8  |
| 2.4.2. Ekstenzografska svojstva .....                                                              | 9  |
| 2.5. Matematičke i statističke metode .....                                                        | 10 |
| 2.5.1. Opisna statistika .....                                                                     | 10 |
| 2.5.2. Kemometrija .....                                                                           | 12 |
| 2.5.2.1. Regresijska analiza metodom najmanjih kvadrata .....                                      | 12 |
| 2.5.2.2. Analiza glavnih komponenti .....                                                          | 13 |
| 2.5.2.3. Klaster analiza .....                                                                     | 14 |
| 3. EKSPERIMENTALNI DIO .....                                                                       | 15 |
| 3.1. Zadatak .....                                                                                 | 16 |
| 3.2. Materijali i metode .....                                                                     | 16 |
| 3.2.1. Materijali .....                                                                            | 16 |
| 3.2.2. Metode .....                                                                                | 17 |
| 3.2.2.1. Određivanje prinosa pšenice, Y [kg/ha] .....                                              | 17 |
| 3.2.2.2. Određivanje hektolitarske mase, HL [kg/hl] .....                                          | 18 |
| 3.2.2.3. Određivanje apsolutne mase pšenice ( mase tisuću zrna ), TKW [g] .....                    | 19 |
| 3.2.2.4. Određivanje udjela proteina, P [%] .....                                                  | 20 |
| 3.2.2.5. Određivanje vlažnog glutena, WG [%] .....                                                 | 21 |
| 3.2.2.6. Određivanje sposobnosti upijanja vode – WA [%] .....                                      | 22 |
| 3.2.2.7. Određivanje energije tijesta i maksimalnog otpora, E [cm <sup>2</sup> ] i RMAX [EJ] ..... | 24 |
| 3.2.2.8. Statističke analize podataka .....                                                        | 26 |
| 4. REZULTATI .....                                                                                 | 28 |
| 4.1. Statistička obrada podataka .....                                                             | 29 |

|                                                                                |    |
|--------------------------------------------------------------------------------|----|
| 4.2. PLSR METODA –Polinomna regresija metodom najmanjih kvadrata .....         | 38 |
| 4.2.1. Prediktivni model za izračunavanje sposobnosti upijanja vode (WA) ..... | 39 |
| 4.2.2. Prediktivni model za izračunavanje energije tijesta (E) .....           | 41 |
| 4.2.3. Prediktivni model za izračunavanje maksimalnog otpora (RMAX) .....      | 43 |
| 4.3. PCA METODA – Analiza glavnih komponenti .....                             | 45 |
| 4.4. CA METODA – Klaster analiza .....                                         | 48 |
| 5. RASPRAVA .....                                                              | 49 |
| 5.1. Deskriptivna statistika .....                                             | 50 |
| 5.2. Kemometrijske metode opisivanja skupa podataka .....                      | 51 |
| 6. ZAKLJUČCI .....                                                             | 54 |
| 7. LITERATURA .....                                                            | 58 |

### Popis oznaka, kratica i simbola

|          |                                                                                               |
|----------|-----------------------------------------------------------------------------------------------|
| POLJINOS | Poljoprivredni institut u Osijeku                                                             |
| H        | eng. <i>Harvest</i> , godina žetve                                                            |
| Y        | eng. <i>Yield</i> , prinos pšenice                                                            |
| HL       | eng. <i>Hectolitre</i> , hektolitarska masa pšenice                                           |
| TKW      | eng. <i>Thousand kernel weight</i> , masa tisuću zrna (apsolutna masa)                        |
| P        | eng. <i>Protein</i> , udio proteina                                                           |
| SED      | eng. <i>Sedimentation</i> , vrijednost sedimentacije                                          |
| WG       | eng. <i>Wet gluten</i> , vlažni gluten                                                        |
| GI       | eng. <i>Gluten index</i> , gluten indeks                                                      |
| FN       | eng. <i>Falling number</i> , broj padanja                                                     |
| FY       | eng. <i>Flour yield</i> , izbrašnjavanje                                                      |
| WG/P     | Omjer vlažnog glutena i udjela proteina                                                       |
| WA       | eng. <i>Water absorption</i> , sposobnost upijanja vode                                       |
| DDT      | eng. <i>Dough development time</i> , vrijeme razvoja tijesta                                  |
| STAB     | eng. <i>Stability</i> , stabilnost tijesta                                                    |
| R        | eng. <i>Resistance</i> , otpor                                                                |
| DS       | eng. <i>Degree of softening</i> , stupanj omekšanja                                           |
| FQN      | eng. <i>Farinograph quality number</i> , Farinografski broj kakvoće                           |
| E        | eng. <i>Energy</i> , Energija tijesta                                                         |
| R5MIN    | Otpor kroz pet minuta                                                                         |
| RMAX     | Maksimalni otpor                                                                              |
| EXT      | eng. <i>Extensibility</i> , rastezljivost tijesta                                             |
| R/EXT    | Omjer otpora i rastezljivosti tijesta                                                         |
| RMAX/EXT | Omjer maksimalnog otpora i rastezljivosti tijesta                                             |
| FJ       | Farinografska jedinica                                                                        |
| EJ       | Ekstenzografska jedinica                                                                      |
| PLSR     | eng. <i>Partial least squares regression</i> , regresijska analiza metodom najmanjih kvadrata |
| PCA      | eng. <i>Principal components analysis</i> , analiza glavnih komponenti                        |
| CA       | eng. <i>Cluster analysis</i> , klaster analiza                                                |

## **1. UVOD**

Čak 70% svjetske populacije hrani se kruhom koji je dobiven od pšeničnog brašna (Đaković, 1980). Temelj naše svakodnevne prehrane čine razni proizvodi na bazi pšenice i pšeničnog brašna kao poluproizvoda, a općenito pekarska industrija neizostavan je dio prehrambene industrije u svakom dijelu svijeta. Gotovo je sigurno da se s godinama povećava svijest kupaca i potrošača o kvaliteti hrane, proporcionalno tome, proizvođači kruha, peciva, keksa, tjestenina, slastica te ostalih proizvoda na osnovi pšeničnog brašna u svakom trenutku proizvodnje pokušavaju dobiti proizvod najbolje moguće kvalitete. Kakvoća kruha, različitih vrsta tjestenine ili pšeničnog piva uvelike ovisi o karakteristikama odnosno svojstvima zrna pšenice, brašna od pšeničnog zrna ili tijesta od pšeničnog brašna.

Svojstva pšeničnog zrna ovise o agrotehničkim i klimatskim uvjetima ali i o sorti pšenice. Pomoću različitih analiza i metoda određuju se i računaju vrijednosti svojstava zrna, pšeničnog brašna i njegovog tijesta.

Tehnološka kvaliteta brašna određuje se pomoću ispitivanja kvalitete vlažnog glutena, a ispitivanje reoloških svojstava određuje se na uređajima poput farinografa, ekstenzografa, amilografa i alveografa.

Različiti kultivari pšenice, unutar iste vrste, međusobno se razlikuju i po fizikalnim osobinama zrna. Važnija fizikalna svojstva zrna pomoću kojih se ocjenjuje kakvoća pšenice su hektolitarska masa (65-86 kg/hl), masa tisuću zrna (28-45 g), specifična masa (1,20-1,45), veličina i oblik zrna, staklavost i boja zrna (Horvat, 2005).

Jedan od ciljeva ovog diplomskog rada je naglasiti vezu između svojstava pšenice, pšeničnog brašna i tijesta te kakvoće konačnog proizvoda. Metodama i analizama određene su vrijednosti svojstava kultivarapšenice Poljoprivrednog instituta u Osijeku tijekom više godina, a matematičkim i statističkim metodama prikazane su promjene. Na taj način prikazana je dinamika promjene odabranih svojstava tijekom godina. Pomoću prediktivnih modela predložen je jedan od načina računanja vrijednosti svojstava na temelju nekoliko drugih prvotno izmjerenih svojstava, a ostalim kemometrijskim metodama, poput analize glavnih komponenti i klusterske analize, prikazani su načini razlikovanja i razvrstavanja raznih važnih sirovina, poput pšenice.

## **2. TEORIJSKI DIO**

## 2.1.Porijeklo i značaj pšenice

Pšenica je u svom današnjem obliku prošla dug i zanimljiv put evolucije. Podrijetlo roda *Triticum* (pšenica/žito) nalazi se u Aziji i dijelovima Afrike, u području koje se proteže od Sirije do Kašmira, te južno prema Etiopiji. To su mjesta gdje je uzgajana pšenica postupno evoluirala iz divljih biljaka, u vrlo dalekoj prošlosti davno prije Kristova rođenja. *Triticumaestivum* se vjerojatno razvila spontano negdje na Iranskoj visoravni i okolnim područjima. Arheološki nalazi ukazuju da se to dogodilo negdje 6000 godina prije Krista (Belderok i sur.,2000).

Pšenica je biljka koju čovjek od davnina uzgaja kao vrlo važan izvor hrane. Biljka ima korijen, stabljiku, listove i klas. Botanički je svrstana u porodicu trava, rod *Triticum*, a ima i dvadeset i sedam vrsta. Za proizvodnju brašna značajne su tri vrste. Od mekih vrsta pšenica *Triticum aestivum* i *Triticum compactum* (patuljasta pšenica), a od tvrdih vrsta *Triticum durum* (Kljusurić, 2000).

Iz pšenice se danas proizvodi ogroman broj različitih proizvoda. Samo u SAD-u se dnevno proda 40 milijuna komada kruha različitih po obliku, kori, unutrašnjoj strukturi, itd. i puno veći broj različitih vrsta peciva, kolača, pita i sl. (Ugarčić – Hardi, 1999a).

Osim pečenjem, drugi proizvodi koji nastaju preradom pšeničnog zrna su tjestenina, žitarice za doručak, ulje, škrobni modifikati i hidrolizati te stočna hrana.

## 2.2.Svojstva pšenice

Kvaliteta same pšenice i pšeničnih proizvoda uvelike ovisi o njezinim svojstvima, koja diktiraju kasnije procese prerade pšeničnog zrna i proizvodnje proizvoda od pšenice, pšeničnog zrna i pšeničnog brašna.

O kakvoći pšenice ovisi njena upotrebna vrijednost kao sirovine za preradu u mlinske proizvode za ljudsku prehranu. Ona je određena botaničkom pripadnošću, organoleptičkim svojstvima, količinom i vrstom primjesa, sadržajem vode, određenim fizikalnim svojstvima, hektolitarskom težinom, prisutnošću mikroorganizama, kukaca i pesticida (Đaković, 1980).

Najveći utjecaj na preradu i konačni proizvod imaju fizikalna i kemijska svojstva pšenice.

**Slika 1** prikazuje rast pšenice kroz godinu i visinu njezine stabljike u pojedinim mjesecima.



**Slika 1** Razvojni stadiji pšenice

(eng. Wheat growth stages, razvojni stadiji pšenice)

(Izvor slike: web 6)

### 2.2.1. Fizikalne osobine

Važna fizikalna svojstva uz pomoć kojih se određuje kvaliteta pšenice su :

- Oštećenja zrna; fizičkim oštećenjima smanjuje se skladišna vrijednost,
- Hektolitarska masa; masa zrna žitarice izražene u jedinici volumena, izražava se u kg/hl
- Apsolutna masa ili masa tisuću zrna je masa 1000 zrna izražena u gramima,
- Veličina i oblik zrna; poželjno je da su zrna krupnija i što okruglija, jer tada imaju manju površinu - što znači manje omotača u istoj količini,
- Primjese; razlikujemo crne i bijele primjese te korovsko sjemenje
- Tvrdća i staklavost zrna; brašno za pečenje visokokvalitetnoga kruha obično se dobije od tvrdozrne pšenice, koja se odlikuje visokim sadržajem bjelančevina i dobrim svojstvima lijepka, s druge strane, staklavost zrna izražava strukturu endosperma i temelji se na izgledu njegova presjeka (staklast ili bijel (brašnast)) te se obično daje prednost staklavoj pšenici jer ima više bjelančevina te veću pecivost,
- Boja zrna; uvelike ovisi o sorti, velik spektar nijansi crvene i bijele boje zrna,
- Gustoća zrna; više bjelančevina – veća gustoća, više masnih tvari – manja gustoća, te se izražava u  $\text{kg/m}^3$  (Anić, 2016; PTFOS, 2016a).

### 2.2.2. Kemijske osobine

Kriteriji ocjenjivanja kvalitete pšenice po kemijskim svojstvima su :

- Maseni udio vode; potreban je biti manji ili jednak 14%,
- Maseni udio i kvaliteta proteina; razne pšenice od 6 pa sve do 20% proteina, koji je i ujedno najvažniji sastojak kemijskog sastava pšeničnog zrna,
- Maseni udio masti; najveći dio masnih komponenata se nalazi u klici te iznosi od oko 1,5 – 3%, te
- Maseni udio pepela i celuloze; udio pepela u pšenici kreće se od 1,5 – 2% a celuloze od 2 - 2,5% (PTFOS, 2016a).

**Tablica 1**Pravilniko parametrima kvalitete pšenice za otkup pšenice roda 2017. (Ministarstvo poljoprivrede, 2017)

| Parametri kvalitete | Kvalitativne klase pšenice |            |             |            |           |
|---------------------|----------------------------|------------|-------------|------------|-----------|
|                     | Premium                    | I klasa    | II klasa    | III klasa  | IV klasa  |
| Proteini (%)        | >15                        | 13,5-14,99 | 12,00-13,49 | 10,5-11,99 | <10,49    |
| Hektolitar (kg/hl)  | 80                         | 78         | 78          | 74         | <74       |
| Vlaga (%)           | 13,5                       | 13,5       | 13,5        | 13,5       | 13,5      |
| Primjese (crna) (%) | najviše 2                  | najviše 2  | najviše 2   | najviše 2  | najviše 2 |
| Ukupna primjesa (%) | najviše 5                  | najviše 5  | najviše 5   | najviše 5  | najviše 5 |

### 2.3.Utjecaj kakvoće brašna na konačni proizvod

#### 2.3.1. Općenito o brašnu

S obzirom na to da je brašno daleko najvažniji sastojak u gotovo svim pekarskim proizvodima te da zapravo brašno određuje reološke karakteristike tijesta, poznato je da pekarska industrija obraća veliku pozornost na njegove osobine koje mogu biti različite. Dakle, za različite proizvode u pekarskoj industriji upotrebljavaju se različita brašna te brašno koje je idealno za uporabu u proizvodnji pekarskih proizvoda vrlo vjerojatno ne odgovara za proizvodnju konditorskih proizvoda.

Brašno je heterogena smjesa čestica koje se fizikalno nalaze zajedno ali su u kemijskom smislu odvojene. Mogu se uočiti proteini nepravilnog oblika koji su slobodni ili fizički vezani za zrnca škroba. Ostale glavne komponente brašna kao što su celuloza, hemiceluloza, lipidi i druge, nalaze se slobodne ili slijepljene, ukliještene zajedno sa škrobom i proteinima u manje ili veće grupe čestica (Kljusurić, 2000).

U komercijalnom mlinarstvu, cilj je postići maksimalni prinos brašna sa 'zdravom' bijelom bojom. Općenito 'škrobasti' endosperm ima vrlo nizak sadržaj pepela (oko 0,5%), dok su posije (mekinje) i klice karakterizirane mnogo višim razinama pepela (7,2% i 4,5%). Drugim riječima, što je niži sadržaj pepela, to je brašno bjelje (Belderok i sur., 2000).

### 2.3.2. Tehnološka svojstva brašna

Faktori kvalitete brašna one su osobine koje određuju odgovara li brašno tehnološkim postupcima kojima je namijenjeno, kako će se ponašati tijesto tijekom proizvodnje i kakva će biti kvaliteta dobivenog proizvoda. Pojednostavljeno, određuju tehnološku kvalitetu brašna (Đaković, 1980).

Najvažniji faktor su udio i kvaliteta proteina (glutena) u brašnu koji direktno utječe na ostale faktore tehnološke kvalitete brašna, a to su sljedeći: sposobnost razgradnje škroba, sposobnost želatinizacije, sedimentacijska vrijednost brašna, sposobnost zadržavanja plinova, boja brašna i sposobnost tamnjenja tijekom pečenja (Hajek, 2014).



**Slika 2** Razne vrste pšeničnog brašna

(Izvor slike: web 7)

### 2.3.3. Udio i kvaliteta proteina

Količina proteina u pšeničnom zrnu kreće se otprilike od 11 do 18 %. Sadržaj proteinskih tvari zavisi od mnogo faktora, kako genetičkih tako i o karakteristikama klimatske sredine uzgoja

pšenice. Generalno, kako se povećava udio proteinskih tvari, opada udio škrobnih tvari te pšenično brašno većinom sadrži 1% manje proteina nego početno zrno pšenice.

Opća klasifikacija proteina pšenice je prvo u dvije grupe na glutenske (85 %) i neglutenske (15 %), a potom i prema topljivosti u 4 grupe: albumini (topljivi u vodi), globulini (topljivi u slanim otopinama), glijadini (topljivi u etanolu) i glutenini koji stvaraju komplekse s lipidima (PTFOS, 2016b).

Količina vlažnog glutena(WG)može se izračunati nakon ispiranja škroba iz tijesta jer u tijestu ostaje samovlažni gluten. U stvaranju glutena sudjeluju samo proteini koji su netopljivi u vodi, stoga je količina proteina važan faktor kvalitete brašna. No, količina vlažnog glutena sama po sebi nije dovoljan podatak za provjeravanje kvalitete brašna, jer je jednako važna i njegova kvaliteta.

## **2.4. Reološke osobine tijesta**

Miješanjem brašna s vodom dobiva se tijesto čija kvaliteta prvenstveno ovisi o kvaliteti brašna, ali i o drugim faktorima, npr. konstrukcija miješalice, broj okretaja miješalice, dužina miješanja, količina dodane vode, temperatura tijesta i drugo. Fizikalne osobine tijesta mijenjaju se s vremenom, a posebno pod utjecajem fermentacije (Kljusurić, 2000).

Stoga,neke od glavnih svojstava brašna i tijesta određuju se pomoću raznih uređaja poput farinografa, amilografa, alveografa, ekstenzografa i sl.

### **2.4.1. Farinografska svojstva**

Rad farinografa, uređaja za ocjenjivanje reoloških svojstava tijesta zasniva se na mjerenju otpora koje pruža tijesto pri miješanju u vremenu od početka kada se prvi put formira prvo tijesto preko maksimalnog razvoja i daljnjeg miješanja sve do kraja miješanja i zaustavljanja miješalice.

Farinogram je vrsta dijagrama gdje su naordinati vrijednosti otpora u farinografskim jedinicama (FJ), a na apscisi je navedeno vrijeme u minutama. Dogovoreno je da maksimalna konzistencija tijesta na farinogramu bude točno 500 farinografskih jedinica (FJ). Stoga, na početku mjerenja treba izračunat količinu vode s kojom će se dobiti odgovarajuća konzistencija tijesta, a to svojstvo se zove sposobnost upijanja vode prema farinografu (WA). Farinogram pokazuje slijedeća svojstva tijesta :

1. Konzistencija (tvrdoća) tijesta u farinografskim jedinicama,
2. Sposobnost upijanja vode (WA),
3. Vrijeme razvoja tijesta tj. vrijeme u tijeku kojeg konzistencija ispitivanog tijesta postiže maksimum,
4. Stabilnost ili postojanost tijesta – vrijeme održavanja maksimalne konzistencije tijesta koje se mijesi,
5. Elastičnost i rastezljivost tijesta koje karakterizira širina krivulje (amplituda kolebanja pisača),
6. Omekšavanje tijesta (stupanj omekšanja) – predstavlja razliku između maksimalno postignute konzistencije pri miješanju i maksimalne konzistencije u trenutku završetka miješanja (Ugarčić – Hardi, 1999b).

#### 2.4.2. Ekstenzografska svojstva

Ekstenzograf je uređaj čiji se princip rada temelji na mjerenju otpora kojeg pruža tijesto tijekom razvlačenja do kidanja. Tijesto se prethodno zamjesi na farinografu 5 minuta, te se oblikuje i stavlja u kalupe na odmaranje tijekom 45 minuta. Nakon toga provodi se mjerenje (razvlačenje komada tijesta pomoću kuke ekstenzografa do pucanja). Zatim se tijesto odmara još 45 minuta i ponovi se postupak (Hoseney, 1994).

Dakle, ekstenzogram je dijagram koji nam pokazuje slijedeće osobine tijesta:

1. Otpor rastezanju ( $R$ ) – Visina srednje vrijednosti dvaju krivulja registriranih 135 minuta nakon zamjesivanja tijesta, na 5 cm od početka krivulje, predstavlja otpornost tijesta prema rastezanju pri konstantnoj brzini rastezanja. Iskazuje se u EJ,
2. Maksimalan otpor ( $R_{max}$ ) – srednja vrijednost maksimalne visine krivulja opisanih 135 minuta nakon zamjesivanja. Iskazuje se u EJ,
3. Energija ( $E$ ) – srednja vrijednost površine što je formira krivulja opisana 135 minuta nakon zamjesivanja, iskazuje se u  $cm^2$ . Što je površina veća, potrebno je veću količinu energije utrošiti da bi se tijesto rasteglo od početka do trenutka kidanja,
4. Rastezljivost (Ext) – srednja udaljenost zaokružena na 0,1 cm što ju prijeđe dijagramski papir od početka rastezanja pa sve do trenutka kad se tijesto prekne. Iskazuje se u milimetrima,
5. Otpor/rastezljivost ( $R/Ext$ ) – Odnos otpora i rastezljivosti,

6. Maksimalan otpor/rastezljivost ( $R_{\max}/Ext$ ) – Odnos maksimalnog otpora i rastezljivosti.

(Filipović, 2016).

## 2.5. Matematičke i statističke metode

### 2.5.1. Opisna statistika

„Opisna (deskriptivna) statistika u cijelosti obuhvaća skup svih promatranih objekata, a ima za zadaću "opisati" dobivene rezultate, tj. srediti ih i sažeti tako da budu što pregledniji, razumljiviji i pogodniji za interpretaciju, daljnju analizu i primjenu“ (web 4).

Deskriptivna statistika se većinom koristi:

- za pregled prosjeka, poput sredine ili medijana,
- za dobivanje informacije, poput sredine za grupe od interesa, koje treba interpretirati s drugim statističkim testovima,
- za dobivanje grafičke reprezentacije podataka, poput histograma i grafikona kvadrata (web 1).

Neke od bitnijih mjera centralne tendencije i raspršenosti podataka, te metode opisivanja numeričkih podataka su:

1. Aritmetička sredina (eng. *arithmetic mean*) niza podataka  $x_1, x_2, \dots, x_n$  iz varijable  $X$  definirana je izrazom (1):

$$\bar{x}_n = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_i. \quad (1)$$

Aritmetička sredina je numerička karakteristika koja spada u mjere centralne tendencije, tj. ona mjeri "srednju vrijednost" podataka.

## 2. Medijan

Medijan je mjera centralne tendencije pri čemu je to vrijednost od koje je barem pola podataka manje ili jednako medijanu, i barem pola podataka veće ili jednako od medijana. Način njegova izračuna ovisi o tome imamo li neparan ili paran broj podataka.

## 3. Standardna devijacija

Standardna devijacija jedna je od mjera raspršenosti podataka. Takve mjere karakteriziraju raspršenost podataka oko aritmetičke sredine. Varijanca niza izmjerenih vrijednosti  $x_1, x_2, \dots, x_n$  varijable  $X$  definirana je izrazom (2):

$$s_n^2 = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2 \quad (2)$$

a standardna devijacija (3) je kvadratni korijen varijance:

$$S_n = \sqrt{s_n^2} = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2} \quad (3)$$

## 4. Koeficijent varijabilnosti

Koeficijent varijabilnosti izračunava se kao udio standardne devijacije u srednjoj vrijednosti (4):

$$CV = \frac{S_n}{\bar{x}_n} \times 100 [\%] \quad (4)$$

i objašnjava koliko je odstupanje minimalne i maksimalne vrijednosti u skupu podataka od srednje vrijednosti.

(Benšić i Šuvak, 2013).

### **2.5.2. Kemometrija**

Razvoj kemometrije kao znanstvene discipline snažno je povezan s pojavom i korištenjem osobnih računala u kemiji.

Kemometrija je dakle, kemijska disciplina koja se služi matematičkim i statističkim metodama da bi optimalno projektirali, odnosno, izabrali mjeriteljske procedure, postupke i eksperimente te da bi dobili maksimalan broj informacija analiziranjem početnog seta podataka (Mathias, 2007).

Metode koje spadaju pod kemometrijske metode, a koje su korištene u ovom radu pri obradi podataka su regresijska analiza metodom najmanjih kvadrata (PLS), klaster analiza (CA) i analiza glavnih komponenta (PCA).

#### **2.5.2.1. Regresijska analiza metodom najmanjih kvadrata**

Ova analiza je tehnika koja generalizira i kombinira značajke metode analize glavnih komponenta i višestruke regresije. Regresijska analiza metodom najmanjih kvadrata je zapravo proširenje višestruke regresije jer u svom najjednostavnijem obliku linearni model određuje (linearni) odnos između zavisne varijable  $Y$  i skupa varijabli prediktora –  $X$ . To je osobito korisno kada treba predvidjeti niz zavisnih varijabli iz vrlo velikog skupa nezavisnih varijabli (web 2).

Na primjer, moguće je procijeniti masu osobe kao funkciju visine i spola osobe. Moguće je koristiti linearnu regresiju za procjenu odgovarajućih koeficijenata regresije iz uzorka podataka, visine, težine i promatranja spola subjekata (web 2).

Takva metoda je korištena u raznim disciplinama kao što su kemija, ekonomija, medicina, psihologija i farmaceutska znanost gdje je predvidljivo linearno modeliranje, osobito s velikim brojem prediktora, uvelike potrebno. Posebno u kemometrijskim svojstvima,

regresijska analiza metodom najmanjeg kvadrata, postala je standardni alat za modeliranje linearnih odnosa između multivarijantnih mjerenja (web 2).

### **2.5.2.2. Analiza glavnih komponenti**

Glavna ideja analize glavnih komponenti je smanjiti dimenzionalnost skupova podataka koji se sastoje od velikog broja međusobno povezanih (koreliranih) varijabli, zadržavajući što je moguće više varijacija prisutnih u skupu podataka. To se postiže preoblikovanjem na novi niz varijabli, glavnih komponenti, koje nisu povezane (korelirane) i koje su složene tako da prvih nekoliko zadržavaju većinu varijacija prisutnih u svim originalnim varijablama (Jolliffe, 1986.).

Pretpostavke za primjenu analize glavnih komponenta više su konceptualne, nego statističke. PCA nije osjetljiva na probleme normalnosti, linearnosti i homogenosti varijanci, a određena doza multikolinearnosti čak je i poželjna. Osnovni koraci u analizi glavnih komponenta su sljedeći:

1. S obzirom da je većina biometričkih setova podataka konstruirana iz varijabli različitih skala i jedinica mjerenja potrebno je standardizirati varijable tako da im je prosjek 0, a varijanca 1 kako bi sve bile na jednakoj razini u analizi,
2. Izračunati matrice korelacija između svih izvornih standardiziranih varijabli,
3. Pronaći svojstvene vrijednosti glavnih komponenta,
4. Odbaciti one komponente koje su nositelji proporcionalno malog udjela varijance, tj. obično prvih nekoliko koje nose 80 - 90% ukupne varijance što se bolje može uočiti nakon razrade faktorske analize (Pecina, 2006).

### 2.5.2.3. Klaster analiza

Klaster analiza je naziv za skup multivarijantnih tehnika čija je primarna svrha grupiranje objekata temeljem osobina koje posjeduju. Multivarijantnost označava svojstvo klaster analize da više varijabli analizira istovremeno i zajedno kao dio jedne cjeline. Predmet klaster analize najčešće su objekti, a ne varijable kao što je to slučaj kod faktorske analize. No, osobine objekata se definiraju pomoću varijabli koje samim time ulaze u proces klaster analize. Za razliku od ostalih multivarijantnih statističkih tehnika, klaster analiza varijable ne procjenjuje empirijski, već koristi one varijable koje su zadane od strane samog istraživača (Devčić, 2012).

Matematičke metode klusterske analize klasificiraju grupe na matematički način. Umjesto sortiranja stvarnih objekata, ove metode razvrstavaju objekte koji su opisani kao podaci. Objekti sa sličnim opisima matematički se skupljaju u istu skupinu. U stvari, ako se klaster analizom analizira skup npr. šljunka, fizički, pa ponovo pomoću matematičke metode klusterske analize, trebao bi se dobiti isti skup klastera (Romesburg, 2004).

Za različite ciljeve istraživanja, istraživači trebaju otkriti koji su predmeti u skupu slični, a koji različiti. Najpoznatiji od ovih ciljeva istraživanja je izrada klasifikacija. Jedan od razloga zašto je klaster analiza toliko korisna je taj da istraživači u svim poljima trebaju znati izraditi i revidirati klasifikaciju kontinuirano. Psihijatrijski istraživači trebaju klasificirati mentalne pacijente na osnovi psihijatrijskih testova i njihovih rezultata kako bi poboljšali njihovo razumijevanje mentalne bolesti i planirali njihovo liječenje. Poslovni istraživači trebaju klasificirati tvrtke tijekom istraživanja tržišta. Beskonačan popis ostalih primjera može se navesti jer su klasifikacije jako bitni 'građevni blokovi' u svim područjima istraživanja (Romesburg, 2004).

### **3. EKSPERIMENTALNI DIO**

### 3.1. Zadatak

Zadatak diplomskog rada je kemometrijska analiza skupa podataka te izrada i validacija izvedenih prediktivnih matematičkih modela. U ovom diplomskom radu primijenjene su deskriptivne statističke i kemometrijske metode na 24 različita kultivara pšenice s 22 izmjerena svojstva pšenice i brašna. Trebalo je utvrditi varijabilnost svojstava i sastava pšenice deskriptivnom statističkom analizom te primjenom jedne od nekoliko kemometrijskih metoda predložiti matematičke modele za izračun jedne zavisne varijable pomoću nekoliko nezavisnih. Potom, izvesti validaciju predloženih matematičkih modela na novom skupu podataka te tako odrediti povezanost svojstava pšeničnog zrna i brašna. Analiza glavnih komponenti i klaster analiza kao zadatak su imali utvrditi kako sa smanjenim brojem varijabli opisati većinu varijabilnosti skupa te utvrditi povezanost vrijednosti svojstava.

### 3.2. Materijali i metode

#### 3.2.1. Materijali

Osnovni materijal korišten u ovom radu bili su zrno i brašno kultivara pšenice, uzgojeni na površinama Poljoprivrednog instituta Osijek u vremenskom periodu od 12 godina. Svojstva su dobivena analizama u laboratoriju Poljoprivrednog instituta Osijek te su na taj način prikupljeni podaci za razne karakteristike zrna pšenice i brašna. U diplomskom radu pri izradi matematičkih modela korištena su svojstva 24 kultivara pšenice i to:

**Tablica 2** Imena 24 kultivara pšenice POLJINOS-a korištenih u ovom diplomskom radu

|             |               |            |            |        |          |
|-------------|---------------|------------|------------|--------|----------|
| S. Prolific | Bezostaja 1   | Osječka 20 | S. Žitarka | Lucija | Divana   |
| U1          | Zlatna dolina | Osječanka  | Golubica   | Alka   | Felix    |
| Dubrava     | Tena          | Slavonija  | Demetra    | Sana   | Katarina |
| Libellula   | OS Crvenka    | Žitarka    | Srpanjka   | Ficko  | Renata   |

Svake godine, poslije žetve, pšenična zrna nakon sortiranja i čišćenja, odlaze u laboratorije na meljavu i analize te se određuju različita svojstva koji su pokazatelji karakteristika raznih kultivara pšenice. Dobiveni parametri kakvoće pšenice ekstenzografska i farinografska svojstva, poslužili su u ovom diplomskom radu kao materijal za izradu matematičkih modela i za kemometrijske analize koje imaju svrhu u razvrstavanju i analizi jedne vrlo važne prehrambene sirovine.

U matematičkim modelima za izračunavanje sposobnosti upijanja vode – WA, energije tijesta – E i maksimalnog otpora tijesta – RMAX, kao nezavisne varijable korištena su svojstva: prinos pšenice, hektolitarska masa pšenice, apsolutna masa pšenice, udio proteina pšenice te sadržaj vlažnog glutena. Ostala svojstva koja su također dobivena analizama su: sedimentacijska vrijednost, gluten indeks, broj padanja, omjer vlažnog glutena i proteina, sposobnost upijanja vode, izbrašnjavanje, vrijeme razvoja tijesta, otpor rastezanju tijesta, stabilnost tijesta, farinografski broj kakvoće, energija tijesta, otpor kroz 5 minuta, rastezljivost tijesta, maksimalni otpor, omjer otpora i rastezljivosti te omjer maksimalnog otpora i rastezljivosti.

### **3.2.2. Metode**

Kako bi se izračunale vrijednosti svojstava pšenice i brašna postoje razne metode koje nam na kraju daju indirektne parametre kakvoće pšenice te ekstenzografska i farinografska svojstva. Spomenute su metode koje mjere točno ona svojstva koja su korištena u prediktivnim matematičkim modelima računanja svojstava pšeničnog brašna, a to su prinos pšenice, hektolitarska i apsolutna masa, udio proteina i udio vlažnog glutena kao nezavisne varijable te sposobnost upijanja vode, energija i maksimalni otpor tijesta kao zavisne varijable.

#### **3.2.2.1. Određivanje prinosa pšenice, Y [kg/ha]**

U poljoprivredi, prinos usjeva odnosi se na mjeru prinosa usjeva po jedinici površine uzgojnog zemljišta i na proizvodnju sjemena same biljke. Prinos pšenice u našoj zemlji se kreće i računa nekoliko tona po hektaru. U podacima s Poljoprivrednog instituta Osijek utvrđeno je da je prosječni prinos (Y) u 12 godina 7217,24 kg po hektaru zemlje, odnosno oko 7 tona po hektaru.

Tablica 3 Prosječan prinos pšenice s Poljoprivrednog instituta Osijek u razdoblju od 12 godina

| Godina<br>žetve | Y<br>(kg/ha) |
|-----------------|--------------|
| 2005            | 6675,53      |
| 2006            | 8269,99      |
| 2007            | 6538,87      |
| 2008            | 8817,82      |
| 2009            | 8497,92      |
| 2010            | 6352,67      |
| 2011            | 8538,09      |
| 2012            | 8065,52      |
| 2013            | 6225,02      |
| 2014            | 4190,99      |
| 2015            | 7327,28      |
| 2016            | 6473,07      |

### 3.2.2.2. Određivanje hektolitarske mase, HL [kg/hl]

Pod hektolitarskom (HL) masom pšenice podrazumijeva se masa hektolitra pšenice u kg. Hektolitarska masa jedno je od najstarijih mjerila za određivanje mlinarske kvalitete pšenice. S većom hektolitarskom masom raste i količina brašna, koja se može dobiti mljevenjem, ali to nije pravilo. Hektolitarska masa ovisi o sortnim svojstvima pšenice, kao i o klimatskim prilikama pojedine godine, masenom udjelu vode u pšenici i dr., uslijed čega ona i kod iste sorte varira u dosta širokom rasponu. Hektolitarska masa pšenice (*T. vulgare*) kreće se od min. 65 kg/hl do max. 84 kg/hl; prosječna vrijednost je 75,5 kg/hl (Kalušerski i Filipović, 1998).

Inače, hektolitarsku masu povećavaju: kompaktna staklasta zrna, potpuno dozrela zrna, mala zrna i zrna osrednje veličine, ovalna zrna glatke površine, nizak sadržaj vode, te zrna s tankom ljuskom. S druge strane obrnuto proporcionalno na hektolitarsku masu djeluju mekana brašnasta zrna, velika duguljasta zrna, povišen sadržaj vode te debela i hrapava ljuska na zrnima pšenice. Također vrijedi pravilo po kojem je hektolitarska masa uvijek manja u klimatski ekstremnijim uvjetima i godinama (web 5).

Hektolitarska masa ili nasipna gustoća određuje se Schopperovom vagom. Masa uzorka volumena 0,250 L u gramima usporedi se s najbližom vrijednošću u Schopperovim tablicama za određenu kulturu i u susjednoj koloni tablice očita se izračunata vrijednost u kg/hL. S vremenom su se razvile druge aparature i metode kojima također možemo izračunati ovo svojstvo zrna pšenice (web 5).



**Slika 3** Schopperova vaga

(Izvor slike: web 8)

### 3.2.2.3. Određivanje apsolutne mase pšenice ( mase tisuću zrna ), TKW [g]

Apsolutna masa pšenice se obično određuje masom 1000 pšeničnih zrna, koja su neoštećena i čista te suha. Masa tisuću zrna je dobar pokazatelj kvalitete pšenice jer opisuje endosperm zrna, odnosno ukratko govori o unutarnoj strukturi pšenice.

Apsolutna masa čistog, suhog i neoštećenog zrna pšenice iznosi od 33 do 45 g, u prosjeku oko 38 g. Izračunava se tako da izbrojimo 1000 zrna te ih nakon toga važemo i uvrštavamo u formulu (5):

$$M = m \times (100 - V) / 100 \quad (5)$$

gdje je:

M – masa suhe tvari 1000 zrna žita

m – masa 1000 zrna s prirodnom vlagom, u gramima

V – postotak vlage u zrnu žita (PBF, 2010).

#### 3.2.2.4. Određivanje udjela proteina, P [%]

Količina bjelančevina može se odrediti Kjeldahlovom metodom koja je službena standardna metoda za određivanje proteina, ali i drugim metodama. Ipak, u novije vrijeme izračunava se na jako brz način pomoću uređaja koji rade na principu infracrvene transmisije. Postoje razne vrste uređaja, no u ovom slučaju se na Poljoprivrednom institutu Osijek koristi uređaj „Infratec 1241 GrainAnalyzer“.

Takav uređaj ima niz prednosti kao što su automatizirana, brza i točna analiza parametara kvalitete zrna, jednostavan rad bez pripreme uzorka, stabilna optika za skeniranje i pouzdano umjeravanje i kalibriranje. Osim toga, rezultati mjerenja neovisni su o uzorku i temperaturi okoline, što omogućava pravi rezultat, bilo na vrućim ljetnim ili u hladnim zimskim danima. Takav uređaj sadrži veliku, statistički stabilnu skupinu podataka koja omogućuje uređaju da gradi kalibraciju na širokom spektru uzoraka (web 3).



**Slika 4** Uređaj „Infratec“ za određivanje udjela proteina

(Izvor slike: web 9)

### 3.2.2.5. Određivanje vlažnog glutena, WG [%]

Glutelini su proteini koji nisu topljivi u vodi, nalaze se samo u žitaricama zajedno s gliadinom. Oni su važni za pekarstvo kod dobivanja tijesta jer formiraju gluten. Tijekom ispiranja tijesta s vodom, uklanjaju se zrnca škroba i proteini topivi u vodi, zaostaju proteini netopivi u vodi, koji s vodom formiraju gumastu i elastičnu masu, vlažni lijepak ili vlažni gluten. Gluten ima veliki utjecaj na osobine tijesta. Sastoji se od niskomolekularne frakcije glijadina i visokomolekularne frakcije glutenina. Glijadin s vodom daje ljepljivu i tegljivu masu koja se lako razilazi, dok glutenin daje čvrstu i elastičnu masu. Glijadinska frakcija utječe na prinos tijesta, dok glutenin određuje razvoj i vrijeme zamjesa tijesta. U dodiru sa vodom dolazi do bubrenja proteina i tijesto poprima plastično-elastične osobine. Tijekom miješanja dolazi do umrežavanja glijadina i glutetnina, nastaje makromolekularna mreža, koja se naziva gluten (Đaković, 1980).

Glutomatic sustav sastoji se od tri dijela: jedinice za zamjes i ispiranje glutena, centrifuge i jedinice za sušenje glutena (Ačkar, 2010).

U komoru za pranje sa poliesterskim sitom se prebaci 10g uzorka te se komora lagano protrese da bi se ravnomjerno raspodijelio uzorak. Potom se dodaje određena količina 2%-tne otopine natrij-klorida iz dispenzera. Komora ima automatski redoslijed pranja i miješanja uzorka. Nakon završetka rada, pažljivo se ukloni komora za pranje te izvadi dobiveni gluten, te se nastavlja s centrifugiranjem uzorka radi dobivanja još jednog važnog svojstva – gluten indeksa (Hajek, 2014).

Formirana loptica glutena stavlja se na centrifugiranje, a nakon toga se pomoću špatule ostruže sav gluten koji je prošao kroz sito, važe se te ostavlja na vagi. Pomoću pincete se ostali gluten koji je ostao na situ dodaje na vagu radi izračunavanja ukupne težine glutena (6). Ona količina vlažnog glutena koja je zaostala na situ definirana je kao „gluten indeks“ izračunava se formulom (7) i izražava se u postotcima.

Izračunavanje vlažnog glutena:

$$\text{sadržaj vlažnog glutena} = \frac{\text{ukupni gluten (g)} \times 100}{10(\text{g})} = \text{ukupni gluten} \times 10 \quad (6)$$

Izračunavanje gluten indeksa:

$$\text{gluten indeks} = \frac{\text{gluten koji je ostao na situ (g)} \times 100}{\text{ukupni gluten (g)}} \quad (7)$$

(Hajek, 2014).

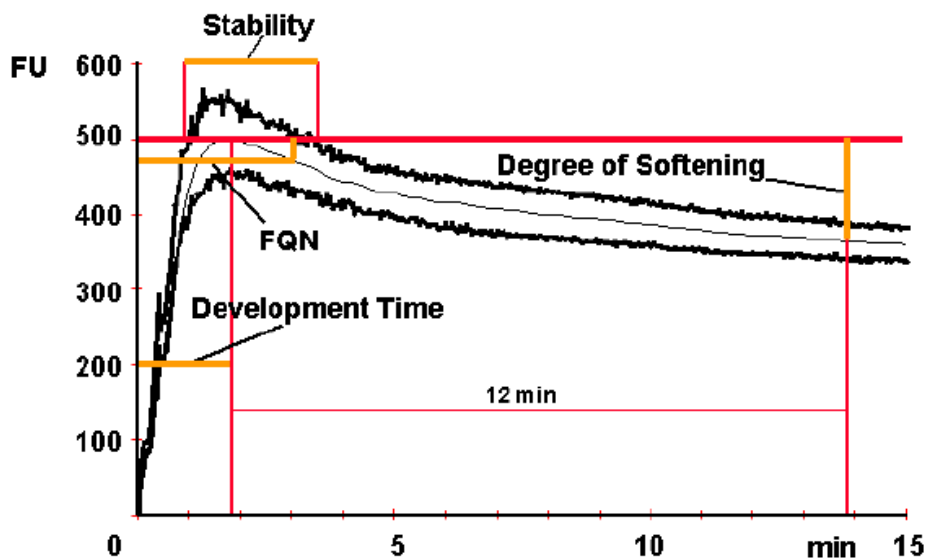
### 3.2.2.6. Određivanje sposobnosti upijanja vode – WA [%]

Sposobnost upijanja vode jedna je od farinografskih veličina što znači da se isčitava iz farinograma, dobivenog na uređaju koji se zove farinograf. Rad farinografa se temelji na mehaničkom otporu koje tijesto pruža mješalici od trenutka formiranja tijesta preko tijesta u punom razvoju pa do trenutka završetka rada mješalice. Nakon 15 minuta rada ispisuje se graf odnosno farinogram.



**Slika 5** Brabenderovfarinograf

(Izvor slike: web 10)



Slika 6 Farinogram sa podacima o farinografskim svojstvima pšenice

(eng. *Stability*, stabilnost tijesta,

eng. *Degree of Softening*, stupanj omekšanja,

eng. FQN, *farinograph quality number*, farinografski broj kakvoće

eng. *Development time*, vrijeme razvoja tijesta.)

(Izvor slike: web 11)

Nakon praznog hoda mjesilice od jedne minute pomoću koje se provjerava uređaj dodaje se brašno u uređaj u količini od 300g te se također ono zagrijava jednu minutu. Dodaje se voda u biretu temperature od 30°C. Potom se voda iz birete dodaje u ugao mjesilice, a dodaje se 55 –60% vode na brašno i samo dodavanje vode traje maksimalno 25 sekundi. Nakon što se formira tijesto, potrebno je očistiti unutrašnje stijenkemjesilice te se ponovo mjesilica poklopi. Nakon 15 minuta rad farinografa je gotov, te se ispisuje farinogram i izračunavaju podaci za različita svojstva: sposobnost upijanja vode, razvoj tijesta, stabilnost tijesta, otpor tijesta, stupanj omekšanja, elastičnost i rastezljivost tijesta. A posebnim izračunom površine koju zajedno zatvaraju farinografska krivulja te konzistencija od 500 FJ moguće je odrediti kvalitetnu skupinu te kvalitetni broj brašna (Filipović, 2016).

Otpor tijesta ovisi o moći upijanja vode promatranog brašna, stoga je potrebno ponajprije utvrditi količinu vode koju treba dodati u odvagano količinu brašna da bi konzistencija u točki

punog razvoja tijesta bila 500 FJ. Moć upijanja vode je količina vode koja je bila potrebna za dobivanje tijesta, te se izražava u postocima na osnovu očitavanja utrošenih mililitara sa birete (8):

$$\text{moć upijanja vode (\%)} = \frac{V}{3} \quad (8)$$

V – broj mililitara vode potreban za stvaranje tijesta konzistencije od 500 FJ, dobivenog od brašna količine 300 g (Kljusurić, 2000).

Što je veća moć upijanja dobije se više tijesta prilikom zamjesivanja. Konzistencija tijesta, koja se dobije dodatkom ovako određene količine vode u brašno, biti će pogodna za proizvodnju pekarskih proizvoda (Kljusurić, 2000).

#### **3.2.2.7. Određivanje energije tijesta i maksimalnog otpora, E [cm<sup>2</sup>] i RMAX [EJ]**

Za razliku od WA, energija tijesta i maksimalni otpor suekstenzografske veličine koje se očitavaju s ekstenzograma ispisanog saekstenzografa. Analizom takvim uređajem ispituje se reakcija tijesta na mehaničku obradu i odmaranje, a podaci koji se dobiju iz ekstenzograma upotpunju sliku o kvaliteti brašna pšenice.

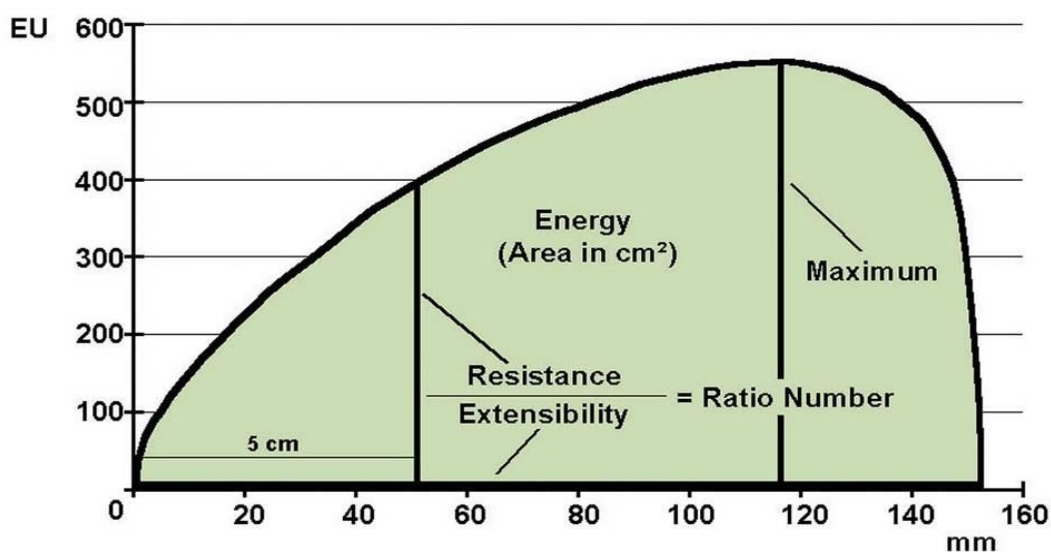
Primjenom sile konstantne veličine, pri istom smjeru djelovanja i pri istoj brzini, tijesto se oblikuje preko granice rastezljivosti i na kraju se kida. Sveukupni otpor koje tijesto neke pšenice pruža očitava se u obliku ekstenzograma sa kojeg se može očitati podatke kao što su otpor (EJ), rastezljivost tijesta (mm), energija tijesta (cm<sup>2</sup>) te omjer između otpora i rastezljivosti (Anić, 2016).

U uređaj se stavi oko 300g pšeničnog brašna, nekoliko grama soli i dovoljno vode da konzistencija tijesta postane od otprilike 500 FJ, te se potom zamijesi tijesto. Nakon što se tijesto podijeli na 3 dijela od 150g, te se oblikuje u obliku valjaka i stavi u metalne hvataljke, tijesto se tada odmara 45 minuta pri 30 stupnjeva celzijusa. Kada se tijesto odmori, isteže se pomoću kuke u okomitom pravcu prema dolje sa konstantnom brzinom. Dok se ta radnja

odvija, mjeri se otpor tijesta istezanju te se na računalu ispisuje ekstenzogram s ostalim podacima, odnosno krivulja ovisnosti otpora tijesta istezanju iskazanom u ekstenzografskim jedinicama o dužini tijesta do raskidanja u centimetrima. Nakon kidanja tijesta, postupak se ponavlja još dva puta s druga dva pripremljena dijela tijesta. Odmaranje pa istezanje. Za svaki uzorak brašna rade se tri ekstenzograma, tri puta po 45 minuta, 135 minuta ukupno (Anić, 2016).

Područje ispod krivulje je proporcionalno energiji potrebnoj za istezanje ispitivanog komada tijesta do njezine točke kidanja. Ovaj parametar, izražen u  $\text{cm}^2$ , prikladan je pokazatelj karakteristike jačine brašna. Što je jače brašno, to je veća energija potrebna da se rasteže tijesto. (DapčevićHadnađev i sur., 2011).

Maksimalni otpor tijesta (RMAX) ili otpor pri konstantnoj deformaciji, obično odgovara visini krivulje na 50mm od početka njezinog širenja. Potonji se ponajprije koristi unutar laboratorija za ispitivanje žitarica jer predstavlja „resistance at a fixed extension“, odnosno otpor pri fiksiranoj ekstenziji za sva ispitivana tijesta. (DapčevićHadnađev i sur., 2011).



**Slika 7** Ekstenzogram sa podacima o ekstenzografskim svojstvima

(eng. Energy, energija tijesta

eng. Maximum, maksimalni otpor

eng. Resistance, otpor

eng. Extensibility, rastezljivost tijesta

eng. Ratio number, omjer između otpora i rastezljivosti)

(Izvor slike: web 12)



**Slika 8** Ekstenzograf

(Izvor slike: web 13)

### **3.2.2.8. Statističke analize podataka**

Pomoću programskog paketa *Statistica ver. 13* provedena je statistička obrada mjerenih vrijednosti 22 svojstava pšenice s Poljoprivrednog instituta Osijek tijekom perioda od 12 godina.

Na korištenom setu podataka izračunata su osnovna statistička svojstva poput medijana, srednje vrijednosti, standardne devijacije, koeficijenta varijabilnosti te minimuma i maksimuma svakog svojstva.

Za analizirane vrijednosti određeni su trendovi promjene tijekom 12 godina primjenom metode linearne regresije i izračunavanjem koeficijenta determinacije.

Izračunata je korelacijska matrica za sva analizirana svojstva.

Kemometrijske metode (regresijska metoda najmanjih kvadrata, analiza glavnih komponenti i klastreska analiza) korištene su u svrhu opisivanja veze između kultivara i svojstava tijekom

godina te da se regresijskim matematičkim modelima objasni dinamika promjena odabranih svojstava tijekom godina.

Razvijeni su prediktivnimultivarijantnimatematički modeli za izračunavanje vrijednosti pojedinih svojstava. Za izradu matematičkih modela korištena je metoda najmanjih kvadrata. Validacija predloženih matematičkih modela izvedena je pomoćudva seta eksperimentalnih podataka.

Analizom glavnih komponenata opisan je skup podataka pomoću sedam glavnih svojstava sa 95% varijabilnosti analiziranog skupa.

Klusterskom analizom grupirana su svojstva čije su vrijednosti međusobno povezane.

## **4. REZULTATI**

### 4.1. Statistička obrada podataka

Kroz period od 12 godina žetve Poljoprivredni institut Osijek raznim je metodama dobio srednje vrijednosti 22 svojstava kultivara pšenice. Programom „Statistica“ na izmjerenim vrijednostima svojstava izvedena je deskriptivna statistika te su izračunate srednje vrijednosti pojedinih svojstava, standardne devijacije i koeficijenti varijabilnosti mjerenih veličina.

**Tablica 4** Srednje vrijednosti svojstava pšenice i brašna od 24 kultivara POLJINOS tijekom 12 godina

|    | H    | Y (kg/ha) | HL (kg) | TKW (g) | P (%) | WG (%) | WA (%) | SED (cm <sup>3</sup> ) | GI    | FY (%) | FN (s) | WG/P |
|----|------|-----------|---------|---------|-------|--------|--------|------------------------|-------|--------|--------|------|
| 1  | 2005 | 6675,53   | 77,38   | 38,60   | 15,38 | 37,53  | 60,24  | 58,29                  | 78,08 | 75,43  | 237,96 | 2,44 |
| 2  | 2006 | 8269,99   | 83,68   | 43,32   | 15,02 | 36,86  | 62,40  | 54,54                  | 75,44 | 71,25  | 344,75 | 2,44 |
| 3  | 2007 | 6538,87   | 81,43   | 37,55   | 15,12 | 35,67  | 59,50  | 53,13                  | 76,44 | 68,04  | 247,92 | 2,36 |
| 4  | 2008 | 8817,82   | 83,25   | 43,27   | 13,09 | 29,03  | 56,89  | 38,42                  | 88,58 | 67,92  | 291,13 | 2,21 |
| 5  | 2009 | 8497,92   | 80,02   | 45,39   | 13,73 | 29,11  | 58,61  | 46,63                  | 88,82 | 67,46  | 305,63 | 2,11 |
| 6  | 2010 | 6352,67   | 76,89   | 33,92   | 15,89 | 37,44  | 60,33  | 49,46                  | 82,95 | 72,21  | 305,13 | 2,35 |
| 7  | 2011 | 8538,09   | 84,76   | 43,66   | 12,55 | 29,09  | 58,08  | 38,38                  | 88,29 | 68,83  | 344,71 | 2,30 |
| 8  | 2012 | 8065,52   | 82,74   | 40,72   | 11,55 | 25,43  | 57,75  | 26,46                  | 85,84 | 69,13  | 323,00 | 2,20 |
| 9  | 2013 | 6225,02   | 76,20   | 33,74   | 14,50 | 33,71  | 61,73  | 49,79                  | 78,26 | 61,54  | 410,75 | 2,33 |
| 10 | 2014 | 4190,99   | 72,44   | 31,99   | 14,08 | 35,22  | 56,98  | 41,67                  | 77,71 | 63,17  | 366,69 | 2,51 |
| 11 | 2015 | 7327,28   | 79,12   | 37,64   | 13,91 | 31,93  | 58,70  | 44,33                  | 88,42 | 67,53  | 343,50 | 2,30 |
| 12 | 2016 | 6473,07   | 78,80   | 43,11   | 12,88 | 31,62  | 56,81  | 46,42                  | 87,13 | 68,96  | 307,00 | 2,45 |

H = eng. *harvest*, Y = eng. *yield* (kg/ha), HL = eng. *hectolitre* (kg), TKW = eng. *thousandkernelweight* (g), P = eng. *protein* (%), WG = eng. *wetgluten* (%), WA = eng. *water absorption* (%), SED = eng. *sedimentation* (cm<sup>3</sup>), GI = eng. *gluten indeks*, FY = eng. *flouryield* (%), FN = eng. *fallingnumber* (s), WG/P = eng. *wetgluten and protein ratio*

**Tablica 5** Srednje vrijednosti svojstava pšenice i brašna od 24 kultivara POLJINOS tijekom 12 godina

|    | H    | DDT(min) | STAB(min) | R (EJ) | DS (FJ) | FQN    | E (cm <sup>2</sup> ) | R5MIN (EJ) | EXT (mm) | RMAX (EJ) | R/EXT | RMAX/ EXT |
|----|------|----------|-----------|--------|---------|--------|----------------------|------------|----------|-----------|-------|-----------|
| 1  | 2005 | 3,61     | 1,27      | 4,87   | 76,63   | 83,43  | 57,64                | 170,16     | 176,53   | 243,22    | 0,99  | 1,43      |
| 2  | 2006 | 2,90     | 1,24      | 4,13   | 76,96   | 79,25  | 52,54                | 189,75     | 152,50   | 254,96    | 1,27  | 1,71      |
| 3  | 2007 | 3,68     | 1,76      | 5,41   | 57,46   | 104,92 | 68,00                | 216,29     | 164,79   | 314,04    | 1,35  | 1,97      |
| 4  | 2008 | 2,65     | 0,80      | 3,45   | 80,04   | 58,79  | 62,46                | 246,54     | 144,17   | 331,92    | 1,78  | 2,37      |
| 5  | 2009 | 2,92     | 0,95      | 3,87   | 69,75   | 72,33  | 69,42                | 268,42     | 146,83   | 357,42    | 1,90  | 2,52      |
| 6  | 2010 | 3,70     | 1,45      | 5,15   | 79,17   | 91,25  | 64,58                | 169,04     | 183,13   | 262,33    | 0,95  | 1,47      |
| 7  | 2011 | 2,56     | 0,95      | 3,51   | 69,21   | 64,58  | 74,58                | 300,38     | 140,96   | 404,46    | 2,19  | 2,93      |
| 8  | 2012 | 2,02     | 0,65      | 2,67   | 89,13   | 53,54  | 53,71                | 239,17     | 136,79   | 291,92    | 1,81  | 2,20      |
| 9  | 2013 | 3,58     | 1,04      | 4,63   | 51,58   | 104,13 | 70,83                | 258,17     | 147,50   | 357,67    | 1,75  | 2,43      |
| 10 | 2014 | 4,48     | 2,75      | 7,23   | 42,04   | 116,42 | 94,71                | 275,58     | 173,58   | 433,08    | 1,63  | 2,55      |
| 11 | 2015 | 3,79     | 2,88      | 6,66   | 46,42   | 102,63 | 92,63                | 275,04     | 166,17   | 422,46    | 1,88  | 1,67      |
| 12 | 2016 | 2,40     | 0,94      | 3,33   | 106,08  | 55,13  | 69,46                | 210,88     | 166,71   | 311,08    | 1,28  | 1,88      |

H = eng. *harvest*, DDT = eng. *dough development time* (min), STAB = eng. *stability* (min), R = eng. *resistance* (EJ), DS = eng. *degree of softening* (FJ), FQN = eng. *farinograph quality number*, E = eng. *dough energy* (cm<sup>2</sup>), R5MIN = eng. *resistance through 5 min* (EJ), EXT = eng. *extensibility* (mm), RMAX = eng. *max resistance* (EJ), R/EXT = eng. *resistance and extensibility ratio*, RMAX/EXT = eng. *max resistance and extensibility ratio*

**Tablica 6** Deskriptivna statistička analiza na 22 svojstvu pšenice i brašna

|          | MEDIJAN | AVG     | STDEV   | CV    | MIN     | MAX     |
|----------|---------|---------|---------|-------|---------|---------|
| Y        | 7001,40 | 7164,40 | 1346,74 | 18,80 | 4190,99 | 8817,82 |
| HL       | 79,57   | 79,73   | 3,64    | 4,57  | 72,44   | 84,76   |
| TKW      | 39,66   | 39,41   | 4,51    | 11,45 | 31,99   | 45,39   |
| P        | 13,99   | 13,97   | 1,29    | 9,23  | 11,55   | 15,89   |
| WG       | 32,82   | 32,72   | 3,97    | 12,13 | 25,43   | 37,53   |
| WA       | 58,66   | 59,00   | 1,87    | 3,17  | 56,81   | 62,40   |
| SED      | 46,52   | 45,63   | 8,63    | 18,91 | 26,46   | 58,29   |
| FY       | 68,44   | 68,46   | 3,69    | 5,39  | 61,54   | 75,43   |
| GI       | 84,40   | 83,00   | 5,41    | 6,52  | 75,44   | 88,82   |
| FN       | 315,00  | 319,01  | 48,19   | 15,11 | 237,96  | 410,75  |
| WG/P     | 2,34    | 2,33    | 0,12    | 5,09  | 2,11    | 2,51    |
| DDT      | 3,25    | 3,19    | 0,72    | 22,51 | 2,02    | 4,48    |
| STAB     | 1,14    | 1,39    | 0,73    | 52,47 | 0,65    | 2,88    |
| R        | 4,38    | 4,57    | 1,37    | 30,05 | 2,67    | 7,23    |
| DS       | 73,19   | 70,37   | 18,53   | 26,34 | 42,04   | 106,08  |
| FQN      | 81,34   | 82,20   | 21,71   | 26,42 | 53,54   | 116,42  |
| E        | 68,71   | 69,21   | 13,32   | 19,24 | 52,54   | 94,71   |
| R5MIN    | 242,85  | 234,95  | 43,55   | 18,54 | 169,04  | 300,38  |
| EXT      | 158,65  | 158,30  | 15,38   | 9,71  | 136,79  | 183,13  |
| RMAX     | 322,98  | 332,05  | 64,66   | 19,47 | 243,22  | 433,08  |
| R/EXT    | 1,69    | 1,56    | 0,39    | 24,89 | 0,95    | 2,19    |
| RMAX/EXT | 2,09    | 2,09    | 0,48    | 22,80 | 1,43    | 2,93    |

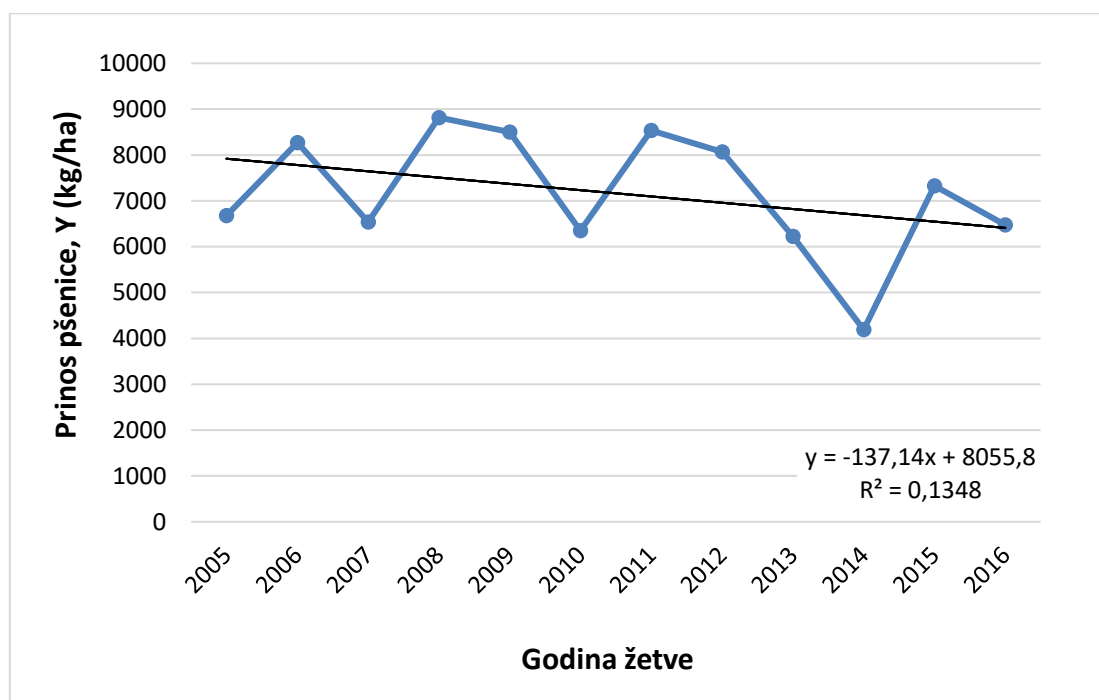
Y = eng. *yield* (kg/ha), HL = eng. *hectolitre* (kg), TKW = eng. *thousandkernelweight* (g), P = eng. *protein* (%), WG = eng. *wetgluten* (%), WA = eng. *water absorption* (%), SED = eng. *sedimentation* (cm<sup>3</sup>), FY = eng. *Flouryield* (%), GI = eng. *glutenindex*, FN = eng. *fallingnumber* (s), WG/P = eng. *wetgluten and protein ratio*, DDT = eng. *dough development time* (min), STAB = eng. *stability* (min), R = eng. *resistance* (EJ), DS = eng. *degreeofsoftening* (FJ), FQN = eng. *farinographqualitynumber*, E = eng. *doughenergy* (cm<sup>2</sup>), R5MIN = eng. *resistancethrough 5min* (EJ), EXT = eng. *extensibility* (mm), RMAX = eng. *maxresistance* (EJ), R/EXT = eng. *resistance and extensibilityratio*, RMAX/EXT = eng. *maxresistance and extensibilityratio*

Na nekoliko izabranih svojstava poput prinosa, hektolitarske mase, udjela proteina, apsolutne mase pšenice te vlažnog glutena izračunate su linearne regresijske jednadžbe i koeficijenti determinacije te su prikazani u **tablici 7**.

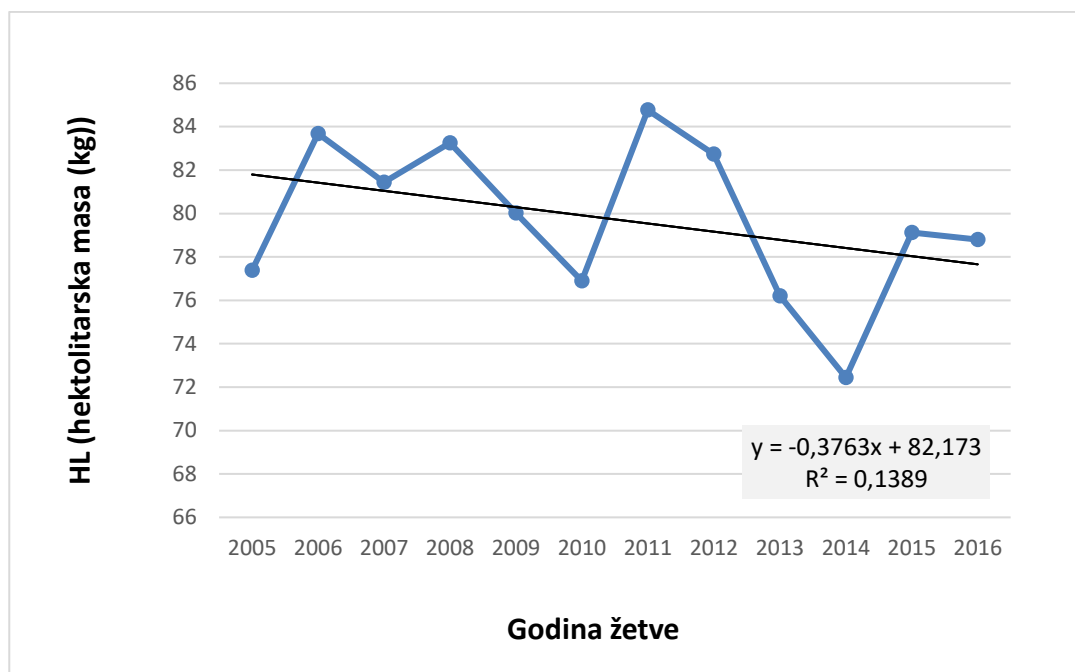
Pomoću tih podataka su kreirani grafički prikazi promjene i linearne zavisnosti određenih svojstava tijekom mjerenja za 24 kultivara kroz 12 godina od strane Poljoprivrednog instituta Osijek.

**Tablica 7** Izračunate jednadžbe linearne regresije i koeficijent determinacije za linearnu promjenu mjerenih svojstava pšenice

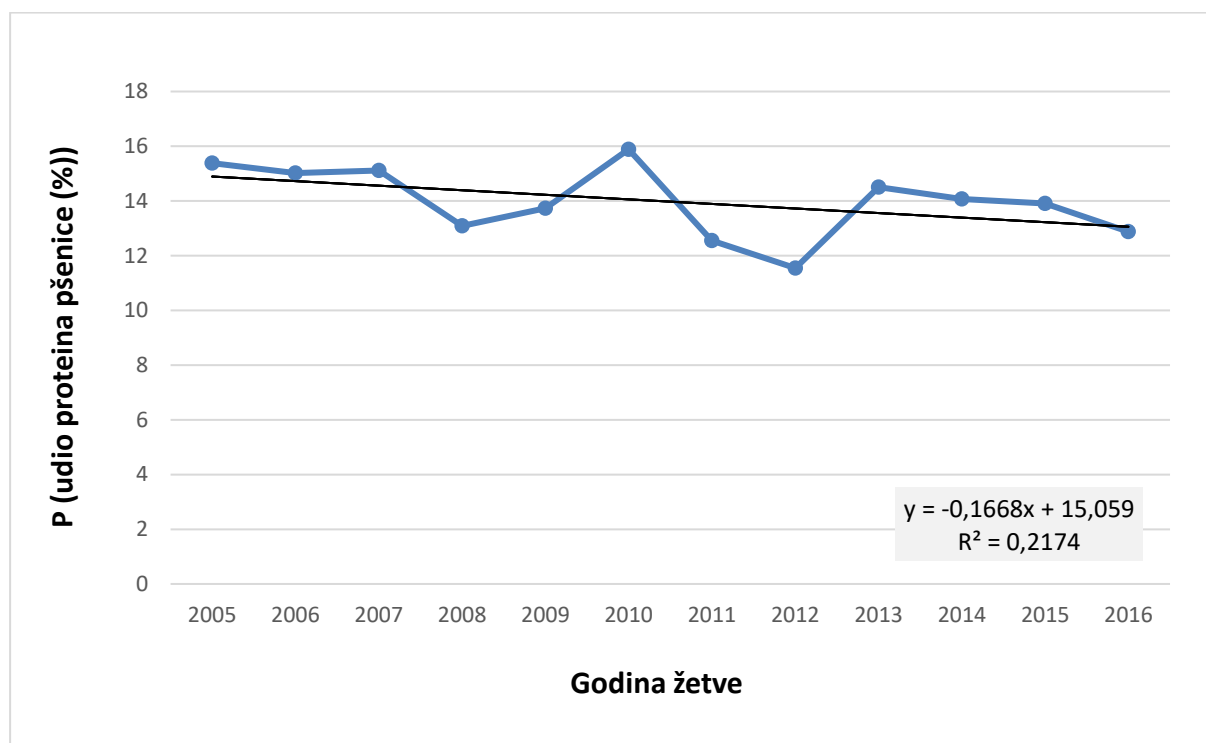
| SVOJSTVO | JEDNADŽBA LINEARNE REGRESIJE | R <sup>2</sup> |
|----------|------------------------------|----------------|
| Y        | $-137,1x + 8055$             | 0,1348         |
| HL       | $-0,376x + 82,17$            | 0,1389         |
| TKW      | $-0,322x + 41,50$            | 0,0664         |
| P        | $-0,166x + 15,05$            | 0,2174         |
| WG       | $-0,379x + 35,18$            | 0,119          |



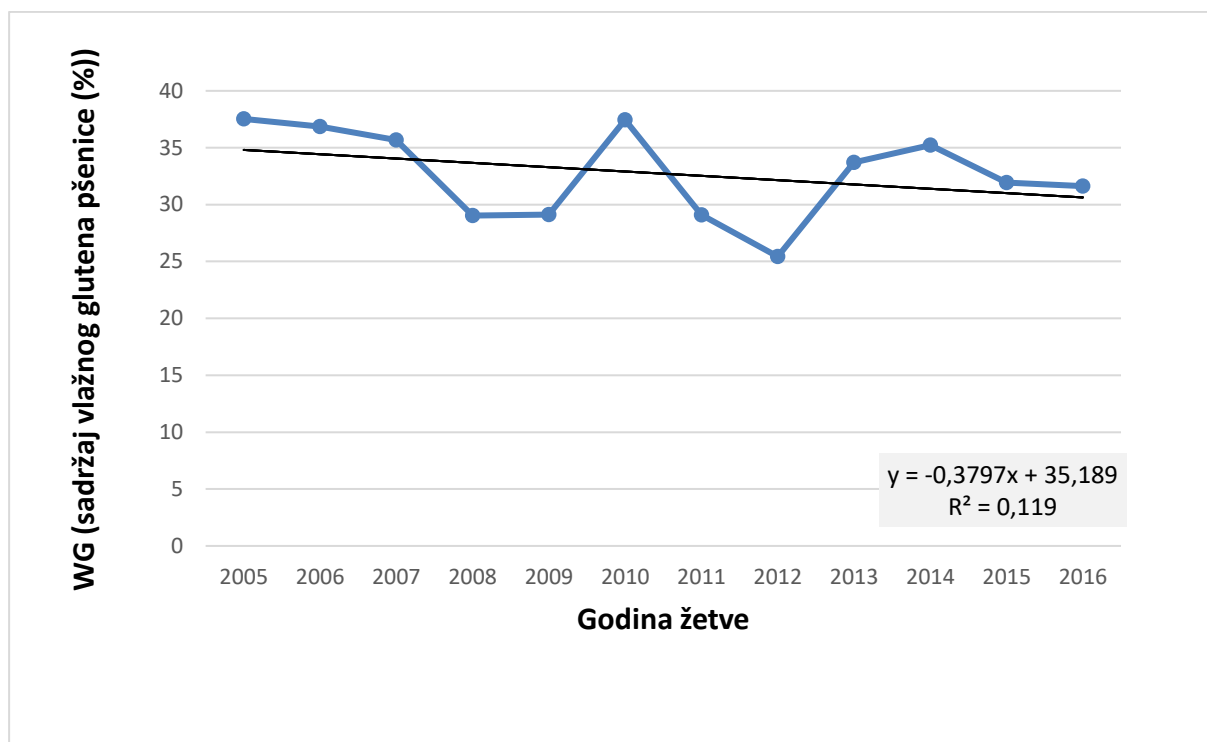
**Slika 9** Trend promjene prinosa pšenice kroz period od 12 godina (2005 – 2016)



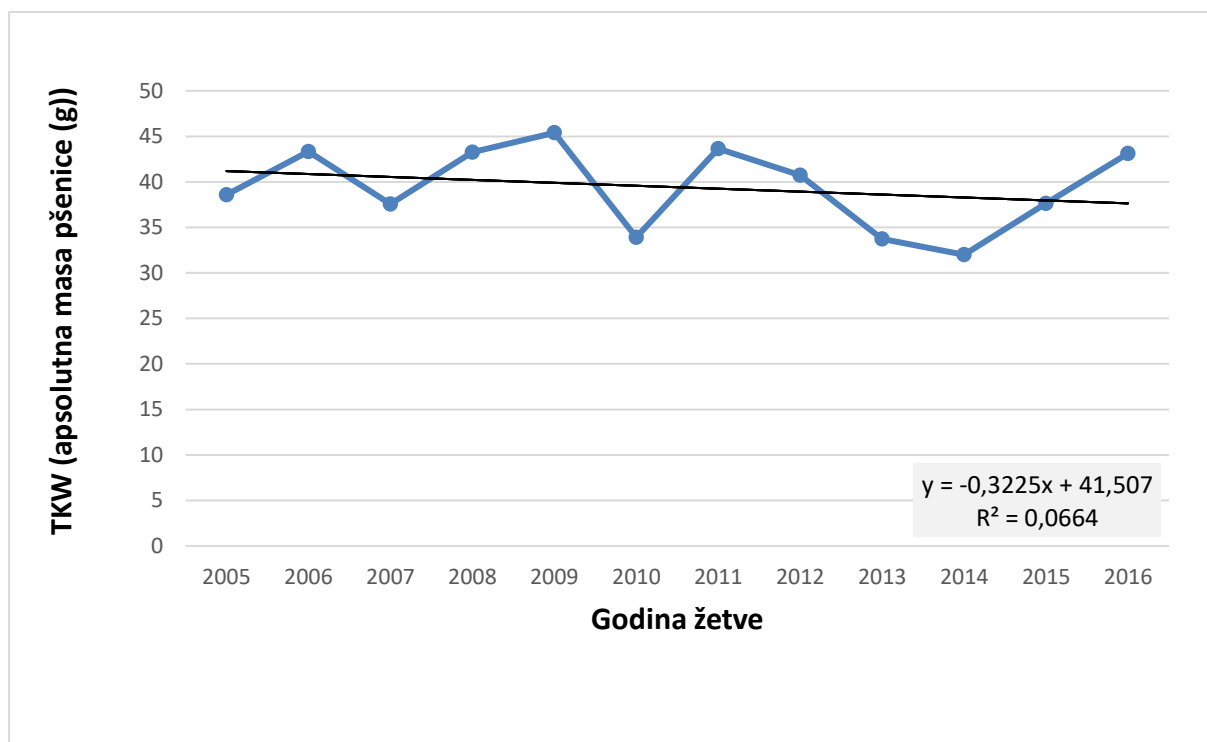
**Slika 10** Trend promjene hektolitarske mase pšeničnog zrna kroz period od 12 godina (2005 – 2016)



**Slika 11** Trend promjene udjela proteina pšeničnog zrna kroz period od 12 godina (2005 – 2016)



**Slika 12** Trend promjene sadržaja vlažnog glutena u tijestu od pšeničnog zrna kroz period od 12 godina (2005 – 2016)



**Slika 13** Trend promjene apsolutne mase pšeničnog zrna kroz period od 12 godina (2005 – 2016)

U tablici 8 prikazani su korelacijski odnosi između 22 svojstva pšenice. Koeficijentima korelacije moguće je zapaziti koja svojstva sa kojima imaju visoku pozitivnu ili nisku korelaciju te kako povećanje jednog svojstva utječe na drugo svojstvo.

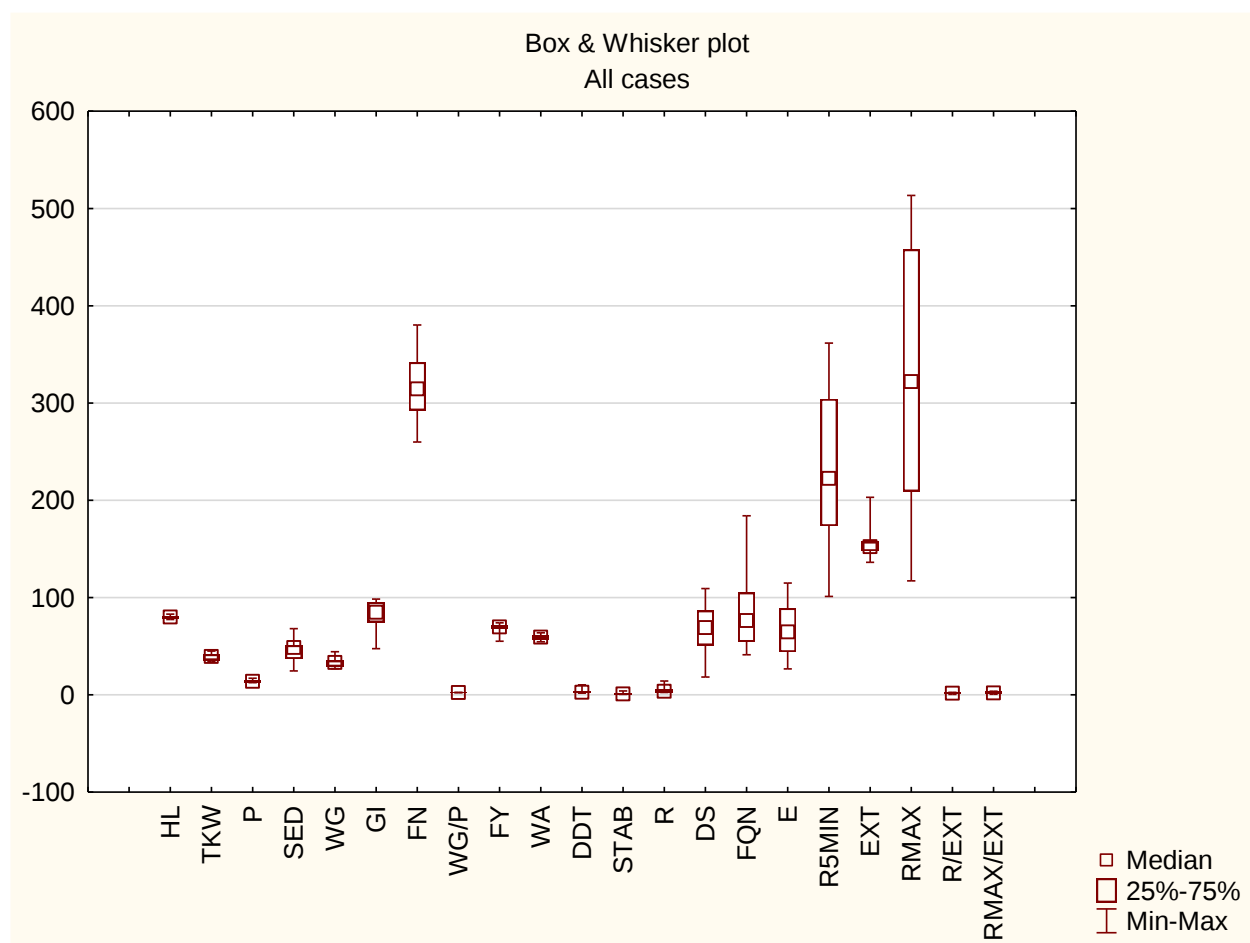
**Tablica 8** Korelacijski koeficijenti za 21 svojstvo pšeničnog zrna i brašna od 24 kultivara sa POLJINOS ( $p < 0,05$ )

| Svojstvo | Y      | HL     | TKW    | P      | SED    | WG     | GI     | FN     | WG/P   | FY     | WA     | DDT    | STAB   | R      | DS     | FQN    | E      | R5MIN  | EXT    | RMAX   | R/EXT  | RMAX/EXT |
|----------|--------|--------|--------|--------|--------|--------|--------|--------|--------|--------|--------|--------|--------|--------|--------|--------|--------|--------|--------|--------|--------|----------|
| Y        | 1,000  | 0,247  | -0,592 | -0,882 | 0,316  | -0,895 | 0,765  | 0,133  | -0,614 | 0,412  | 0,009  | -0,198 | 0,049  | -0,124 | -0,304 | 0,080  | 0,425  | 0,579  | -0,661 | 0,534  | 0,648  | 0,601    |
| HL       | 0,247  | 1,000  | 0,227  | -0,111 | 0,370  | -0,110 | 0,194  | 0,356  | -0,005 | 0,395  | 0,653  | 0,232  | 0,214  | 0,240  | -0,332 | 0,357  | 0,147  | 0,171  | -0,360 | 0,164  | 0,180  | 0,168    |
| TKW      | -0,592 | 0,227  | 1,000  | 0,727  | 0,080  | 0,647  | -0,425 | -0,227 | 0,330  | 0,033  | 0,337  | 0,281  | 0,238  | 0,280  | 0,053  | 0,199  | -0,180 | -0,320 | 0,483  | -0,268 | -0,388 | -0,333   |
| P        | -0,882 | -0,111 | 0,727  | 1,000  | -0,047 | 0,897  | -0,630 | -0,050 | 0,460  | -0,196 | 0,117  | 0,457  | 0,243  | 0,406  | 0,050  | 0,224  | -0,240 | -0,473 | 0,788  | -0,390 | -0,587 | -0,495   |
| SED      | 0,316  | 0,370  | 0,080  | -0,047 | 1,000  | -0,319 | 0,691  | 0,244  | -0,537 | 0,684  | 0,416  | 0,625  | 0,752  | 0,700  | -0,889 | 0,828  | 0,804  | 0,708  | -0,096 | 0,756  | 0,620  | 0,691    |
| WG       | -0,895 | -0,110 | 0,647  | 0,897  | -0,319 | 1,000  | -0,858 | -0,030 | 0,802  | -0,314 | 0,128  | 0,141  | -0,095 | 0,067  | 0,357  | -0,119 | -0,536 | -0,701 | 0,722  | -0,649 | -0,768 | -0,718   |
| GI       | 0,765  | 0,194  | -0,425 | -0,630 | 0,691  | -0,858 | 1,000  | 0,148  | -0,865 | 0,503  | -0,025 | 0,210  | 0,433  | 0,297  | -0,737 | 0,512  | 0,834  | 0,892  | -0,483 | 0,885  | 0,887  | 0,895    |
| FN       | 0,133  | 0,356  | -0,227 | -0,050 | 0,244  | -0,030 | 0,148  | 1,000  | 0,033  | 0,272  | 0,298  | 0,034  | 0,113  | 0,061  | -0,319 | 0,193  | 0,248  | 0,267  | -0,114 | 0,258  | 0,265  | 0,265    |
| WG/P     | -0,614 | -0,005 | 0,330  | 0,460  | -0,537 | 0,802  | -0,865 | 0,033  | 1,000  | -0,346 | 0,165  | -0,276 | -0,475 | -0,358 | 0,610  | -0,490 | -0,742 | -0,764 | 0,357  | -0,773 | -0,750 | -0,772   |
| FY       | 0,412  | 0,395  | 0,033  | -0,196 | 0,684  | -0,314 | 0,503  | 0,272  | -0,346 | 1,000  | 0,539  | 0,258  | 0,404  | 0,320  | -0,536 | 0,478  | 0,452  | 0,490  | -0,369 | 0,495  | 0,496  | 0,507    |
| WA       | 0,009  | 0,653  | 0,337  | 0,117  | 0,416  | 0,128  | -0,025 | 0,298  | 0,165  | 0,539  | 1,000  | 0,336  | 0,203  | 0,309  | -0,201 | 0,311  | -0,020 | -0,059 | -0,190 | -0,042 | -0,074 | -0,063   |
| DDT      | -0,198 | 0,232  | 0,281  | 0,457  | 0,625  | 0,141  | 0,210  | 0,034  | -0,276 | 0,258  | 0,336  | 1,000  | 0,782  | 0,978  | -0,655 | 0,870  | 0,426  | 0,183  | 0,280  | 0,278  | 0,039  | 0,149    |
| STAB     | 0,049  | 0,214  | 0,238  | 0,243  | 0,752  | -0,095 | 0,433  | 0,113  | -0,475 | 0,404  | 0,203  | 0,782  | 1,000  | 0,895  | -0,716 | 0,841  | 0,592  | 0,409  | 0,152  | 0,484  | 0,295  | 0,385    |
| R        | -0,124 | 0,240  | 0,280  | 0,406  | 0,700  | 0,067  | 0,297  | 0,061  | -0,358 | 0,320  | 0,309  | 0,978  | 0,895  | 1,000  | -0,710 | 0,906  | 0,504  | 0,269  | 0,249  | 0,362  | 0,128  | 0,237    |
| DS       | -0,304 | -0,332 | 0,053  | 0,050  | -0,889 | 0,357  | -0,737 | -0,319 | 0,610  | -0,536 | -0,201 | -0,655 | -0,716 | -0,710 | 1,000  | -0,889 | -0,887 | -0,782 | 0,055  | -0,837 | -0,684 | -0,767   |
| FQN      | 0,080  | 0,357  | 0,199  | 0,224  | 0,828  | -0,119 | 0,512  | 0,193  | -0,490 | 0,478  | 0,311  | 0,870  | 0,841  | 0,906  | -0,889 | 1,000  | 0,662  | 0,498  | 0,060  | 0,573  | 0,382  | 0,480    |
| E        | 0,425  | 0,147  | -0,180 | -0,240 | 0,804  | -0,536 | 0,834  | 0,248  | -0,742 | 0,452  | -0,020 | 0,426  | 0,592  | 0,504  | -0,887 | 0,662  | 1,000  | 0,941  | -0,094 | 0,976  | 0,860  | 0,925    |
| R5MIN    | 0,579  | 0,171  | -0,320 | -0,473 | 0,708  | -0,701 | 0,892  | 0,267  | -0,764 | 0,490  | -0,059 | 0,183  | 0,409  | 0,269  | -0,782 | 0,498  | 0,941  | 1,000  | -0,366 | 0,990  | 0,981  | 0,997    |
| EXT      | -0,661 | -0,360 | 0,483  | 0,788  | -0,096 | 0,722  | -0,483 | -0,114 | 0,357  | -0,369 | -0,190 | 0,280  | 0,152  | 0,249  | 0,055  | 0,060  | -0,094 | -0,366 | 1,000  | -0,272 | -0,504 | -0,396   |
| RMAX     | 0,534  | 0,164  | -0,268 | -0,390 | 0,756  | -0,649 | 0,885  | 0,258  | -0,773 | 0,495  | -0,042 | 0,278  | 0,484  | 0,362  | -0,837 | 0,573  | 0,976  | 0,990  | -0,272 | 1,000  | 0,948  | 0,985    |
| R/EXT    | 0,648  | 0,180  | -0,388 | -0,587 | 0,620  | -0,768 | 0,887  | 0,265  | -0,750 | 0,496  | -0,074 | 0,039  | 0,295  | 0,128  | -0,684 | 0,382  | 0,860  | 0,981  | -0,504 | 0,948  | 1,000  | 0,987    |
| RMAX/EXT | 0,601  | 0,168  | -0,333 | -0,495 | 0,691  | -0,718 | 0,895  | 0,265  | -0,772 | 0,507  | -0,063 | 0,149  | 0,385  | 0,237  | -0,767 | 0,480  | 0,925  | 0,997  | -0,396 | 0,985  | 0,987  | 1,000    |

*Box and whisker* dijagram prikazuje koliko pojedino svojstvo u analiziranom razdoblju odstupa od srednje vrijednosti.

Vrijednosti za prinos pšenice (Y) nisu uvrštene u *box and whisker* dijagram zbog njihovog reda veličine ( $10^3$ ).

Najveće variranje tijekom razdoblja od 10 godina ima maksimalni otpor, a najstabilnije svojstva su sposobnost upijanja vode, vrijeme razvoja tijesta, udio proteina, apsolutna i hektolitarska masa, stabilnost tijesta.



**Slika 14** *Box and whisker* dijagram raspršenosti podataka za 21 svojstvo pšeničnog zrna i brašna

(Izvor slike: *Statistica* ver. 13)

#### 4.2. PLSR METODA –Polinomna regresija metodom najmanjih kvadrata

Regresijska analiza metodom najmanjih kvadrata (eng. *PartialLeastSquareRegression*) je jedna od nekoliko regresijskih tehnika koje se zasnivaju na temelju kvantitativnog izražavanja zavisnosti odnosno korelacije koja omogućava model kakav se koristi za predviđanje podataka koji nisu izmjereni.

U ovom diplomskom radu korištena je multivarijantna regresijska analiza koja je definirana zavisnošću jedne varijable o više nezavisnih varijabli. Vrijednosti zavisnih varijabli izračunate su iz poznatih vrijednosti pet ostalih svojstava pšenice, zrna i brašna (nezavisne varijable). Vrijednosti svojstava sposobnosti upijanja vode (WA), energije tijesta (E) i maksimalnog otpora (RMAX) izračunate su iz podataka o prinosu pšenice (Y), hektolitarskoj masi pšenice (HL), apsolutnoj masi pšenice (TKW), udjelu proteina (P) u pšeničnom zrnu te sadržaja vlažnog glutena (WG) u tijestu pšeničnog brašna.

Jednadžbe (9, 10, 11, 12, 13 i 14) za izračun zavisnih varijabli WA, E i RMAX dobivene su na temelju prediktivnih modela u kojima su upotrijebljene nezavisne varijable: Y, HL, TKW, P i WG. Prediktivni modeli izvedeni su na temelju vrijednosti navedenih svojstava za razdoblje od 10 godina (2005–2014). Validacija predloženih modela provedena je na temelju vrijednosti navedenih svojstava za razdoblje od 2 godine (2015-2016). Izmjerene srednje vrijednosti za Y, HL, TKW, P i WG kroz desetogodišnji period dane su u tablici 1 i tablici 2. Na temelju njihovih vrijednosti određeni su regresijski koeficijenti prediktivnog modela za izračun vrijednosti zavisne varijable WA, E i RMAX.

#### 4.2.1. Prediktivni model za izračunavanje sposobnosti upijanja vode (WA)

**Tablica 9** Regresijski koeficijenti metode najmanjih kvadrata (PLS) za izračun zavisne varijable WA

| Intercept   | Y        | Y <sup>2</sup> | HL       | HL <sup>2</sup> | TKW        | TKW <sup>2</sup> | P         | P <sup>2</sup> | WG         | WG <sup>2</sup> |
|-------------|----------|----------------|----------|-----------------|------------|------------------|-----------|----------------|------------|-----------------|
| -172,748159 | 0,018745 | -0,000001      | 6,484792 | -0,038091       | -11,710123 | 0,144138         | 45,613646 | -1,753748      | -11,503435 | 0,195036        |

Intercept = eng. *interception* (slobodni član u jednadžbi koji predstavlja sjecište regresijskog pravca i ordinatne osi), Y = eng. *yield* (kg/ha), HL = eng. *hectolitre* (kg), TKW = eng. *thousandkernelweight* (g), P = eng. *protein* (%), WG = eng. *wetgluten* (%)

Pomoću regresijskih koeficijenata konstruirane su jednadžbe za izračun svojstva sposobnosti upijanja vode. Prediktivni matematički model za izračun svojstva sposobnosti upijanja vode za 2015. i 2016. prikazuju jednadžbe 9 i 10:

$$WA_{15} = \text{Intercept} + Y \times Y'_{15} + Y^2 \times Y'^2_{15} + HL \times HL'_{15} + HL^2 \times HL'^2_{15} + TKW \times TKW'_{15} + TKW^2 \times TKW'^2_{15} + P \times P'_{15} + P^2 \times P'^2_{15} + WG \times WG'_{15} + WG^2 \times WG'^2_{15} \quad (9)$$

$$WA_{16} = \text{Intercept} + Y \times Y'_{16} + Y^2 \times Y'^2_{16} + HL \times HL'_{16} + HL^2 \times HL'^2_{16} + TKW \times TKW'_{16} + TKW^2 \times TKW'^2_{16} + P \times P'_{16} + P^2 \times P'^2_{16} + WG \times WG'_{16} + WG^2 \times WG'^2_{16} \quad (10)$$

$Y'_{15/16}$  = prosječna vrijednost prinosa pšenice 2015./16. godine,  $HL'_{15/16}$  = prosječna vrijednost hektolitarske mase 2015./16. god.,  $TKW'_{15/16}$  = prosječna vrijednost apsolutne mase pšenice 2015./16. god.,  $P'_{15/16}$  = prosječna vrijednost udjela proteina 2015./16. god.,  $WG'_{15/16}$  = prosječna vrijednost količine vlažnog glutena 2015./16. god.

Pomoću prediktivnog modela temeljenog na jednadžbi (9 i 10) izračunate su vrijednosti svojstva sposobnosti upijanja vode kroz dvije godine; 2015 i 2016, te je tako validiran prediktivni model. Rezultati dobiveni izračunom uspoređeni su s mjerenim vrijednostima svojstva za navedene dvije godine. Dobivena razlika između izmjerenih vrijednosti i prediktivnim modelom izračunatih vrijednosti svojstva sposobnosti upijanja vode iznosi 2,38%, što nam govori da je točnost modela 97,62%. Točnost je vrlo visoka što znači da je vrlo lako predvidjeti vrijednost sposobnosti upijanja vode pomoću ovakvog prediktivnog modela.

**Tablica 10** Prikazan odnos između prediktivnim modelom izračunatih vrijednosti i izmjerenih vrijednosti svojstva sposobnosti upijanja vode (WA)

| H                     | WA_model | WA_mjereno | Razlika<br>(mjereno – model) | Razlika<br>(%) |
|-----------------------|----------|------------|------------------------------|----------------|
| 2015                  | 59,14    | 58,70      | -0,43                        | 0,73           |
| 2016                  | 59,15    | 56,81      | -2,33                        | 4,03           |
| PROSJEČNA RAZLIKA (%) |          |            |                              | 2,38           |

H = eng. *harvest*, WA = eng. *water absorption* (%)

### 4.2.2. Prediktivni model za izračunavanje energije tijesta (E)

**Tablica 11** Regresijski koeficijenti metode najmanjih kvadrata (PLS) za izračun zavisne varijable E

| Intercept   | Y         | Y <sup>2</sup> | HL         | HL <sup>2</sup> | TKW      | TKW <sup>2</sup> | P           | P <sup>2</sup> | WG        | WG <sup>2</sup> |
|-------------|-----------|----------------|------------|-----------------|----------|------------------|-------------|----------------|-----------|-----------------|
| 1940,011661 | -0,027765 | 0,000001       | -41,072770 | 0,251341        | 5,338286 | -0,027889        | -213,390764 | 7,834230       | 78,260449 | -1,241700       |

Intercept = eng. *interception* (slobodni član u jednadžbi koji predstavlja sjecište regresijskog pravca i ordinatne osi), Y = eng. *yield* (kg/ha), HL = eng. *hectolitre* (kg), TKW = eng. *thousandkernelweight* (g), P = eng. *protein* (%), WG = eng. *wetgluten* (%)

Pomoću regresijskih koeficijenata konstruirane su jednadžbe za izračun svojstva energije tijesta. Prediktivni matematički model za izračun svojstva energije tijesta za 2015. i 2016. prikazuju jednadžbe 11 i 12:

$$E_{15} = \text{Intercept} + Y \times Y'_{15} + Y^2 \times Y'^2_{15} + HL \times HL'_{15} + HL^2 \times HL'^2_{15} + TKW \times TKW'_{15} + TKW^2 \times TKW'^2_{15} + P \times P'_{15} + P^2 \times P'^2_{15} + WG \times WG'_{15} + WG^2 \times WG'^2_{15} \quad (11)$$

$$E_{16} = \text{Intercept} + Y \times Y'_{16} + Y^2 \times Y'^2_{16} + HL \times HL'_{16} + HL^2 \times HL'^2_{16} + TKW \times TKW'_{16} + TKW^2 \times TKW'^2_{16} + P \times P'_{16} + P^2 \times P'^2_{16} + WG \times WG'_{16} + WG^2 \times WG'^2_{16} \quad (12)$$

Y'<sub>15/16</sub> = prosječna vrijednost prinosa pšenice 2015./16. godine, HL'<sub>15/16</sub> = prosječna vrijednost hektolitarske mase 2015./16. god., TKW'<sub>15/16</sub> = prosječna vrijednost apsolutne mase pšenice 2015./16. god., P'<sub>15/16</sub> = prosječna vrijednost udjela proteina 2015./16. god., WG'<sub>15/16</sub> = prosječna vrijednost količine vlažnog glutena 2015./16. god.

Prediktivnim modelom koji se zasniva na jednadžbi (11 i 12) izračunate su vrijednosti svojstva energije tijesta kroz dvije godine; 2015 i 2016, te je tako validiran prediktivni model. Rezultati koji su dobiveni tim izračunom uspoređeni su s mjerenim vrijednostima svojstva za navedene dvije godine. Dobivena razlika između izmjerenih vrijednosti i prediktivnim modelom izračunatih vrijednosti svojstva energije tijesta je 33,54%, što govori da je točnost modela 66,46%. S obzirom na to da je puno veća točnost prvog modela gdje je izračunata sposobnost upijanja vode, znači da je moguće s većom vjerojatnosti izračunati sposobnost upijanja vode nego energiju tijesta pomoću ovakvog prediktivnog modela.

**Tablica 12** Prikazan odnos između prediktivnim modelom izračunatih vrijednosti i izmjerenih vrijednosti svojstva energije tijesta (E)

| H                     | E_model | E_mjereno | Razlika<br>(mjereno – model) | Razlika<br>(%) |
|-----------------------|---------|-----------|------------------------------|----------------|
| 2015                  | 65,36   | 92,63     | 27,37                        | 34,67          |
| 2016                  | 96,32   | 69,46     | -26,86                       | 32,41          |
| PROSJEČNA RAZLIKA (%) |         |           |                              | 33,54          |

H = eng. *harvest*, E = eng. *dough energy* (cm<sup>2</sup>)

### 4.2.3. Prediktivni model za izračunavanje maksimalnog otpora (RMAX)

**Tablica 13** Regresijski koeficijenti metode najmanjih kvadrata (PLS) za izračun zavisne varijable RMAX

| Intercept   | Y         | Y <sup>2</sup> | HL          | HL <sup>2</sup> | TKW        | TKW <sup>2</sup> | P           | P <sup>2</sup> | WG         | WG <sup>2</sup> |
|-------------|-----------|----------------|-------------|-----------------|------------|------------------|-------------|----------------|------------|-----------------|
| 7127,512503 | -0,020023 | -0,000002      | -165,413264 | 1,028588        | -34,097427 | 0,591993         | -711,792755 | 25,075052      | 352,447360 | -5,536516       |

Intercept = eng. *interception* (slobodni član u jednadžbi koji predstavlja sjecište regresijskog pravca i ordinatne osi), Y = eng. *yield* (kg/ha), HL = eng. *hectolitre* (kg), TKW = eng. *thousandkernelweight* (g), P = eng. *protein* (%), WG = eng. *wetgluten* (%)

Pomoću regresijskih koeficijenata konstruirane su jednadžbe za izračun svojstva maksimalnog otpora. Prediktivni matematički model za izračun svojstva maksimalnog otpora za 2015. i 2016. prikazuju jednadžbe 13 i 14:

$$RMAX_{15} = \text{Intercept} + Y \times Y'_{15} + Y^2 \times Y'^2_{15} + HL \times HL'_{15} + HL^2 \times HL'^2_{15} + TKW \times TKW'_{15} + TKW^2 \times TKW'^2_{15} + P \times P'_{15} + P^2 \times P'^2_{15} + WG \times WG'_{15} + WG^2 \times WG'^2_{15} \quad (13)$$

$$RMAX_{16} = \text{Intercept} + Y \times Y'_{16} + Y^2 \times Y'^2_{16} + HL \times HL'_{16} + HL^2 \times HL'^2_{16} + TKW \times TKW'_{16} + TKW^2 \times TKW'^2_{16} + P \times P'_{16} + P^2 \times P'^2_{16} + WG \times WG'_{16} + WG^2 \times WG'^2_{16} \quad (14)$$

$Y'_{15/16}$  = prosječna vrijednost prinosa pšenice 2015./16. godine,  $HL'_{15/16}$  = prosječna vrijednost hektolitarske mase 2015./16. god.,  $TKW'_{15/16}$  = prosječna vrijednost apsolutne mase pšenice 2015./16. god.,  $P'_{15/16}$  = prosječna vrijednost udjela proteina 2015./16. god.,  $WG'_{15/16}$  = prosječna vrijednost količine vlažnog glutena 2015./16. god.

Prediktivnim modelom koji se zasniva na jednadžbi (13 i 14) izračunate su vrijednosti svojstva maksimalnog otpora kroz dvije godine; 2015 i 2016, te je tako validiran prediktivni model. Rezultati koji su dobiveni tim izračunom uspoređeni su s mjerenim vrijednostima svojstva za navedene dvije godine. Dobivena razlika između izmjerenih vrijednosti i prediktivnim modelom izračunatih vrijednosti svojstva energije tijekom je 33,90%, što govori da je točnost modela 66,10%. Zapaženo je da također u ovom slučaju puno veća točnost prvog modela, gdje je izračunata sposobnost upijanja vode, što znači da je s većom vjerojatnosti moguće izračunati sposobnost upijanja vode nego maksimalni otpor pomoću ovog prediktivnog modela.

**Tablica 14** Prikazan odnos između prediktivnim modelom izračunatih vrijednosti i izmjerenih vrijednosti svojstva maksimalnog otpora (RMAX)

| H                     | RMAX_model | RMAX_mjereno | Razlika<br>(mjereno – model) | Razlika<br>(%) |
|-----------------------|------------|--------------|------------------------------|----------------|
| 2015                  | 340,29     | 422,46       | 82,17                        | 21,55          |
| 2016                  | 498,25     | 311,08       | -187,17                      | 46,25          |
| PROSJEČNA RAZLIKA (%) |            |              |                              | 33,90          |

H = eng. *harvest*, RMAX = eng. *maxresistance* (EJ)

### 4.3.PCA METODA – Analiza glavnih komponenti

Kemometrijskom statističkom analizom glavnih komponenti obrađen je skup podataka u razdoblju od 10 godina. Statistička analiza pod 4.1. odrađena je na 12 godina zbog bolje preglednosti dinamike promjene svojstava na što više godina, a PCA i CA metode su kroz programski paket *Statistica ver. 13* izvedene na 10 godina, od 2005 – 2014.

Tablica 15 prikazuje 22 svojstva od 24 kultivara te njihove svojstvene vrijednosti, postotak ukupne varijance, kumulativnu svojstvenu vrijednost i postotak kumulativne varijance.

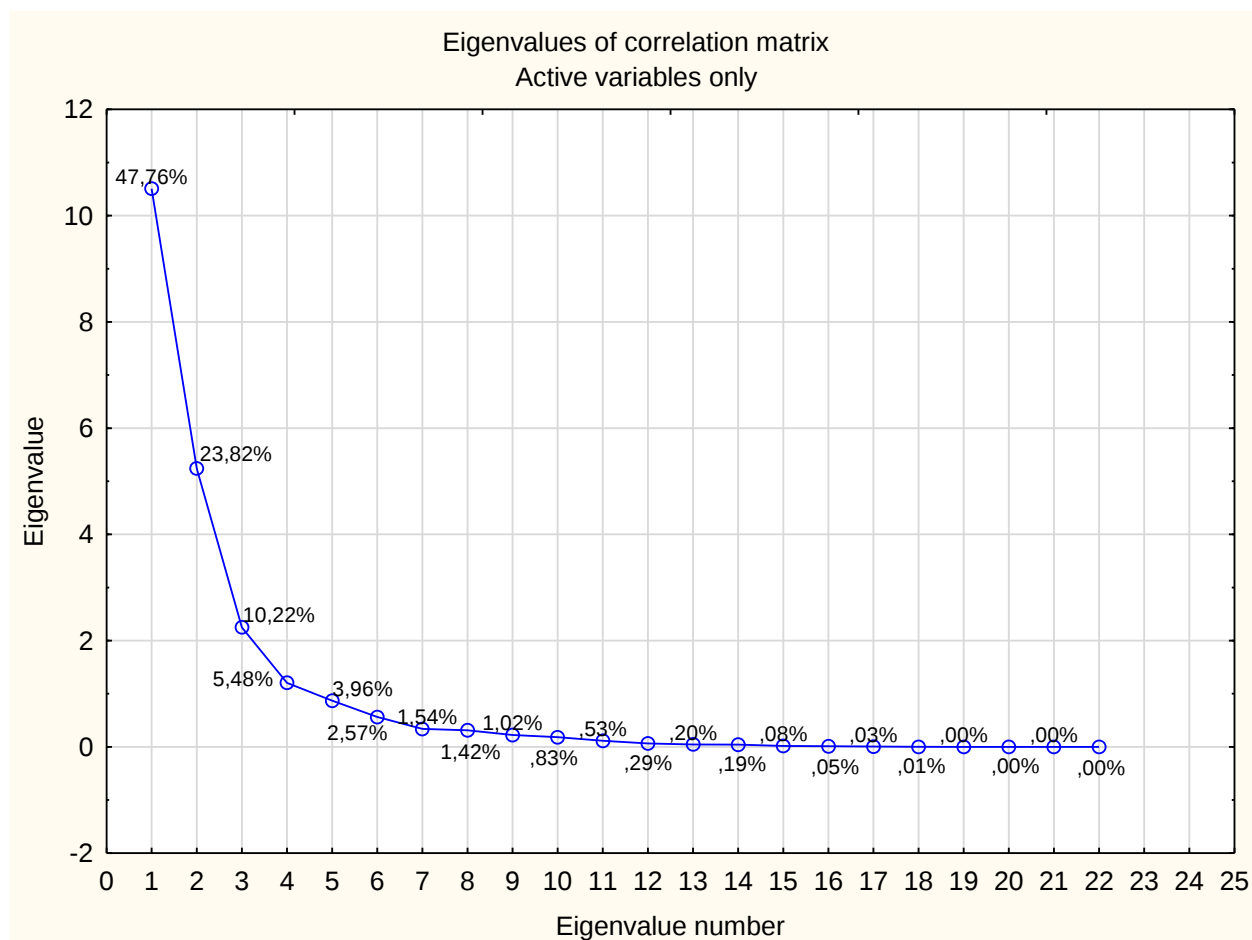
Slika 17 prikazuje grafički prikaz postotka ukupne varijance.

Slika 18 prikazuje grafički prikaz grupiranja svojstava u prve dvijefaktorske ravnine

**Tablica 15** Vrijednosti korelacijske matrice iz programskog paketa *Statistica ver. 13*

| Redni broj svojstva | Svojstvena vrijednost | Udio ukupne varijance (%) | Kumulativna svojstvena vrijednost | Kumulativna varijanca (%) |
|---------------------|-----------------------|---------------------------|-----------------------------------|---------------------------|
| 1                   | 10,50738              | 47,76083                  | 10,50738                          | 47,7608                   |
| 2                   | 5,24015               | 23,81886                  | 15,74753                          | 71,5797                   |
| 3                   | 2,24913               | 10,22333                  | 17,99667                          | 81,8030                   |
| 4                   | 1,20607               | 5,48215                   | 19,20274                          | 87,2852                   |
| 5                   | 0,87136               | 3,96073                   | 20,07410                          | 91,2459                   |
| 6                   | 0,56436               | 2,56525                   | 20,63846                          | 93,8112                   |
| 7                   | 0,33844               | 1,53838                   | 20,97690                          | <b>95,3495</b>            |
| 8                   | 0,31259               | 1,42085                   | 21,28949                          | 96,7704                   |
| 9                   | 0,22445               | 1,02021                   | 21,51393                          | 97,7906                   |
| 10                  | 0,18223               | 0,82834                   | 21,69617                          | 98,6189                   |
| 11                  | 0,11575               | 0,52615                   | 21,81192                          | 99,1451                   |
| 12                  | 0,06368               | 0,28944                   | 21,87559                          | 99,4345                   |
| 13                  | 0,04465               | 0,20295                   | 21,92024                          | 99,6375                   |
| 14                  | 0,04272               | 0,19419                   | 21,96297                          | 99,8317                   |
| 15                  | 0,01697               | 0,07715                   | 21,97994                          | 99,9088                   |
| 16                  | 0,01131               | 0,05142                   | 21,99125                          | 99,9602                   |
| 17                  | 0,00736               | 0,03347                   | 21,99861                          | 99,9937                   |
| 18                  | 0,00117               | 0,00533                   | 21,99979                          | 99,9990                   |
| 19                  | 0,00018               | 0,00080                   | 21,99996                          | 99,9998                   |
| 20                  | 0,00002               | 0,00009                   | 21,99998                          | 99,9999                   |
| 21                  | 0,00001               | 0,00007                   | 22,00000                          | 100,0000                  |
| 22                  | 0,00000               | 0,00001                   | 22,00000                          | 100,0000                  |

Udio ukupne varijance nakon sedme glavne komponente iznosi 1,54% a vrijednost kumulativne varijance iznosi 95,35%.



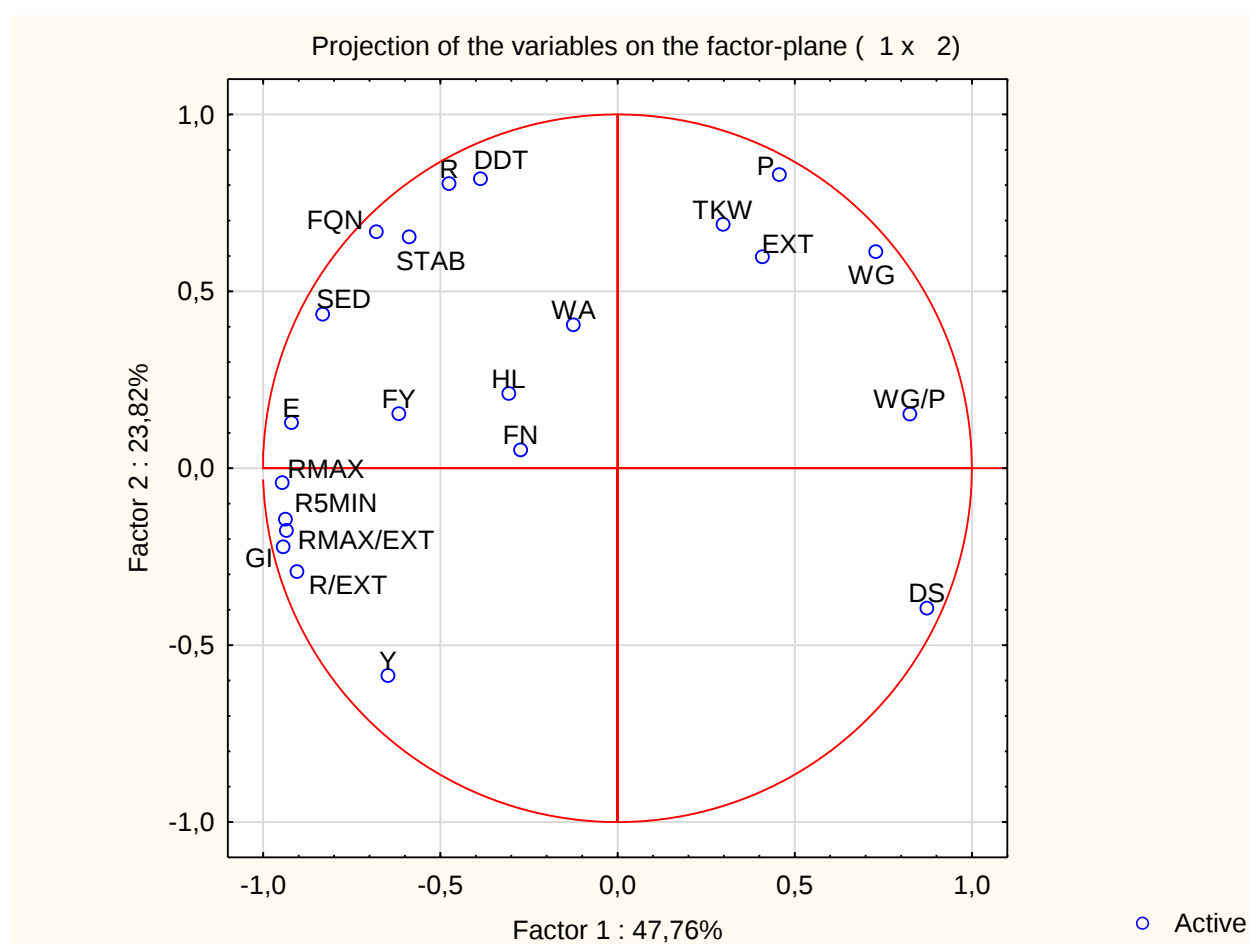
**Slika 15** Vrijednosti postotka ukupne varijance glavnih komponenta

(eng. *Eigenvalues of correlation matrix*, svojstvene vrijednosti korelacijske matrice)

(Izvor slike: Statistica ver. 13)

Grupiranjem svojstva na ovakav način, utvrđeno je da se neki podaci slažu za korelacijskim koeficijentima između svojstava odnosno varijabli.

Slikom je prikazano grupiranje u prve dvije faktorske ravnine nakon kojih je opisano 71,58% ukupne varijabilnosti svojstava.



**Slika 16** Grupiranje svojstava u prve dvije faktorske ravnine

(eng. *Projection of the variables on the factor plane, projiciranje varijabli na faktorskoj ravnini* )

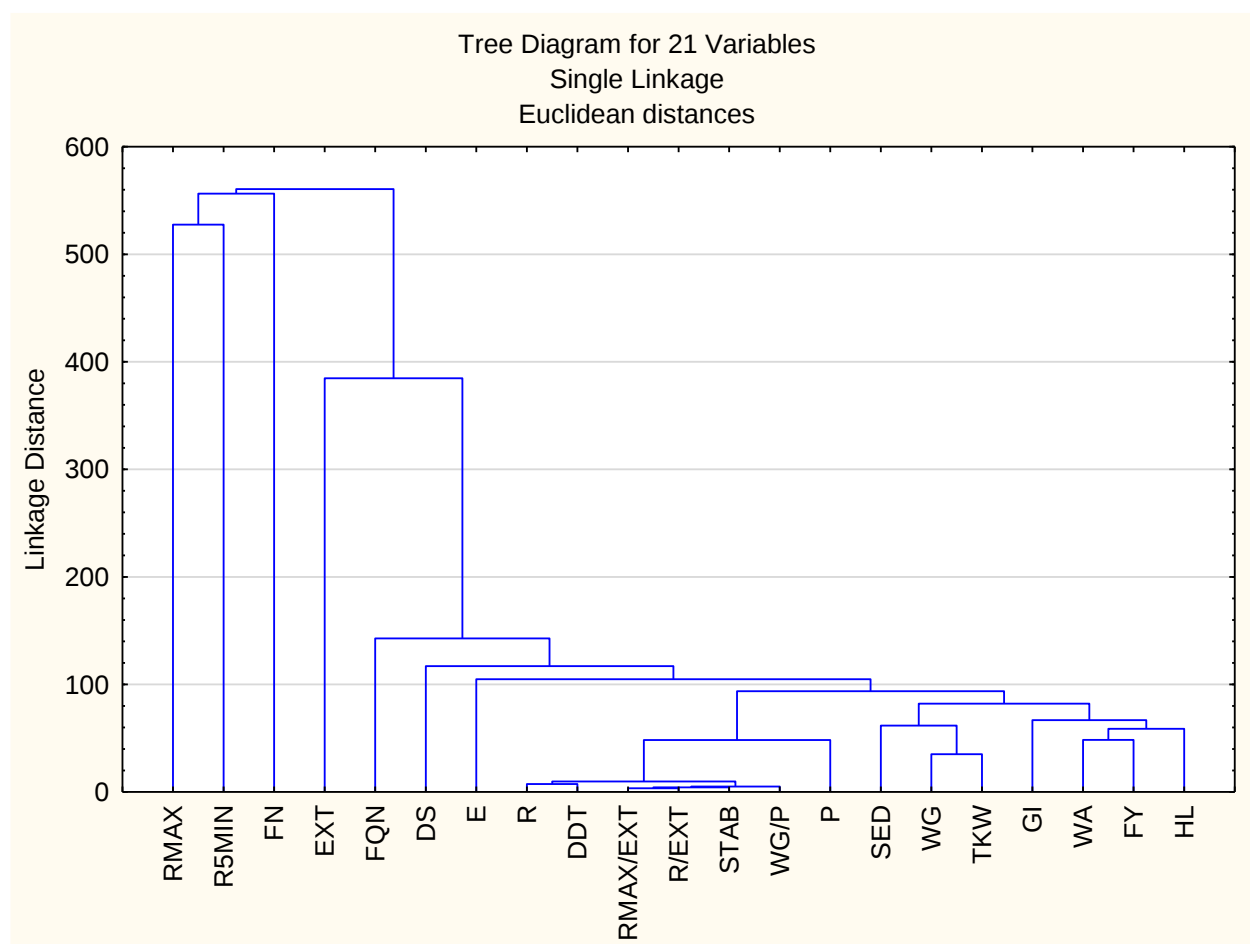
(Izvor slike: Statistica ver. 13)

#### 4.4. CA METODA – Klaster analiza

Vrijednosti za prinos pšenice (Y) nisu uvrštene u dendogram zbog njihovog reda veličine ( $10^3$ ).

Trećom kemometrijskom analizom, klaster analizom, klasificirano je 21 svojstvo u tzv. dendogramu te je opažena međusobna povezanost svojstava. Na dendogramu se mogu zapaziti slične promjene svojstava i njihovo grupiranje.

Slika 19 prikazuje dendogram klaster analize sa 21 svojstvom.



**Slika 17** Dendogram klasterne analize

(eng. *Tree Diagram for 21 variables*, dendogram za 21 varijablu (svojstvo))

(Izvor slike: Statistica ver. 13)

## **5. RASPRAVA**

## 5.1. Deskriptivna statistika

**Tablica 4** i **Tablica 5** prikazuju vrijednosti svojstava pšeničnog zrna i brašna kroz period od 12 godina i to redom: prinos pšenice, hektolitarska masa, apsolutna masa, udio proteina, udio vlažnog glutena, sposobnost upijanja vode, sedimentacijska vrijednost, gluten indeks, izbrašnjavanje, broj padanja, omjer vlažnog glutena i proteina, vrijeme razvoja tijesta, stabilnost tijesta, otpor tijesta rastezanju, stupanj omekšanja, farinografski broj kakvoće, energija tijeta, otpor kroz pet minuta, rastezljivost, maksimalni otpor, omjer otpora i rastezljivosti, omjer maksimalnog otpora i rastezljivosti te se svojstvo hektolitarske mase slaže s Pravilnikom o žitaricama, mlinskim i pekarskim proizvodima, tjestenini, tijestu i proizvodima od tijesta (NN 78/05).

Deskriptivna statistika izvedena je na vrijednostima iz tablice 1 i tablice 2 te su izračunate vrijednosti: medijana, srednje vrijednosti, standardne devijacije, koeficijenta varijabilnosti te minimumi i maksimumi pojedinih svojstava koji su prikazani u **tablici 6**.

Iz **tablice 6** zapaženo je koje svojstvo ima najveći koeficijent varijabilnosti odnosno koja su svojstva najviše varirala tijekom analiziranog razdoblja a koja su bila stabilna. U nekim istraživanjima su stabilna svojstva npr. hektolitarske mase također slična (Šeremet, 2016).

**Tablica 7** sadrži podatke izračunate za jednadžbe linearne regresije i izračunate koeficijente determinacije. Tako su matematički opisana neka svojstva kroz razdoblje od 12 godina te je prikazana dinamika variranja. Prikazane su vrijednosti koeficijenata determinacije koje su služile da se zaključi koje od navedenih svojstava je najbliže poklapanju sa regresijskim pravcem.

**Slikama 9-13** prikazan je trend promjene odabranih svojstava pšeničnog zrna i brašna tijekom navedenog razdoblja od 12 godina. Objašnjena je dinamika promjene svojstava: prinosa pšenice, hektolitarske mase, apsolutne mase, udjela proteina i udjela vlažnog glutena. Na slikama je zapaženo da neka svojstva variraju tijekom 12 godina (HL, WG, Y) alii da postoje ona koja slabije variraju (P, TKW). U literaturnom izvoru (Web 15) koji pokazuje istraživanje Kanadske vlade također je zapaženo da udio proteina i apsolutna masa zrna variraju tijekom godina ali ne u ekstremnim vrijednostima.

Za razliku od **slike 9** gdje jasno vidimo pad prinosa tijekom godina, u literaturnom izvoru (web 16) u istraživanju američkog USDA zapažamo rast prinosa kukuruza u Brazilu kroz godine, s obzirom na to može se zaključiti da prinos uvelike ovisi o agroklimatskim uvjetima ali i o vrsti žitarice.

Korelacijski odnosi između izmjerenih vrijednosti svojstava objašnjeni su u **tablici 8**. Prikazani koeficijenti korelacije govore koliko je koje svojstvo u korelaciji odnosno kako su međusobno povezane vrijednosti tih svojstava.

Iz **tablice 8** zapaženo je da je vrijednost svojstva prinosa pšenice u velikoj negativnoj korelaciji sa vrijednosti svojstva udjela proteina pšeničnog zrna. Taj podatak slaže se s literaturnim izvorom (Fossati, 2010). Nadalje, utvrđeno je da visoku pozitivnu korelaciju imaju udio proteina i udio vlažnog glutena, što je i logičan slijed te se također slaže s literaturnim izvorom (Horvat i sur., 2012). Vrijednosti apsolutne mase pšenice, udjela proteina, udjela vlažnog glutena, stupnja omekšanja su u niskoj korelaciji sa vrijednosti gluten indeksa, dok je vrlo vjerojatno da povećanjem vrijednosti svojstava prinosa pšenice, sedimentacije i izbrašnjavanja doći će i do povećanja vrijednosti gluten indeksa jer je vidljivo da su u visokoj pozitivnoj korelaciji.

**Slika 14** je tzv. „*box and whisker*“ dijagram i prikazuje raspršenost podataka srednjih vrijednosti tijekom analiziranog razdoblja. Takve vrste dijagrama služe da se opiše raspon podataka jedne varijable odnosno u ovome slučaju jednog svojstva. Na dijagramu je vrlo lako zapaziti vrijednosti koje su uvelike odstupale u nekim godinama od srednje vrijednosti (FQN, FN, E, DS, RMAX, R5MIN). S druge strane neke su bile stabilne i uvijek blizu srednje vrijednosti svojstva (STAB, DDT, WA, HL, TKW) što se slaže s literaturnim izvorom (Šeremet, 2016).

## 5.2. Kemometrijske metode opisivanja skupa podataka

Kemometrijskim dijelom diplomskog rada matematički su povezana analizirana svojstva.

Regresijskom metodom najmanjih kvadrata (PLSR) izvedeni su regresijski koeficijenti pomoću kojih su konstruirane jednadžbe prediktivnih modela.

Kao prediktori kod sva tri modela služile su vrijednosti pet svojstava: prinos pšenice, hektolitarska masa pšenice, apsolutna masa pšenice, udio proteina te udjel vlažnog glutena.

Za predviđanje vrijednosti zavisne varijable sposobnosti upijanja vode (WA) korišten je **1. model**. Rezultati u **Tablici 9** prikazuju vrijednosti regresijskih koeficijenata pomoću kojih su izvedene **jednadžbe 9 i 10** za prediktivni model izračunavanja zavisne varijable svojstva sposobnosti upijanja vode – WA. Validacija modela izvedena je na dvije slijedeće godine, te je u **tablici 10** utvrđeno da je razlika između eksperimentalnih podataka i podataka izračunatih izvedenim prediktivnim modelom jednaka 2,38%, što daje visoku točnost predviđanja svojstva sposobnosti upijanja vode od 97,62%.

Vrijednost svojstva energije tijesta (E) predviđena je **2. modelom**. Nezavisne varijable iste su u sva tri modela. Uvrštavanjem vrijednosti nezavisnih varijabli danih u **tablici 11** u jednadžbe za prediktivni model (**jednadžbe 11 i 12**) predviđene su vrijednosti za svojstvo energije tijesta. Svaki model validiran je na 2015. godini i 2016. godini. Rezultati u **tablici 12** govore da je razlika između mjerenih vrijednosti svojstva za 2015./2016. godinu i prediktivnim modelom izračunatih jednaka 33,54%, što navodi da je točnost modela oko 66%.

U **3. modelu** računato je svojstvo maksimalnog otpora (RMAX). Regresijski koeficijenti prikazani su u **tablici 13**. **Jednadžbama 13 i 14** izveden je prediktivni model predviđanja navedenog svojstva. Maksimalni otpor poslije validacije modela moguće je predvidjeti sa točnošću oko 66% kako je navedeno u **tablici 14**.

Trima modelima zapaženo je da nije moguće svakim prediktivnim modelom s velikom točnosti izračunati željenu zavisnu varijablu s čime se slaže i literaturni izvor (Vasilj, 2016).

Analiza glavnih komponenata prikazana je **tablicom 15** gdje su prikazane svojstvene vrijednosti korelacijske matrice za 22 svojstva od 24 kultivara tijekom 10 godina (2005-2014). Utvrđeno je da je potrebno sedam različitih svojstava za opisivanje 95,35% varijabilnosti analiziranog skupa podataka. Pomoću programskog paketa *statistica ver.13* izračunat je postotak ukupne varijance, kumulativna svojstvena vrijednost i kumulativna varijanca. Prvom glavnom komponentom objašnjeno je 47,76% ukupne varijance, drugom glavnom komponentom objašnjeno je 23,81% ukupne varijance, trećom 10,22 %, četvrtom oko 5,5%, petom oko 4%, šestom oko 2,5%, i sedmom oko 1,5%. Tako je sa sedam glavnih komponenata objašnjeno 95, 35% varijance.

Grafičkim prikazom na **slici 15** prikazan je postotak ukupne varijance pomoću tzv. „*scree plot*“ dijagrama.

**Slika 16** prikazuje grupiranje svojstava u prve dvije faktorske ravnine koje se mogu vidjeti u **tablici 15** i iznose 47,76% i 23,82% te da je pomoću te dvije glavne komponente opisano oko 71,6% ukupne varijance. Na temelju grupiranja svojstava na takav način analizom glavnih komponenata izvedeni su zaključci koja svojstva su međusobno povezana.

Iz **slike 16** vidljivo je da je zajedničko grupiranje onih svojstava koja imaju pozitivnu korelaciju: farinografski broj kakvoće, sedimentacijska vrijednost i stabilnost tijesta. Kao i npr. svojstva: sposobnost upijanja vode, hektolitarska masa i broj padanja. Prinos pšenice i udio proteina ili vlažnog glutena, kao što je već spomenuto nekoliko puta u radu, imaju nisku negativnu korelaciju i obično djeluju obrnuto proporcionalno jedno na drugo. Također, gluten indeks naspram vlažnog glutena djeluje obrnuto proporcionalno, što je u skladu s literaturnim izvorom (Jurković i sur., 2000).

**Slikom 17** objašnjena je treća korištena metoda kemometrije, klaster analiza. Takvom analizom dobiven je dendogram iz kojeg se može očitati ono što je potvrđeno u nekim dijelovima ovog diplomskog rada a poglavito u analizi glavnih komponenata (PCA analizi). Dakle, zapaženo je da su neka svojstva formirana u grupe, što govori da su vrijednosti nekih svojstava povezana pozitivnom korelacijom kao naprimjer udio proteina i apsolutna masa (masa 1000 zrna) što je potvrđeno sličnim istraživanjem literaturnog izvora (Aydin i sur., 2010).

Prinos pšenice kao svojstvo je uvelike povezano sa svim ostalim svojstvima te je zbog svoje visoke vrijednosti izdvojen iz dendograma na **slici 17**.

## **6. ZAKLJUČCI**

Najveće su promjene tijekom analiziranog razdoblja imala svojstva: stabilnost tijesta (>50%), otpor tijesta rastezanju ( $\approx$ 30%), farinografski broj kakvoće (>25%), stupanj omekšanja (>25%) te vrijeme razvoja tijesta (>20%).

Najmanje promjene tijekom 12 godina imale su hektolitarska masa pšenice, sposobnost upijanja vode, gluten indeks te izbrašnjavanje.

Na grafovima trenda promjene odabranih svojstava (linearne regresije) slabo je poklapanje regresijskog pravca s izmjerenim vrijednostima što navodi na zaključak da su promjene nelinearne i ne mogu biti precizno opisane linearnim modelima.

Koeficijentima korelacije izvedeni su zaključci o utjecaju promjene pojedinih svojstava na ostala svojstva i njihovoj međusobnoj povezanosti.

Obrnuto proporcionalan utjecaj prinosa pšenice na udio proteina u zrnu pšenice zapažen u tablici s korelacijskim koeficijentima.

Udio proteina je najvažnije svojstvo za prehrambenu industriju i većinom određuje vrste pšenice pogodne za različite proizvode. Da je upravo tako, zaključuje se po korelacijskim odnosima između udjela proteina u zrnu i onih svojstava koja su bitna za visokokvalitetno tijesto pri proizvodnji prehrambenih proizvoda, a pogotovo kruha. To su rastezljivost tijesta, otpora tijesta pri rastezanju, vrijeme razvoja tijesta, stabilnost tijesta i farinografski broj kvalitete.

Poznato je da godine s većim količinama oborina povećavaju hektolitarsku i apsolutnu masu, povećavaju krupnoću zrna te povoljno utječu na opći izgled zrna. S obzirom na to da su ta svojstva u visokoj korelaciji sa svojstvima stabilnosti tijesta, otporom tijesta pri rastezanju, i svojstvom sposobnosti upijanja vode, možemo zaključiti da će se i ona u takvim godinama proporcionalno povećati.

Korelacijskom analizom utvrđen je statistički značajan negativan utjecaj prinosa na apsolutnu masu zrna, udio proteina i vlažnog glutena, te rastezljivost.

S druge strane, prinos je pokazao značajan pozitivan utjecaj na gluten indeks, izbrašnjavanje, energiju tijesta te maksimalni otpor i otpor kroz pet minuta.

Regresijskom analizom primjenom metode najmanjih kvadrata kreirani su prediktivni modeli predviđanja odabranih varijabli (svojstava). Nezavisne varijable ili prediktori su bile iste u sva tri modela: prinos pšenice, hektolitarska masa, apsolutna masa, udio proteina i udio vlažnog glutena.

Utvrđeno je da svaki model ne pokazuje jednaku točnost predviđanja nekog svojstva te da je s jednim modelom moguće predvidjeti vrijednost svojstva s velikom točnosti, a s ostala dva nije.

Modelom 1 predviđena je vrijednost svojstva sposobnosti upijanja vode. Točnost modela je oko 97 % što navodi na zaključak da vrlo precizno primjenom ovog matematičkog modela možemo predvidjeti vrijednost zavisne varijable WA.

Modelom 2 predviđena je vrijednost svojstva energije tijesta (E) te je dobivena srednja točnost od oko 66 % iz koje je vidljivo da ovaj model ima nisku točnost predviđanja vrijednosti varijable E.

Modelom 3 računata je vrijednost svojstva maksimalnog otpora (RMAX). Točnost trećeg modela iznosila je 66 % te je zaključeno da takvim prediktivnim modelom možemo predvidjeti vrijednost maksimalnog otpora s nedovoljnom točnošću za praktičnu primjenu.

Povećanje točnosti navedenih modela moguće je postići povećanjem broja podataka za kreiranje i testiranje (validaciju) modela. Međutim, na varijabilnost podataka najveći utjecaj imaju agrotehnički i klimatski uvjeti pa će raspon temperatura i količine oborina tijekom vegetacije ipak imati presudan utjecaj na raspršenost podataka.

Analiza glavnih komponenata navodi na zaključak da i sa smanjenim brojem varijabli možemo opisati većinu varijabilnosti vrijednosti varijabli u analiziranom skupu podataka. Utvrđeno je da je potrebno matematičke modele kreirati na temelju sedam različitih svojstava i veza među tim svojstvima za opisivanje 95,35% varijabilnosti analiziranog skupa kemometrijskim metodama.

Faktorskom analizom i grafičkim prikazom grupiranja svojstava u prve dvije faktorske ravnine zapaženo je poklapanje sa korelacijskom analizom i koeficijentima korelacije.

Dendogramklasterske analize pokazuje grupiranje svojstava koja se na sličan način mijenjaju, ali se negdje grupiraju i ona koja nisu stvarno povezana unutar pšenice ili brašna. Na temelju toga može se zaključiti da su grupe kreirane prema vrijednostima rezultata, a ne prema svojstvima.

## **7. LITERATURA**

- Ačkar Đ: Izoliranje, modificiranje i karakteriziranje škroba pšenice. Doktorski rad. Prehrambeno-tehnološki fakultet, Osijek, 2010.
- Anić A: Analiza kvalitete krušnog brašna. Završni rad. Veleučilište u Požegi; Poljoprivredni odjel; Preddiplomski stručni studij prehrambena tehnologija, Požega, 2016.
- Aydin N, Sermet C, Mut Z, Bayramoglu H, Ozcan H: Path analyses of yield and some agronomic and quality traits of bread wheat (*Triticum aestivum* L.) under different environments. *African Journal of Biotechnology* 9 (32): 5131.5134, 2010.
- Benšić M, Šuvak N: Primijenjena statistika. Sveučilište J.J. Strossmayera, Odjel za matematiku, Osijek, 2013.
- Belderok B, Mesdag J, Donner D.A. : Bread-making quality of wheat: A century of breeding in Europe. Kluwer academic publishers, Dordrecht, 2000.
- Dapčević Hadnađev T, Pojić M, Hadnađev M, Torbica A: The role of empirical rheology in flour quality control, *Wide Spectra of Quality Control*, Dr. Isin Akyar (Ed.). InTech, DOI: 10.5772/24148, 2011. <https://www.intechopen.com/books/wide-spectra-of-quality-control/the-role-of-empirical-rheology-in-flour-quality-control> [25.11.2017]
- Devčić, K, Tonković Pražić, I, Župan, Ž (2012.): Klaster analiza: primjena u marketinškim istraživanjima. Zbornik radova Međimurskog veleučilišta u Čakovcu, 3(1), 15-22. [https://hrcak.srce.hr/index.php?show=clanak&id\\_clanak\\_jezik=124179](https://hrcak.srce.hr/index.php?show=clanak&id_clanak_jezik=124179) [20.11.2017]
- Đaković Lj: Pšenično brašno. Tehnološki fakultet Novi Sad, Novi Sad, 1980.
- Filipović M: Prijem pšenice u silos „ Slavonija Županja „ d.d. za preradu i promet žitarica 2015. godine. Završni rad. Prehrambeno-tehnološki fakultet, Osijek, 2016.
- Fossati D, Brabant C, Kleijer, G: Yield, protein content, breadmaking quality and market requirements of wheat. *Ertrag vs. Qualität bei Getreide*: 179-182. Tagung der Vereinigung der Pflanzenzüchter und Saatgutkaufleute Österreichs, Raumberg, 2010.
- Hajek D: Utjecaj promjene testnih parametara na rezultate ispitivanja reološkog profila pšeničnog brašna pomoću Brabenderovog GLUTOPEAK-a. Diplomski rad. Prehrambeno-tehnološki fakultet, Osijek, 2014.
- Horvat D: Kvantifikacija bjelančevina glutena RP-HPLC metodom i procjena njihovog utjecaja na pekarsku kakvoću OS kultivara pšenice. Doktorski rad. Prehrambeno-tehnološki fakultet, Osijek, 2005.
- Horvat D, Drezner G, Dvojković K, Šimić G, Španić V, Magdić, D: Sjemenarstvo, Vol.29 No.1/2 pp.5-13 ref.20, Zagreb, 2012.
- Hoseney, R. C. : Principles of cereal science and technology, second edition. The American Association of Cereal Chemists, Inc. St. Paul, Minnesota, USA, 1994.

- Jolliffe I.T. :Principal ComponentAnalysis (Springerseriesinstatistic). SpringerVerlag, New York, 1986.
- Jurković Z, Sudar R, Drezmer G, Horvat D: The HMW glutenin subunit composition of OS wheat cultivars and their relationship with bread-making quality. Cereal Research Communications 28 (3): 271-277, 2000.
- Kaluđerški G, Filipović N: Metode ispitivanja kvalitete žita, brašna i gotovih proizvoda. Tehnološki fakultet Novi Sad, Novi Sad, 1998.
- Kljusurić S: Uvod u tehnologiju mljevenja pšenice.Metković, 2000.
- Mathias O: Chemometrics: Statistics and Computer ApplicationinAnalyticalChemistry. Wiley – VCH VerlangGmbH&KgaA, Weinheim, 2007.
- MPS, Ministarstvo poljoprivrede RH: Pravilnik o parametrima kvalitete i kvalitativnim klasama pšenice u otkupu pšenice roda 2017. godine. Narodne novine 64/17, 2017.
- Pecina M: Metode multivarijantne analize-osnove, Interna skripta. Agronomski fakultet, Sveučilište u Zagrebu, Zagreb, 2006.
- Pravilnik o žitaricama, mlinskim i pekarskim proizvodima, tjestenini, tijestu i proizvodima od tijesta (NN78/2005)
- Prehrambeno-tehnološki fakultet Osijek, Katedra za tehnologiju ugljikohidrata, Katedra za tehnologiju prerade žitarica: Tehnologija prerade sirovina bilnog podrijetla I; Uvod. PTF, Osijek, 2016a.
- Prehrambeno-tehnološki fakultet Osijek, Katedra za tehnologiju ugljikohidrata, Katedra za tehnologiju prerade žitarica: Tehnologija prerade sirovina bilnog podrijetla I; Pekarstvo sirovine. PTF, Osijek, 2016b.
- Prehrambeno-biotehnološki fakultet Zagreb, Kemija i tehnologija žitarica, Upute za laboratorijske vježbe. PBF, Zagreb, 2010.
- Romesburg H.C. : Cluster Analysis for Researchers. LULU Press, North Carolina, 2004.
- Šeremet, J: Varijabilnost agronomskih svojstava i pokazatelja pekarske kakvoće kod F<sub>4</sub> potomstva pšenice. Diplomski rad. Agronomski fakultet u Zagrebu, Zagreb, 2016.
- Ugarčić-Hardi Ž: Tehnologija proizvodnje i prerade brašna, Opći dio i skladištenje žitarica, Interna skripta. Prehrambeno-tehnološki fakultet, Osijek, 1999a.
- Ugarčić-Hardi Ž: Tehnologija proizvodnje i prerade brašna, Pekarstvo, Interna skripta. Prehrambeno-tehnološki fakultet, Osijek, 1999b.
- Vasilj I: Kemometrijski model zavisnosti svojstava kvalitete pšeničnog zrna i brašna. Diplomski rad. Prehrambeno-tehnološki fakultet, Osijek, 2016.

- Web 1 : Autor nepoznat, [https://www.ibm.com/support/knowledgecenter/hr/SSEP7J\\_10.2.0/com.ibm.swg.ba.cognos.ug\\_cr\\_rptstd.10.2.0.doc/c\\_id\\_desc\\_stats.html#id\\_desc\\_stats](https://www.ibm.com/support/knowledgecenter/hr/SSEP7J_10.2.0/com.ibm.swg.ba.cognos.ug_cr_rptstd.10.2.0.doc/c_id_desc_stats.html#id_desc_stats) [02.12.2017.]
- Web 2: Autor nepoznat, <http://www.statsoft.com/Textbook/Partial-Least-Squares> [02.12.2017.]
- Web 3: Autor nepoznat, <http://www.speciation.net/Database/Instruments/Foss-AS/Infratec-1241-Grain-Analyzer-;i908> [06.12.2017.]
- Web 4: [http://bkovacic.weebly.com/uploads/7/4/0/7/7407552/3.1. osnovni pojmovi u des kriptivnoj statistici.pdf](http://bkovacic.weebly.com/uploads/7/4/0/7/7407552/3.1._osnovni_pojmovi_u_des_kriptivnoj_statistici.pdf) [02.12.2017]
- Web 5: Srećec S: Općenita fizikalna svojstva ratarskih proizvoda. Visoko gospodarsko učilište u Križevcima, <https://www.vguk.hr/download.php?downloadParams=studnewsfile|990> [05.12.2017.]
- Web 6: <http://balagan.info/wp-content/uploads/Winter-Wheat-Growth-Cycle.jpg>
- Web 7: <https://www.konzum.hr/klik/#!/products/50009190/mlineta-glatko-brasno-t-550-2-kg>, <https://nutristo.com/proizvodi/Psenicno-ostro-brasno-Podravka/908>, <http://www.zitoprodukt.com/industrijsko.html>
- Web 8: <http://www.fins.uns.ac.rs/index.php?page=Pilot-postrojenje-za-postharvest-tehnologije-zrnastih-kultura-i-mlinarstvo>
- Web 9: <http://www.speciation.net/Database/Instruments/Foss-AS/Infratec-1241-Grain-Analyzer-;i908>
- Web 10: <http://www.mbkomerc.com/delatnost/usluge/laboratorija/>
- Web 11: [https://www.researchgate.net/figure/Example-of-a-farinogram-9\\_292894284](https://www.researchgate.net/figure/Example-of-a-farinogram-9_292894284)
- Web 12: <https://www.brabender.com/en/food/products/rheometers/inspect-rheological-dough-properties-extensograph-e/>
- Web 13: <https://www.realagriculture.com/2015/03/wheat-school-28-new-wheat-varieties-recommended-for-registration-with-customer-requirements-top-of-mind/>
- Web 14: <http://www.grainscanada.gc.ca/barley-orge/harvest-recolte/2017/qbsm17-qosm17-3-en.html>
- Web 15: <https://www.ers.usda.gov/data-products/chart-gallery/gallery/chart-detail/?chartId=77333>