

RELAȚIA DINTRE PARAMETRII DE CALITATE AI GRÂULUI DETERMINAȚI PRIN SPECTROSCOPIE ȘI PRIN METODA REOLOGICĂ

THE RELATIONSHIP BETWEEN WHEAT QUALITY PARAMETERS USING SPECTROSCOPY AND RHEOLOGICAL METHODS

CRISTINA MIHAELA MARINCIU¹ ȘI GABRIELA ȘERBAN¹

Abstract

Winter wheat samples were evaluated during three years (2015-2017) for quality parameters, with two different methods: Near-infrared spectroscopy (NIR), using Foss 1241 and rheological analysis, using Reomixer. The wheat samples used in this study are breeding lines in F3-F5. The parameters estimated by Foss 1241 were: protein content, wet gluten, Zeleny sedimentation, W – tenacity of dough and hardness. The parameters estimated by Reomixer were: bread volume, peak height, peak time, breakdown and end width of curve. Correlation coefficients were calculated between all these parameters. We also calculated correlation between the qualitative parameters and thousand kernel weight. In all three years we obtained some significant correlations either between the parameters measured by the same method and between the parameters measured by the two different methods. The data obtained recommends NIR technique to be used as a tool in selection of winter wheat breeding lines with improved quality.

Cuvinte cheie: grâu comun, parametrii de calitate, Reomixer, analizor de boabe NIR, corelații.

Keywords: winter wheat, quality parameters, Reomixer, NIRS, correlations.

INTRODUCERE

Grâul este una dintre culturile folosite cel mai mult în alimentația umană. Calitatea grâului este determinată de o combinație de mai mulți parametri. Pentru a determina calitatea finală a produsului trebuie evaluate caracteristici multiple ale bobului, făinii și aluatului. Cele mai obișnuite caractere evaluate în programele de ameliorare, pentru determinarea calității grâului, sunt morfologia bobului, tăria bobului, conținutul de proteine, proprietățile glutenului. Glutenul joacă un rol cheie în determinarea calității de panificație, conferind capacitatea de absorbție a apei, vâscozitatea și elasticitatea aluatului (Wieser, 2007). În general, cu cât conținutul de proteine este mai ridicat, cu atât

¹ I.N.C.D.A. Fundulea. E-mail: cristinamarinciu77@gmail.com

timpul de formare a glutenului este mai mare. Conținutul de proteine și de gluten nu este însă suficient pentru o caracterizare completă a calității făinii de grâu, foarte util este să se determine valoarea indicelui de sedimentare. Valoarea indicelui de sedimentare depinde de compoziția proteinelor, dar este corelată și cu conținutul de proteine. Un alt parametru important în determinarea calității de panificație a grâului este tăria bobului care are un efect semnificativ asupra unor proprietăți tehnologice, cum ar fi capacitatea de cernere, capacitatea de sortare a șrotului, afectarea amidonului în timpul măcinatului, susceptibilitatea la enzimele amilolitice, fermentabilitate îmbunătățită, absorbția apei din făină și o valoare îmbunătățită de coacere a pâinii produse (Gross și colab., 2004; Salmawicz și colab., 2012).

Caracteristicile de calitate ale grâului, fie la boabe, fie la făină, pot fi măsurate printr-o serie de teste cantitative și calitative. Există metode standard de determinare a parametrilor de calitate, dar acestea sunt, în general, dificil de efectuat și necesită timp.

Comportarea aluatului la frământare poate fi analizată cu aparatul Reomixer, care este un aparat de tip mixograf, iar curbele de mixare produse sunt în acord cu rezultatele obținute ale mixografului clasic cu peniță (Bolin, 2007). Reomixerul oferă date despre calitatea făinii, practic, rapid și folosind cantități mici de făină (Anderson, 2004; Maradin, 2012). Parametrii de frământare ai Reomixer-ului s-au dovedit a fi utili pentru estimarea volumului pâinii, utilizând analiza multivariată (Wikström și Bolin, 1996). Mai târziu, Wikström și Bolin (2007) au arătat că volumul pâinii poate fi prezis cu explicarea a 91% din varianța totală, folosind 5 parametri derivați din curba de frământare la Reomixer. Pe de altă parte, dincolo de corelarea acestora cu volumul pâinii, proprietățile de frământare sunt obiective importante în procesul de ameliorare.

Metoda spectroscopică NIR poate fi folosită ca o metodă rapidă, precisă și nedestructivă pentru estimarea mai multor parametri de calitate, ceea ce o face să fie de mare interes pentru amelioratori. Delwiche și Weaver (1994) au prezis absorbția apei, timpul de mixare, nota la coacere și toleranța la mixare prin spectrul NIR. Pawlinsky și Williams (1998) au putut prezice parametrii de calitate la grâu pentru identificarea materialului potrivit pentru avansarea în programul de ameliorare. Sisson și colaboratorii (2006) au folosit spectrul NIR la liniile de ameliorare de grâu dur pentru predicția caracteristicilor de calitate în programul de ameliorare. Hruskova și Famera (2003) au folosit spectrul NIR pentru selecția cantitativă bazată pe conținutul de proteine și umiditate, cenușă și gluten umed. Salmawicz și colaboratorii (2012) au arătat că rezultatele analizelor moleculare au fost în acord cu cele determinate prin metoda NIR, în aprecierea tăriei bobului. De asemenea, tăria bobului a fost corelată semnificativ cu conținutul de gluten umed și indicele de sedimentare, ca și cu o serie de parametri reologici și producția de pâine.

Obiectivul acestei cercetări a fost evaluarea acurateții determinărilor cu metoda NIR, pentru caracteristicile de calitate, pe probe de boabe de grâu de toamnă, în vederea obținerii de informații utile care să ajute în realizarea unei presiuni de selecție eficiente în materialul de ameliorare de grâu comun aflat în primele verigi ale procesului de ameliorare.

MATERIAL ȘI METODE

Materialul genetic analizat provine din primele verigi ale programului de ameliorare, respectiv generațiile F3-F5, testat în câmpul de selecție pe rânduri de 140 cm lungime. Prima selecție s-a făcut în câmp, pe baza aspectului fenotipic pentru principalele caractere agronomice de productivitate și de adaptabilitate, iar în continuare s-a făcut selecția în laborator pe baza analizelor de determinare a principalilor indici de calitate.

S-au analizat genotipurile din 3 ani consecutivi: 220 genotipuri în 2015, 130 genotipuri în 2016 și 165 genotipuri în 2017.

Parametrii de calitate au fost determinați prin două metode bazate pe principii diferite: prin citire în infraroșu (spectroscopic) NIR, cu ajutorul analizorului de boabe Infratec 1241 de la firma FOSS și prin frământare (reologic) cu ajutorul aparatului Reomixer fabricat de Reologen în Lund AB de la firma Bohlin (Suedia), care funcționează după principiul mixografului clasic cu peniță.

Cu analizorul de boabe Infratec 1241 au fost determinați următorii parametri: procentul de proteine, procentul de gluten umed, indicele de sedimentare Zeleny, tenacitatea aluatului – W, tăria bobului.

Cu aparatul Reomixer au fost determinați 16 parametri, dintre care au fost aleși cei mai reprezentativi, și anume: volumul pâinii (estimat pe baza parametrilor „formarea aluatului”, „tăria aluatului”, „formarea inițială”), timpul de formare a aluatului, tăria aluatului, căderea aluatului și elasticitatea aluatului.

Pentru determinarea masei a o mie de boabe s-a folosit aparatul de numărat boabe Contador, din dotarea laboratorului. Din fiecare probă au fost numărate două subprobe de 1000 boabe, au fost cântărite la balanța analitică, apoi s-a făcut media între cele două probe.

Analiza statistică a constat în efectuarea corelațiilor dintre parametrii de calitate determinați prin cele două metode și masa a o mie de boabe.

REZULTATE ȘI DISCUȚII

În cei trei ani a existat o variabilitate largă a parametrilor de calitate determinați prin cele două metode (tabelul 1). Cel mai mare conținut mediu de proteine a fost obținut în 2017 și cel mai scăzut, în 2015. În ceea ce privește volumul pâinii, cea mai mare valoare medie s-a obținut în anul 2016, iar cea mai mică în anul 2017.

Tabelul 1

**Valorile medii și valorile extreme pentru indicii de calitate determinați prin cele două metode:
spectrometric și reologic**

(Average and extreme values for quality indices using the two methods: spectroscopy and rheological)

Caracterul	2015		2016		2017	
	Valori medii	Valori extreme	Valori medii	Valori extreme	Valori medii	Valori extreme
Proteine - Foss	13,7	11,3 - 15,9	14,3	12,4 - 16,0	14,7	13 - 16,6
Gluten umed - Foss	33,3	23 - 40,6	35,3	27,5 - 41,0	35,2	29 - 41,6
Zeleny - Foss	48,4	31,4 - 65,2	48,3	30,3 - 62,6	49,0	33 - 63,4
Tăria aluatului - Foss	284,7	219 - 342	270,3	207 - 327	285,7	201 - 365
Tăria bobului - Foss	67,4	51,4 - 83,1	54,2	23,3 - 77,2	38,5	2,8 - 63
Volumul pâinii - Reomixer (cm ³)	937,5	645 - 1219	944,9	758 - 1147	884,7	597 - 1150
Timpul de formare a aluatului - Reomixer	5,3	1,8 - 10	2,8	1,7 - 5	4,3	1,47 - 9,98
Tăria aluatului - Reomixer	4,8	3,4 - 6,3	4,9	3,2 - 6,2	4,3	2,61 - 5,72
Căderea aluatului - Reomixer	0,7	0 - 2	1,8	0,6 - 3,2	0,8	0 - 2,22
Elasticitatea aluatului - Reomixer	1,2	0,4 - 1,6	0,5	0,2 - 1,2	0,7	0,22 - 1,21

Au fost calculate corelații între parametrii de calitate determinați prin cele două metode, prin citire în infraroșu (NIR) și prin frământare (reologic). În toți cei trei ani studiați, s-a remarcat o corelație pozitivă foarte semnificativă, mai ales între unii parametri determinați prin aceeași metodă, dar și între unii parametri determinați prin metode diferite (tabelul 2).

Tabelul 2

Corelația dintre parametrii de calitate determinați prin spectroscopie (analizorul Foss) și prin metoda reologică (Reomixer-ul), în 2015-2017
 [The relationship between quality parameters using spectroscopy (FOSS analyzer) and rheological method (Reomixer), in 2015-2017]

2015	Proteine % (Foss)	Gluten umed (Foss)	Zeleny (Foss)	Tenacitatea aluatului (Foss)	Tăria bobului (Foss)	Volumul pâinii (Reomixer)	Timpul de formare (Reomixer)	Tăria aluatului (Reomixer)	Căderea aluatului (Reomixer)	Elasticitatea aluatului (Reomixer)	MMB
Proteine % (Foss)	1										
Gluten umed (Foss)	0,950691	1									
Zeleny (Foss)	0,914699	0,878395	1								
Tenacitatea aluatului (Foss)	0,846217	0,833157	0,731859	1							
Tăria bobului (Foss)	0,270757	0,230634	0,509952	0,281724	1						
Volumul pâinii (Reomixer)	0,733889	0,693069	0,738829	0,600101	0,34381	1					
Timpul de formare (Reomixer)	-0,44862	-0,49512	-0,3241	-0,3492	0,020622	-0,33193	1				
Tăria aluatului (Reomixer)	0,669605	0,651566	0,683992	0,550309	0,323302	0,949246	-0,43749	1			
Căderea aluatului (Reomixer)	0,519679	0,547129	0,433626	0,424981	0,029166	0,506803	-0,84445	0,632211	1		
Elasticitatea aluatului (Reomixer)	-0,19983	-0,24604	-0,04635	-0,13767	0,278693	0,055702	0,791049	-0,04333	-0,69199	1	
MMB	-0,00625	0,035901	0,012767	0,008146	-0,00057	0,032175	-0,07743	0,059839	0,072211	-0,07179	1
N=220	p 1%=0,18										
2016											
Proteine % (Foss)	1										
Gluten umed (Foss)	0,95588	1									
Zeleny (Foss)	0,897795	0,877596	1								
Tenacitatea aluatului (Foss)	0,817403	0,860517	0,804455	1							
Tăria bobului (Foss)	0,260635	0,288869	0,579012	0,410535	1						
Volumul pâinii (Reomixer)	0,43734	0,463063	0,514098	0,563535	0,423941	1					
Timpul de formare (Reomixer)	0,004109	-0,0146	0,031586	0,049486	0,102463	0,197186	1				
Tăria aluatului (Reomixer)	0,298359	0,331471	0,388577	0,418096	0,343386	0,894572	0,032164	1			
Căderea aluatului (Reomixer)	0,202104	0,204771	0,14252	0,148746	-0,05996	0,090498	-0,73347	0,189069	1		
Elasticitatea aluatului (Reomixer)	0,050552	0,066078	0,207133	0,18029	0,420112	0,56083	0,688313	0,506546	-0,6416	1	
MMB	-0,06878	-0,00883	-0,09282	-0,01978	-0,1765	-0,16616	-0,2695	0,020366	0,108811	-0,19415	1
N=130	p 1%=0,23										
2017											
Proteine % (Foss)	1										
Gluten umed (Foss)	0,952057	1									
Zeleny (Foss)	0,876717	0,855099	1								
Tenacitatea aluatului (Foss)	0,807809	0,845549	0,652608	1							
Tăria bobului (Foss)	0,339412	0,366255	0,645664	0,319576	1						
Volumul pâinii (Reomixer)	0,525504	0,616497	0,45479	0,621888	0,267762	1					
Timpul de formare (Reomixer)	-0,15538	-0,09809	-0,14651	0,129632	0,137367	0,034429	1				
Tăria aluatului (Reomixer)	0,375918	0,474487	0,329085	0,424767	0,165385	0,924432	-0,17373	1			
Căderea aluatului (Reomixer)	0,263531	0,226298	0,19176	0,036161	-0,17546	0,310672	-0,77502	0,523165	1		
Elasticitatea aluatului (Reomixer)	-0,03963	0,07983	-0,00701	0,28669	0,261019	0,387833	0,804903	0,215513	-0,63593	1	
MMB	0,125654	0,148367	0,12214	0,102653	-0,01293	-0,04293	-0,05576	-0,00381	-0,05162	0,083974	1
N=165	p 1%=0,20										

Coeficienții scriși cu caractere îngroșate sunt semnificativi pentru p<1%. Valorile subliniate sunt cele mai mari de 0,6. Partea marcată cu galben reprezintă coeficienții de corelație dintre cele două metode de determinare a calității.

Interesant este cum s-au corelat parametri determinați prin cele două metode. Astfel, în toți cei trei ani s-au observat corelații strânse între volumul estimat al pâinii (determinat reologic) și conținutul de proteine, glutenul umed, indicele de sedimentare Zeleny, tenacitatea aluatului (determinați spectroscopic), precum și între tăria aluatului (determinată reologic) și conținutul de proteine, glutenul umed, indicele de sedimentare Zeleny, tenacitatea aluatului (determinați spectroscopic) (figurile 1, 2, 3).

Corelații semnificativ pozitive, dar nu la fel de strânse, s-au observat, în cei trei ani, între volumul pâinii și elasticitatea aluatului (determinate reologic) cu tăria bobului (determinată spectroscopic). De asemenea, tăria bobului (determinată spectroscopic) s-a corelat semnificativ pozitiv și cu tăria aluatului (determinată reologic) în anii 2015 și 2016.

În 2015 s-au obținut corelații semnificativ pozitive, dar nu la fel de strânse, între căderea aluatului (determinată reologic) și conținutul de proteine, glutenul umed, indicele de sedimentare Zeleny, tenacitatea aluatului (determinați spectroscopic). De asemenea, s-a observat o corelație semnificativ negativă între timpul de formare a aluatului (determinat reologic) și conținutul de proteine, glutenul umed, indicele de sedimentare Zeleny, tenacitatea aluatului (determinați spectroscopic).

În toți cei trei ani nu s-a obținut nicio corelație între elasticitatea aluatului (determinată reologic) și conținutul de proteine și indicele de sedimentare Zeleny (determinați spectroscopic), dar nici între tăria bobului (determinată spectroscopic) și căderea aluatului și timpul de formare a aluatului (determinați reologic).

Masa a o mie de boabe nu s-a corelat cu principalii parametri de calitate analizați, fapt ce conduce la posibilitatea de a selecta genotipuri cu calitate de panificație bună, indiferent de mărimea boabelor.

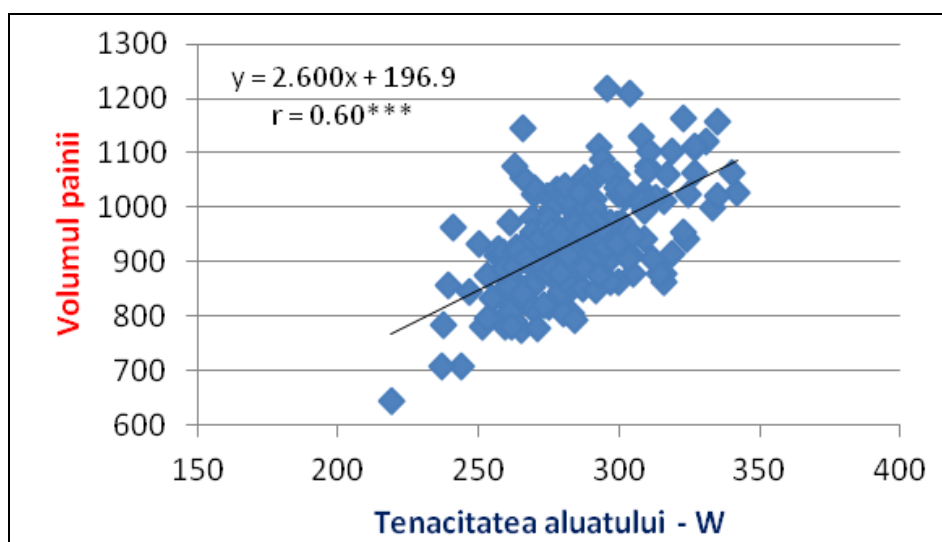


Figura 1 – Corelația dintre tenacitatea aluatului (determinată spectroscopic) și volumul estimat al pâinii (determinat reologic) pentru 220 genotipuri din anul 2015

[The relationship between dough strength (by spectroscopy) and estimated bread volume (by the rheological method) of 220 genotypes tested in 2015]

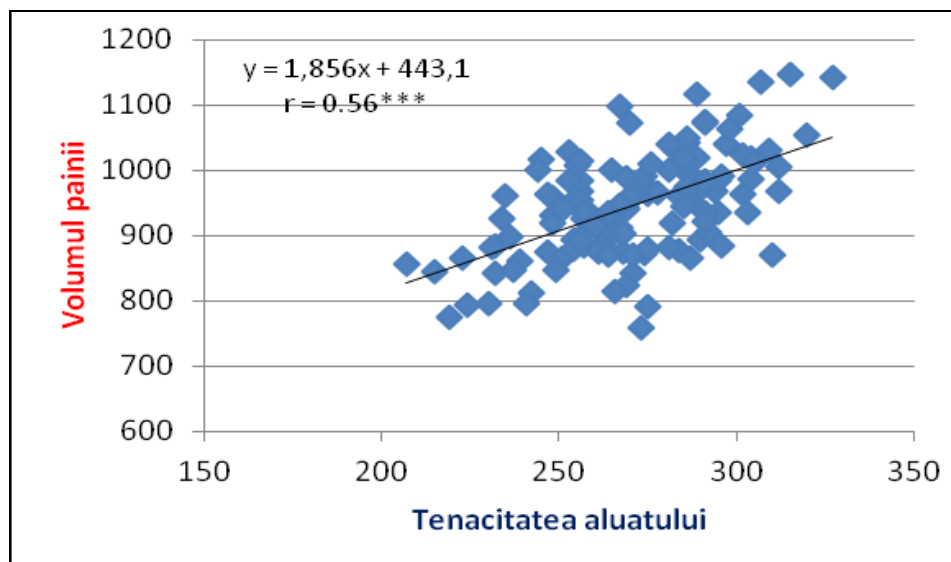


Figura 2 – Corelația dintre tenacitatea aluatului (determinată spectroscopic) și volumul estimat al pâinii (determinat reologic) pentru 130 genotipuri din anul 2016
[The relationship between dough strength (by spectroscopy) and estimated bread volume (by the rheological method) of 130 genotypes tested in 2016]

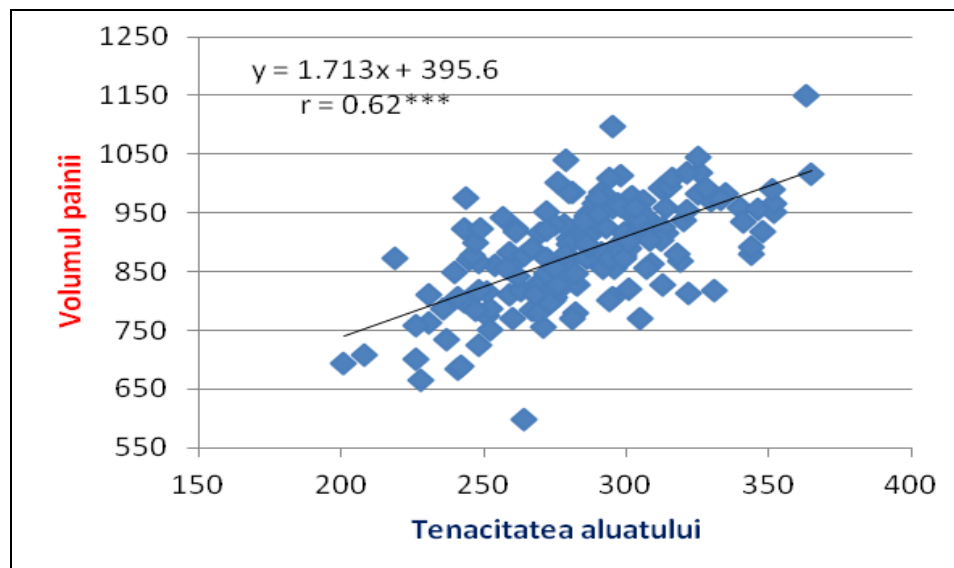


Figura 3 – Corelația dintre tenacitatea aluatului (determinat spectroscopic) și volumul estimat al pâinii (determinat reologic) pentru 165 genotipuri din anul 2017
[The relationship between dough strength (by spectroscopy) and estimated bread volume (by the rheological method) of 165 genotypes tested in 2017]

De-a lungul anilor au fost efectuate numeroase studii privind acuratețea determinărilor de calitate prin metode spectroscopice de citire în infraroșu.

D o w e l l și colaboratorii (2006) au evaluat acuratețea folosirii citirii spectroscopice în infraroșu pentru predicția a 186 parametri legați de bob, măcinare, făină, aluat și calitatea de panificație la 100 de genotipuri de grâu roșu tare de toamnă și 98 genotipuri de grâu roșu tare de primăvară. Determinările efectuate cu aparatul Foss 1241 au avut cel mai ridicat coeficient de determinare (R^2) pentru 46 dintre parametrii analizați, printre care: conținutul de proteine în bob (0,99), conținutul de umiditate în bob (0,96), conținutul de proteine în făină (0,97), indicele de sedimentare (0,70), conținutul de gluten (0,93), volumul pâinii (0,83). Rezultate similare privind predicția pentru conținutul de proteine, gluten umed și timpul de frământare au fost obținute și de P a w l i n s k y și W i l l i a m s (1998). H r u s k o v a și colaboratorii (2001) au raportat că anumite caracteristici ale farinogramei (ex. absorbția apei) nu au putut fi prezise cu ajutorul spectrului NIR, obținând un coeficient de determinare (R^2) mai mic de 0,40. De asemenea, H r u s k o v a și S m e j d a (2003), în cercetările lor, nu au găsit $R^2 \geq 0,25$ pentru niciun parametru determinat de alveograf, posibil și datorită numărului mic de probe. În studiul nostru, tenacitatea aluatului, determinată prin NIR, s-a corelat foarte distinct semnificativ cu volumul pâinii și tăria aluatului determinate reologic, în toți cei trei ani luați în studiu. B a ș l a r și E r t u g a y (2011), în studiul lor privind dezvoltarea modelelor de calibrare NIR pentru conținutul de proteine, gluten umed și uscat și valoarea de sedimentare Zeleny, au obținut rezultate foarte satisfăcătoare pentru acești parametri, și anume: $r = 0,985, 0,976, 0,953$ și, respectiv, $0,924$.

D o w e l l și colaboratorii (2006) consideră că spectrul NIR poate fi folosit cu o acuratețe de $R^2 = 0,97$ pentru conținutul de proteine și umiditate și de $R^2 \geq 0,70$ pentru alți parametri de calitate, printre care indicele de sedimentare, conținutul total de gluten umed, volumul pâinii, extensibilitatea și tenacitatea determinate prin alveograf. Ei consideră că spectrul NIR poate fi folosit pentru predicția mai multor parametri de calitate, în principal datorită corelațiilor ridicate ale acestor parametri cu conținutul de proteine.

CONCLUZII

În urma analizei corelațiilor efectuate între parametrii de calitate determinați prin două metode, și anume prin citire în infraroșu (Fos 1241) și reologic (Reomixer), s-au observat:

- corelații foarte strânse între volumul pâinii (determinat reologic) și conținutul de proteine, glutenul umed, indicele de sedimentare Zeleny, tenacitatea aluatului (determinați spectroscopic), precum și între tăria aluatului (determinată reologic) și conținutul de proteine, glutenul umed, indicele de sedimentare Zeleny, tenacitatea aluatului (determinați spectroscopic);

- o relație slabă s-a constatat între elasticitatea aluatului (determinată reologic) și conținutul de proteine, glutenul umed, indicele de sedimentare Zeleny (determinați spectroscopic); tăria bobului (determinată spectroscopic) și căderea aluatului și timpul de formare a aluatului (determinați reologic);

- lipsa corelației dintre masa a o mie de boabe cu principalii parametri de calitate analizați, conduce la concluzia că este posibilă selectarea de genotipuri cu calitate de panificație bună, indiferent de mărimea boabelor.

Utilizarea acestor metode de analiză, la scară mare, în programele de ameliorare a grâului va permite selectarea de genotipuri care să recombine caracteristici superioare de calitate cu parametrii ridicați de productivitate.

REFERINȚE BIBLIOGRAFICE

- ANDERSON, C., 2004 – *Characterizing Wheat Flour Protein Quality from REOMIXER Traces*. HGCA Project Report 324, Home - Grown Cereals Authority, London, p. 1-75.
- BAŞLAR, M., ERTUGAY, M.F., 2011 – *Determination of protein and gluten quality-related parameters of wheat flour using near-infrared reflectance spectroscopy (NIRS)*. Turk. J. Agric. For., 35: 139-144. DOI: 10.3906/tar-0912-507.
- BOHLIN, L., 2007 – *ReoMixer Online Software Operation Manual*, Beta version 0.9.
- DOWELL, F.E., MAGHIRANG, E.B., XIE, F., LOOKHART, G.L., PIERCE, R.O., SEABOURN, B.W., BEAN, S.R., WILSON, J.D., CHUNG, O.K., 2006 – *Predicting Wheat Quality Characteristics and Functionality Using Near-Infrared Spectroscopy*. Cereal Chem., 83, 5: 529-536. DOI: 10.1094/CC-83-0529.
- DELWICHE, S.R. și WEAVER, G., 1994 – *Bread quality of wheat flour by near-infrared spectrophotometry: Feasibility of modeling*. J. Food Sci., 59: 410-415.
- GROSS, C., BERVAS, E., CHARMET, G., 2004 – *Genetic analysis of grain protein content, grain hardness and dough rheology in a hard×hard bread wheat progeny*. J. Cereal Sci., 40: 93-100.
- HRUSKOVA, M., FAMERA, O., 2003 – *Prediction of wheat and flour Zeleny sedimentation value using NIR technique*. Czech J. Food Sci., 21: 91-96.
- HRUSKOVA, M., SMEJDA, P., 2003 – *Wheat flour dough alveograph characteristics predicted by NIRSystems 6500*. Czech J. Food Sci., 21: 2833.
- HRUSKOVA, M., BEDNAROVA, M., NOVOTNY, F., 2001 – *Wheat flour dough rheological characteristics predicted by NIR Systems 6500*. Czech J. Food Sci., 19: 213-218. Hubbard.
- MARADIN (NEACȘU), F.-A., 2012 – *Posibilități de ameliorare a potențialului calitativ al grânelor românești*. Teză de doctorat. Universitatea de Științe Agronomice și Medicină Veterinară, București.
- PAWLINSKY, T., WILLIAMS, P., 1998 – *Prediction of wheat bread-baking functionality in whole kernels, using near infrared reflectance spectroscopy*. J. Near Infrared Spectrosc, 6: 121-127.
- SALMANOWICZ, B.P., ADAMSKI, T., SURMA, M., KACZMAREK, Z., KAROLINA, K., KUCZYŃSKA, A., BANASZAK, Z., ŁUGOWSKA, B., MAJCHE, M., OBUCHOWSKI, W., 2012 – *The Relationship Between Grain Hardness, Dough Mixing Parameters and Bread-Making Quality in Winter Wheat*. Int. J. Mol. Sci., 13(4): 4186-4201.
- SISSONS, M., OSBORNE, B., SISSONS, S., 2006 – *Application of near infrared reflectance spectroscopy to a durum wheat breeding programme*. J. Near Infrared Spectrosc, 14: 17-25.
- WIESER, H., 2007 – *Chemistry of gluten proteins*. Food Microbiology, 24: 115-119.
- WIKSTRÖM, K. și BOHLIN, L., 1996 – *Multivariate analysis as a tool to predict bread volume from mixogram parameters*. Cereal Chemistry, 73: 686-690.
- WIKSTRÖM, K. și BOHLIN, L., 2007 – *Reomixer™ – Wheat Dough Rheology and Baking Quality by Multivariate Analysis*. <http://www.reologen.se>.