



經濟部標準檢驗局新竹分局 103 年度

自行研究計畫

103HCBSMI-04

酒精汽油快速篩檢之 可行性評估

經濟部標準檢驗局新竹分局第四課 編印

中華民國 103 年 12 月 31 日

經濟部標準檢驗局新竹分局 103 年度研究報告提要表		填表人：陳界佐 填表日期：103 年 12 月 31 日	
研究報告名稱	酒精汽油快速篩檢之可行性評估		
研究單位及人員	第四課陳界佐	研究時間	自 103 年 1 月 1 日 至 103 年 12 月 31 日
報 告 內 容 提 要			
<p>一、研究緣起與目的</p> <p>石化能源所產生的氣體，不但造成空氣污染更擴大溫室效應，造成氣候劇變，因此，必須尋找對於環境保育和經濟發展有利的替代能源，生質能源在這環境下誕生，依據我國再生能源發展條例第三條第二項定義，生質能「指農林植物、沼氣及國內有機廢棄物直接利用或經處理所產生之能源」，其中以生質酒精與生質柴油最為重要。</p> <p>巴西是目前全球發展酒精汽油最成功的國家，其國內加油站沒有提供純汽油，而只供應 E22 酒精汽油(酒精佔汽油成份 22%)或 E93 酒精汽油；美國則是提供 E10 或 E85 的酒精汽油，在歐盟已經容許使用 E85 酒精汽油，可見酒精汽油已是再生能源的發展潮流，而國內台灣中油股份有限公司已分別在台北市及高雄市建置完成 13 站加油站供應 95-E3 酒精汽油，以減少對石化燃料的依賴，並可降低車輛廢氣中的一氧化碳、碳氫化合物等污染物排放量，改善空氣品質。</p> <p>目前本分局已完成建置 NIR 快速篩選油品品質技術，此技術已應用在 92 無鉛汽油、95 無鉛汽油、98 無鉛汽油及柴油等油品分析，惟 95-E3 酒精汽油組成已與一般 95 無鉛汽油組成有明顯的差異，故在近紅外光吸收圖譜會產生明顯改變，已無法用原有的 NIR 快篩技術做油品品質分析，需另建置專屬的 95-E3 酒精汽油分析資料庫以供未來酒精汽油普及化時使用。</p> <p>二、研究方法與過程</p> <p>本次實驗係由中國石油股份有限公司石門供油中心在不同時間內所提供的 150 批 95-E3 酒精汽油，該公司先以傳統油品分析方法 CNS 14474「液態油品密度及比重測定法（數位式密度計法）」檢測密度、CNS 14298「汽油中各種芳香烴測定法（氣相層析法）」檢測苯含量、CNS 14297「汽油中醚類與醇類測定法（氣相層析法）」檢測氧含量、CNS 1218「石油產品常壓蒸餾試驗法」檢測蒸餾溫度（10%蒸餾溫度、50%蒸餾溫度、90%蒸餾溫度、</p>			

終沸點)、CNS 12011「車用燃油震爆性試驗法(研究法)」檢測辛烷值。

利用 NIR 近紅外光光譜儀掃描上述 150 批 95-E3 酒精汽油光譜，使用 Foss NIR Systems 的 Vision 電腦作業軟體將近紅外光譜圖譜進行資料篩選，並將圖譜區分成校正組 (Calibration set)、確證組 (Validation set) 及剔除組 (Outlier set)；校正組 (Calibration set) 光譜利用二階微分及 PLSR 方法進行回歸分析建立檢量線，回歸分析所得到的密度、辛烷值、10%蒸餾溫度、50%蒸餾溫度、90%蒸餾溫度、終沸點、苯含量及氧含量等預測數據，再與該公司實驗室以本局所公告的標準方法所檢測的數值相互比較，來評估以 NIR 紅外光光譜進行酒精汽油的快篩檢測之可行性。

三、研究發現與建議

本實驗所建立的快篩分析方法係利用近紅外光光譜特性並結合油品傳統分析方法的檢測數值，經由數據線性回歸後可得到光譜與傳統分析數值相對應關係，進而用來快速預測分析油品的品質；此種非破壞性的分析方法，不會造成分析樣品的損失，而且一個樣品圖譜就可同時用來預測不同的分析項目品質，明顯縮短分析所需的時間。

汽油是經由不同成分的石化原料或中間產物所摻配而成的混合物，若製程的改變、原油進料或摻配配方比例的改變皆會影響汽油成品油的組成，其品質亦能通過傳統分析方法的要求，惟汽油組成的改變，會影響油品在近紅外光範圍的吸收光譜，此時以近紅外光快篩分析方法來進行油品品質預測將產生很大的誤差，故吸收光譜樣品型態的多寡將影響此快篩分析方法的準確度。

說明：報告提要以 1,500 字為限，且應包括下列 3 部分：

- (一) 研究緣起與目的
- (二) 研究方法與過程
- (三) 研究發現與建議

目次

壹、前言	1
貳、材料與方法	7
參、結果與討論	13
肆、結論	21
伍、參考文獻	22
六、附件	23

圖目次

圖 1. 不同有機分子在近紅外光譜圖譜與拉曼光譜圖之特徵吸收	4
圖 2. 近紅外光光譜儀	7
圖 3. 密度計	8
圖 4. 氣相層析儀	9
圖 5. 自動蒸餾裝置	9
圖 6. Waukesha CFR 引擎	10
圖 7. Lab. 密度檢測值與 NIR 預測值分佈圖	15
圖 8. Lab. 密度檢測值與 NIR 預測值統計分析	15
圖 9. Lab. 辛烷值檢測值與 NIR 預測值分佈圖	15
圖 10. Lab. 辛烷值檢測值與 NIR 預測值統計分析	16
圖 11. Lab. 10%蒸餾溫度檢測值與 NIR 預測值分佈圖	16
圖 12. Lab. 10%蒸餾溫度檢測值與 NIR 預測值統計分析	16
圖 13. Lab. 50%蒸餾溫度檢測值與 NIR 預測值分佈圖	17
圖 14. Lab. 50%蒸餾溫度檢測值與 NIR 預測值統計分析	17
圖 15. Lab. 90%蒸餾溫度檢測值與 NIR 預測值分佈圖	17
圖 16. Lab. 90%蒸餾溫度檢測值與 NIR 預測值統計分析	18
圖 17. Lab. 終沸點檢測值與 NIR 預測值分佈圖	18
圖 18. Lab. 終沸點檢測值與 NIR 預測值統計分析	18
圖 19. Lab. 氧含量檢測值與 NIR 預測值分佈圖	19
圖 20. Lab. 氧含量檢測值與 NIR 預測值統計分析	19
圖 21. Lab. 苯含量檢測值與 NIR 預測值分佈圖	19
圖 22. Lab. 苯含量檢測值與 NIR 預測值統計分析	20

表目次

表 1. 95 無鉛汽油品質要求	1
------------------	---

壹、前言：

一、酒精汽油的發展：

工業革命至今，人類所開發出來的能源，如石油、煤……等石化能源，為人類帶來許多的便利，然而大量燃燒化石能源所產生的氣體，不但造成空氣污染更擴大溫室效應，造成氣候劇變，因此，必須尋找對於環境保育和經濟發展有利的替代能源，生質能源在這環境下誕生。

所謂生質是指由光合作用衍生的生物物質，例如玉米、高粱、小麥等穀類，甘蔗、甜菜、糖漿、澱粉、糖等糖類，以及纖維素等，依據我國再生能源發展條例第三條第二項定義，生質能「指農林植物、沼氣及國內有機廢棄物直接利用或經處理所產生之能源」，其中以生質酒精與生質柴油最為重要；主要原因為依據BP公司2010年統計石油，全世界石油可採年數為45.7年，故未來進口燃料與原物料勢必呈現上漲的走勢。全世界平均約有55%的石油為運輸產業所使用，在美國則約有66%的石油使用在運輸部門。臺灣由於國土較小，機車普遍，以及塑化重工業發達，因此石油用於運輸產業的比例略低，根據經濟部能源局的統計，在臺灣運輸產業約使用全部石油消費的34%，因此開發生質原料轉化技術生產替代化石燃料及其衍生產品，應有經濟效益、分散國內能源及原物料供給風險、環保與永續發展的目的。

酒精汽油是在汽油中填加無水酒精，而所需的酒精來源是由植物提煉出。一般是使用含糖質或澱粉質較高的農作物提煉，例如：甘蔗、玉米、甜高粱…等。首先將植物高溫殺菌之後，磨碎並加入酵母菌，發酵作用之後即產生酒精再將其純化，其特性與汽油相似並具有高辛烷值，可以用來提高汽油的抗爆震，而且酒精的含氧量高，燃燒效率高，所以燃燒時可以減少燃燒不完全所造成的廢氣污染，並且植物在吸收二氧化碳後，可行光合作用轉換成葡萄糖，再繼續製作成酒精，一直循環，因此使用酒精汽油可大量減少石化燃料的消耗量，對於地球氣候變遷溫暖化有減緩的趨勢。

早在1970年代石油危機時，巴西、美國就積極投入生質酒精工業的發展，近年來在CO₂超量排放、全球氣候暖化、國際原油供需不穩定和價格持續上漲等因素影響下，有越來越多的國家投入。2006年全球的生質酒精產量約4千萬公秉，90%生產於巴西和美國。巴西以甘蔗為原料，美國則以玉米為主，生產生質酒精，甘蔗和玉米分別是糖質和澱粉質作物。除了這兩者之外，做為生質酒精原料的作物也包括大麥、小麥、燕麥、稻米等穀類，還有甜菜、甜高粱，以及木薯、甘藷等，以上簡稱為第一代生質酒精。

這幾年因為玉米酒精工廠大量設廠開工，造成玉米價格飆漲，畜牧業受到波及，使得全球糧食短缺而引起恐慌，因此，最近幾年發展的目標是以非糧食作物為原料來生產酒精稱之為第二代生質酒精，也就是以

木質纖維素或纖維質做為生質酒精的原料，包括穀類農作物廢棄物如麥稈、稻稈、玉米稈等，以及農業、都市和建築廢棄物，如蔗渣、舊報紙、木屑、廢木材等，或者成長快速的纖維質作物，如芒草、狼尾草、柳枝稷等，甚至包括海藻類。在美國，為了加速纖維酒精的發展，美國能源部在2007年6月底宣布，未來5年內將提供3個研究中心總共3億7千5百萬美元經費，進行生物燃料研究計畫，目標是改進纖維素轉化為生質酒精的製程，以降低成本。

巴西是目前全球發展酒精汽油最成功的國家，國內加油站沒有提供純汽油，而只供應E22酒精汽油(酒精佔汽油成份22%)或E93酒精汽油；美國則是提供E10或E85的酒精汽油，在歐盟已經容許使用E85酒精汽油，可見酒精汽油已是再生能源的發展潮流。近年來政府推動生質汽、柴油主要用意是以再生能源減少對石化燃料的依賴，並可降低車輛廢氣中的一氧化碳、碳氫化合物等污染物排放量，改善空氣品質，有助於二氧化碳減量，減緩地球暖化現象；中油目前已推出之酒精汽油是95無鉛汽油內添加3% (v/v) 酒精之汽油。燃料用酒精是利用玉米、蔗糖及纖維素等原料，經過發酵所生產的可再生產品。在油品品質方面，添加3%酒精之汽油，完全符合國家標準CNS 12614「車用無鉛汽油」之品質規範要求，因此車輛引擎不需要作任何修改，它在熱值、辛烷值與駕駛性等方面均與傳統汽油沒有差異，亦不會影響車輛駕駛性能。目前台灣中油股份有限公司已分別在台北市及高雄市建置完成13站加油站供應E3酒精汽油，

讓開車族有另一種選擇。

二、研究方向與預期目標:

石油煉製工業所有產品組成均為烯烴類化合物，主要官能基為C-H、C-C、C-O、O-H；酒精汽油添加3%酒精，酒精的化學結構為C₂H₅OH，其官能基與烯烴類化合物類似，推估應適合於近紅外光譜儀(Near infrared spectroscopy, NIR)分析。絕大部分的近紅外光吸收來自大致上n=1~3倍頻(overtones)多座落於780與1800奈米(14285~5555cm⁻¹)之間，而組合頻帶之吸收則多半位於1800與2500奈米(5555~4000 cm⁻¹)的範圍內。

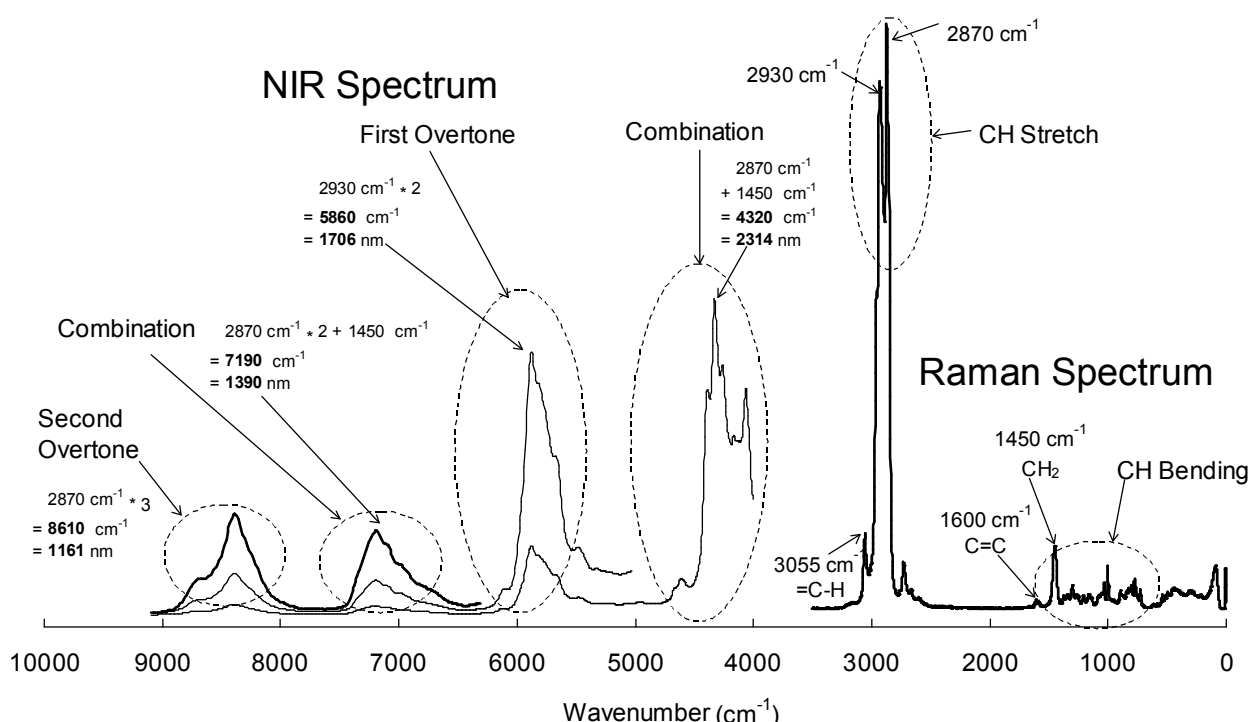


圖1.不同有機分子在近紅外光譜圖譜與拉曼光譜圖之特徵吸收

近紅外光譜的吸收峰帶互相重疊、錯綜複雜，無法和紅外光譜一樣地解

析特定波長與化學結構的關係（如圖1.）。尤其在分析複雜組成的樣品時，傳統單一波長的分析方法難以發揮效用，必須完全依賴化學計量學中的多變量分析技術來描述樣品化性與光譜的相對關係；進行數據分析之前，必須將原始數據經過一連串的前處理以確保光譜品質。常用的技術包括：中心平均化、自動比例化、正常化、自動比例化、正常化、微分、倍數散射修正和傅立葉轉換等。其功能不外乎降低基線平移的影響，加強重疊波帶之解析度等，而選用適當的處理技術需配合樣品種類與光譜特質。

近紅外光光譜儀目前可以快速分析原油、汽油、航空燃油、柴油、潤滑油、渣油和瀝青等的組成及各種物化性質，如：汽油辛烷值、餾程、密度、雷氏蒸汽壓、汽油PIONA組成（石蠟烴，異構烷烴，烯烴，環烷烴和芳香烴）；柴油凝固點、十六烷值、閃點、餾程；瀝青蠟含量等。故本次研究計畫為針對辛烷值95的E3酒精汽油重點檢驗項目，包括密度、辛烷值、蒸餾範圍（10%蒸餾溫度、50%蒸餾溫度、90%蒸餾溫度及終沸點（Final Boiling Point, FBP））、氧含量及苯含量，先以國家標準CNS 14474「液態油品密度及比重測定法（數位式密度計法）」、CNS 12011「車用燃油震爆性試驗法（研究法）」、CNS 14298「汽油中各種芳香烴測定法（氣相層析法）」、CNS 14297「汽油中醚類與醇類測定法（氣相層析法）」及CNS 1218「石油品品常壓蒸餾試驗法」等分析方法求得E3酒精汽油傳統油品品質數據；再利用近紅外光光譜儀掃描相同油品，

累積具代表性數據建立之光譜/數據資料庫，利用數學模式迴歸建立檢量線；此檢量線經確效(Validation)驗證符合可接受之誤差範圍內；即可利用此檢量線預測其他E3酒精汽油之密度、辛烷值、蒸餾範圍（10%蒸餾溫度、50%蒸餾溫度、90%蒸餾溫度及終沸點）、氧含量及苯含量。並依CNS 12614「車用無鉛汽油」，所列適用於車用95無鉛汽油之標準查核油品品質（如表1.）。

品質項目	品質要求	CNS檢驗方法
密度（15℃）	0.720~0.775（g/mL）	CNS 14474
辛烷值（研究法）	>95	CNS 12011
苯含量	<1（% , v/v）	CNS 14298
氧含量	<2.7 ^(a) （% , m/m）	CNS 14297
蒸餾溫度 10%蒸餾溫度 50%蒸餾溫度 90%蒸餾溫度 終沸點	<70（℃） <121（℃） <190（℃） <225（℃）	CNS 1218
註 ^(a) 基於我國環境保護需求”苯含量”品質要求另須符合行政院環境保護署發布之車用汽柴油成分管制標準之規定。		
備考：依中華民國98年7月29日環署空字第0980065735號令修正發布之「車用汽柴油成分管制標準」，E3酒精汽油氧含量標準值為3.24%（m/m）。		

表1. 95無鉛汽油品質要求

貳、材料與方法

一、材料:

(一)油樣:與中國石油股份有限公司石門供油中心合作，定期並隨機取得95E3酒精汽油之樣品，以鐵罐封裝油樣並置入冷藏櫃保存，做為近紅外光光譜儀掃描樣品用。

(二) NIR快速篩檢儀器設備:

1.是由近紅外光光譜儀、作業軟體、電腦等軟、硬設備組合而成

(如圖2.)，分述如下：



圖2. 近紅外光光譜儀

(1)近紅外光光譜儀：Foss NIR Systems XDS，波長範圍400～2500 nm。

(2) 作業軟體：Foss NIRSystems 公司Vision軟體。

(3) 控制電腦：宏碁筆記型電腦。

(三) 傳統油品分析方法檢測設備:

1. 密度計 (如圖3.):

配有U型震盪管之數位式密度計，乾燥空氣導入U型震盪管中，設定恆溫水槽的溫度，等U型震盪管與恆溫水槽達到熱平衡時，因等體積樣品放入U型震盪管的重量不同，產生不同的震盪週期，接著再利用校正的資料來測出樣品的密度。



圖3. 密度計

2. 氣相層析儀 (如圖4.):

以雙管柱氣相層析系統來進行含氧及含苯化合物分離，並以火焰離子化偵檢器 (Flame Ionization Detector, FID) 來完成氧含量與苯含量之定量程序。



圖4.氣相層析儀

3. 自動蒸餾裝置 (如圖5.):

蒸餾裝置的基本元件有蒸餾瓶、冷凝器及與其組合的冷卻槽、作為蒸餾瓶屏障用的防風罩、加熱源、燒瓶支撐架、溫度量測裝置，以及收集蒸餾液用的量筒；此裝置用以量測記錄石油產品之蒸餾溫度與回收量筒內回收的體積量。

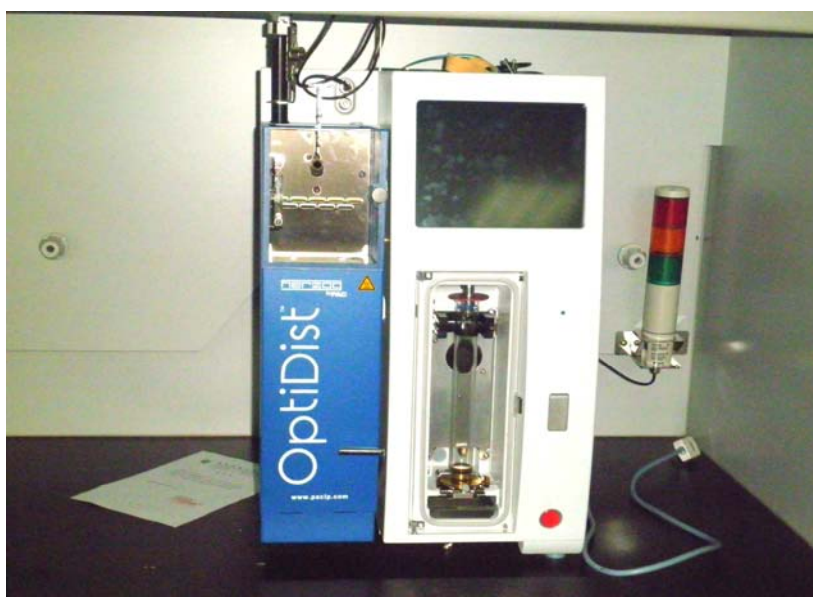


圖5.自動蒸餾裝置

4. 辛烷值量測引擎（如圖6.）：

引擎為單缸並可依油品的辛烷值調整壓縮比（改變汽缸高度）來量測油品的震爆值，並與已知辛烷值標準參考燃料（Primary Reference Fuel, PRF）的震爆值進行內插而求的油品的辛烷值，此款引擎在1931年由美國聯合燃料研究委員會（Cooperative Fuel Research Committee, CFR）設計完成，委由Waukesha公司製造，全球皆使用Waukesha CFR引擎量測辛烷值。

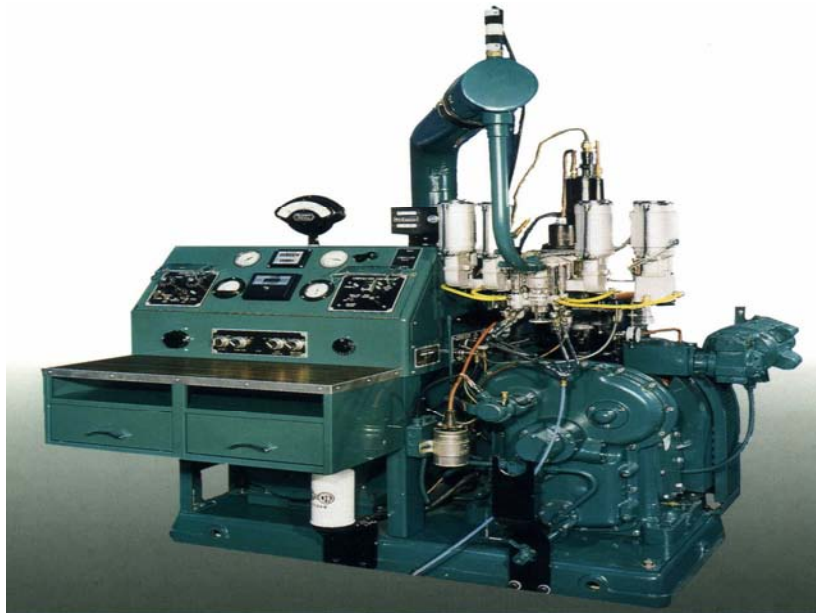


圖6. Waukesha CFR引擎

二、分析方法：

（一）油品傳統化學分析(由中油負責檢測並提供數據)：

將油樣從4°C 冷藏櫃中取出，靜置至室溫，以CNS 14474「液態油品密度及比重測定法（數位式密度計法）」檢測密度（如圖3.）；

以CNS 14298「汽油中各種芳香烴測定法（氣相層析法）」及CNS 14297「汽油中醚類與醇類測定法（氣相層析法）」分別檢測苯含量與氧含量（如圖4.）；以CNS 1218「石油產品常壓蒸餾試驗法」檢測蒸發溫度（如圖5.）；以CNS 12011「車用燃油震爆性試驗法（研究法）」檢測辛烷值（如圖6.）；油品傳統化學分析方法如上所述，請參照國家標準方法。

（二）近紅外光光譜儀分析：

1. 將油樣置於Foss NIR Systems XDS樣品瓶中，以近紅外光光譜儀進行全光譜掃描，掃描波長範圍從400到2500 nm，波長間隔為20 nm。
2. 建立酒精汽油密度、辛烷值、蒸餾範圍（10%蒸餾溫度、50%蒸餾溫度、90%蒸餾溫度及終沸點（Final Boiling Point, FBP））、苯含量及氧含量之近紅外光光譜儀資料庫，結合相同油品的近紅外光光譜及以傳統油品分析方法檢測所的檢測數據，使用電腦作業軟體Vision 將近紅外光光譜圖譜進行自動資料篩選，並將圖譜區分成校正組（Calibration set）、確證組（Validation set）及剔除組（Outlier set），利用二階微分，使用之回歸多項式為二次曲線前處理，處理後之校正組（Calibration set）光譜再利用PLSR方法進行回歸分析建立檢量線，此檢量線經確證（Validation）驗證符合可接受之誤差範

圍內；即可利用此檢量線預測其他95-E3酒精汽油的密度、辛烷值、蒸餾範圍、苯含量及氧含量來進行快篩檢測作業。

參、結果與討論

本次實驗係由中國石油股份有限公司石門供油中心在不同時間內所提供的150批95-E3酒精汽油，經NIR近紅外光光譜儀掃描的得到的光譜，利用Foss NIR Systems的Vision軟體經PLSR方法進行回歸分析所得到的數據，再與該公司實驗室以本局所公告的標準方法所檢測的數值相互比較，來評估以NIR紅外光光譜進行酒精汽油的快篩檢測之可行性。

圖7.、圖9.、圖11.、圖13.、圖15.、圖17.、圖19.、圖21.分別為傳統分析方法之密度、辛烷值、10%蒸餾溫度、50%蒸餾溫度、90%蒸餾溫度、終沸點、氧含量及苯含量檢測數值(代號：Lab.)與其相對應近紅外光光譜預測數值(代號：NIR)的分析結果分佈。

圖8.為密度傳統分析數值 (Lab.) 與近紅外光光譜預測數值 (NIR) 的平均值 (Ave.)、極大值 (Max.)、極小值 (Min.) 及標準偏差 (Stdevp) 統計分析資料，從資料中可看出Lab.檢測數值的平均值、極大值、極小值、標準偏差或全距 (極大值-極小值) 皆與NIR預測值的統計分析資料相當，顯示出以NIR預測油品密度數值具有相當高之準確性，從圖7.的分佈情形亦可得到驗證。

圖10.、圖12.、圖14.、圖16.、圖18.、圖20.、圖22.分別為辛烷值、10%蒸餾溫度、50%蒸餾溫度、90%蒸餾溫度、終沸點、氧含量及苯含量傳統檢測數值(代號：Lab.)與其相對應近紅外光光譜預測數值(代號：NIR)的統計分析資料。在圖10.資料中，辛烷值Lab.檢測數值的標準偏差

(0.09) 與全距 (0.40) 皆小於NIR所預測數值的標準偏差 (0.13) 與全距 (0.67)，所以NIR預測辛烷值的準確性較低，圖9.可看出NIR預測法數值與Lab.檢測數值容易發生over-fitting 或 under-fitting情形，但其預測辛烷值結果仍可符合CNS國家標準要求並不會發生不合格的誤判。圖12.10%蒸餾溫度、圖14.50%蒸餾溫度、圖16.90%蒸餾溫度及圖18.終沸點Lab.檢測數值的標準偏差與全距皆大於NIR預測數值的標準偏差與全距，故從圖11.、圖13.、圖15.、圖17.顯示出NIR預測數值有時與Lab.檢測數值會發生小偏離，但NIR預測數值的波動變異明顯小於Lab.檢測數值，所以NIR在10%蒸餾溫度、50%蒸餾溫度、90%蒸餾溫度及終沸點的預測結果數值的不準確度明顯在可接受範圍內。圖20.氧含量及圖22.苯含量Lab.檢測數值的標準偏差與全距與NIR預測值的統計分析資料相當，顯示出以NIR預測油品氧含量及苯含量數值具有相當高之準確性，從圖19.及圖21的分佈情形亦可得到驗證。

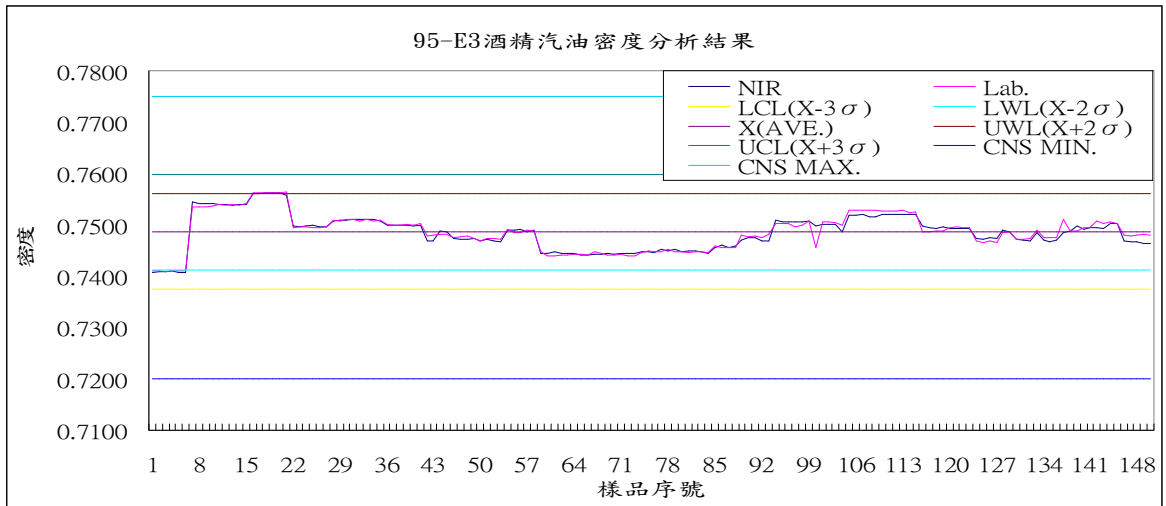


圖7. Lab. 密度檢測值與NIR預測值分佈圖

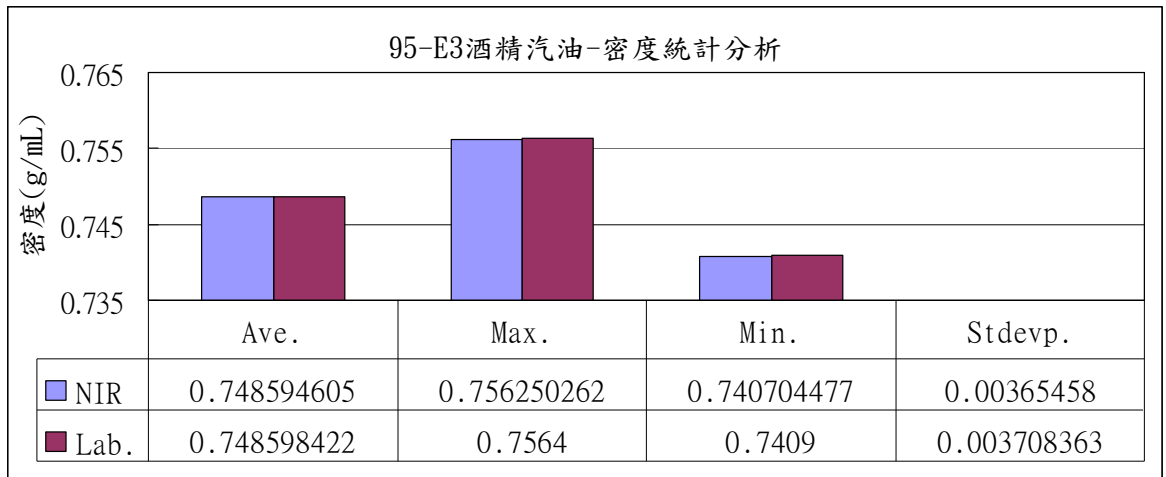


圖8. Lab. 密度檢測值與NIR預測值統計分析

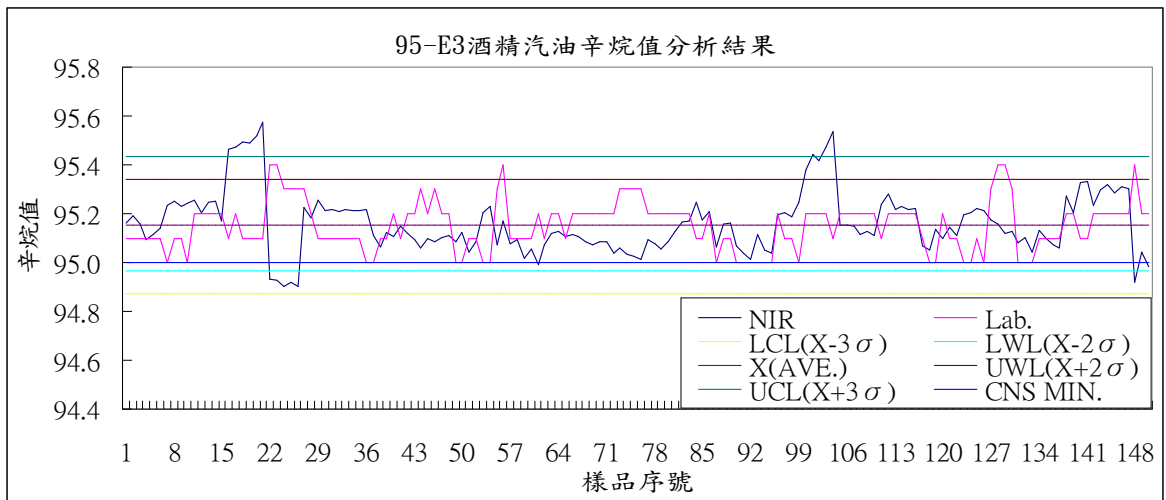


圖9. Lab. 辛烷值檢測值與NIR預測值分佈圖

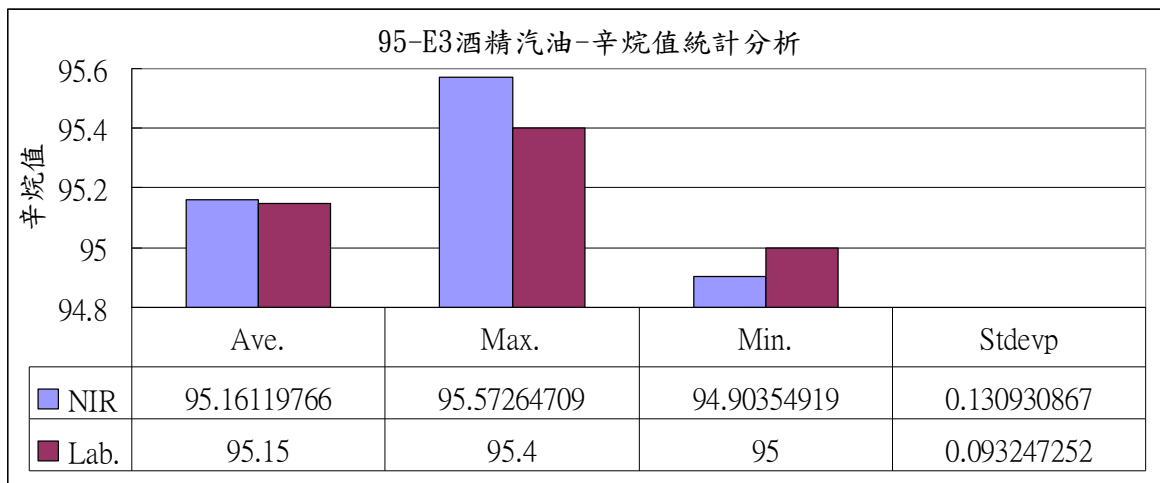


圖10. Lab. 辛烷值檢測值與NIR預測值統計分析

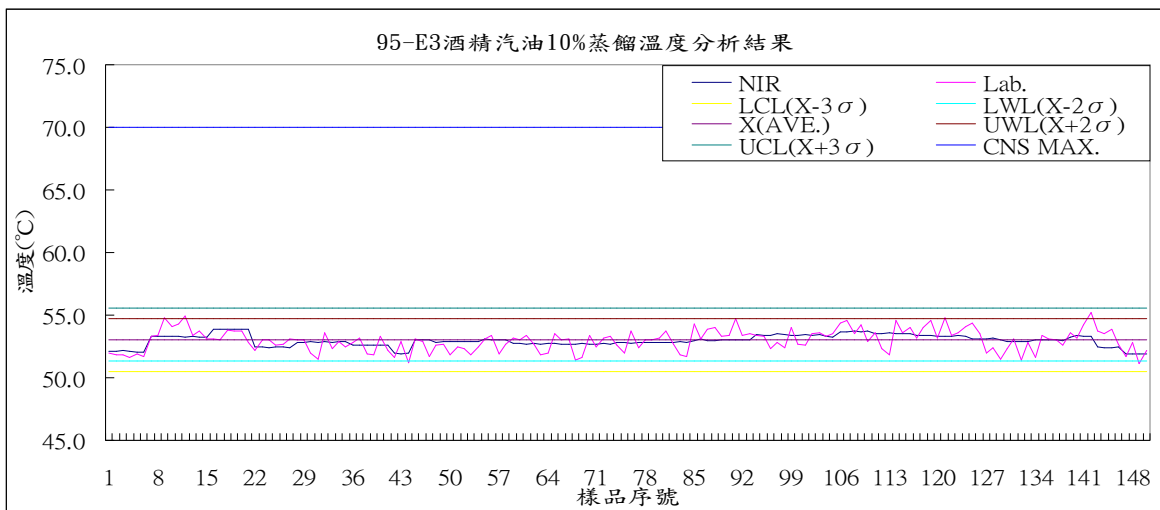


圖11. Lab. 10%蒸餾溫度檢測值與NIR預測值分佈圖

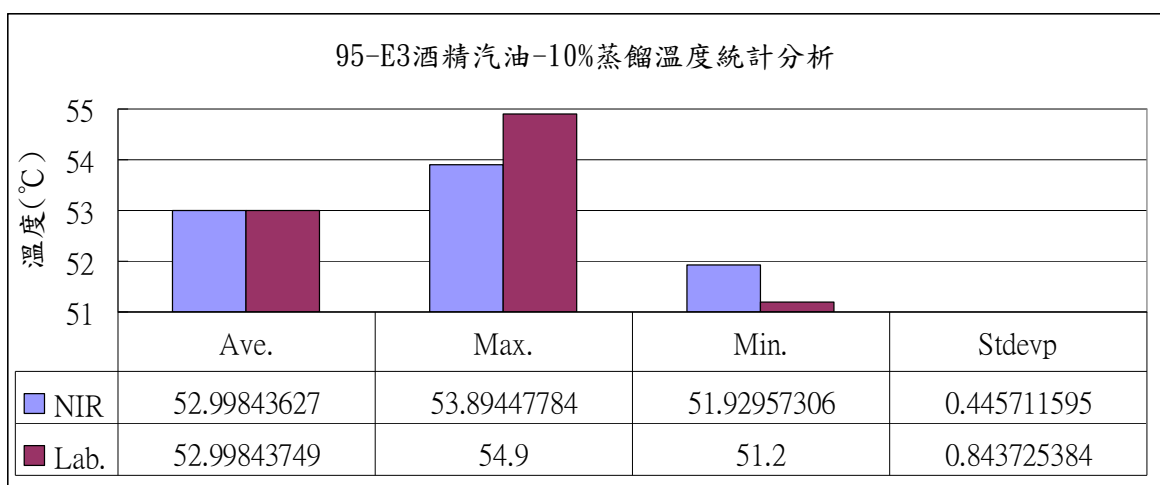


圖12. Lab. 10%蒸餾溫度檢測值與NIR預測值統計分析

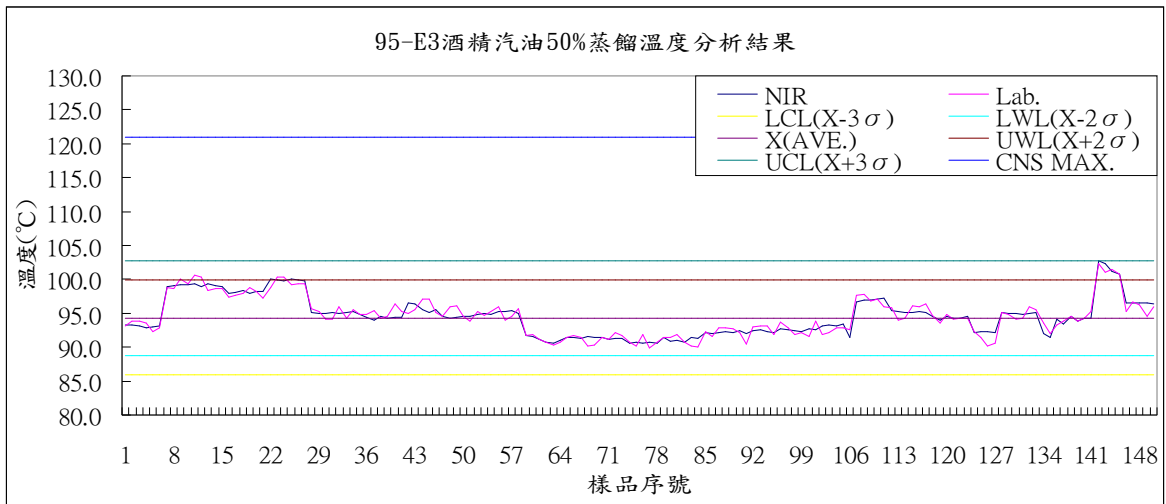


圖13. Lab. 50%蒸餾溫度檢測值與NIR預測值分佈圖

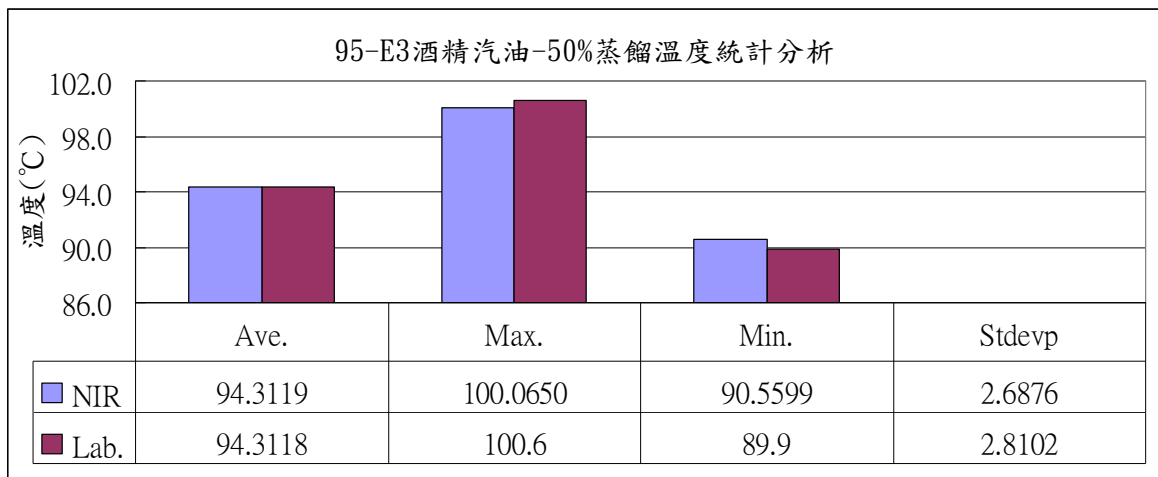


圖14. Lab. 50%蒸餾溫度檢測值與NIR預測值統計分析

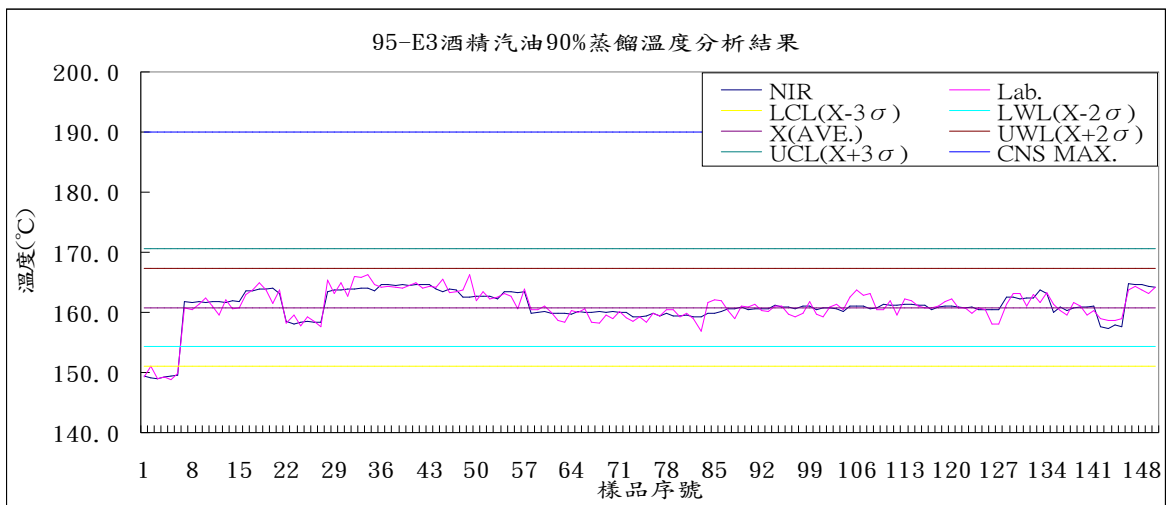


圖15. Lab. 90%蒸餾溫度檢測值與NIR預測值分佈圖

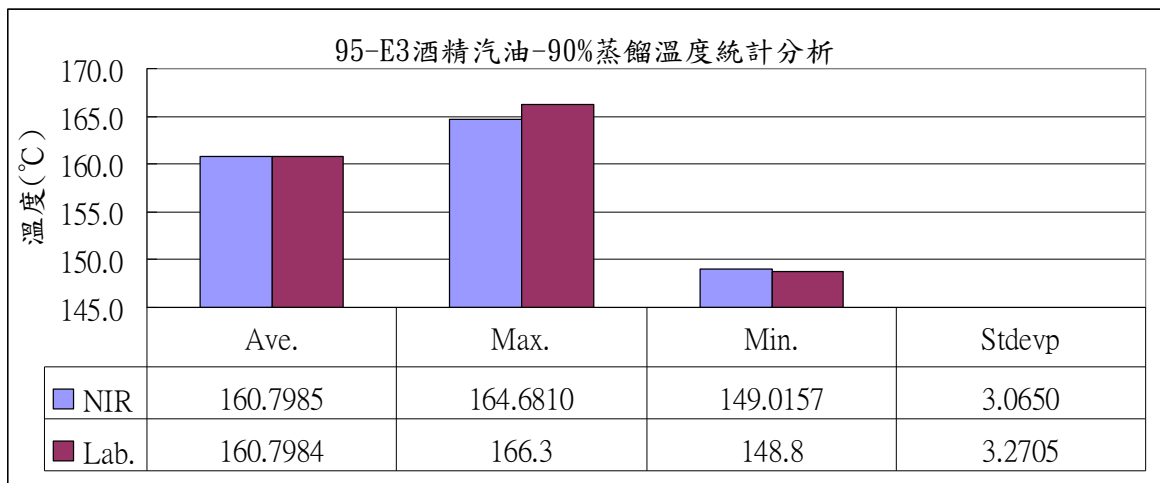


圖16. Lab. 90%蒸餾溫度檢測值與NIR預測值統計分析

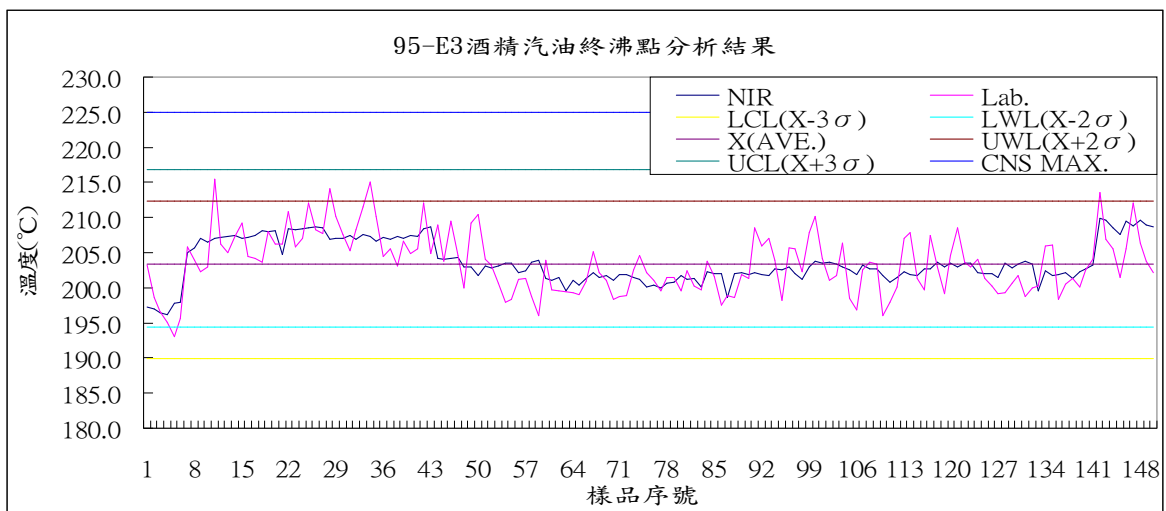


圖17. Lab. 終沸點檢測值與NIR預測值分佈圖

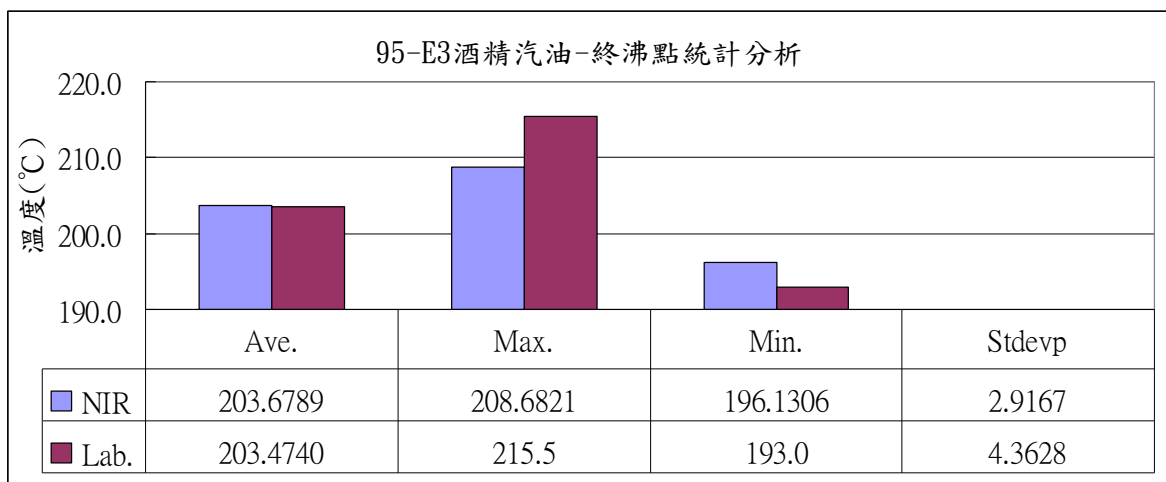


圖18. Lab. 終沸點檢測值與NIR預測值統計分析

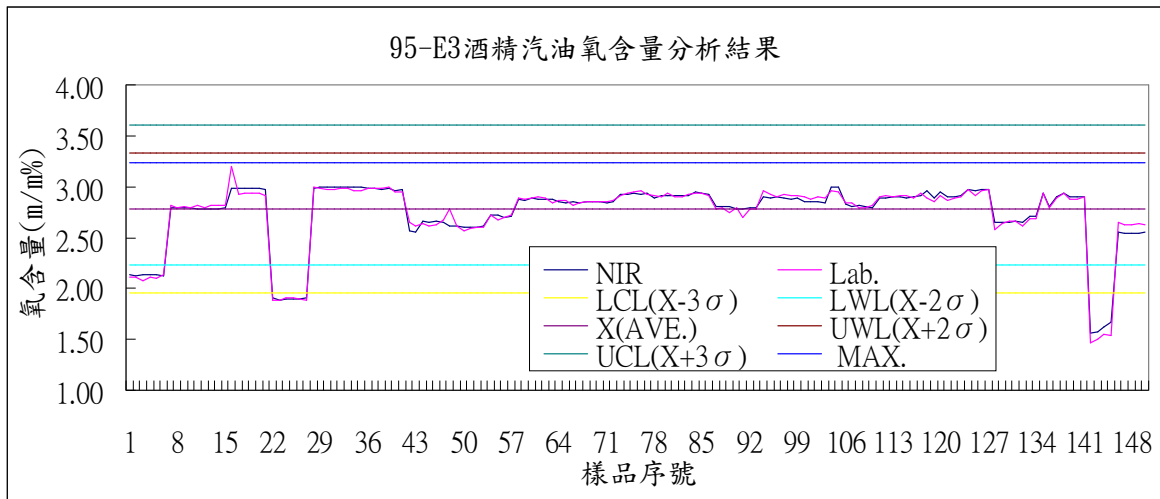


圖19. Lab. 氧含量檢測值與NIR預測值分佈圖

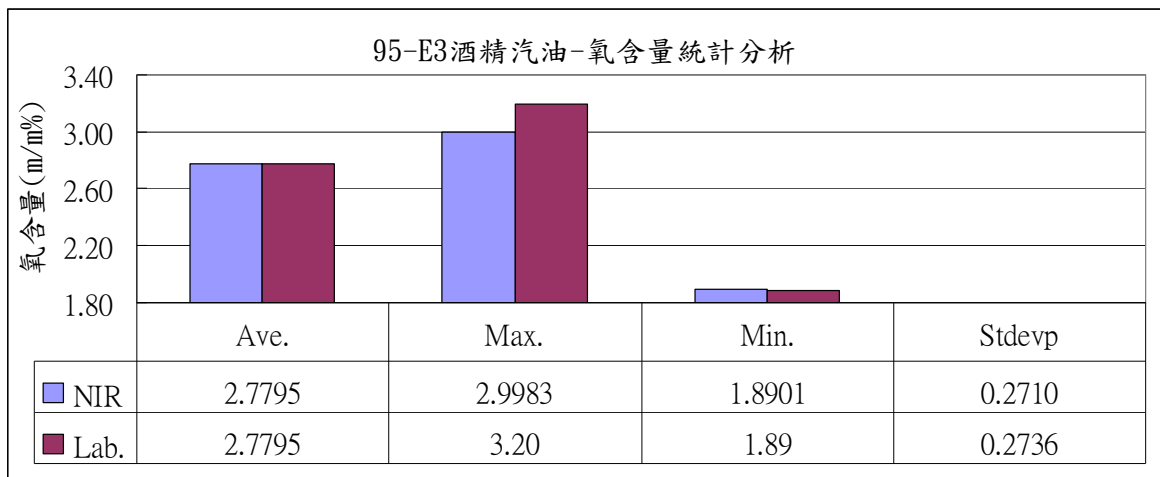


圖20. Lab. 氧含量檢測值與NIR預測值統計分析

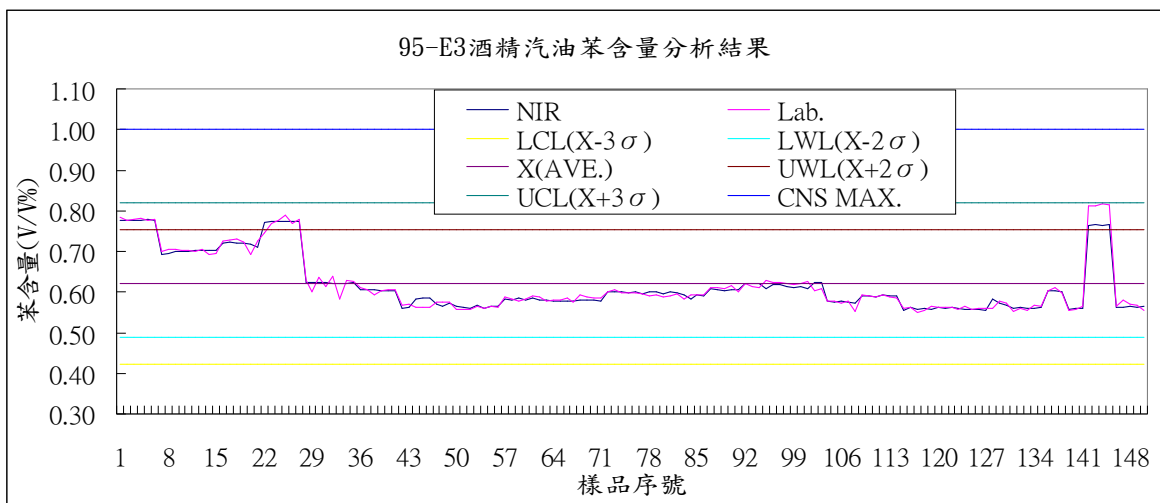


圖21. Lab. 苯含量檢測值與NIR預測值分佈圖

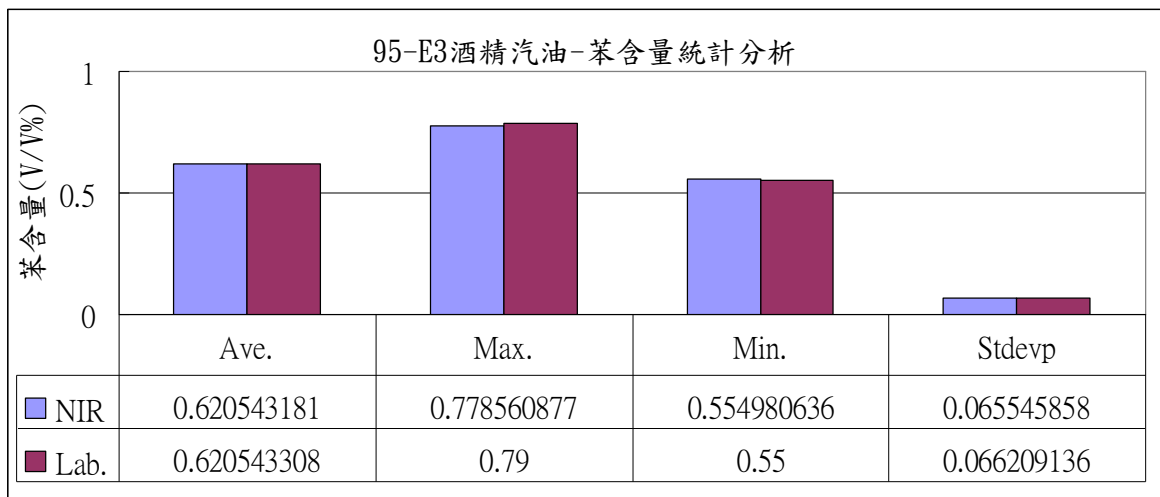


圖22. Lab. 苯含量檢測值與NIR預測值統計分析

肆、結論

近紅外光光譜儀技術系利用化學分子結構在800~2500nm之間的特定波長產生吸收而造成分子鍵結的彎曲、伸展及振動，於是光譜產生特定的吸收帶（band），光譜吸收峰的位置可用來進行化學結構的定性分析，而吸收峰的大小可用來進行特定化學結構的定量分析。本實驗所建立的快篩分析方法係利用近紅外光光譜特性並結合油品傳統分析方法的檢測數值，經由數據線性回歸後可得到光譜與傳統分析數值相對應關係，進而用來快速預測分析油品的品質；此種非破壞性的分析方法，不會造成分析樣品的損失，而且一個樣品圖譜就可同時用來預測不同的分析項目品質，明顯縮短分析所需的時間。汽油是經由不同成分的石化原料或中間產物所摻配而成的混合物，若製程的改變、原油進料或摻配配方比例的改變皆會影響汽油成品油的組成，其品質亦能通過傳統分析方法的要求，惟汽油組成的改變，會影響油品在近紅外光範圍的吸收光譜，此時以近紅外光快篩分析方法來進行油品品質預測將產生很大的誤差，故吸收光譜樣品型態的多寡將影響此快篩分析方法的準確度。

伍、參考文獻

- 1.CNS 12614 「車用無鉛汽油」，標準檢驗局，民國100年03月16日修訂。
- 2.CNS 14474 「液態油品密度及比重測定法（數位式密度計法）」，標準檢驗局，民國89年10月24日公布。
- 3.CNS 14298 「汽油中各種芳香烴測定法（氣相層析法）」，標準檢驗局，民國88年1月25日公布。
- 4.CNS14297 「汽油中醚類與醇類測定法（氣相層析法）」，標準檢驗局，民國88年1月25日公布。
- 5.CNS 1218 「石油產品常壓蒸餾試驗法」，標準檢驗局，民國93年7月6日修訂。
- 6.CNS 12011 「車用燃油震爆性試驗法（研究法）」，標準檢驗局，民國76年7月16日公布。
7. 「車用汽柴油成分管制標準」，環境保護署，民國98年7月29日修正發布。
- 8.ASTM D2699 「Standard Test Method for Research Octane Number of Spark-Ignition Engine Fuel」, American Society for Testing and Materials, 2012.

陸、附件

一、NIR及Lab.密度 (API) (g/mL) 數據

樣品區分	樣品序號	NIR	Lab.	樣品區分	樣品序號	NIR	Lab.
Calibration	1	0.7408	0.7410	Calibration	41	0.7499	0.7502
Calibration	2	0.7408	0.7410	Calibration	42	0.7469	0.7479
Calibration	3	0.7408	0.7409	Calibration	43	0.7468	0.7480
Calibration	4	0.7411	0.7411	Calibration	44	0.7488	0.7482
Calibration	5	0.7408	0.7410	Calibration	45	0.7486	0.7482
Calibration	6	0.7407	0.7410	Calibration	46	0.7473	0.7475
Calibration	7	0.7545	0.7535	Calibration	47	0.7471	0.7476
Calibration	8	0.7542	0.7535	Calibration	48	0.7472	0.7479
Calibration	9	0.7542	0.7535	Calibration	49	0.7473	0.7474
Calibration	10	0.7542	0.7536	Calibration	50	0.7468	0.7469
Calibration	11	0.7540	0.7540	Calibration	51	0.7471	0.7473
Calibration	12	0.7539	0.7538	Calibration	52	0.7468	0.7473
Calibration	13	0.7539	0.7540	Calibration	53	0.7468	0.7472
Calibration	14	0.7540	0.7538	Calibration	54	0.7490	0.7491
Calibration	15	0.7540	0.7542	Calibration	55	0.7490	0.7485
Calibration	16	0.7561	0.7562	Calibration	56	0.7491	0.7485
Calibration	17	0.7561	0.7562	Calibration	57	0.7487	0.7490
Calibration	18	0.7563	0.7563	Calibration	58	0.7489	0.7488
Calibration	19	0.7562	0.7563	Calibration	59	0.7444	0.7447
Calibration	20	0.7562	0.7562	Calibration	60	0.7444	0.7440
Calibration	21	0.7558	0.7564	Calibration	61	0.7447	0.7440
Calibration	22	0.7498	0.7494	Calibration	62	0.7445	0.7441
Calibration	23	0.7495	0.7496	Calibration	63	0.7444	0.7441
Calibration	24	0.7497	0.7496	Calibration	64	0.7444	0.7442
Calibration	25	0.7499	0.7494	Calibration	65	0.7441	0.7442
Calibration	26	0.7497	0.7494	Calibration	66	0.7442	0.7441
Calibration	27	0.7496	0.7496	Calibration	67	0.7443	0.7447
Calibration	28	0.7507	0.7509	Calibration	68	0.7443	0.7445
Calibration	29	0.7509	0.7508	Calibration	69	0.7445	0.7441
Calibration	30	0.7509	0.7510	Calibration	70	0.7442	0.7441
Calibration	31	0.7510	0.7510	Calibration	71	0.7444	0.7442
Calibration	32	0.7511	0.7508	Calibration	72	0.7444	0.7440
Calibration	33	0.7511	0.7510	Calibration	73	0.7444	0.7440
Calibration	34	0.7511	0.7508	Calibration	74	0.7447	0.7446
Calibration	35	0.7508	0.7509	Calibration	75	0.7447	0.7449
Calibration	36	0.7499	0.7501	Calibration	76	0.7447	0.7448
Calibration	37	0.7499	0.7499	Calibration	77	0.7452	0.7448
Calibration	38	0.7499	0.7499	Calibration	78	0.7449	0.7452
Calibration	39	0.7499	0.7501	Calibration	79	0.7452	0.7447

Calibration	40	0.7497	0.7500	Calibration	80	0.7447	0.7448
樣品區分	樣品序號	NIR	Lab.	樣品區分	樣品序號	NIR	Lab.
Calibration	85	0.7456	0.7459	Calibration	116	0.7497	0.7487
Calibration	86	0.7460	0.7456	Calibration	117	0.7494	0.7487
Calibration	87	0.7456	0.7455	Calibration	118	0.7493	0.7488
Calibration	88	0.7458	0.7456	Calibration	119	0.7496	0.7488
Calibration	81	0.7448	0.7446	Calibration	120	0.7494	0.7495
Calibration	82	0.7449	0.7447	Calibration	121	0.7493	0.7496
Calibration	83	0.7448	0.7447	Calibration	122	0.7493	0.7494
Calibration	84	0.7445	0.7446	Calibration	123	0.7493	0.7494
Calibration	89	0.7470	0.7480	Calibration	124	0.7474	0.7468
Calibration	90	0.7475	0.7476	Calibration	125	0.7473	0.7466
Calibration	91	0.7474	0.7478	Calibration	126	0.7474	0.7469
Calibration	92	0.7468	0.7475	Calibration	127	0.7474	0.7466
Calibration	93	0.7468	0.7481	Validation	128	0.7489	0.7484
Calibration	94	0.7508	0.7503	Validation	129	0.7486	0.7486
Calibration	95	0.7506	0.7502	Validation	130	0.7472	0.7472
Calibration	96	0.7505	0.7503	Validation	131	0.7470	0.7472
Calibration	97	0.7505	0.7496	Validation	132	0.7469	0.7473
Calibration	98	0.7507	0.7500	Validation	133	0.7486	0.7490
Calibration	99	0.7507	0.7507	Validation	134	0.7470	0.7475
Calibration	100	0.7498	0.7456	Validation	135	0.7468	0.7475
Calibration	101	0.7501	0.7506	Validation	136	0.7470	0.7475
Calibration	102	0.7501	0.7506	Validation	137	0.7484	0.7510
Calibration	103	0.7501	0.7504	Validation	138	0.7488	0.7488
Calibration	104	0.7486	0.7499	Validation	139	0.7497	0.7488
Calibration	105	0.7519	0.7529	Validation	140	0.7491	0.7495
Calibration	106	0.7518	0.7528	Validation	141	0.7494	0.7494
Calibration	107	0.7520	0.7528	Outlier	142	0.7494	0.7508
Calibration	108	0.7516	0.7529	Outlier	143	0.7492	0.7503
Calibration	109	0.7515	0.7528	Outlier	144	0.7502	0.7506
Calibration	110	0.7521	0.7527	Outlier	145	0.7502	0.7503
Calibration	111	0.7520	0.7526	Outlier	146	0.7469	0.7480
Calibration	112	0.7521	0.7526	Outlier	147	0.7467	0.7479
Calibration	113	0.7520	0.7528	Outlier	148	0.7466	0.7480
Calibration	114	0.7521	0.7524	Outlier	149	0.7463	0.7482
Calibration	115	0.7520	0.7525	Outlier	150	0.7463	0.7480
註：1. NIR 代表近紅外光光譜儀預測數據。				Ave.	0.7486	0.7486	
2. Lab. 代表實驗室傳統分析數據。				Max.	0.7563	0.7564	
3. Calibration 代表校正組、Validation 代表確證組、				Min.	0.7407	0.7409	
Outlier 代表剔除組。				Stdevp.	0.0037	0.0037	

二、NIR及Lab.辛烷值（RON）數據

樣品區分	樣品序號	NIR	Lab.	樣品區分	樣品序號	NIR	Lab.
Calibration	1	95.16	95.10	Calibration	41	95.15	95.10
Calibration	2	95.19	95.10	Calibration	42	95.12	95.20
Calibration	3	95.16	95.10	Calibration	43	95.09	95.20
Calibration	4	95.10	95.10	Calibration	44	95.06	95.30
Calibration	5	95.11	95.10	Calibration	45	95.10	95.20
Calibration	6	95.14	95.10	Calibration	46	95.08	95.30
Calibration	7	95.23	95.00	Calibration	47	95.10	95.20
Calibration	8	95.25	95.10	Calibration	48	95.11	95.20
Calibration	9	95.23	95.10	Calibration	49	95.08	95.00
Calibration	10	95.24	95.00	Calibration	50	95.12	95.00
Calibration	11	95.25	95.20	Calibration	51	95.04	95.10
Calibration	12	95.21	95.20	Calibration	52	95.08	95.10
Calibration	13	95.25	95.20	Calibration	53	95.20	95.00
Calibration	14	95.25	95.20	Calibration	54	95.23	95.00
Calibration	15	95.17	95.20	Calibration	55	95.07	95.30
Calibration	16	95.46	95.10	Calibration	56	95.17	95.40
Calibration	17	95.47	95.20	Calibration	57	95.08	95.10
Calibration	18	95.49	95.10	Calibration	58	95.09	95.10
Calibration	19	95.49	95.10	Calibration	59	95.01	95.10
Calibration	20	95.52	95.10	Calibration	60	95.05	95.10
Calibration	21	95.57	95.10	Calibration	61	94.99	95.20
Calibration	22	94.93	95.40	Calibration	62	95.07	95.10
Calibration	23	94.93	95.40	Calibration	63	95.12	95.20
Calibration	24	94.90	95.30	Calibration	64	95.13	95.20
Calibration	25	94.92	95.30	Calibration	65	95.11	95.10
Calibration	26	94.90	95.30	Calibration	66	95.11	95.20
Calibration	27	95.22	95.30	Calibration	67	95.11	95.20
Calibration	28	95.18	95.20	Calibration	68	95.09	95.20
Calibration	29	95.26	95.10	Calibration	69	95.07	95.20
Calibration	30	95.21	95.10	Calibration	70	95.09	95.20
Calibration	31	95.22	95.10	Calibration	71	95.08	95.20
Calibration	32	95.21	95.10	Calibration	72	95.04	95.20
Calibration	33	95.22	95.10	Calibration	73	95.06	95.30
Calibration	34	95.21	95.10	Calibration	74	95.03	95.30
Calibration	35	95.21	95.10	Calibration	75	95.02	95.30
Calibration	36	95.22	95.00	Calibration	76	95.01	95.30
Calibration	37	95.11	95.00	Calibration	77	95.09	95.20
Calibration	38	95.06	95.10	Calibration	78	95.08	95.20
Calibration	39	95.13	95.10	Calibration	79	95.05	95.20
Calibration	40	95.11	95.20	Calibration	80	95.09	95.20

樣品區分	樣品序號	NIR	Lab.	樣品區分	樣品序號	NIR	Lab.
Calibration	81	95.13	95.20	Calibration	116	95.22	95.20
Calibration	82	95.16	95.20	Validation	117	95.07	95.10
Calibration	83	95.17	95.20	Validation	118	95.05	95.00
Calibration	84	95.25	95.10	Validation	119	95.14	95.00
Calibration	85	95.17	95.10	Validation	120	95.10	95.20
Calibration	86	95.21	95.20	Validation	121	95.14	95.10
Calibration	87	95.06	95.00	Validation	122	95.11	95.10
Calibration	88	95.16	95.10	Validation	123	95.20	95.00
Calibration	89	95.16	95.10	Validation	124	95.21	95.00
Calibration	90	95.07	95.00	Validation	125	95.22	95.10
Calibration	91	95.04	95.00	Validation	126	95.21	95.00
Calibration	92	95.01	95.00	Validation	127	95.17	95.30
Calibration	93	95.11	95.00	Validation	128	95.16	95.40
Calibration	94	95.05	95.00	Validation	129	95.12	95.40
Calibration	95	95.04	95.00	Validation	130	95.13	95.30
Calibration	96	95.19	95.20	Validation	131	95.08	95.00
Calibration	97	95.21	95.10	Validation	132	95.10	95.00
Calibration	98	95.19	95.10	Validation	133	95.04	95.00
Calibration	99	95.24	95.00	Validation	134	95.13	95.10
Calibration	100	95.38	95.20	Validation	135	95.10	95.10
Calibration	101	95.44	95.20	Validation	136	95.07	95.10
Calibration	102	95.42	95.20	Validation	137	95.06	95.10
Calibration	103	95.47	95.20	Validation	138	95.27	95.20
Calibration	104	95.53	95.10	Validation	139	95.21	95.20
Calibration	105	95.15	95.20	Validation	140	95.33	95.10
Calibration	106	95.16	95.20	Validation	141	95.33	95.10
Calibration	107	95.15	95.20	Validation	142	95.23	95.20
Calibration	108	95.12	95.20	Validation	143	95.30	95.20
Calibration	109	95.13	95.20	Validation	144	95.32	95.20
Calibration	110	95.11	95.20	Validation	145	95.28	95.20
Calibration	111	95.24	95.10	Validation	146	95.31	95.20
Calibration	112	95.28	95.20	Validation	147	95.30	95.20
Calibration	113	95.22	95.20	Outlier	148	94.92	95.40
Calibration	114	95.23	95.20	Outlier	149	95.04	95.20
Calibration	115	95.22	95.20	Outlier	150	94.98	95.20
註：1. NIR 代表近紅外光光譜儀預測數據。 2. Lab. 代表實驗室傳統分析數據。 3. Calibration 代表校正組、Validation 代表確證組、 Outlier 代表剔除組。					Ave.	95.16	95.15
					Max.	95.57	95.40
					Min.	94.90	95.00
					Stdevp	0.13	0.09

三、NIR及Lab. 10%蒸餾溫度 (°C) 數據

樣品區分	樣品序號	NIR	Lab.	樣品區分	樣品序號	NIR	Lab.
Calibration	1	52.1	52.0	Calibration	41	52.6	52.2
Calibration	2	52.1	51.8	Calibration	42	52.0	51.6
Calibration	3	52.2	51.8	Calibration	43	51.9	52.9
Calibration	4	52.1	51.6	Calibration	44	52.0	51.2
Calibration	5	52.1	51.9	Calibration	45	53.0	53.1
Calibration	6	52.0	51.7	Calibration	46	53.0	52.9
Calibration	7	53.3	53.3	Calibration	47	53.0	51.7
Calibration	8	53.3	53.4	Calibration	48	52.8	52.6
Calibration	9	53.3	54.8	Calibration	49	52.9	52.7
Calibration	10	53.3	54.1	Calibration	50	52.9	51.8
Calibration	11	53.3	54.3	Calibration	51	52.9	52.5
Calibration	12	53.3	54.9	Calibration	52	52.9	52.3
Calibration	13	53.3	53.4	Calibration	53	52.9	51.8
Calibration	14	53.3	53.7	Calibration	54	52.9	52.5
Calibration	15	53.2	53.1	Calibration	55	53.1	53.1
Calibration	16	53.9	53.1	Calibration	56	53.0	53.4
Calibration	17	53.9	53.0	Calibration	57	53.1	51.9
Calibration	18	53.8	53.8	Calibration	58	53.0	52.7
Calibration	19	53.8	53.7	Calibration	59	52.7	53.2
Calibration	20	53.9	53.7	Calibration	60	52.7	53.0
Calibration	21	53.9	52.8	Calibration	61	52.7	53.4
Calibration	22	52.4	52.2	Calibration	62	52.7	52.7
Calibration	23	52.5	53.0	Calibration	63	52.6	51.8
Calibration	24	52.4	53.0	Calibration	64	52.7	52.0
Calibration	25	52.4	52.6	Calibration	65	52.7	53.5
Calibration	26	52.4	52.7	Calibration	66	52.7	53.0
Calibration	27	52.4	53.1	Calibration	67	52.7	53.1
Calibration	28	52.8	53.0	Calibration	68	52.7	51.4
Calibration	29	52.8	53.0	Calibration	69	52.7	51.6
Calibration	30	52.9	52.0	Calibration	70	52.7	53.4
Calibration	31	52.8	51.5	Calibration	71	52.7	52.5
Calibration	32	52.9	53.6	Calibration	72	52.7	53.2
Calibration	33	52.8	52.3	Calibration	73	52.7	53.3
Calibration	34	52.9	52.9	Calibration	74	52.8	52.6
Calibration	35	52.9	52.5	Calibration	75	52.8	52.0
Calibration	36	52.6	52.8	Calibration	76	52.8	53.7
Calibration	37	52.6	53.2	Calibration	77	52.8	52.4
Calibration	38	52.6	51.9	Calibration	78	52.8	53.0
Calibration	39	52.6	51.8	Calibration	79	52.8	53.0
Calibration	40	52.6	53.3	Calibration	80	52.8	53.2

樣品區分	樣品序號	NIR	Lab.	樣品區分	樣品序號	NIR	Lab.
Calibration	81	52.8	53.7	Calibration	116	53.5	54.0
Calibration	82	52.8	52.7	Calibration	117	53.4	53.2
Calibration	83	52.9	51.8	Calibration	118	53.4	54.0
Calibration	84	52.9	51.7	Calibration	119	53.4	54.6
Calibration	85	53.0	54.3	Calibration	120	53.3	53.2
Calibration	86	53.1	53.1	Calibration	121	53.3	54.8
Calibration	87	53.0	53.9	Calibration	122	53.3	53.4
Calibration	88	53.0	54.0	Calibration	123	53.3	53.6
Calibration	89	53.0	53.3	Calibration	124	53.3	54.1
Calibration	90	53.0	53.4	Calibration	125	53.1	54.4
Calibration	91	53.0	54.7	Calibration	126	53.1	53.5
Calibration	92	53.0	53.4	Calibration	127	53.1	52.0
Calibration	93	53.0	53.5	Calibration	128	53.1	52.4
Calibration	94	53.4	53.4	Validation	129	53.0	51.5
Calibration	95	53.4	53.3	Validation	130	52.9	52.3
Calibration	96	53.4	52.3	Validation	131	52.9	53.1
Calibration	97	53.5	52.8	Validation	132	52.9	51.4
Calibration	98	53.4	52.4	Validation	133	52.9	52.8
Calibration	99	53.4	54.0	Validation	134	53.1	51.6
Calibration	100	53.4	52.7	Validation	135	53.0	53.4
Calibration	101	53.4	52.6	Validation	136	53.0	53.1
Calibration	102	53.4	53.5	Validation	137	53.0	53.0
Calibration	103	53.5	53.6	Validation	138	53.0	52.6
Calibration	104	53.3	53.3	Validation	139	53.3	53.6
Calibration	105	53.3	53.5	Validation	140	53.4	53.2
Calibration	106	53.7	54.4	Validation	141	53.3	54.2
Calibration	107	53.6	54.6	Validation	142	53.3	55.2
Calibration	108	53.7	53.5	Outlier	143	52.4	53.7
Calibration	109	53.7	54.2	Outlier	144	52.4	53.5
Calibration	110	53.7	52.9	Outlier	145	52.4	53.9
Calibration	111	53.5	53.6	Outlier	146	52.5	52.7
Calibration	112	53.5	52.3	Outlier	147	51.9	51.7
Calibration	113	53.6	51.8	Outlier	148	51.9	52.8
Calibration	114	53.5	54.6	Outlier	149	51.9	51.1
Calibration	115	53.5	53.6	Outlier	150	51.9	52.2
註：1. NIR 代表近紅外光光譜儀預測數據。 2. Lab. 代表實驗室傳統分析數據。 3. Calibration 代表校正組、Validation 代表確證組、 Outlier 代表剔除組。					Ave.	53.0	53.0
					Max.	53.9	54.9
					Min.	51.9	51.2
					Stdevp	0.4	0.8

四、NIR及Lab. 50%蒸餾溫度 (°C) 數據

樣品區分	樣品序號	NIR	Lab.	樣品區分	樣品序號	NIR	Lab.
Calibration	1	93.2	93.2	Calibration	41	94.3	95.2
Calibration	2	93.3	93.8	Calibration	42	96.5	95.0
Calibration	3	93.2	93.8	Calibration	43	96.4	95.6
Calibration	4	92.8	93.5	Calibration	44	95.5	97.1
Calibration	5	93.1	92.3	Calibration	45	95.1	97.1
Calibration	6	93.1	92.9	Calibration	46	95.6	95.1
Calibration	7	98.9	98.8	Calibration	47	94.6	94.5
Calibration	8	99.1	98.6	Calibration	48	94.3	95.9
Calibration	9	99.2	100.1	Calibration	49	94.4	96.1
Calibration	10	99.2	99.4	Calibration	50	94.6	94.6
Calibration	11	99.4	100.6	Calibration	51	94.6	93.8
Calibration	12	99.0	100.3	Calibration	52	94.9	95.2
Calibration	13	99.4	98.4	Calibration	53	95.0	94.7
Calibration	14	99.1	98.6	Calibration	54	94.8	95.2
Calibration	15	98.9	98.7	Calibration	55	95.2	96.0
Calibration	16	97.9	97.4	Calibration	56	95.3	94.0
Calibration	17	98.0	97.6	Calibration	57	95.4	94.6
Calibration	18	98.3	97.9	Calibration	58	94.9	95.7
Calibration	19	97.9	98.8	Calibration	59	91.7	91.7
Calibration	20	98.2	98.2	Calibration	60	91.6	91.8
Calibration	21	98.2	97.2	Calibration	61	91.1	91.2
Calibration	22	100.0	98.8	Calibration	62	90.8	90.8
Calibration	23	99.9	100.4	Calibration	63	90.6	90.3
Calibration	24	99.8	100.4	Calibration	64	91.0	90.7
Calibration	25	100.1	99.2	Calibration	65	91.5	91.4
Calibration	26	99.9	99.4	Calibration	66	91.5	91.7
Calibration	27	99.7	99.4	Calibration	67	91.4	91.4
Calibration	28	95.1	95.7	Calibration	68	91.6	90.2
Calibration	29	95.0	95.2	Calibration	69	91.5	90.3
Calibration	30	95.0	94.1	Calibration	70	91.4	91.5
Calibration	31	95.2	94.1	Calibration	71	91.2	91.2
Calibration	32	95.0	96.0	Calibration	72	91.3	92.1
Calibration	33	95.2	94.2	Calibration	73	91.3	91.7
Calibration	34	95.2	95.5	Calibration	74	90.6	90.7
Calibration	35	94.9	94.8	Calibration	75	90.7	90.1
Calibration	36	94.4	94.8	Calibration	76	90.6	91.8
Calibration	37	94.0	95.4	Calibration	77	90.7	89.9
Calibration	38	94.6	94.2	Calibration	78	90.6	90.8
Calibration	39	94.3	94.5	Calibration	79	91.4	91.4
Calibration	40	94.5	96.4	Calibration	80	90.9	91.4

樣品區分	樣品序號	NIR	Lab.	樣品區分	樣品序號	NIR	Lab.
Calibration	81	91.0	91.8	Calibration	116	95.2	96.0
Calibration	82	90.8	90.8	Calibration	117	95.2	96.4
Calibration	83	91.5	90.1	Calibration	118	94.5	94.7
Calibration	84	91.3	90.0	Calibration	119	94.0	93.6
Calibration	85	92.2	92.3	Calibration	120	94.5	94.9
Calibration	86	92.0	91.6	Calibration	121	94.3	94.1
Calibration	87	92.2	92.9	Calibration	122	94.3	94.3
Calibration	88	92.3	92.8	Calibration	123	94.5	94.2
Calibration	89	92.2	92.7	Calibration	124	92.2	92.3
Calibration	90	92.4	92.2	Calibration	125	92.3	91.5
Calibration	91	92.0	90.4	Calibration	126	92.3	90.2
Calibration	92	92.4	93.0	Calibration	127	92.1	90.6
Calibration	93	92.5	93.2	Validation	128	95.1	95.1
Calibration	94	92.3	93.1	Validation	129	95.0	94.8
Calibration	95	92.1	91.9	Validation	130	94.9	94.1
Calibration	96	92.7	93.7	Validation	131	94.9	94.3
Calibration	97	92.6	92.8	Validation	132	95.0	95.9
Calibration	98	92.4	91.8	Validation	133	95.1	95.5
Calibration	99	92.3	92.2	Validation	134	92.1	93.6
Calibration	100	92.8	91.6	Validation	135	91.5	92.0
Calibration	101	92.6	93.8	Validation	136	94.2	93.3
Calibration	102	93.1	91.9	Validation	137	93.4	93.9
Calibration	103	93.2	92.1	Validation	138	94.6	94.5
Calibration	104	93.1	92.9	Validation	139	93.8	93.8
Calibration	105	93.4	92.9	Validation	140	94.2	94.2
Calibration	106	91.5	92.6	Validation	141	94.3	95.3
Calibration	107	96.7	97.7	Outlier	142	102.7	102.3
Calibration	108	96.9	97.8	Outlier	143	102.3	101.1
Calibration	109	96.9	96.8	Outlier	144	101.2	101.5
Calibration	110	97.1	97.1	Outlier	145	100.8	100.7
Calibration	111	97.2	96.0	Outlier	146	96.6	95.2
Calibration	112	95.4	95.8	Outlier	147	96.5	96.6
Calibration	113	95.2	94.0	Outlier	148	96.6	96.3
Calibration	114	95.2	94.3	Outlier	149	96.5	94.6
Calibration	115	95.0	96.1	Outlier	150	96.3	95.9
註：1. NIR 代表近紅外光光譜儀預測數據。 2. Lab. 代表實驗室傳統分析數據。 3. Calibration 代表校正組、Validation 代表確證組、 Outlier 代表剔除組。					Ave.	94.3	94.3
					Max.	100.1	100.6
					Min.	90.6	89.9
					Stdevp	2.7	2.8

五、NIR及Lab. 90%蒸餾溫度 (°C) 數據

樣品區分	樣品序號	NIR	Lab.	樣品區分	樣品序號	NIR	Lab.
Calibration	1	149.3	149.3	Calibration	41	164.6	165.0
Calibration	2	149.2	151.0	Calibration	42	164.7	164.1
Calibration	3	149.0	148.9	Calibration	43	164.6	164.4
Calibration	4	149.2	149.2	Calibration	44	163.9	164.2
Calibration	5	149.5	148.8	Calibration	45	163.5	165.5
Calibration	6	149.6	149.8	Calibration	46	163.9	163.3
Calibration	7	161.8	160.7	Calibration	47	163.8	163.4
Calibration	8	161.7	160.5	Calibration	48	162.6	163.8
Calibration	9	161.7	161.3	Calibration	49	162.5	166.3
Calibration	10	161.6	162.4	Calibration	50	162.7	161.9
Calibration	11	161.7	161.1	Calibration	51	162.7	163.4
Calibration	12	161.8	159.6	Calibration	52	162.6	162.3
Calibration	13	161.6	162.1	Calibration	53	162.2	162.6
Calibration	14	161.9	160.6	Calibration	54	163.4	163.1
Calibration	15	161.8	160.8	Calibration	55	163.4	162.7
Calibration	16	163.5	163.0	Calibration	56	163.4	160.6
Calibration	17	163.6	163.7	Calibration	57	163.4	163.9
Calibration	18	163.9	164.9	Calibration	58	159.8	160.4
Calibration	19	163.8	163.7	Calibration	59	160.0	160.5
Calibration	20	164.0	161.5	Calibration	60	160.1	161.0
Calibration	21	163.2	163.7	Calibration	61	159.9	160.0
Calibration	22	158.6	158.2	Calibration	62	159.8	158.7
Calibration	23	158.1	159.6	Calibration	63	159.9	158.4
Calibration	24	158.4	157.8	Calibration	64	159.7	160.3
Calibration	25	158.5	159.2	Calibration	65	160.1	160.0
Calibration	26	158.4	158.5	Calibration	66	160.0	160.6
Calibration	27	158.4	157.6	Calibration	67	160.1	158.4
Calibration	28	163.5	165.3	Calibration	68	160.1	158.2
Calibration	29	163.7	163.1	Calibration	69	160.0	159.5
Calibration	30	163.7	165.0	Calibration	70	160.1	158.9
Calibration	31	163.9	162.7	Calibration	71	160.0	160.1
Calibration	32	163.9	165.9	Calibration	72	160.0	159.1
Calibration	33	164.1	165.8	Calibration	73	159.3	158.5
Calibration	34	164.0	166.3	Calibration	74	159.3	159.2
Calibration	35	163.6	164.7	Calibration	75	159.3	158.4
Calibration	36	164.6	164.2	Calibration	76	159.8	159.9
Calibration	37	164.6	164.4	Calibration	77	159.4	159.4
Calibration	38	164.5	164.2	Calibration	78	159.9	160.5
Calibration	39	164.7	164.1	Calibration	79	159.4	160.5
Calibration	40	164.5	164.5	Calibration	80	159.4	159.2

樣品區分	樣品序號	NIR	Lab.	樣品區分	樣品序號	NIR	Lab.
Calibration	81	159.5	159.8	Calibration	116	161.2	160.8
Calibration	82	159.3	159.0	Calibration	117	160.5	160.8
Calibration	83	159.2	156.9	Calibration	118	160.9	161.1
Calibration	84	159.9	161.6	Calibration	119	161.0	161.8
Calibration	85	159.8	162.1	Calibration	120	161.0	162.3
Calibration	86	160.1	161.9	Calibration	121	160.9	160.7
Calibration	87	160.5	160.3	Calibration	122	160.7	160.8
Calibration	88	160.6	158.9	Calibration	123	160.8	159.8
Calibration	89	160.9	161.0	Calibration	124	160.5	160.7
Calibration	90	160.4	160.9	Calibration	125	160.4	160.4
Calibration	91	160.7	161.3	Calibration	126	160.5	158.0
Calibration	92	160.6	160.3	Calibration	127	160.5	158.1
Calibration	93	160.6	160.2	Validation	128	162.5	161.4
Calibration	94	161.2	161.0	Validation	129	162.5	163.1
Calibration	95	160.9	161.0	Validation	130	162.3	163.1
Calibration	96	160.9	159.7	Validation	131	162.4	161.1
Calibration	97	160.6	159.2	Validation	132	162.4	163.0
Calibration	98	161.0	159.8	Validation	133	163.7	161.6
Calibration	99	161.1	161.8	Validation	134	163.1	163.3
Calibration	100	160.4	159.7	Validation	135	160.0	161.3
Calibration	101	160.7	159.3	Validation	136	160.9	160.3
Calibration	102	160.7	160.9	Validation	137	160.4	159.5
Calibration	103	160.6	161.4	Validation	138	160.7	161.7
Calibration	104	160.1	160.4	Validation	139	161.0	161.1
Calibration	105	161.0	162.5	Validation	140	160.8	159.6
Calibration	106	161.1	163.7	Validation	141	161.1	160.3
Calibration	107	161.0	162.8	Outlier	142	157.6	159.0
Calibration	108	160.6	163.2	Outlier	143	157.3	158.7
Calibration	109	160.7	160.5	Outlier	144	157.9	158.7
Calibration	110	161.3	160.4	Outlier	145	157.6	158.9
Calibration	111	161.3	161.9	Outlier	146	164.8	163.8
Calibration	112	161.2	159.6	Outlier	147	164.6	164.4
Calibration	113	161.3	162.2	Outlier	148	164.6	163.8
Calibration	114	161.3	161.9	Outlier	149	164.3	163.2
Calibration	115	161.3	161.1	Outlier	150	164.2	164.2
註：1. NIR 代表近紅外光光譜儀預測數據。 2. Lab. 代表實驗室傳統分析數據。 3. Calibration 代表校正組、Validation 代表確證組、 Outlier 代表剔除組。					Ave.	160.8	160.8
					Max.	164.7	166.3
					Min.	149.0	148.8
					Stdevp	3.1	3.3

六、NIR及Lab. 終沸點 (FBP) (°C) 數據

樣品區分	樣品序號	NIR	Lab.	樣品區分	樣品序號	NIR	Lab.
Calibration	1	197.2	203.3	Calibration	41	207.3	205.6
Calibration	2	196.9	198.6	Calibration	42	208.3	212.1
Calibration	3	196.4	196.6	Calibration	43	208.6	204.9
Calibration	4	196.1	195.1	Calibration	44	204.1	209.0
Calibration	5	197.8	193.0	Calibration	45	204.0	203.8
Calibration	6	197.9	195.6	Calibration	46	204.1	209.5
Calibration	7	205.0	205.8	Calibration	47	204.4	204.6
Calibration	8	205.7	203.9	Calibration	48	203.0	200.0
Calibration	9	207.0	202.3	Calibration	49	203.0	209.2
Calibration	10	206.5	203.0	Calibration	50	201.7	210.5
Calibration	11	207.1	215.5	Calibration	51	203.1	204.0
Calibration	12	207.2	206.2	Calibration	52	202.9	203.3
Calibration	13	207.2	205.0	Calibration	53	203.2	200.6
Calibration	14	207.4	207.3	Calibration	54	203.6	198.0
Calibration	15	207.0	209.2	Calibration	55	203.5	198.4
Calibration	16	207.2	204.4	Calibration	56	202.2	201.2
Calibration	17	207.5	204.2	Calibration	57	202.5	201.3
Calibration	18	208.1	203.7	Calibration	58	203.7	198.7
Calibration	19	208.0	208.0	Calibration	59	203.9	196.0
Calibration	20	208.1	206.2	Calibration	60	201.3	203.9
Calibration	21	204.7	206.2	Calibration	61	201.1	199.7
Calibration	22	208.4	210.9	Calibration	62	201.5	199.5
Calibration	23	208.2	205.8	Calibration	63	199.6	199.4
Calibration	24	208.4	207.0	Calibration	64	201.0	199.3
Calibration	25	208.5	212.1	Calibration	65	200.4	199.0
Calibration	26	208.7	208.2	Calibration	66	201.3	200.9
Calibration	27	208.5	207.7	Calibration	67	202.1	205.2
Calibration	28	207.0	214.1	Calibration	68	201.4	202.1
Calibration	29	207.0	210.2	Calibration	69	201.7	201.0
Calibration	30	207.0	207.6	Calibration	70	201.1	198.3
Calibration	31	207.4	205.3	Calibration	71	201.8	198.7
Calibration	32	206.9	208.3	Calibration	72	201.9	198.9
Calibration	33	207.5	211.5	Calibration	73	201.4	202.6
Calibration	34	207.3	215.0	Calibration	74	201.2	204.6
Calibration	35	206.7	210.1	Calibration	75	200.1	202.2
Calibration	36	207.1	204.4	Calibration	76	200.4	201.1
Calibration	37	206.9	205.5	Calibration	77	200.0	199.5
Calibration	38	207.3	203.1	Calibration	78	200.6	201.5
Calibration	39	207.1	206.6	Calibration	79	200.7	201.4
Calibration	40	207.4	204.9	Calibration	80	201.8	199.5

樣品區分	樣品序號	NIR	Lab.	樣品區分	樣品序號	NIR	Lab.
Calibration	81	201.2	202.4	Calibration	116	202.7	199.7
Calibration	82	201.4	200.2	Calibration	117	202.8	207.4
Calibration	83	200.2	199.7	Calibration	118	203.7	203.0
Calibration	84	202.3	203.8	Calibration	119	202.9	199.2
Calibration	85	202.0	201.6	Calibration	120	203.6	204.6
Calibration	86	202.0	197.5	Calibration	121	202.9	208.5
Calibration	87	198.6	198.9	Calibration	122	203.5	203.7
Calibration	88	201.9	198.6	Calibration	123	203.5	203.0
Calibration	89	202.1	201.9	Calibration	124	202.2	204.1
Calibration	90	201.9	201.3	Calibration	125	202.0	201.3
Calibration	91	202.2	208.6	Calibration	126	202.0	200.2
Calibration	92	201.9	206.0	Calibration	127	201.4	199.2
Calibration	93	201.8	207.1	Validation	128	203.5	199.3
Calibration	94	202.6	203.9	Validation	129	202.9	200.6
Calibration	95	202.6	198.2	Validation	130	203.4	201.7
Calibration	96	202.9	205.7	Validation	131	203.8	198.7
Calibration	97	202.0	205.5	Validation	132	203.4	200.0
Calibration	98	201.2	202.3	Validation	133	199.5	200.3
Calibration	99	203.0	207.9	Validation	134	202.4	205.9
Calibration	100	203.8	210.2	Validation	135	201.8	206.1
Calibration	101	203.6	204.2	Validation	136	201.8	198.3
Calibration	102	203.7	201.1	Validation	137	202.2	200.5
Calibration	103	203.4	201.8	Validation	138	201.4	201.3
Calibration	104	202.9	206.3	Validation	139	202.2	200.1
Calibration	105	202.6	198.5	Validation	140	202.8	202.5
Calibration	106	201.9	196.9	Validation	141	203.3	204.0
Calibration	107	203.2	202.5	Outlier	142	210.0	213.5
Calibration	108	202.7	203.6	Outlier	143	209.7	206.9
Calibration	109	202.7	203.4	Outlier	144	208.6	205.6
Calibration	110	201.8	196.1	Outlier	145	207.6	201.5
Calibration	111	200.8	198.0	Outlier	146	209.5	205.5
Calibration	112	201.4	200.1	Outlier	147	208.8	212.1
Calibration	113	202.3	207.1	Outlier	148	209.6	206.4
Calibration	114	201.9	207.8	Outlier	149	208.9	203.8
Calibration	115	201.8	201.3	Outlier	150	208.6	202.2
註：1. NIR 代表近紅外光光譜儀預測數據。 2. Lab. 代表實驗室傳統分析數據。 3. Calibration 代表校正組、Validation 代表確證組、 Outlier 代表剔除組。					Ave.	203.7	203.5
					Max.	208.7	215.5
					Min.	196.1	193.0
					Stdevp	2.9	4.4

七、NIR及Lab. 氧含量 (% , *m/m*) 數據

樣品區分	樣品序號	NIR	Lab.	樣品區分	樣品序號	NIR	Lab.
Calibration	1	2.13	2.11	Calibration	41	2.97	2.95
Calibration	2	2.12	2.12	Calibration	42	2.56	2.65
Calibration	3	2.13	2.08	Calibration	43	2.55	2.62
Calibration	4	2.14	2.11	Calibration	44	2.66	2.63
Calibration	5	2.14	2.10	Calibration	45	2.65	2.62
Calibration	6	2.13	2.14	Calibration	46	2.66	2.63
Calibration	7	2.80	2.81	Calibration	47	2.65	2.67
Calibration	8	2.79	2.80	Calibration	48	2.61	2.78
Calibration	9	2.79	2.81	Calibration	49	2.61	2.61
Calibration	10	2.79	2.79	Calibration	50	2.60	2.57
Calibration	11	2.78	2.82	Calibration	51	2.61	2.59
Calibration	12	2.79	2.80	Calibration	52	2.60	2.60
Calibration	13	2.78	2.82	Calibration	53	2.61	2.60
Calibration	14	2.78	2.82	Calibration	54	2.72	2.72
Calibration	15	2.79	2.82	Calibration	55	2.72	2.67
Calibration	16	2.99	3.20	Calibration	56	2.70	2.70
Calibration	17	2.99	2.93	Calibration	57	2.71	2.72
Calibration	18	2.99	2.94	Calibration	58	2.87	2.89
Calibration	19	2.99	2.93	Calibration	59	2.86	2.88
Calibration	20	2.98	2.93	Calibration	60	2.89	2.89
Calibration	21	2.98	2.91	Calibration	61	2.88	2.90
Calibration	22	1.90	1.89	Calibration	62	2.88	2.88
Calibration	23	1.89	1.89	Calibration	63	2.88	2.84
Calibration	24	1.90	1.91	Calibration	64	2.85	2.86
Calibration	25	1.90	1.91	Calibration	65	2.84	2.86
Calibration	26	1.90	1.90	Calibration	66	2.85	2.81
Calibration	27	1.91	1.89	Calibration	67	2.84	2.84
Calibration	28	2.98	3.00	Calibration	68	2.85	2.86
Calibration	29	3.00	2.98	Calibration	69	2.85	2.86
Calibration	30	3.00	2.97	Calibration	70	2.85	2.85
Calibration	31	2.99	2.98	Calibration	71	2.85	2.86
Calibration	32	2.99	2.98	Calibration	72	2.86	2.87
Calibration	33	3.00	2.99	Calibration	73	2.93	2.91
Calibration	34	3.00	2.95	Calibration	74	2.93	2.94
Calibration	35	3.00	2.96	Calibration	75	2.93	2.95
Calibration	36	2.98	2.98	Calibration	76	2.93	2.96
Calibration	37	2.99	2.99	Calibration	77	2.93	2.93
Calibration	38	2.97	2.98	Calibration	78	2.89	2.92
Calibration	39	2.98	3.00	Calibration	79	2.91	2.90
Calibration	40	2.96	2.95	Calibration	80	2.91	2.93

樣品區分	樣品序號	NIR	Lab.	樣品區分	樣品序號	NIR	Lab.
Calibration	81	2.92	2.91	Calibration	116	2.90	2.89
Calibration	82	2.91	2.90	Calibration	117	2.92	2.93
Calibration	83	2.91	2.93	Calibration	118	2.96	2.89
Calibration	84	2.95	2.94	Calibration	119	2.89	2.86
Calibration	85	2.94	2.94	Calibration	120	2.95	2.91
Calibration	86	2.93	2.91	Calibration	121	2.90	2.86
Calibration	87	2.81	2.78	Calibration	122	2.90	2.89
Calibration	88	2.80	2.79	Calibration	123	2.91	2.90
Calibration	89	2.81	2.74	Calibration	124	2.98	2.97
Calibration	90	2.78	2.79	Calibration	125	2.96	2.91
Calibration	91	2.78	2.70	Calibration	126	2.98	2.96
Calibration	92	2.79	2.78	Calibration	127	2.98	2.97
Calibration	93	2.80	2.78	Validation	128	2.64	2.58
Calibration	94	2.90	2.96	Validation	129	2.65	2.63
Calibration	95	2.89	2.93	Validation	130	2.65	2.66
Calibration	96	2.90	2.90	Validation	131	2.66	2.66
Calibration	97	2.89	2.93	Validation	132	2.65	2.61
Calibration	98	2.88	2.91	Validation	133	2.71	2.69
Calibration	99	2.89	2.91	Validation	134	2.71	2.69
Calibration	100	2.85	2.91	Validation	135	2.93	2.94
Calibration	101	2.85	2.87	Validation	136	2.81	2.79
Calibration	102	2.85	2.90	Validation	137	2.90	2.89
Calibration	103	2.85	2.89	Validation	138	2.94	2.93
Calibration	104	2.99	2.96	Validation	139	2.90	2.87
Calibration	105	3.00	2.95	Validation	140	2.91	2.88
Calibration	106	2.83	2.84	Validation	141	2.90	2.90
Calibration	107	2.81	2.84	Outlier	142	1.56	1.47
Calibration	108	2.82	2.79	Outlier	143	1.58	1.51
Calibration	109	2.80	2.79	Outlier	144	1.62	1.55
Calibration	110	2.79	2.81	Outlier	145	1.67	1.53
Calibration	111	2.89	2.90	Outlier	146	2.55	2.65
Calibration	112	2.89	2.91	Outlier	147	2.55	2.63
Calibration	113	2.90	2.90	Outlier	148	2.54	2.63
Calibration	114	2.90	2.91	Outlier	149	2.54	2.64
Calibration	115	2.89	2.92	Outlier	150	2.55	2.62
註：1. NIR 代表近紅外光光譜儀預測數據。 2. Lab. 代表實驗室傳統分析數據。 3. Calibration 代表校正組、Validation 代表確證組、 Outlier 代表剔除組。					Ave.	2.78	2.78
					Max.	3.00	3.20
					Min.	1.89	1.89
					Stdevp	0.27	0.27

八、NIR及Lab. 苯含量 (% , v/v) 數據

樣品區分	樣品序號	NIR	Lab.	樣品區分	樣品序號	NIR	Lab.
Calibration	1	0.78	0.78	Calibration	41	0.60	0.61
Calibration	2	0.78	0.78	Calibration	42	0.56	0.57
Calibration	3	0.78	0.78	Calibration	43	0.56	0.57
Calibration	4	0.78	0.78	Calibration	44	0.58	0.56
Calibration	5	0.78	0.78	Calibration	45	0.59	0.56
Calibration	6	0.78	0.78	Calibration	46	0.59	0.56
Calibration	7	0.69	0.70	Calibration	47	0.57	0.58
Calibration	8	0.70	0.70	Calibration	48	0.56	0.57
Calibration	9	0.70	0.70	Calibration	49	0.57	0.57
Calibration	10	0.70	0.70	Calibration	50	0.56	0.56
Calibration	11	0.70	0.70	Calibration	51	0.56	0.56
Calibration	12	0.70	0.70	Calibration	52	0.56	0.56
Calibration	13	0.70	0.70	Calibration	53	0.57	0.56
Calibration	14	0.70	0.69	Calibration	54	0.56	0.56
Calibration	15	0.70	0.69	Calibration	55	0.56	0.56
Calibration	16	0.72	0.73	Calibration	56	0.57	0.56
Calibration	17	0.72	0.73	Calibration	57	0.58	0.59
Calibration	18	0.72	0.73	Calibration	58	0.58	0.58
Calibration	19	0.72	0.72	Calibration	59	0.59	0.58
Calibration	20	0.72	0.69	Calibration	60	0.58	0.58
Calibration	21	0.71	0.73	Calibration	61	0.58	0.59
Calibration	22	0.77	0.75	Calibration	62	0.58	0.59
Calibration	23	0.77	0.77	Calibration	63	0.58	0.58
Calibration	24	0.77	0.78	Calibration	64	0.58	0.58
Calibration	25	0.77	0.79	Calibration	65	0.58	0.58
Calibration	26	0.77	0.77	Calibration	66	0.58	0.59
Calibration	27	0.77	0.78	Calibration	67	0.58	0.57
Calibration	28	0.62	0.63	Calibration	68	0.58	0.59
Calibration	29	0.62	0.60	Calibration	69	0.58	0.59
Calibration	30	0.62	0.64	Calibration	70	0.58	0.59
Calibration	31	0.62	0.61	Calibration	71	0.58	0.59
Calibration	32	0.62	0.64	Calibration	72	0.60	0.60
Calibration	33	0.62	0.58	Calibration	73	0.60	0.61
Calibration	34	0.62	0.63	Calibration	74	0.60	0.60
Calibration	35	0.62	0.63	Calibration	75	0.60	0.60
Calibration	36	0.60	0.61	Calibration	76	0.60	0.60
Calibration	37	0.61	0.61	Calibration	77	0.60	0.60
Calibration	38	0.60	0.59	Calibration	78	0.60	0.59
Calibration	39	0.60	0.60	Calibration	79	0.60	0.59
Calibration	40	0.60	0.61	Calibration	80	0.60	0.59

樣品區分	樣品序號	NIR	Lab.	樣品區分	樣品序號	NIR	Lab.
Calibration	81	0.60	0.59	Calibration	116	0.56	0.56
Calibration	82	0.60	0.60	Calibration	117	0.56	0.55
Calibration	83	0.59	0.58	Calibration	118	0.56	0.56
Calibration	84	0.58	0.59	Calibration	119	0.56	0.56
Calibration	85	0.59	0.59	Calibration	120	0.56	0.56
Calibration	86	0.59	0.59	Calibration	121	0.56	0.56
Calibration	87	0.61	0.61	Calibration	122	0.56	0.56
Calibration	88	0.61	0.61	Calibration	123	0.56	0.56
Calibration	89	0.60	0.61	Calibration	124	0.56	0.56
Calibration	90	0.61	0.62	Calibration	125	0.56	0.56
Calibration	91	0.61	0.60	Calibration	126	0.56	0.56
Calibration	92	0.62	0.62	Calibration	127	0.55	0.56
Calibration	93	0.62	0.61	Validation	128	0.58	0.56
Calibration	94	0.62	0.61	Validation	129	0.57	0.58
Calibration	95	0.61	0.63	Validation	130	0.57	0.57
Calibration	96	0.62	0.62	Validation	131	0.56	0.55
Calibration	97	0.62	0.62	Validation	132	0.56	0.56
Calibration	98	0.61	0.62	Validation	133	0.56	0.56
Calibration	99	0.61	0.62	Validation	134	0.56	0.57
Calibration	100	0.61	0.62	Validation	135	0.56	0.56
Calibration	101	0.61	0.63	Validation	136	0.60	0.60
Calibration	102	0.62	0.60	Validation	137	0.60	0.61
Calibration	103	0.62	0.61	Validation	138	0.60	0.60
Calibration	104	0.58	0.58	Validation	139	0.56	0.56
Calibration	105	0.57	0.58	Validation	140	0.56	0.56
Calibration	106	0.58	0.57	Validation	141	0.56	0.56
Calibration	107	0.58	0.58	Outlier	142	0.76	0.81
Calibration	108	0.57	0.55	Outlier	143	0.77	0.81
Calibration	109	0.59	0.59	Outlier	144	0.76	0.82
Calibration	110	0.59	0.59	Outlier	145	0.77	0.81
Calibration	111	0.59	0.59	Outlier	146	0.56	0.56
Calibration	112	0.59	0.59	Outlier	147	0.56	0.58
Calibration	113	0.59	0.59	Outlier	148	0.56	0.57
Calibration	114	0.59	0.59	Outlier	149	0.56	0.57
Calibration	115	0.56	0.56	Outlier	150	0.56	0.56
註：1. NIR 代表近紅外光光譜儀預測數據。					Ave.	0.62	0.62
2. Lab. 代表實驗室傳統分析數據。					Max.	0.78	0.79
3. Calibration 代表校正組、Validation 代表確證組、					Min.	0.55	0.55
Outlier 代表剔除組。					Stdevp	0.07	0.07