

Spis treści

Wstęp	5
Rozdział 1	
Koncepcja zastosowania spektroskopii optycznej do oceny jakości żywności	7
1.1. Wprowadzenie	7
1.2. Współczesne wyzwania wobec przemysłu rolno-spożywczego	7
1.3. Ewolucja metod badania żywności	10
1.4. Charakterystyka technik spektroskopowych jako technik odcisku palca	12
Rozdział 2	
Techniki spektroskopii optycznej stosowane w badaniach żywności	18
2.1. Wprowadzenie	18
2.2. Podstawy spektroskopii optycznej.....	19
2.3. Spektroskopia w zakresie podstawowej podczerwieni	26
2.4. Spektroskopia w zakresie bliskiej podczerwieni.....	45
2.5. Spektroskopia w zakresie nadfioletu i widzialnym	51
2.6. Spektroskopia fluorescencyjna	70
Rozdział 3	
Pomiar widm żywności	87
3.1. Wprowadzenie	87
3.2. Techniki pomiarów widm	88
3.2.1. Techniki transmisyjne.....	89
3.2.2. Techniki odbiciowe	93
3.2.3. Techniki pomiarów fluorescencji	101
3.3. Aparatura do pomiaru widm.....	105
3.3.1. Spektrofotometry absorpcyjne	106
3.3.2. Elementy budowy spektrofotometrów absorpcyjnych.....	115
3.3.3. Spektrofluometry	120
3.3.4. Parametry charakteryzujące spektrofotometry i spektrofluometry.....	124
3.3.5. Podział spektrofotometrów w zależności od zastosowań.....	129
Rozdział 4	
Metody chemometryczne stosowane do analizy widm	134
4.1. Wprowadzenie	134
4.2. Charakterystyka i metody analizy danych spektroskopowych	135

4.3. Metody eksploracyjne.....	137
4.3.1. Analiza głównych składowych	138
4.3.2. Analiza skupień	149
4.3.3. Równoległa analiza czynnikowa.....	152
4.4. Metody regresji.....	155
4.4.1. Regresja prosta	156
4.4.2. Regresja wielokrotna	159
4.4.3. Regresja głównych składowych	160
4.4.4. Regresja cząstkowych najmniejszych kwadratów	162
4.4.5. Interpretacja wyników analizy regresji	164
4.4.6. Metody kalibracyjne drugiego rzędu	172
4.5. Metody klasyfikacyjne	174
4.5.1. Analiza dyskryminacyjna	175
4.5.2. Metoda najbliższych sąsiadów	177
4.5.3. Analiza dyskryminacyjna metodą cząstkowych najmniejszych kwadratów	178
4.5.4. Sztuczne sieci neuronowe	179
4.5.5. Metoda wektorów nośnych	180
4.5.6. Drzewa klasyfikacyjne i regresyjne	181
4.5.7. Niezależne modelowanie analogii klas	183
4.5.8. Ocena zdolności predykcyjnej modeli klasyfikacyjnych.....	184
Rozdział 5	
Modele kalibracyjne	186
5.1. Wprowadzenie	186
5.2. Etapy opracowania modeli kalibracyjnych	186
5.3. Gromadzenie próbek i danych.....	188
5.4. Opracowanie i optymalizacja modeli	193
5.5. Walidacja modeli kalibracyjnych	208
5.6. Zastosowanie i utrzymanie modeli.....	210
Rozdział 6	
Zastosowania spektroskopii optycznej w ocenie jakości żywności.....	212
6.1. Wprowadzenie	212
6.2. Owoce i warzywa oraz przetwory	213
6.3. Zboża i produkty zbożowe	222
6.4. Oleje roślinne.....	226
6.5. Napoje spirytusowe	238
6.6. Wino.....	241
6.7. Piwo	248
6.8. Kawa	251
6.9. Herbata.....	256
6.10. Mleko i produkty mleczne	258
6.11. Mięso	269
6.12. Ryby.....	279

Podsumowanie.....	283
Bibliografia	288
Optical spectroscopy in food quality assessment. Summary	323
Spis rysunków	325
Spis tabel.....	329