به نام ایزد یکتا

باسمه تعالی

تاییدیه اعضای هیات داوران حاضر در جلسه دفاع از رساله دکتری

دانشکده کشاورزی

بدینوسیله گواهی می‌شود خانم **بهاره جمشیدی** در تاریخ **۱۳۹۱/۶/۲۸** از رساله دکتری **۱۸** واحدی خود با عنوان: **تشخیص و تفکیک غیر مخرب مزه پرتقال با اسپکتروسکوپی مرئی/ فروسرخ نزدیک (Vis/NIR)** دفاع کرده است. اعضای هیات داوران نسخه نهایی این رساله را از نظر فرم و محتوا بررسی کرده و پذیرش آن را برای دریافت درجه دکتری تخصصی (Ph.D) تائید می‌نمایند.

اعضای هیات داوران	نام و نام خانوادگی	رتبه علمی	امضاء
۱- استاد راهنمای اصلی	سعید مینائی	دانشیار	
۲- استاد راهنمای دوم	عزالدین مهاجرانی	دانشیار	
۳- استاد مشاور اول	حسن قاسمیان	استاد	
۴- استاد مشاور دوم			
۵- استاد ناظر	سید حسن توسلی	دانشیار	
۶- استاد ناظر	اکبر عرب حسینی	دانشیار	
۷- استاد ناظر	محمدهادی خوش تقاضا	دانشیار	
۸- استاد ناظر	احمد بناکار	استادیار	
۹- نماینده شورای تحصیلات تکمیلی	غلامحسن نجفی	استادیار	

آیین‌نامه حق مالکیت مادی و معنوی در مورد نتایج پژوهش‌های علمی دانشگاه تربیت مدرس

مقدمه: با عنایت به سیاست‌های پژوهشی و فناوری دانشگاه در راستای تحقق عدالت و کرامت انسان‌ها که لازمه شکوفایی علمی و فنی است و رعایت حقوق مادی و معنوی دانشگاه و پژوهشگران، لازم است اعضای هیأت علمی، دانشجویان، دانش‌آموختگان و دیگر همکاران طرح، در مورد نتایج پژوهش‌های علمی که تحت عناوین پایان‌نامه، رساله و طرح‌های تحقیقاتی با هماهنگی دانشگاه انجام شده است، موارد زیر را رعایت نمایند:

ماده ۱- حق نشر و تکثیر پایان‌نامه/ رساله و درآمدهای حاصل از آنها متعلق به دانشگاه می‌باشد ولی حقوق معنوی پدیدآورندگان محفوظ خواهد بود.

ماده ۲- انتشار مقاله یا مقالات مستخرج از پایان‌نامه/ رساله به صورت چاپ در نشریات علمی و یا ارائه در مجامع علمی باید به نام دانشگاه بوده و با تایید استاد راهنمای اصلی، یکی از اساتید راهنما، مشاور و یا دانشجو مسئول مکاتبات مقاله باشد. ولی مسئولیت علمی مقاله مستخرج از پایان‌نامه و رساله به عهده اساتید راهنما و دانشجو می‌باشد.

تبصره: در مقالاتی که پس از دانش‌آموختگی بصورت ترکیبی از اطلاعات جدید و نتایج حاصل از پایان‌نامه/ رساله نیز منتشر می‌شود نیز باید نام دانشگاه درج شود.

ماده ۳- انتشار کتاب، نرم‌افزار و یا آثار ویژه (اثری هنری مانند فیلم، عکس، نقاشی و نمایش‌نامه) حاصل از نتایج پایان‌نامه/ رساله و تمامی طرح‌های تحقیقاتی کلیه واحدهای دانشگاه اعم از دانشکده‌ها، مراکز تحقیقاتی، پژوهشکده‌ها، پارک علم و فناوری و دیگر واحدها باید با مجوز کتبی صادره از معاونت پژوهشی دانشگاه و بر اساس آئین‌نامه‌های مصوب انجام شود.

ماده ۴- ثبت اختراع و تدوین دانش فنی و یا ارائه یافته‌ها در جشنواره‌های ملی، منطقه‌ای و بین‌المللی که حاصل نتایج مستخرج از پایان‌نامه/ رساله و تمامی طرح‌های تحقیقاتی دانشگاه باید با هماهنگی استاد راهنما یا مجری طرح از طریق معاونت پژوهشی دانشگاه انجام گیرد.

ماده ۵- این آیین‌نامه در ۵ ماده و یک تبصره در تاریخ ۸۷/۴/۱ در شورای پژوهشی و در تاریخ ۸۷/۴/۲۳ در هیأت رئیسه دانشگاه به تایید رسید و در جلسه مورخ ۸۷/۷/۱۵ شورای دانشگاه به تصویب رسیده و از تاریخ تصویب در شورای دانشگاه لازم‌الاجرا است.

«اینجانب بهاره جمشیدی دانشجوی رشته مکانیک ماشین‌های کشاورزی ورودی سال تحصیلی ۱۳۸۷ مقطع دکتری تخصصی دانشکده کشاورزی متعهد می‌شوم کلِیه نکات مندرج در آئین‌نامه حق مالکیت مادی و معنوی در مورد نتایج پژوهش‌های علمی دانشگاه تربیت مدرس را در انتشار یافته‌های علمی مستخرج از پایان‌نامه/ رساله تحصیلی خود رعایت نمایم. در صورت تخلف از مفاد آئین‌نامه فوق‌الاشعار به دانشگاه وکالت و نمایندگی می‌دهم که از طرف اینجانب نسبت به لغو امتیاز اختراع بنام بنده و یا هر گونه امتیاز دیگر و تغییر آن به نام دانشگاه اقدام نماید. ضمناً نسبت به جبران فوری ضرر و زیان حاصله بر اساس برآورد دانشگاه اقدام خواهم نمود و بدینوسیله حق هر گونه اعتراض را از خود سلب نمودم»

امضا: بهاره جمشیدی

تاریخ: ۱۳۹۱/۶/۲۸

آیین‌نامه چاپ پایان‌نامه (رساله)های دانشجویان دانشگاه تربیت مدرس

نظر به اینکه چاپ و انتشار پایان‌نامه (رساله)های تحصیلی دانشجویان دانشگاه تربیت مدرس، مبین بخشی از فعالیت‌های علمی- پژوهشی دانشگاه است بنابراین به منظور آگاهی و رعایت حقوق دانشگاه، دانش‌آموختگان این دانشگاه نسبت به رعایت موارد ذیل متعهد می‌شوند:

ماده ۱: در صورت اقدام به چاپ پایان‌نامه (رساله)ی خود، مراتب را قبلاً به طور کتبی به «دفتر نشر آثار علمی» دانشگاه اطلاع دهد.

ماده ۲: در صفحه سوم کتاب (پس از برگ شناسنامه) عبارت ذیل را چاپ کند:

«کتاب حاضر، حاصل پایان‌نامه کارشناسی ارشد/ رساله دکتری نگارنده در رشته ..... است که در سال ..... در دانشکده ..... دانشگاه تربیت مدرس به راهنمایی سرکار خانم/جناب آقای دکتر .....، مشاوره سرکار خانم/جناب آقای دکتر ..... و مشاوره سرکار خانم/جناب آقای دکتر ..... از آن دفاع شده است.»

ماده ۳: به منظور جبران بخشی از هزینه‌های انتشارات دانشگاه، تعداد یک درصد شمارگان کتاب (در هر نوبت چاپ) را به «دفتر نشر آثار علمی» دانشگاه اهدا کند. دانشگاه می‌تواند مازاد نیاز خود را به نفع مرکز نشر در معرض فروش قرار دهد.

ماده ۴: در صورت عدم رعایت ماده ۳، ۵۰٪ بهای شمارگان چاپ‌شده را به عنوان خسارت به دانشگاه تربیت‌مدرس، تأدیه کند.

ماده ۵: دانشجو تعهد و قبول می‌کند در صورت خودداری از پرداخت بهای خسارت، دانشگاه می‌تواند خسارت مذکور را از طریق مراجع قضایی مطالبه و وصول کند؛ به علاوه به دانشگاه حق می‌دهد به منظور استیفای حقوق خود، از طریق دادگاه، معادل وجه مذکور در ماده ۴ را از محل توقیف کتاب‌های عرضه‌شده نگارنده برای فروش، تامین نماید.

ماده ۶: اینجانب بهاره جمشیدی دانشجوی رشته مکانیک ماشین‌های کشاورزی مقطع دکتری تخصصی تعهد فوق و ضمانت اجرایی آن را قبول کرده، به آن ملتزم می‌شوم.

نام و نام خانوادگی: **بهاره جمشیدی**

تاریخ و امضا: ۱۳۹۱/۶/۲۸

دانشگاه تربیت مدرس

دانشکده کشاورزی

رساله برای دریافت درجه دکتری تخصصی گروه مکانیک ماشین‌های کشاورزی

تشخیص و تفکیک غیر مخرب مزه پرتقال با اسپکتروسکوپی مرئی/فروسرخ نزدیک (Vis/NIR)

بهاره جمشیدی

استاد راهنما (اصلی):

دکتر سعید مینایی

استاد راهنما (دوم):

دکتر عزالدین مهاجرانی

استاد مشاور:

دکتر حسن قاسمیان

شهریور ۱۳۹۱

تقدیم به

پدر، مادر، برادر و همسر عزیزم

که در سخت‌ترین لحظه‌های این راه مشوق و همیار من بودند

بانهایت سپاس از

استادراهنمای بزرگوارم جناب آقای دکتر سعید مینایی که در همه مراحل اجرای پژوهش و تحصیل دلسوزانه و صبورانه مرا راهنمایی و همراهی کردند.

استادراهنمای گرانقدر دیگرم جناب آقای دکتر عزالدین مهاجرانی که به طور قطع بدون راهنمایی ها و همراهی های ایشان این پژوهش به سامان نمی رسید.

استادمشاور خوبم جناب آقای دکتر حسن قاسمیان که گاه و بی گاه از مشاوره های بی بدیل ایشان سود بردم.

اساتید ارجمند جناب آقایان دکتر محمدهادی خوش تقاضا، دکتر اکبر عرب حسینی، دکتر سید حسن توسلی و دکتر احمد بناکار که زحمت داوری رساله را بر عهده داشتند.

مدیر محترم گروه جناب آقای دکتر غلامحسن نجفی، اساتید محترم و کارشناس گروه مکانیک ماشین های کشاورزی دانشکده کشاورزی دانشگاه تربیت مدرس، مسئولین محترم آزمایشگاه های پژوهشکده لیزر و پلاسما دانشگاه شهید بهشتی سرکار خانم ها افخمی و عربانیان، مسئول محترم آزمایشگاه صنایع غذایی دانشکده کشاورزی دانشگاه تربیت مدرس آقای مهندس تالهی، مسئولین محترم موسسه تحقیقات فنی و مهندسی کشاورزی، و همه دوستان و عزیزانی که به هر نحوی مرا در این راه یاری رساندند.

و با سپاس ویژه از:

پدر، مادر، برادر و همسر عزیزم که وجود پر مهرشان سبب دلگرمی و آرامش من در این راه شد.

تشخیص و تفکیک غیر مخرب مزه پرتقال با اسپکتروسکوپی مرئی/فروسرخ نزدیک

چکیده

در این پژوهش، توانایی روش اسپکتروسکوپی مرئی/ فروسرخ نزدیک (Vis/NIR) بازتابی به منظور تشخیص و تفکیک غیر مخرب مزه پرتقال‌ها بررسی شد. در این راستا، ابتدا طیف‌های مرئی/ فروسرخ نزدیک موج کوتاه (Vis/SW-NIR) پرتقال‌های با پوست و بدون پوست در محدوده طیفی nm ۱۰۰۰- ۴۵۰ برای بررسی اثر پوست میوه بر اسپکتروسکوپی، مقایسه و تفسیر شدند. در ادامه، اسپکتروسکوپی بازتابی از دو واریته پرتقال (والنسیا و تامسون ناول) با دو اسپکترومتر مختلف در محدوده‌های طیفی nm ۱۰۰۰- ۴۵۰ (Vis/SW-NIR) و nm ۱۶۵۰- ۹۳۰ (NIR) به منظور تشخیص و پیش‌گویی غیر مخرب شاخص‌های رنگ (a^*، b^*، L^*، CI) و pH که به طور غیر مستقیم با مزه میوه در ارتباط هستند، پارامترهای اصلی مزه شامل اسیدیته قابل تیتر (TA) و مواد جامد حل‌شدنی (SSC)، و شاخص‌های مزه ترکیبی شامل نسبت مواد جامد حل‌شدنی به اسیدیته (SSC/TA) و BrimA که معرف مزه واقعی میوه هستند، انجام شد. مدل‌های واسنجی چندمتغیره رگرسیون مولفه‌های اصلی (PCR) و حداقل مربعات جزئی (PLS) بر پایه اندازه‌گیری‌های مرجع و اطلاعات طیف‌های پیش‌پردازش‌شده با ترکیب روش‌های مختلف هموارسازی (میانگین‌گیری متحرک (MA)، ساویتزکی- گولای (SG)، تبدیل موجک (WT))؛ نرمال‌سازی (تصحیح پخش افزاینده (MSC)، توزیع نرمال استاندارد (SNV))؛ و افزایش قدرت تفکیک طیفی (مشتق‌های اول و دوم (D_1، D_2) برای پیش‌گویی ویژگی‌ها و شاخص‌های مزه تدوین شدند. هم‌چنین، روش‌های بازشناسی الگوی نظارت‌نشده و نظارت‌شده، خوشه‌بندی سلسله مراتبی (HCA) و مدل‌سازی مستقل نرم شباهت‌های طبقه (SIMCA) به ترتیب برای امکان‌سنجی تفکیک واریته‌های پرتقال و طبقه‌بندی (بر اساس مزه آنها) بر پایه اطلاعات طیفی محدوده‌های nm ۱۰۰۰- ۴۵۰ و nm ۱۶۵۰- ۹۳۰ استفاده شدند. نتایج نشان داد که ناحیه بروز پیک‌های جذبی مهم طیف‌های Vis/SW-NIR در پرتقال‌های با پوست و بدون پوست مشابه است و اختلاف میان طول موج‌های این پیک‌ها در سطح احتمال ۵ درصد معنی‌دار نیست. بنابراین، اثر ترکیبات شیمیایی پوست در تعیین غیر مخرب ویژگی‌های درونی پرتقال‌ها بر پایه طیف‌های Vis/SW-NIR بازتابی آنها می‌تواند نادیده گرفته شود. بر اساس آنالیزهای کمّی، اسپکتروسکوپی Vis/NIR بازتابی در ترکیب با روش‌های شیمی‌سنجی توانایی پیش‌گویی غیر مخرب پارامترها و شاخص‌های مزه پرتقال‌ها را دارد و کاربرد این روش برای تشخیص مزه به طور مستقیم بر پایه شاخص BrimA که بهترین شاخص مرتبط با طعم میوه است، به جای تعیین SSC و TA به تنهایی، پیشنهاد می‌شود. آنالیزهای کیفی نشان داد که طیف‌های Vis/NIR واریته‌های پرتقال به خوبی با بازشناسی الگوی نظارت‌نشده HCA خوشه‌بندی شدند. هم‌چنین، بازشناسی الگوی نظارت‌شده SIMCA برای طیف‌های Vis/NIR پرتقال‌ها نتایج عالی طبقه‌بندی واریته بر اساس شاخص BrimA را در سطح احتمال ۵٪ در بر داشت. نمونه‌های دارای مقدارهای یکسان شاخص BrimA نیز به‌درستی و با دقت طبقه‌بندی بالا در سطح احتمال ۵٪ طبقه‌بندی شدند. بنابراین، اسپکتروسکوپی Vis/NIR بازتابی می‌تواند برای تشخیص سایر ویژگی‌های مزه نیز به‌کار رود.

واژه‌های کلیدی: اسپکتروسکوپی، پرتقال، طبقه‌بندی، غیر مخرب، مرئی/ فروسرخ نزدیک، مزه

فهرست مطالب

عنوان صفحه

فصل یک: مقدمه

۱-۱- تعریف و بیان مسئله ۱

۱-۲- ضرورت انجام پژوهش ۳

۱-۳- هدف و فرضیه ۴

فصل دو: پیشینه پژوهش

۲-۱- مفاهیم پایه اسپکتروسکوپی NIR ۶

۲-۱-۱- تابش الکترومغناطیس ۶

۲-۱-۲- تابش IR ۹

۲-۱-۲-۱- حرکت‌های ارتعاشی مولکول ۱۰

۲-۱-۲-۲- مدل‌های توصیف حرکت ارتعاشی ۱۲

۲-۱-۳- تابش NIR ۱۴

۲-۱-۴- اسپکتروسکوپی NIR ۱۵

۲-۲- تجهیزات اسپکتروسکوپی NIR ۱۷

۲-۲-۱- اسپکتروفتومتر ۱۷

۲-۲-۱-۱- منبع نور ۱۸

۲-۲-۱-۲- تکفام‌ساز ۱۸

۲-۲-۱-۳- آشکارساز ۱۹

۲-۲-۲- فیبرهای نوری ۲۰

۲-۲-۳- مدهای اسپکتروسکوپی ۲۰

۲-۲-۳-۱- مد بازتاب ۲۱

۲-۲-۳-۲- مد عبور ۲۲

۲-۲-۳-۳- مد برهم‌کنش ۲۳

۲-۳- مزه مواد غذایی ۲۴
۲-۳-۱- مزه شیرین ۲۵
۲-۳-۲- مزه ترش ۲۶
۲-۳-۳- مزه شور ۲۷
۲-۳-۴- مزه تلخ ۲۷
۲-۳-۵- مزه‌های ترکیبی ۲۷
۲-۳-۶- جنبه‌های چشایی دیگر ۲۷

۲-۴- مرکبات ۲۸
۲-۴-۱- بخش‌های تشکیل‌دهنده میوه ۲۸
۲-۴-۲- ترکیب‌های شیمیایی ۲۸
۲-۴-۳- مزه مرکبات ۳۰
۲-۴-۳-۱- شاخص SSC/TA ۳۰
۲-۴-۳-۲- شاخص BrimA ۳۱

۲-۵- کاربرد اسپکتروسکوپی NIR در کشاورزی ۳۲

۲-۶- وجه تمایز پژوهش حاضر با پژوهش‌های پیشین ۴۲

فصل سه: مواد و روش‌ها

۳-۱- طراحی چیدمان و انتخاب مد مناسب اسپکتروسکوپی ۴۴
۳-۱-۱- تجهیزات اسپکتروسکوپی مورد استفاده ۴۴
۳-۱-۱-۱- اسپکترومتر ۴۴
۳-۱-۱-۲- منبع نوری ۴۵
۳-۱-۱-۳- فیبر نوری ۴۶
۳-۱-۲- چیدمان اسپکتروسکوپی ۴۷
۳-۱-۳- اسپکتروسکوپی در مدهای مختلف و انتخاب بهترین مد ۴۸

۳-۲- بررسی اثر پوست پرتقال بر اسپکتروسکوپی Vis/SW-NIR ۵۰
۳-۲-۱- اسپکتروسکوپی Vis/SW-NIR بازتابی ۵۱

۳-۲-۲- مقایسه و تفسیر طیف‌های Vis/SW-NIR بازتابی ۵۲

۳-۳- بررسی امکان تشخیص غیر مخرب مزه پرتقال با اسپکتروسکوپی Vis/SW-NIR ۵۲
۳-۳-۱- انتخاب نمونه ۵۳
۳-۳-۲- اسپکتروسکوپی Vis/SW-NIR بازتابی ۵۴
۳-۳-۳- اندازه‌گیری‌های مرجع ۵۴
۳-۳-۳-۱- اندازه‌گیری رنگ ۵۴
۳-۳-۳-۲- اندازه‌گیری TA (بر حسب اسید سیتریک) ۵۵
۳-۳-۳-۳- اندازه‌گیری SSC ۵۶
۳-۳-۳-۴- محاسبه شاخص‌های مزه ترکیبی ۵۸
۳-۳-۳-۵- اندازه‌گیری pH ۵۸
۳-۳-۴- آماده‌سازی و پیش‌پردازش طیف‌ها ۵۸
۳-۳-۴-۱- میانگین‌گیری متحرک (MA) ۵۹
۳-۳-۴-۲- هموارسازی ساویتزکی-گولای (SG) ۶۰
۳-۳-۴-۳- تبدیل موجک (WT) ۶۰
۳-۳-۴-۴- تصحیح پخش افزاینده (MSC) ۶۱
۳-۳-۴-۵- توزیع نرمال استاندارد (SNV) ۶۲
۳-۳-۴-۶- مشتق اول و دوم (D_1, D_2) ۶۳
۳-۳-۴-۷- ترکیب روش‌های پیش‌پردازش ۶۳
۳-۳-۵- مدل‌سازی رگرسیون چندمتغیره ۶۴
۳-۳-۵-۱- تجزیه مولفه‌های اصلی (PCA) ۶۵
۳-۳-۵-۲- رگرسیون مولفه‌های اصلی (PCR) ۶۶
۳-۳-۵-۳- حداقل مربعات جزئی (PLS) ۶۷
۳-۳-۶- اعتبارسنجی مدل‌ها و انتخاب بهترین مدل ۶۹

۳-۴- بررسی امکان تشخیص غیر مخرب مزه پرتقال با اسپکتروسکوپی NIR ۷۱

۳-۵- بررسی امکان تفکیک غیر مخرب پرتقال‌ها بر اساس مزه با اسپکتروسکوپی Vis/NIR ۷۲
۳-۵-۱- آنالیز خوشه سلسله مراتبی (HCA) ۷۲
۳-۵-۲- مدل‌سازی مستقل نرم شباهت‌های طبقه (SIMCA) ۷۳
۳-۵-۲-۱- طبقه‌بندی واریته‌های پرتقال بر اساس مزه (شاخص BrimA) ۷۴

۳-۵-۲-۲- طبقه‌بندی واریته‌های پرتقال بر اساس سایر پارامترهای مربوط به مزه.....۷۵

فصل چهار: نتایج و بحث

۴-۱- تفسیر طیف‌های Vis/SW-NIR پرتقال در مدهای مختلف اسپکتروسکوپی.....۷۶
۴-۱-۱- مد بازتاب.....۷۶
۴-۱-۲- مد عبور.....۷۸
۴-۱-۳- مد برهم‌کنش.....۷۹
۴-۱-۴- مد مناسب اسپکتروسکوپی ۸۰

۴-۲- تفسیر و مقایسه طیف‌های Vis/SW-NIR بازتابی پرتقال با پوست و بدون پوست ۸۰

۴-۳- آنالیزهای کمّی برای تشخیص غیر مخرب مزه پرتقال با اسپکتروسکوپی Vis/SW-NIR.....۸۳
۴-۳-۱- مشخصات نمونه‌ها ۸۳
۴-۳-۲- مشخصات طیف‌ها.....۸۷
۴-۳-۳- پیش‌پردازش طیف‌ها ۸۹
۴-۳-۴- مدل‌سازی رگرسیون چندمتغیره.....۹۱
۴-۳-۴-۱- تشخیص رنگ.....۹۱
۴-۳-۴-۲- تشخیص TA ۹۸
۴-۳-۴-۳- تشخیص SSC ۱۰۱
۴-۳-۴-۴- تشخیص SSC/TA ۱۰۵
۴-۳-۴-۵- تشخیص BrimA.....۱۰۹
۴-۳-۴-۶- تشخیص pH.....۱۱۴

۴-۴- آنالیزهای کمّی برای تشخیص غیر مخرب مزه پرتقال با اسپکتروسکوپی NIR.....۱۱۷
۴-۴-۱- مشخصات نمونه‌ها ۱۱۷
۴-۴-۲- مشخصات و تفسیر طیف‌ها ۱۱۹
۴-۴-۳- پیش‌پردازش طیف‌ها ۱۲۰
۴-۴-۴- مدل‌سازی رگرسیون چندمتغیره.....۱۲۲
۴-۴-۴-۱- تشخیص TA ۱۲۲
۴-۴-۴-۲- تشخیص SSC ۱۲۶
۴-۴-۴-۳- تشخیص SSC/TA ۱۲۹

۴-۴-۴-۴- تشخیص BrimA ۱۳۳
۴-۴-۴-۵- تشخیص pH ۱۳۴

۴-۵- آنالیزهای کیفی برای تفکیک غیر مخرب پرتقال‌ها با اسپکتروسکوپی Vis/NIR ۱۴۱
۴-۵-۱- خوشه‌بندی واریته‌های پرتقال بر پایه طیف‌های Vis/NIR ۱۴۱
۴-۵-۲- طبقه‌بندی واریته‌های پرتقال بر اساس مزه و بر پایه طیف‌های Vis/NIR ۱۴۱
۴-۵-۳- طبقه‌بندی واریته‌های پرتقال با مزه یکسان بر پایه طیف‌های Vis/NIR ۱۴۷

۴-۶- طرح سامانه تشخیص و پیش‌گویی غیر مخرب مزه پرتقال با اسپکتروسکوپی Vis/NIR ۱۵۰

فصل پنج: نتیجه‌گیری و پیشنهادها

۵-۱- نتیجه‌گیری ۱۵۲

۵-۲- پیشنهادها ۱۵۴

مراجع ۱۵۵

نمادها و نشانه‌ها

نشانه	توضیح	واحد
A	تعداد متغیرهای نهان	-
Abs	میزان جذب	-
a	پارامتر مقیاس	-
a^*	شاخص هانتر معرف بعدهای سرخ- سبز	-
a_i	ثابت رگرسیون	-
B	ماتریس ضریب‌های رگرسیون	-
b	پارامتر انتقال	-
b^*	شاخص هانتر معرف بعدهای زرد- آبی	-
b_i	ثابت رگرسیون	-
C	سرعت انتشار نور در خلاء	m/s
c	غلظت نمونه	mol/L
D	شدت نور تیره	-
D_1	مشتق اول	-
D_2	مشتق دوم	-
E	انرژی تابش	J
ΔE	تغییر انرژی	J
F	ماتریس خطای داده‌های طیفی	-
G	ماتریس خطای ویژگی‌ها	-
h	ثابت پلانک	Js
I	شدت نور خروجی	-
I_0	شدت نور ورودی	-
i	زاویه فرود تابش	Rad

j	طول مسیر نوری	cm
K	ثابت حساسیت زبان	-
k	ثابت نیرو	Kg/s^2
L^*	شاخص هانتر معرف روشنایی	-
M	تعداد اتم	-
m	تعداد ویژگی	-
m_1 و m_2	جرم اتم	Kg
N	تعداد طول موج	-
n	تعداد نمونه	-
n^*	عدد کوانتوم	-
n_c	تعداد نمونه‌های دسته آموزش	-
n_p	تعداد نمونه‌های دسته آزمون	-
P	ماتریس بارگذاری داده‌های طیفی	-
p_a	بردار بارگذاری داده‌های طیفی	-
Q	ماتریس بارگذاری ویژگی‌ها	-
q_a	بردار بارگذاری ویژگی‌ها	-
R	میزان بازتاب نور	-
R^2	ضریب تعیین	-
Ref	شدت نور مرجع	-
r	زاویه شکست تابش	Rad
r_c	ضریب هم‌بستگی واسنجی	-
r_e	فاصله تعادلی پیوند	m
r_p	ضریب هم‌بستگی پیش‌گویی	-
S	شدت نور نمونه	-
T	ماتریس امتیاز داده‌های طیفی	-
Tr	میزان عبور نور	-

t	مقدار سود مصرفی	ml
t_a	بردار امتیاز داده‌های طیفی	-
U	ماتریس امتیاز ویژگی‌ها	-
u_a	بردار امتیاز ویژگی‌ها	-
W	وزن بارگذاری	-
X	ماتریس طیف	-
$\overline{X}$	طیف میانگین نمونه‌ها	-
$\overline{X}_i$	میانگین هر طیف	-
x_e	ثابت غیر هارمونیک	-
Y	ماتریس ویژگی‌های اندازه‌گیری‌شده	-
y_i	مقدار اندازه‌گیری‌شده ویژگی	-
$\hat{y}_i$	مقدار پیش‌گویی‌شده ویژگی	-
y_m	میانگین مقدار اندازه‌گیری‌شده ویژگی	-
ε	ضریب جذب مولی	$L\ mol^{-1}\ cm^{-1}$
μ	جرم کاهش‌یافته	Kg
μ_0	ضریب شکست	-
λ	طول موج	m
υ	فرکانس	Hz
$\bar{\upsilon}$	عدد موجی	cm^{-1}
$\Psi(t)$	تابع موجک مادر	-
$\Psi_{a,b}(t)$	موجک	-

فهرست جدول‌ها

عنوان صفحه

جدول ۲-۱- تقسیم‌بندی ناحیه IR ۹
جدول ۲-۲- تقسیم‌بندی ناحیه NIR..... ۱۵
جدول ۲-۳- کاربرد اسپکتروسکوپی NIR در سنجش برخی از پارامترهای کیفی میوه‌ها و سبزی‌ها یا طبقه‌بندی آنها ۳۴
جدول ۴-۱- مشخصات مدل‌سازی‌های انجام‌شده برای تشخیص پارامترها و شاخص‌های مزه پرتقال‌ها..... ۷۷
جدول ۴-۲- طول موج میانگین هر پیک جذبی در طیف Vis/SW-NIR پرتقال های والنسیا با پوست و بدون پوست ۸۲
جدول ۴-۳- نتایج مقایسه میانگین‌ها بین طول موج‌های هر پیک جذبی در طیف Vis/SW-NIR پرتقال‌های والنسیا با پوست و بدون پوست..... ۸۲
جدول ۴-۴- داده‌های آماری نمونه‌های پرتقال والنسیا در اسپکتروسکوپی Vis/SW-NIR..... ۸۴
جدول ۴-۵- داده‌های آماری نمونه‌های پرتقال تامسون ناول در اسپکتروسکوپی Vis/SW-NIR..... ۸۵
جدول ۴-۶- نتایج واسنجی و پیش‌گویی مدل‌های PLS و PCR بر پایه ترکیب روش‌های مختلف پیش‌پردازش و طیف‌های Vis/SW-NIR برای شاخص a^* پرتقال‌های والنسیا و تامسون ناول ۹۳
جدول ۴-۷- نتایج واسنجی و پیش‌گویی مدل‌های PLS و PCR بر پایه ترکیب روش‌های مختلف پیش‌پردازش و طیف‌های Vis/SW-NIR برای شاخص b^* پرتقال‌های والنسیا و تامسون ناول ۹۴
جدول ۴-۸- نتایج واسنجی و پیش‌گویی مدل‌های PLS و PCR بر پایه ترکیب روش‌های مختلف پیش‌پردازش و طیف‌های Vis/SW-NIR برای شاخص L^* پرتقال‌های والنسیا و تامسون ناول..... ۹۵
جدول ۴-۹- نتایج واسنجی و پیش‌گویی مدل‌های PLS و PCR بر پایه ترکیب روش‌های مختلف پیش‌پردازش و طیف‌های Vis/SW-NIR برای شاخص CI پرتقال‌های والنسیا و تامسون ناول ۹۶
جدول ۴-۱۰- نتایج واسنجی و پیش‌گویی مدل‌های PLS و PCR بر پایه ترکیب روش‌های مختلف پیش‌پردازش و طیف‌های Vis/SW-NIR برای TA پرتقال‌های والنسیا و تامسون ناول ۹۹
جدول ۴-۱۱- نتایج واسنجی و پیش‌گویی مدل‌های PLS و PCR بر پایه ترکیب روش‌های مختلف پیش‌پردازش و طیف‌های Vis/SW-NIR برای SSC پرتقال‌های والنسیا و تامسون ناول ۱۰۳
جدول ۴-۱۲- نتایج واسنجی و پیش‌گویی مدل‌های PLS و PCR بر پایه ترکیب روش‌های مختلف پیش‌پردازش و طیف‌های Vis/SW-NIR برای SSC/TA پرتقال‌های والنسیا و تامسون ناول ۱۰۷

جدول ۴-۱۳- نتایج واسنجی و پیش‌گویی مدل‌های PLS و PCR بر پایه ترکیب روش‌های مختلف پیش‌پردازش و طیف‌های Vis/SW-NIR برای BrimA پرتقال‌های والنسیا و تامسون ناول..... ۱۱۰
جدول ۴-۱۴- نتایج واسنجی و پیش‌گویی مدل‌های PLS و PCR بر پایه ترکیب روش‌های مختلف پیش‌پردازش و طیف‌های Vis/SW-NIR برای pH پرتقال‌های والنسیا و تامسون ناول ۱۱۵
جدول ۴-۱۵- داده‌های آماری نمونه‌های پرتقال والنسیا در اسپکتروسکوپی NIR..... ۱۱۸
جدول ۴-۱۶- داده‌های آماری نمونه‌های پرتقال تامسون ناول در اسپکتروسکوپی NIR ۱۱۸
جدول ۴-۱۷- نتایج واسنجی و پیش‌گویی مدل‌های PLS و PCR بر پایه ترکیب روش‌های مختلف پیش‌پردازش و طیف‌های NIR برای TA پرتقال‌های والنسیا و تامسون ناول ۱۲۴
جدول ۴-۱۸- نتایج واسنجی و پیش‌گویی مدل‌های PLS و PCR بر پایه ترکیب روش‌های مختلف پیش‌پردازش و طیف‌های NIR برای SSC پرتقال‌های والنسیا و تامسون ناول ۱۲۷
جدول ۴-۱۹- نتایج واسنجی و پیش‌گویی مدل‌های PLS و PCR بر پایه ترکیب روش‌های مختلف پیش‌پردازش و طیف‌های NIR برای SSC/TA پرتقال‌های والنسیا و تامسون ناول ۱۳۱
جدول ۴-۲۰- نتایج واسنجی و پیش‌گویی مدل‌های PLS و PCR بر پایه ترکیب روش‌های مختلف پیش‌پردازش و طیف‌های NIR برای BrimA پرتقال‌های والنسیا و تامسون ناول..... ۱۳۵
جدول ۴-۲۱- نتایج واسنجی و پیش‌گویی مدل‌های PLS و PCR بر پایه ترکیب روش‌های مختلف پیش‌پردازش و طیف‌های NIR برای pH پرتقال‌های والنسیا و تامسون ناول ۱۳۹
جدول ۴-۲۲- نتایج طبقه‌بندی SIMCA برای تفکیک واریته‌های پرتقال بر اساس مزه و بر پایه طیف‌های Vis/SW-NIR و NIR..... ۱۴۶
جدول ۴-۲۳- نتایج طبقه‌بندی SIMCA برای تفکیک واریته‌های پرتقال دارای مزه یکسان بر پایه طیف‌های Vis/SW-NIR و NIR..... ۱۵۰

فهرست شکل‌ها

عنوان صفحه

شکل ۲-۱- طیف الکترومغناطیس (جوانبخت و همکاران، ۱۳۸۶) ۷
شکل ۲-۲- فرایند جذب و نشر بین دو سطح کوانتایی انرژی ۹
شکل ۲-۳- حرکت‌های ارتعاشی مختلف برای گروه متیلن (موثق، ۱۳۸۷) ۱۱
شکل ۲-۴- مدل ارتعاشی مولکول دو اتمی ۱۲
شکل ۲-۵- سه شیوه ارتعاش طبیعی در مولکول SO_2 (Bokobza, 2006) ۱۴
شکل ۲-۶- توزیع اورتون‌ها و شیوه‌های ترکیبی پیوندهای اصلی مهم در طیف NIR. "=": موقعیت جذب پیوندها، "C": شیوه ترکیبی، "۵،۴،۳،۲": اورتون‌های چهارم، سوم، دوم، و اول (Cen & He, 2007) ۱۶
شکل ۲-۷- نمونه یک شبکه پراش (الف)، و مکانیزم پراش در یک شبکه بازتابی (ب) (Lin et al., 2009) ۱۹
شکل ۲-۸- چگونگی توزیع تابش در برخورد با یک نمونه بیولوژیک ۲۱
شکل ۲-۹- شیوه اندازه‌گیری در مد بازتاب ۲۲
شکل ۲-۱۰- شیوه اندازه‌گیری در مد عبور کامل (الف)، و عبور نیمه (ب) ۲۲
شکل ۲-۱۱- شیوه اندازه‌گیری در مد برهم‌کنش ۲۳
شکل ۲-۱۲- ساختار کاوشگر فیبر نوری دو شاخه (Slaughter & Crisosto, 1998) ۲۴
شکل ۲-۱۳- محل احساس مزه‌های مختلف روی زبان ۲۴
شکل ۲-۱۴- طرحی از رابطه A-H، B و γ در یک ترکیب شیرین و واحد دریافت‌کننده مزه شیرین ۲۶
شکل ۳-۱- اسپکترومتر CCD مدل USB2000 ..... ۴۵
شکل ۳-۲- منبع نور هالوژن- تنگستن مدل LS-1 (الف) و لامپ بازتاباننده (ب) ۴۵
شکل ۳-۳- کاوشگر فیبر نوری دوشاخه مدل R400-7-VIS-NIR به همراه نگه‌دارنده و نحوه اتصال آن به منبع نور LS-1 و اسپکترومتر USB2000 ..... ۴۶
شکل ۳-۴- فیبر نوری تک‌شاخه مدل P400-2-VIS-NIR ۴۶
شکل ۳-۵- چیدمان اسپکتروسکوپی در اندازه‌گیری‌های مد برهم‌کنش ۴۷
شکل ۳-۶- چیدمان اسپکتروسکوپی در اندازه‌گیری‌های مد عبور ۴۸
شکل ۳-۷- چیدمان اسپکتروسکوپی در اندازه‌گیری‌های مد بازتاب ۴۸
شکل ۳-۸- دیسک سفید استاندارد ۴۹
شکل ۳-۹- روند اجرای مراحل کار ۵۳
شکل ۳-۱۰- دستگاه رنگ‌سنج مدل Colorflex (الف)، و فضای سه‌بعدی رنگ L^*، a^*، و b^* هانتر(ب) ۵۵

شکل ۳-۱۱- دستگاه رفرکتومتر مدل DR-A1 (الف)، و اصل شکست نور (ب) ۵۷
شکل ۳-۱۲- دستگاه pH متر مدل 744 pH Meter ۵۸
شکل ۳-۱۳- اسپکترومتر PDA مدل EPP2000-NIR ۷۱
شکل ۴-۱- طیف جذبی میانگین به‌دست‌آمده از اسپکتروسکوپی پرتقال‌های والنسیا در مد بازتابی ۷۷
شکل ۴-۲- طیف جذبی میانگین به‌دست‌آمده از اسپکتروسکوپی پرتقال‌های والنسیا در مد عبور ۷۹
شکل ۴-۳- طیف جذبی میانگین به‌دست‌آمده از اسپکتروسکوپی پرتقال‌های والنسیا در مد برهم‌کنش ۷۹
شکل ۴-۴- طیف‌های جذبی Vis/SW-NIR میانگین برای پرتقال‌های والنسیا با پوست و بدون پوست.... ۸۱
شکل ۴-۵- هم‌بستگی شاخص‌های SSC/TA و BrimA در پرتقال‌های والنسیا (الف)، و تامسون ناول (ب) ۸۶
شکل ۴-۶- طیف‌های جذبی Vis/SW-NIR همه نمونه‌ها برای واریته والنسیا (الف)، و تامسون (ب)..... ۸۷
شکل ۴-۷- طیف‌های جذبی Vis/SW-NIR میانگین واریته‌های پرتقال ۸۸
شکل ۴-۸- طیف‌های جذبی Vis/SW-NIR پرتقال‌های والنسیا پردازش‌شده با ترکیب روش‌های MA + MSC (الف)، WT + SNV (ب)، $SG + D_1$ (ج)، $SG + D_2$ (د) ۸۹
شکل ۴-۹- طیف‌های جذبی Vis/SW-NIR پرتقال‌های تامسون ناول پردازش‌شده با ترکیب روش‌های MA + MSC (الف)، WT + SNV (ب)، $SG + D_1$ (ج)، $SG + D_2$ (د) ۹۰
شکل ۴-۱۰- نتایج پیش‌گویی شاخص CI برای پرتقال‌های والنسیا (الف و ب)، و تامسون ناول (ج و د) با بهترین مدل‌های رگرسیون تدوین‌شده برای هر کدام بر پایه طیف‌های Vis/SW-NIR ۹۷
شکل ۴-۱۱- نتایج پیش‌گویی TA برای پرتقال‌های والنسیا (الف و ب)، و تامسون ناول (ج و د) با بهترین مدل‌های رگرسیون تدوین‌شده برای هر کدام بر پایه طیف‌های Vis/SW-NIR ۱۰۰
شکل ۴-۱۲- نتایج پیش‌گویی SSC برای پرتقال‌های والنسیا (الف و ب)، و تامسون ناول (ج و د) با بهترین مدل‌های رگرسیون تدوین‌شده برای هر کدام بر پایه طیف‌های Vis/SW-NIR ۱۰۴
شکل ۴-۱۳- نتایج پیش‌گویی SSC/TA برای پرتقال‌های والنسیا (الف و ب)، و تامسون ناول (ج و د) با بهترین مدل‌های رگرسیون تدوین‌شده برای هر کدام بر پایه طیف‌های Vis/SW-NIR ۱۰۸
شکل ۴-۱۴- نتایج پیش‌گویی BrimA برای پرتقال‌های والنسیا (الف و ب)، و تامسون ناول (ج و د) با بهترین مدل‌های رگرسیون تدوین‌شده برای هر کدام بر پایه طیف‌های Vis/SW-NIR ۱۱۱
شکل ۴-۱۵- نمودارهای RMSEP در هر PC یا LV و امتیازهای PCA برای مدل‌های PLS تدوین‌شده بر پایه طیف‌های Vis/SW-NIR و پیش‌پردازش‌های SG + D1 (الف و ب)، و WT + MSC (ج و د) به ترتیب برای پیش‌گویی BrimA پرتقال‌های والنسیا و تامسون ناول ۱۱۳
شکل ۴-۱۶- نتایج پیش‌گویی pH برای پرتقال‌های والنسیا (الف و ب)، و تامسون ناول (ج و د) با بهترین مدل‌های رگرسیون تدوین‌شده برای هر کدام بر پایه طیف‌های Vis/SW-NIR ۱۱۶