

فهرست مطالب

شماره عنوان

فصل اول : مقدمه

شماره صفحه

۱	۱-۱ مقدمه.....	۱
۴	۲-۱ فرضیه‌های تحقیق.....	۴
۴	۳-۱ اهداف.....	۴
۵	۴-۱ بررسی اجمال فصل‌های پایان نامه.....	۵
	فصل دوم : پیشینه پژوهش	
۶	۱-۲ کاکائو.....	۶
۶	۲-۱-۱ مقدمه.....	۶
۶	۲-۱-۲ تاریخچه.....	۶
۷	۳-۱-۲ مشخصات گیاه‌شناسی کاکائو.....	۷
۸	۴-۱-۲ برداشت کاکائو و میزان تولید جهانی آن.....	۸
۱۱	۵-۱-۲ شاخص‌های ارزیابی کیفی دانه کاکائو.....	۱۱
۱۲	۲-۲ کیفیت سنجی در محصولات کشاورزی و دانه کاکائو.....	۱۲
۱۲	۱-۲-۲ مواد خارجی در محصولات غذایی و کشاورزی.....	۱۲
۱۴	۲-۲-۲ اهمیت شناسایی و حذف مواد خارجی از دانه کاکائو.....	۱۴
۱۴	۳-۲-۲ مایکوتوکسین‌ها.....	۱۴
۱۶	۴-۲-۲ آلودگی محصولات کشاورزی و دانه کاکائو به آفلاتوکسین و مقررات کنترلی در مورد آن.....	۱۶
۱۸	۵-۲-۲ مواد پلی فنولی و اهمیت آن‌ها برای سلامتی انسان.....	۱۸
۲۰	۶-۲-۲ عوامل تاثیر گذار بر کیفیت و کمیت پلی فنول‌های دانه کاکائو.....	۲۰
۲۱	۷-۲-۲ تخمیر دانه کاکائو و اهمیت آن در صنعت شکلات سازی.....	۲۱
۲۳	۳-۲ روش‌های تشخیص و جداسازی مواد خارجی، تشخیص آفلاتوکسین و تشخیص مواد پلی فنولی و شاخص تخمیر دانه کاکائو.....	۲۳
۲۳	۱-۳-۲ تشخیص و جداسازی مواد خارجی دانه کاکائو.....	۲۳
۲۴	۲-۳-۲ تشخیص و ارزیابی آفلاتوکسین در دانه کاکائو.....	۲۴
۲۵	۳-۳-۲ سنجش میزان مواد پلی فنولی و شاخص تخمیر دانه کاکائو.....	۲۵
۲۷	۴-۲ کاربرد روش طیف سنجی مادون قرمز بعنوان روشی غیر مخرب در کیفیت سنجی مواد غذایی و دانه کاکائو.....	۲۷
۳۰	۱-۴-۲ طیف سنجی مادون قرمز نزدیک.....	۳۰
۳۱	۲-۴-۲ مبانی تئوری طیف مادون قرمز نزدیک.....	۳۱
۳۲	۳-۴-۲ استفاده از تابش در طیف سنجی.....	۳۲
۳۴	۴-۴-۲ تجهیزات طیف سنجی مادون قرمز نزدیک.....	۳۴
۳۵	۵-۴-۲ شیوه‌های طیف سنجی مادون قرمز نزدیک.....	۳۵
۳۵	۶-۴-۲ کاربردهای عملی طیف سنجی مادون قرمز نزدیک برای اندازه‌گیری مواد شیمیایی میوه‌ها، سبزیجات و دانه‌ها.....	۳۵
۳۷	۷-۴-۲ کاربردهای عملی طیف سنجی مادون قرمز نزدیک برای شناسایی مایکوتوکسین‌ها در میوه‌ها، سبزیجات و دانه‌ها.....	۳۷
۳۹	۸-۴-۲ مزایا و معایب روش طیف سنجی مادون قرمز نزدیک در شناسایی مواد خارجی.....	۳۹
۴۲	۵-۲ روش تصویربرداری ابرطیفی.....	۴۲
۴۲	۱-۵-۲ واژه شناسی.....	۴۲
۴۳	۲-۵-۲ داده‌های ابرطیفی و پیکربندی سیستم تصویربرداری ابرطیفی.....	۴۳

۴۵	 ۳-۵-۲ حالت‌های مختلف اخذ تصویر ابرطیفی
۴۷	 ۴-۵-۲ آشکارسازها در سیستم تصویربرداری ابرطیفی
۴۸	 ۵-۵-۲ اجزای اساسی سیستم تصویربرداری ابرطیفی
۴۹	 ۶-۵-۲ کالیبراسیون سیستم تصویربرداری ابرطیفی
۵۰	 ۷-۵-۲ تجزیه و تحلیل تصاویر طیفی و شیمی آماری (Chemometrics)
۵۳	 ۸-۵-۲ تعدادی از کاربردهای عملی تصویربرداری ابر طیفی برای کیفیت سنجی در میوه‌ها، سبزیجات و دانه‌ها
۵۵	 ۹-۵-۲ تعدادی از کاربردهای عملی تصویربرداری ابر طیفی برای تشخیص مواد خارجی در میوه‌ها، سبزیجات و دانه‌ها
۵۶	 ۶-۲ خلاصه فصل

فصل سوم : مواد و روش‌ها

۵۸	 ۱-۳ تهیه و آماده سازی نمونه‌ها
۵۹	 ۲-۳ محاسبه خواص هندسی و ثقلی
۶۰	 ۳-۳ آزمایش تشخیص دانه‌های کاکائو آلوده به آفلاتوکسین
۶۰	 ۱-۳-۳ آلوده کردن مصنوعی نمونه‌های آزمایش به سم آفلاتوکسین
۶۱	 ۲-۳-۳ اندازه گیری داده های طیفی دانه‌های کاکائو سالم و آلوده
۶۳	 ۳-۳-۳ پیش پردازش و تحلیل طیف ها
۶۴	 ۴-۳-۳ تدوین مدل دسته بندی
۶۵	 ۵-۳-۳ ارزیابی مدل دسته بندی
۶۶	 ۴-۳ آزمایش سنجش مواد پلی فنولی تام و شاخص تخمیر دانه کاکائو
۶۶	 ۱-۴-۳ آماده سازی نمونه‌های دانه کاکائو و طیف سنجی از آن‌ها
۶۷	 ۲-۴-۳ انجام آزمایشات مرجع تاییدی برای بدست آوردن میزان دقیق مواد پلی فنولی و شاخص تخمیر
۶۹	 ۳-۴-۳ تیمار داده‌ها و آنالیزهای آماری
۷۰	 ۵-۳ آزمایش تشخیص مواد خارجی داخل توده دانه کاکائو با استفاده از تصویربرداری ابرطیفی
۷۰	 ۱-۵-۳ آماده سازی نمونه‌ها
۷۰	 ۲-۵-۳ اخذ داده‌های ابرطیفی
۷۲	 ۳-۵-۳ انتخاب پیکسل‌ها و پیش پردازش داده‌ها
۷۲	 ۴-۵-۳ کاهش ابعاد و انتخاب طول موج‌های بهینه
۷۵	 ۵-۵-۳ تشخیص الگو و کلاس بندی
۷۸	 ۶-۳ خلاصه فصل

فصل چهارم : نتایج و بحث

۷۹	 ۱-۴ خواص هندسی و ثقلی دانه کاکائو
۸۰	 ۲-۴ تشخیص مواد پلی فنولی و شاخص تخمیر در دانه کاکائو
۸۰	 ۱-۲-۴ اندازه گیری های مرجع برای تعیین ترکیبات فنولی و شاخص تخمیر
۸۲	 ۲-۲-۴ طیف مادون قرمز نزدیک بدست آمده برای پیش بینی ترکیبات دانه کاکائو
۸۳	 ۳-۲-۴ اثر روش‌های مختلف پیش پردازش
۸۴	 ۴-۲-۴ مدل‌های PLS برای پیش بینی محتویات پلی فنولی
۸۷	 ۵-۲-۴ مدل‌های PLS برای پیش بینی شاخص تخمیر
۸۹	 ۶-۲-۴ انتخاب طول موج‌های موثر برای بررسی محتویات پلی فنولی و شاخص تخمیر
۹۱	 ۳-۴ تشخیص دانه‌های کاکائو آلوده به آفلاتوکسین با استفاده از طیف سنجی مادون قرمز نزدیک

۹۱	 ۱-۳-۴ مشخصات طیفی
۹۲	 ۲-۳-۴ نتایج استفاده از مدل PLS-DA برای طبقه‌بندی آلودگی آفاتوکسین
۹۷	 ۳-۳-۴ انتخاب طول موج های موثر
۹۸	 ۴-۴ تشخیص مواد خارجی در دانه کاکائو با استفاده از فناوری تصویربرداری ابرطیفی
۹۸	 ۱-۴-۴ کلاس بندی پیکسلی تصاویر ابرطیفی
۱۰۱	 ۲-۴-۴ انتخاب طول موج‌های بهینه
۱۰۳	 ۳-۴-۴ نتایج کلاس بندی

فصل پنجم : نتیجه گیری و پیشنهادات

۱۰۷	 ۱-۵ نتیجه گیری
۱۰۹	 ۲-۵ پیشنهادات
۱۱۰	 منابع

فهرست شکل‌ها

صفحه	عنوان
۸	شکل ۱-۲. مشخصات گیاهشناسی کاکائو.....
۹	شکل ۲-۲. مناطقی از کره زمین که کاکائو در آن کشت می‌شود.....
۱۰	شکل ۳-۲. مراحل برداشت، تخمیر و خشک کردن دانه کاکائو
۱۳	شکل ۴-۲. میزان مشاهده مواد خارجی در تولیدات غذایی کشورهای اروپایی در سال‌های بین ۲۰۱۵-۱۹۹۸.....
۱۶	شکل ۵-۲. ساختار ملکولی آفلاتوکسین B1.....
۱۹	شکل ۶-۲. ساختار شیمیایی پلی فنول (فلانونید).....
۲۲	شکل ۷-۲. میکروارگانیزمهای غالب در زمانهای مختلف تخمیر دانه‌های کاکائو.....
۲۴	شکل ۸-۲. شماتیکی از سیستم بوجاری دانه کاکائو.....
۲۶	شکل ۹-۲. ارزیابی کیفیت داخلی دانه کاکائو با استفاده از روش تست برش.....
۳۱	شکل ۱۰-۲. میزان انرژی در طیف الکترومغناطیس.....
۳۴	شکل ۱۱-۲. نمونه‌ای از طیف مادون قرمز نزدیک به همراه ناحیه‌های مربوط به اورتون‌ها و پیوندهای ترکیبی.....
۳۴	شکل ۱۲-۲. شماتیک سامانه اندازه‌گیری طیف مادون قرمز نزدیک و دستگاه طیف سنج
۴۴	شکل ۱۳-۲. نمودار شماتیک تصویر ابر طیفی یک تکه گوشت و نمایش موقعیت مکانی و طیفی آن.....
۴۵	شکل ۱۴-۲. اساس کارکرد طیف نگار (Prism-Grating-Prism) PGP.....
۴۷	شکل ۱۵-۲. نمایش مفهومی از حالت‌های اخذ تصویر در حالت مکانی و طیفی نشان داده شده است.....
۴۹	شکل ۱۶-۲. اجزای اصلی سیستم تصویربرداری Pushbroom.....
۵۱	شکل ۱۷-۲. مراحل و گام‌های معمول که در تجزیه و تحلیل داده‌های طیفی طی می‌شود.....
۵۹	شکل ۱-۳. اندازه‌گیری ابعاد و وزن دانه کاکائو.....
۶۱	شکل ۲-۳. مراحل مختلف آلوده کردن مصنوعی نمونه‌ها به سم آفلاتوکسین و سپس طیف سنجی از نمونه‌ها.....
۶۲	شکل ۳-۳. رفتار پرتوهای نور در تابش به جسم.....
۶۴	شکل ۴-۳. پیش تیمار طیف اخذ شده باروش‌های ریاضی.....
۶۷	شکل ۵-۳. اخذ داده‌های طیفی از دانه کاکائو بصورت تک تک.....
۶۸	شکل ۶-۳. آزمایشات تاییدی برای تعیین میزان مواد پلی فنولی و شاخص تخمیر دانه کاکائو.....
۷۱	شکل ۷-۳. سیستم تصویربرداری ابرطیفی و نمونه‌های آماده شده برای تصویربرداری.....
۷۴	شکل ۸-۳. توصیف عملکرد روش تحلیل مولفه‌های اصلی (PCA) بر روی داده‌های سه بعدی دارای همبستگی.....
۷۵	شکل ۹-۳. اجزای متشکله روش تحلیل مولفه‌های اصلی.....
۷۶	شکل ۱۰-۳. نحوه کلاس بندی به روش بردار ماشین‌های پشتیبان (SVM).....
۷۷	شکل ۱۱-۳. کلاس بندی با روش تحلیل تمایزی خطی برای ۲ کلاس و دو متغیر.....
۷۹	شکل ۱-۴. نمایش خواص هندسی و وزنی نمونه‌های دانه کاکائو.
۸۱	شکل ۲-۴. مقادیر مربوط به شاخص تخمیر و مواد پلی فنولی.....
۸۲	شکل ۳-۴. نمایش میزان ارتباط و همبستگی بین دو پارامتر شاخص تخمیر و محتویات پلی فنولی.....
۸۳	شکل ۴-۴. طیف یکنواخت شده به دست آمده از یک نمونه دانه کاکائو را در وضعیت بازتابشی.....
۸۴	شکل ۵-۴. استفاده از تعدادی پیش پردازش‌های آماری برای حذف اثرات نویز.....
۸۶	شکل ۶-۴. مقایسه میزان واقعی و میزان پیش بینی شده محتویات پلی فنولی دانه کاکائو با روش PLS.....
۸۸	شکل ۷-۴. مقایسه میزان واقعی و میزان پیش بینی شده شاخص تخمیر دانه کاکائو با روش PLS.....

- شکل ۴-۸. ضرایب رگرسیونی مدل PLS برای پیشبینی شاخص محتویات پلی فنولی..... ۹۰
- شکل ۴-۹. ضرایب رگرسیونی مدل PLS برای پیشبینی شاخص تخمیر..... ۹۰
- شکل ۴-۱۰. نمودار میانگین طیف مادون قرمز برای دانه های کاکائو آلوده به افلاتوکسین و دانه های غیر آلوده..... ۹۱
- شکل ۴-۱۱. میزان واریانس توصیف شده توسط هر یک از مولفه های پنهان مدل..... ۹۳
- شکل ۴-۱۲. نتایج حاصله از طبقه بندی PLS-DA..... ۹۴
- شکل ۴-۱۳. نمودار هاتلینگ برای داده های کالیبراسیون و تست..... ۹۵
- شکل ۴-۱۴. نمایش تصویری پاسخ محاسبه شده برای سه کلاس طبقه بندی..... ۹۶
- شکل ۴-۱۵. مقادیر بار بر روی متغیرهای نهان..... ۹۷
- شکل ۴-۱۶. فرآیند انتخاب ناحیه مورد علاقه (ROIs)..... ۹۸
- شکل ۴-۱۷. طیف خام و طیف نرمال شده دانه کاکائو و چهار ماده خارجی..... ۹۹
- شکل ۴-۱۸. واریانس توصیف شده توسط هر کدام از مولفه های اصلی..... ۱۰۰
- شکل ۴-۱۹. انتخاب مولفه های بهینه با استفاده از مشتق دوم طیف پیش پردازش شده..... ۱۰۲
- شکل ۴-۲۰. ماتریس آشفتگی برای داده های کالیبراسیون مدل SVM..... ۱۰۴
- شکل ۴-۲۱. مقایسه مشخصه های آماری کلاس بندی در دو حالت ورودی با طول موج بهینه (رنگی) و ورودی با طیف خام (هاشور دار)..... ۱۰۵
- شکل ۴-۲۲. کلاس بندی دانه کاکائو و مواد خارجی با استفاده از تصویربرداری ابرطیفی..... ۱۰۶

فهرست جداول

عنوان	صفحه
جدول ۱-۲. میزان تولید دانه کاکائو در کشورهای آفریقایی غربی برحسب میلیون تن.....	۱۱
جدول ۲-۲. برخی از الزامات کیفی دانه کاکائو و روش های ارزیابی آن ها.....	۱۱
جدول ۳-۲. تجزیه و تحلیل انواع شکایات مصرف کنندگان مواد غذایی در سال های ۱۹۹۵ و ۲۰۰۱.....	۱۳
جدول ۴-۲. مقررات FAO و اتحادیه اروپا برای حداکثر سطح مجاز آفلاتوکسین ها در محصولات زراعی و فرآورده های حیوانی.....	۱۷
جدول ۵-۲. مقادیر حداکثر میزان مجاز آفلاتوکسین B1 در دانه کاکائو در تعدادی از کشورهای جهان.....	۱۸
جدول ۶-۲. روش های غیر مخرب ارزیابی محصولات کشاورزی و غذایی.....	۲۸
جدول ۷-۲. محدودیت های روش های مرسوم در تشخیص مایکوتوکسین ها.....	۲۹
جدول ۸-۲. تعدادی از کاربردهای طیف سنجی مادون قرمز نزدیک برای اندازه گیری مواد شیمیایی میوه ها، سبزیجات و دانه ها.....	۳۷
جدول ۹-۲. تعدادی از کاربردهای طیف سنجی مادون قرمز برای شناسایی مایکوتوکسین ها در میوه ها و دانه ها.....	۳۸
جدول ۱۰-۲. مزایا و معایب روش های سنسوری غیر مخرب در جداسازی مواد خارجی از مواد غذایی.....	۴۱
جدول ۱۱-۲. تفاوت های اساسی میان تصویربرداری معمولی، طیف سنجی، تصویربرداری فراطیفی و چندطیفی.....	۴۱
جدول ۱۲-۲. کاربردهای تصویربرداری فراطیفی برای محصولات غذایی و کشاورزی.....	۵۴
جدول ۱۳-۲. تعدادی از کاربردهای روش تصویربرداری ابر طیفی برای شناسایی مواد خارجی در محصولات غذایی.....	۵۶
جدول ۱-۴. تعدادی از پارامترهای هندسی و ثقلی دانه کاکائو مورد استفاده در تحقیق.....	۸۰
جدول ۲-۴. مقادیر اندازه گیری شده محتویات پلی فنولی و شاخص تخمیر، برای تک دانه کاکائو.....	۸۱
جدول ۳-۴. مقادیر ضریب تبیین و خطای طبقه بندی بدست آمده برای محتویات پلی فنولی با استفاده از مدل PLS با ورودی های مختلف طیفی.....	۸۵
جدول ۴-۴. مقادیر ضریب تبیین و خطای طبقه بندی بدست آمده برای شاخص تخمیر با استفاده از مدل PLS با ورودی های مختلف طیفی.....	۸۷
جدول ۵-۴. نتایج بدست آمده از مدل PLS-DA برای طبقه بندی آلودگی آفلاتوکسین.....	۹۲
جدول ۶-۴. نتایج بدست آمده برای طبقه بندی نمونه های دانه کاکائو بعد از حذف نمونه های زائد.....	۹۵
جدول ۷-۴. دقت کلاس بندی تصاویر ابر طیفی با استفاده از سه کلاس LDA، KNN، SVM.....	۱۰۴

فهرست علامتها و اختصارها

علامت	معادل انگلیسی	معادل فارسی
ϑ	Frequency of vibration	فرکانس ارتعاش
K	Force constant	ثابت نیرو
φ	Sphericity	ضریب کرویت
C	Speed of light	سرعت نور
n	Principal quantum number	عدد اصلی کوانتوم
E	Energy	انرژی
h	Planks constant	ثابت پلانک
m1, m2	Nucleous mass from atom 1 and 2 respectively	جرم اتمی اتم‌های ۱ و ۲
Cx	Concentration of test solute	غلظت ماده حل شونده
e	Molar absorptivity of test solute	قدرت جذب مولی ماده حل شونده
L	Path length traveled by the light	مسافت طی شده توسط نور
I0	Row reflectance image	بازتابش تصویر اولیه
I	Relative reflectance	بازتابش نسبی
D	Dark reference	جریان تاریک
W	White reference	مرجع سفید تصویر
L	Length	طول دانه
W	Width	عرض دانه
T	Thickness	ضخامت دانه
Dg	Geometric mean diameter	قطر متوسط هندسی
S	Surface area	مساحت سطح
Abs	Absorption	میزان جذب
SNV	Standard Normal Variate	تبدیل متغیر نرمال استاندارد
ANN	Artificial Neural Network	شبکه‌های عصبی معمولی
FT	Fourier Transform	تبدیل فوریه
n_p	Number of predictions	تعداد نمونه‌های پیش‌بینی
n_c	Number of observations	تعداد نمونه‌های کالیبراسیون
PLS	Partial Least Squares	کمترین توان‌های دوم جزئی
r	Correlation coefficient	ضریب همبستگی
RMSEP	Root Mean Square Error for Prediction	ریشه میانگین توان های دوم خطای پیشگویی
RMSECV	Root Mean Square Error for Cross Validation	ریشه میانگین توان های دوم خطای اعتبارسنجی متقابل