

**UNUN KALİTE PARAMETRELERİNİN YAKIN VE ORTA  
KIZILÖTESİ SPEKTROSKOPİSİ KULLANILARAK TAHMİN  
EDİLMESİ**

**PREDICTION OF QUALITY PARAMETERS OF FLOUR BY  
USING NEAR AND MID INFRARED SPECTROSCOPY**

ESRA ZEYNEP ARSLAN

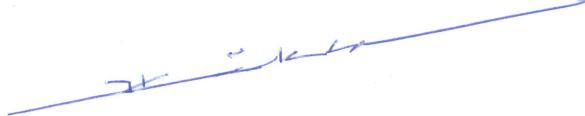
**PROF. DR. İSMAİL HAKKI BOYACI**  
Tez Danışmanı

Hacettepe Üniversitesi  
Lisansüstü Eğitim-Öğretim ve Sınav Yönetmeliğinin  
Gıda Mühendisliği Anabilim Dalı için öngördüğü  
YÜKSEK LİSANS TEZİ olarak hazırlanmıştır.

2018

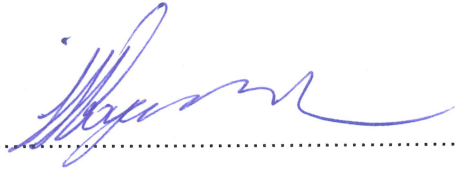
Esra Zeynep ARSLAN'ın hazırladığı “Unun Kalite Parametrelerinin Yakın ve Orta Kızılötesi Spektroskopisi Kullanılarak Tahmin Edilmesi” adlı bu çalışma aşağıdaki jüri tarafından GIDA MÜHENDİSLİĞİ ANABİLİM DALI 'nda YÜKSEK LİSANS TEZİ olarak kabul edilmiştir.

Prof. Dr. Hamit KÖKSEL  
Başkan



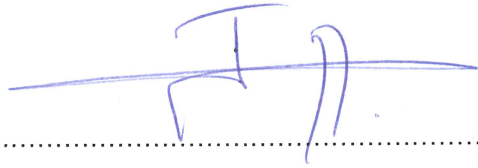
.....

Prof. Dr. İsmail Hakkı BOYACI  
Danışman



.....

Prof. Dr. Uğur TAMER  
Üye



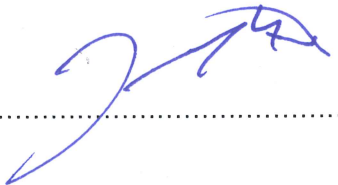
.....

Doç. Dr. Ali TOPCU  
Üye



.....

Dr. Öğr. Üyesi Deniz BAŞ  
Üye



.....

Bu tez Hacettepe Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü tarafından YÜKSEK LİSANS TEZİ olarak onaylanmıştır.

Prof. Dr. Menemşe GÜMÜŞDERELİOĞLU  
Fen Bilimleri Enstitüsü Müdürü

## YAYINLAMA VE FİKRİ MÜLKİYET HAKLARI BEYANI

Enstitü tarafından onaylanan lisansüstü tezimin/raporumun tamamını veya herhangi bir kısmını, basılı (kağıt) ve elektronik formatta arşivleme ve aşağıda verilen koşullarla kullanıma açma iznini Hacettepe Üniversitesine verdiğimi bildiririm. Bu izinle Üniversiteye verilen kullanım hakları dışındaki tüm fikri mülkiyet haklarım bende kalacak, tezimin tamamının ya da bir bölümünün gelecekteki çalışmalarda (makale, kitap, lisans ve patent vb.) kullanım hakları bana ait olacaktır.

Tezin kendi orijinal çalışmam olduğunu, başkalarının haklarını ihlal etmediğimi ve tezimin tek yetkili sahibi olduğumu beyan ve taahhüt ederim. Tezimde yer alan telif hakkı bulunan ve sahiplerinden yazılı izin alınarak kullanması zorunlu metinlerin yazılı izin alarak kullandığımı ve istenildiğinde suretlerini Üniversiteye teslim etmeyi taahhüt ederim.

- Tezimin/Raporumun tamamı dünya çapında erişime açılabilir ve bir kısmı veya tamamının fotokopisi alınabilir.**

(Bu seçenekle teziniz arama motorlarında indekslenebilecek, daha sonra tezinizin erişim statüsünün değiştirilmesini talep etmeniz ve kütüphane bu talebinizi yerine getirirse bile, tezinin arama motorlarının önbelleklerinde kalmaya devam edebilecektir.)

- Tezimin/Raporumun ..... tarihine kadar erişime açılmasını ve fotokopi alınmasını (İç Kapak, Özet, İçindekiler ve Kaynakça hariç) istemiyorum.**

(Bu sürenin sonunda uzatma için başvuruda bulunmadığım takdirde, tezimin/raporumun tamamı her yerden erişime açılabilir, kaynak gösterilmek şartıyla bir kısmı ve ya tamamının fotokopisi alınabilir)

- Tezimin/Raporumun ..... tarihine kadar erişime açılmasını istemiyorum, ancak kaynak gösterilmek şartıyla bir kısmı veya tamamının fotokopisinin alınmasını onaylıyorum.**

- Serbest Seçenek/Yazarın Seçimi**

13/06/2018

Esra Zeynep Arslan

## ETİK

Hacettepe Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, tez yazım kurallarına uygun olarak hazırladığım bu tez çalışmada,

- tez içindeki bütün bilgi ve belgeleri akademik kurallar çerçevesinde elde ettiğimi,
- görsel, işitsel ve yazılı tüm bilgi ve sonuçları bilimsel ahlak kurallarına uygun olarak sunduğumu,
- başkalarının eserlerinden yararlanılması durumunda ilgili eserlere bilimsel normlara uygun olarak atıfta bulunduğumu,
- atıfta bulunduğum eserlerin tümünü kaynak olarak gösterdiğimi,
- kullanılan verilerde herhangi bir tahrifat yapmadığımı,
- ve bu tezin herhangi bir bölümünü bu üniversitede veya başka bir üniversitede tez çalışması olarak sunmadığımı,

beyan ederim.

ESRA ZEYNEP ARSLAN



## ÖZET

# UNUN KALİTE PARAMETRELERİNİN YAKIN VE ORTA KIZILÖTESİ SPEKTROSKOPİSİ KULLANILARAK TAHMİN EDİLMESİ

**Esra Zeynep ARSLAN**

**Yüksek Lisans, Gıda Mühendisliği Bölümü**

**Tez Danışmanı: Prof. Dr. İsmail Hakkı BOYACI**

**Haziran 2018, 163 Sayfa**

İnsan beslenmesinde büyük bir öneme sahip olan hububat, hububat içerisinde de birinci sırada buğday yer almaktadır. Sanayide kullanılan buğday hammaddesinin kalitesi iklime, genetik farklılığa, çevre ve depo koşullarına bağlı olarak önemli değişiklikler göstermektedir. Buğdaydan elde edilen un özellikle ekmek, makarna ve bisküvi üretiminde kullanılmaktadır. Elde edilen bu son ürünlerin kalitesi ise unun kalitesine bağlı olarak değişiklik göstermektedir. Unlarda kalite, unun belirli bir amaç için kullanmaya yarayışlılığını saptayan çok sayıda ölçülebilir parametreleri ifade etmektedir. Bu parametrelerin ölçülmesi fiziksel (hektolitreye ağırlığı, camsılık, tane sertliği vb.), kimyasal (rutubet miktarı, kül miktarı vb.), fizikokimyasal (gluten indeksi, sedimentasyon ve beklemeli sedimentasyon değerleri vb.), reolojik (farinogram ve ekstensograf özellikleri) ve teknolojik (ekmek, makarna ve bisküvi analizleri) analizlerle yapılabilmektedir. Fakat bu analizlerin yapılması için uzman personele ihtiyaç duyulmaktadır. Aynı zamanda bazı analizlerin yapılması uzun süreli olup zararlı kimyasalların kullanımını

gerektirmektedir. Kimyasal maddelerin kullanımına gerek olmadığı için yakın kızılötesi ve orta kızılötesi gibi spektrofotometrik yöntemler çevre kirliliğine neden olmamaktadır. Yapılan çalışmada elde edilen spektrumlar ve klasik yöntemlerle elde edilen parametreler arasındaki ilişki kemometrik veya matematiksel algoritmalar kullanılarak araştırıldı. Tez kapsamında ekmeklik buğday kırma ve un, makarnalık buğday kırma ve un ve bisküvilik buğday un örnekleri ile çalışılmıştır. Her bir örnek matrisi için 19 parametre için kalibrasyon modelleri geliştirilmiştir. Geliştirilen kalibrasyon modelleriyle, geleneksel yöntemlere gerek kalmadan ve daha kısa sürede spektrometrik yöntemlerle unların kalite parametrelerinin belirlenmesi amaçlanmıştır. En yüksek doğrulukta kalibrasyon modellerinin % protein, % rutubet ve % yaş gluten parametreleri için elde edildiği görülmüştür. % Protein değeri için ekmeklik buğday, makarnalık buğday, bisküvilik buğday ve sulu bölge ekmeklik buğday için elde edilen  $R^2$  değerleri sırasıyla 0,963, 0,979, 0,956 ve 0,983'dür. % Rutubet değeri için ekmeklik buğday, makarnalık buğday, ve sulu bölge ekmeklik buğday için elde edilen  $R^2$  değerleri sırasıyla 0,942, 0,941 ve 0,955'dir. % Gluten değeri için ekmeklik buğday, makarnalık buğday, ve sulu bölge ekmeklik buğday için elde edilen  $R^2$  değerleri sırasıyla 0,917, 0,934, 0,954 ve 0,962 olarak elde edilmiştir.

**Anahtar Kelimeler:** Buğday, Un, Kalite, Kemometri, Yapay Sinir Ağları, Yakın Kızılötesi Spektrometresi, Orta Kızılötesi Spektrometresi.

## **ABSTRACT**

# **PREDICTION OF QUALITY PARAMETERS OF FLOUR BY USING NEAR AND MID INFRARED SPECTROSCOPY**

**ESRA ZEYNEP ARSLAN**

**Master of Science, Department of Food Engineering**

**Supervisor: Prof. Dr. İsmail Hakkı BOYACI**

**June 2018, 163 Pages**

Grain has a big importance in human diet and wheat is the first row among grains. Wheat, which is used in the industry, quality can show significant variance depending on climate, genetic difference, environment, and storage conditions. Flour, which is obtained from wheat, can be used to produce bread, pasta, and biscuit. The obtained these end-products quality depends on flour quality. Quality in flour can be stated as that measurable parameters determine the utility of flour for a certain aim. These parameters can be carried out by physical (hectoliter, hardness etc.) chemical (moisture, ash, protein etc.) physicochemical (sedimentation, gluten index, gluten etc.) rheological (farinograph, extensograph etc.) and technological (bread, pasta, and biscuits) analysis. However experienced staff is needed to carry out these analysis. Also these analysis can take long time and cause usage of hazardous chemicals. Spectroscopic methods such as Near Infrared and Middle Infrared don't cause environmental pollution because not to

use any chemicals. Relationship between spectra and reference analysis is researched by using chemometric and mathematical methods. This thesis is aimed at built calibration models which can be predict the quality flour parameters without reference analysis and with short-time spectroscopic methods. The most accurate calibration models was obtained for protein, moisture and gluten parameters.  $R^2$  value of protein (%) parameter for bread wheat, durum wheat, biscuit wheat and watery region bread wheat was 0.963, 0.979, 0.956 and 0.983, respectively.  $R^2$  value of moisture (%) parameter for bread wheat, durum wheat, and watery region bread wheat was 0.942, 0.941 and 0.955, respectively.  $R^2$  value of gluten (%) parameter for bread wheat, durum wheat, biscuit wheat and watery region bread wheat was 0.917, 0.934, 0.954 and 0.962, respectively.

**Key words:** flour, wheat, chemometric, quality parameters, NIR, MIR, ANN.



## TEŞEKKÜR

Yüksek lisans tez çalışmam süresince bilgi, deneyim ve desteğini hiçbir zaman esirgemeyen değerli tez danışmanım Prof. Dr. İsmail Hakkı Boyacı 'ya teşekkür ederim.

Tez çalışmamın ilerlemesi ve tamamlanmasında bilgi ve deneyimleriyle destek olmasının yanı sıra manevi olarak da desteğini esirgemeyen Doç. Dr. Haslet Ekşi'ye teşekkürü bir borç bilirim.

Hububat referans analizleri konusunda tecrübesiyle yardım ve desteğini esirgemeyen Tarla Bitkileri Merkez Araştırma Enstitüsü Kalite ve Teknoloji Bölümü Müdür'ü Turgay Şanal'a ve Yüksek Gıda Mühendisi Oğuz Acar'a teşekkür ederim.

Tez çalışmam boyunca yanımda olan benden manevi desteğimi esirgemeyen canım arkadaşlarım Emine Kübra Tayyarcan ve Banu Sezer başta olmak üzere güverte laboratuvarındaki değerli ekip arkadaşlarıma teşekkür ederim.

Beni bugünlere getiren, madden ve manen her zaman yanımda olan, bana destek veren, canım aileme sonsuz teşekkür ederim.

Bu tez çalışması 113O115 nolu ve Sanayici, Çiftçi ve Tüketici İstekleri Doğrultusunda Yeni Ekmeklik ve Makarnalık Buğday Hat ve Çeşitlerinin Geliştirilmesi isimli TUBİTAK projesi tarafından desteklenmiştir.

# İÇİNDEKİLER

## Sayfa

|   |     |
|---|-----|
| ÖZET.....                                       | i   |
| ABSTRACT.....                                   | iii |
| TEŞEKKÜR.....                                   | v   |
| ÇİZELGELER TABLOSU.....                         | xi  |
| ŞEKİLLER ÇİZELGESİ .....                        | xx  |
| SİMGELER VE KISALTMALAR.....                    | xxi |
| 1. GİRİŞ .....                                  | 1   |
| 2. GENEL BİLGİLER.....                          | 3   |
| 2.1 Buğday .....                                | 3   |
| 2.2 Buğday Tanesinin Yapısı .....               | 3   |
| 2.3 Buğdayın Öğütülmesi .....                   | 4   |
| 2.4 Unun Kalite Parametreleri .....             | 5   |
| 2.4.1 Fiziksel Kalite Parametreleri .....       | 6   |
| 2.4.1.1 Sertlik parametresi .....               | 6   |
| 2.4.1.2 Camsılık parametresi .....              | 6   |
| 2.4.1.3 Bin tane ağırlığı parametresi .....     | 6   |
| 2.4.1.4 Hektolitreye ağırlığı parametresi ..... | 7   |
| 2.4.1.5 Renk kalite parametreleri .....         | 7   |
| 2.4.2 Kimyasal Kalite Parametreleri.....        | 7   |
| 2.4.2.1 Rutubet parametresi.....                | 7   |
| 2.4.2.2 Protein parametresi.....                | 8   |
| 2.4.2.3 Kül parametresi .....                   | 8   |
| 2.4.3 Fizikokimyasal Parametreler.....          | 9   |
| 2.4.3.1 Gluten parametresi.....                 | 9   |
| 2.4.3.2 Gluten indeks parametresi .....         | 9   |

|         |   |    |
|---------|---|----|
| 2.4.3.3 | Zeleny sedimentasyon parametresi .....                        | 10 |
| 2.4.3.4 | Beklemeli zeleny sedimentasyon parametresi .....              | 10 |
| 2.4.3.5 | Alkali su tutma kapasitesi .....                              | 10 |
| 2.4.4   | Reolojik Kalite Parametreleri .....                           | 11 |
| 2.4.4.1 | Alveograf kalite parametreleri.....                           | 11 |
| 2.4.4.2 | Farinograf kalite parametreleri .....                         | 11 |
| 2.4.5   | Teknolojik Kalite Parametreleri .....                         | 13 |
| 2.5     | Infrared Spektroskopisi.....                                  | 13 |
| 2.5.1   | NIR Spektroskopisi .....                                      | 13 |
| 2.5.2   | MIR Spektroskopisi.....                                       | 15 |
| 2.6     | Kemometrik yöntemler .....                                    | 16 |
| 2.6.1   | Regresyon teknikleri .....                                    | 17 |
| 2.6.2   | Veri önışleme .....   | 17 |
| 2.6.3   | Yapay Sinir Ağları .....                                      | 18 |
| 2.6.4   | Model ve test için örneklerin seçimi .....                    | 18 |
| 2.6.5   | Validasyon .....  | 19 |
| 2.6.5.1 | Kalibrasyonun ortalama hata kareleri kökü .....               | 19 |
| 2.6.5.2 | Çapraz validasyonun ortalama hata kareleri kökü.....          | 19 |
| 2.6.5.3 | Tahminin ortalama hata kareleri kökü .....                    | 20 |
| 2.6.5.4 | Determinasyon katsayısı/ korelasyon katsayısı ( $R^2$ ) ..... | 20 |
| 2.6.6   | Faktör sayısının seçimi .....                                 | 20 |
| 2.6.7   | Aykırı değerlerin belirlenmesi .....                          | 21 |
| 2.7     | Gıda Sektöründeki Uygulamalar .....                           | 22 |
| 3.      | MATERYAL ve METOT.....  | 25 |
| 3.1     | Materyal .....  | 25 |
| 3.2     | Metot .....   | 25 |

|          |  |    |
|----------|--|----|
| 3.2.1    | Referans Analizlerin Yapılması.....  | 25 |
| 3.2.1.1  | Sertlik analizi.....   | 25 |
| 3.2.1.2  | Protein analizi.....   | 26 |
| 3.2.1.3  | Rutubet analizi .....  | 26 |
| 3.2.1.4  | Gluten analizleri .....  | 26 |
| 3.2.1.5  | Renk analizleri.....   | 26 |
| 3.2.1.6  | Zeleny sedimentasyon analizi .....   | 26 |
| 3.2.1.7  | Modifiye Zeleny sedimentasyon analizi .....  | 27 |
| 3.2.1.8  | SDS sedimentasyon analizleri.....  | 27 |
| 3.2.1.9  | Modifiye SDS sedimentasyon analizi .....   | 27 |
| 3.2.1.10 | Alkali su tutma kapasitesi analizi .....   | 27 |
| 3.2.1.11 | Alveograf analizleri .....   | 27 |
| 3.2.1.12 | Farinograf analizleri .....  | 27 |
| 3.2.2    | Spektroskopik Ölçümlerin Alınması .....  | 27 |
| 3.2.3    | Kemometrik Analizlerin Yapılması .....   | 30 |
| 3.2.3.1  | PLS Metodu ile Analiz .....  | 30 |
| 3.2.3.2  | MPLS metodu ile analiz .....   | 30 |
| 3.2.3.3  | Yapay sinir ağları ile analiz.....   | 30 |
| 4.       | SONUÇLAR .....   | 32 |
| 4.1      | Un ve Kırma Örneklerine Ait Kalite Parametreleri .....   | 32 |
| 4.2      | Un ve Kırma Örneklerinin NIR ve MIR Spektrumları .....   | 33 |
| 4.3      | Ekmeklik buğday un Ve Kırma Örneklerine Ait Kalite Parametreleri için Kalibrasyon Modellerinin Elde Edilmesi ..... | 36 |
| 4.3.1    | Protein Analiz Sonuçlarını Değerlendirilmesi.....  | 37 |
| 4.3.2    | Rutubet Analiz Sonuçlarını Değerlendirilmesi.....  | 38 |
| 4.3.3    | Sertlik Analiz Sonuçlarının Değerlendirilmesi .....  | 40 |

|       |   |    |
|-------|---|----|
| 4.3.4 | Alveograf Analiz Parametrelerinin Değerlendirilmesi .....   | 41 |
| 4.3.5 | Farinograf Analiz Parametrelerinin Değerlendirilmesi.....   | 47 |
| 4.3.6 | Renk Analiz Parametrelerinin Değerlendirilmesi.....   | 52 |
| 4.3.7 | Gluten Analiz Parametrelerinin Değerlendirilmesi.....   | 54 |
| 4.3.8 | Sedimentasyon Analiz Parametrelerinin Değerlendirilmesi .....   | 58 |
| 4.4   | Makarnalık buğday kırma ve Un Örneklerine Ait Kalite Parametreleri için Kalibrasyon Modellerinin Elde Edilmesi .....          | 61 |
| 4.4.1 | Protein Analiz Sonuçlarının Değerlendirilmesi.....  | 61 |
| 4.4.2 | Rutubet Analiz Sonuçlarının Değerlendirilmesi.....  | 62 |
| 4.4.3 | Gluten Analiz Parametrelerinin Değerlendirilmesi.....   | 63 |
| 4.4.4 | Renk Analiz Parametrelerinin Değerlendirilmesi.....   | 66 |
| 4.4.5 | Farinograf Analiz Parametrelerinin Değerlendirilmesi.....   | 70 |
| 4.4.6 | Sedimentasyon Analiz Parametrelerinin Değerlendirilmesi .....   | 74 |
| 4.5   | Bisküvilik buğday un Örneklerine Ait Kalite Parametreleri İçin Kalibrasyon Modellerinin Elde Edilmesi.....                    | 77 |
| 4.5.1 | Protein Analiz Parametresinin Değerlendirilmesi .....   | 77 |
| 4.5.2 | Sertlik Analiz Parametresinin Değerlendirilmesi .....   | 78 |
| 4.5.3 | Gluten Analiz Parametrelerinin Değerlendirilmesi.....   | 80 |
| 4.5.4 | Farinograf Analiz Parametrelerinin Değerlendirilmesi.....   | 82 |
| 4.5.5 | Sedimentasyon Analiz Parametrelerinin Değerlendirilmesi .....   | 87 |
| 4.5.6 | Alkali Su Tutma Kapasitesi Parametresinin Değerlendirilmesi .....   | 89 |
| 4.5.7 | Alveograf Analiz Parametrelerinin Değerlendirilmesi .....   | 91 |
| 4.6   | Sulu Bölge Ekmeklik buğday kırma ve Un Örneklerine Ait Kalite Parametreleri İçin Kalibrasyon Modellerinin Elde Edilmesi ..... | 95 |
| 4.6.1 | Protein Analiz Parametresinin Değerlendirilmesi .....   | 96 |
| 4.6.2 | Rutubet Analiz Parametresinin Değerlendirilmesi.....  | 97 |
| 4.6.3 | Sertlik Analiz Parametresinin Değerlendirilmesi .....   | 98 |

|       |   |     |
|-------|---|-----|
| 4.6.4 | Gluten Analiz Parametrelerinin Deęerlendirilmesi.....         | 100 |
| 4.6.5 | Renk Analiz Parametrelerinin Deęerlendirilmesi.....           | 102 |
| 4.6.6 | Farinograf Analiz parametrelerinin deęerlendirilmesi.....     | 105 |
| 4.6.7 | Sedimentasyon Analiz Parametrelerinin Deęerlendirilmesi ..... | 110 |
| 4.6.8 | Alveograf Analiz Parametrelerinin Deęerlendirilmesi .....     | 112 |
| 5.    | SONUÇLAR VE TARTIŞMA .....                                    | 119 |
| 6.    | ÖNERİLER.....   | 125 |
|       | KAYNAKLAR.....  | 126 |
|       | ÖZGEÇMİŞ .....  | 135 |



## ÇİZELGELER TABLOSU

|   |    |
|---|----|
| Çizelge 4.1. Analizleri yapılan kalite parametrelerinin sonuçları.....  | 32 |
| Çizelge 4.2. Modellerin oluşturulmasında kullanılan örnek sayıları .....  | 33 |
| Çizelge 4.3. Ekmeklik buğday kırma örneklerine ait % protein değeri için oluşturulan modellere ait parametreler .....               | 37 |
| Çizelge 4.4. Ekmeklik buğday kırma örneklerine ait % protein değeri için seçilen modele ait parametreler .....                      | 38 |
| Çizelge 4.5. Ekmeklik buğday kırma örneklerine ait % rutubet değeri için oluşturulan kalibrasyon modellerine ait parametreler ..... | 39 |
| Çizelge 4.6. Ekmeklik buğday kırma örneklerine ait % rutubet değeri için seçilen modele ait parametreler .....                      | 39 |
| Çizelge 4.7. Ekmeklik buğday kırma örneklerine ait % sertlik değeri için oluşturulan modellere ait parametreler .....               | 40 |
| Çizelge 4.8. Ekmeklik buğday kırma örneklerine ait % sertlik değeri için seçilen modele ait parametreler .....                      | 41 |
| Çizelge 4.9. Ekmeklik buğday un örneklerine ait P değeri için elde edilen modellere ait parametreler .....                          | 42 |
| Çizelge 4.10. Ekmeklik buğday un örneklerine ait P değeri için seçilen modele ait parametreler.....                                 | 42 |
| Çizelge 4.11. Ekmeklik buğday un örneklerine ait W değeri için oluşturulan modellere ait parametreler .....                         | 43 |
| Çizelge 4.12. Ekmeklik buğday un örneklerine ait W değeri için seçilen modele ait parametreler.....                                 | 43 |
| Çizelge 4.13. Ekmeklik buğday un örneklerine ait L değeri için oluşturulan modellere ait parametreler .....                         | 44 |
| Çizelge 4.14. Ekmeklik buğday un örneklerine ait L değeri için seçilen modele ait parametreler.....                                 | 44 |

|  |    |
|--|----|
| Çizelge 4.15. Ekmeklik buğday un örneklerine ait G değeri için oluşturulan modellere ait parametreler .....                | 45 |
| Çizelge 4.16. Ekmeklik buğday un örneklerine ait P/G değeri için oluşturulan modellere ait parametreler .....              | 46 |
| Çizelge 4.17. Ekmeklik buğday un örneklerine ait P/G değeri için seçilen modele ait parametreler .....                     | 46 |
| Çizelge 4.18. Ekmeklik buğday un örneklerine ait % su absorpsiyon değeri için oluşturulan modellere ait parametreler ..... | 48 |
| Çizelge 4.19. Ekmeklik buğday un örneklerine ait % su absorpsiyon değeri için seçilen modele ait parametreler .....        | 48 |
| Çizelge 4.20. Ekmeklik buğday un örneklerine ait gelişme süresi değeri için oluşturulan modellere ait parametreler .....   | 49 |
| Çizelge 4.21. Ekmeklik buğday un örneklerine ait gelişme süresi değeri için seçilen modele ait parametreler .....          | 49 |
| Çizelge 4.22. Ekmeklik buğday un örneklerine ait stabilite değeri için oluşturulan modellere ait parametreler .....        | 50 |
| Çizelge 4.23. Ekmeklik buğday un örneklerine ait stabilite değeri için seçilen modele ait parametreler .....               | 50 |
| Çizelge 4.24. Ekmeklik buğday un örneklerine ait yumuşama derecesi için oluşturulan modellere ait parametreler .....       | 51 |
| Çizelge 4.25. Ekmeklik buğday un örneklerine ait renk $L^*$ değeri için oluşturulan modellere ait parametreler .....       | 52 |
| Çizelge 4.26. Ekmeklik buğday un örneklerine ait renk $a^*$ değeri için oluşturulan modellere ait parametreler .....       | 53 |
| Çizelge 4.27. Ekmeklik buğday un örneklerine ait renk $a^*$ değeri için seçilen modele ait parametreler .....              | 53 |
| Çizelge 4.28. Ekmeklik buğday un örneklerine ait renk $b^*$ değeri için oluşturulan modellere ait parametreler .....       | 54 |
| Çizelge 4.29. Ekmeklik buğday un örneklerine ait % yaş gluten değeri için oluşturulan modellere ait parametreler .....     | 55 |



|  |    |
|--|----|
| Çizelge 4.30. Ekmeklik buğday un örneklerine ait % yaş gluten değeri için seçilen modele ait parametreler .....                          | 55 |
| Çizelge 4.31. Ekmeklik buğday un örneklerine ait % kuru gluten değeri için oluşturulan modellere ait parametreler .....                  | 56 |
| Çizelge 4.32. Ekmeklik buğday un örneklerine % kuru gluten değeri için seçilen modele ait parametreler .....                             | 57 |
| Çizelge 4.33. Ekmeklik buğday un örneklerine ait gluten indeks değeri için oluşturulan modellere ait parametreler .....                  | 57 |
| Çizelge 4.34. Ekmeklik buğday un örneklerine ait gluten indeks değeri için seçilen modele ait parametreler .....                         | 58 |
| Çizelge 4.35. Ekmeklik buğday un örneklerine ait Zeleny sedimentasyon değeri için oluşturulan modellere ait parametreler .....           | 59 |
| Çizelge 4.36. Ekmeklik buğday un örneklerine ait Zeleny sedimentasyon değeri için seçilen modele ait parametreler .....                  | 59 |
| Çizelge 4.37. Ekmeklik buğday un örneklerine ait Beklemeli Zeleny sedimentasyon değeri için oluşturulan modellere ait parametreler ..... | 60 |
| Çizelge 4.38. Ekmeklik buğday un örneklerine ait beklemeli Zeleny sedimentasyon değeri için seçilen modele ait parametreler .....        | 60 |
| Çizelge 4.39. Makarnalık buğday kırma örneklerine ait % protein değeri için oluşturulan modellere ait parametreler .....                 | 62 |
| Çizelge 4.40. Makarnalık buğday kırma örneklerine ait % rutubet değeri için oluşturulan modellere ait parametreler .....                 | 62 |
| Çizelge 4.41. Makarnalık buğday kırma örneklerinin % rutubet değerinin tahmin edilmesi için seçilen modele ait parametreler .....        | 63 |
| Çizelge 4.42. Makarnalık buğday un örneklerine ait % yaş gluten değeri için oluşturulan modellere ait parametreler .....                 | 64 |
| Çizelge 4.43. Makarnalık buğday un örneklerine ait % yaş gluten değerinin tahmin edilmesi için seçilen modele ait parametreler .....     | 64 |
| Çizelge 4.44. Makarnalık buğday un örneklerine ait % kuru gluten değeri için oluşturulan modellere ait parametreler .....                | 65 |

|  |    |
|--|----|
| Çizelge 4.45. Makarnalık buğday un örneklerine ait % kuru gluten değeri için seçilen modele ait parametreler .....           | 66 |
| Çizelge 4.46. Makarnalık buğday un örneklerine ait renk $L^*$ değeri için oluşturulan modellere ait parametreler .....       | 66 |
| Çizelge 4.47. Makarnalık buğday un örneklerine ait renk $L^*$ değeri için seçilen modele ait parametreler .....              | 67 |
| Çizelge 4.48. Makarnalık buğday un örneklerine renk $a^*$ değeri için oluşturulan modellere ait parametreler .....           | 68 |
| Çizelge 4.49. Makarnalık buğday un örneklerine ait renk $a^*$ değeri için seçilen modele ait parametreler .....              | 68 |
| Çizelge 4.50. Makarnalık buğday un örneklerine ait renk $b^*$ değeri için oluşturulan modellere ait parametreler .....       | 69 |
| Çizelge 4.51. Makarnalık buğday un örneklerine ait renk $b^*$ değeri için seçilen modele ait parametreler .....              | 69 |
| Çizelge 4.52. Makarnalık buğday un örneklerine ait % su absorpsiyon değeri için oluşturulan modellere ait parametreler ..... | 70 |
| Çizelge 4.53. Makarnalık buğday un örneklerine ait % su absorpsiyon değeri için seçilen modele ait parametreler .....        | 71 |
| Çizelge 4.54. Makarnalık buğday un örneklerine ait gelişme süresi değeri için oluşturulan modellere ait parametreler .....   | 71 |
| Çizelge 4.55. Makarnalık buğday un örneklerine ait gelişme süresi değeri için seçilen modele ait parametreler .....          | 72 |
| Çizelge 4.56. Makarnalık buğday un örnekleri ait stabilite değeri için oluşturulan modellere ait parametreler .....          | 72 |
| Çizelge 4.57. Makarnalık buğday un örneklerine ait stabilite değeri için seçilen modele ait parametreler .....               | 73 |
| Çizelge 4.58. Makarnalık buğday un örneklerine ait yumuşama derecesi için oluşturulan modellere ait parametreler .....       | 73 |
| Çizelge 4.59. Makarnalık buğday un örneklerine ait yumuşama derecesi için seçilen modele ait parametreler .....              | 74 |

|  |    |
|--|----|
| Çizelge 4.60. Makarnalık buğday un örneklerine ait SDS sedimentasyon değeri için oluşturulan modellere ait parametreler.....           | 75 |
| Çizelge 4.61. Makarnalık buğday un örneklerine ait SDS sedimentasyon değeri için seçilen modele ait parametreler .....                 | 75 |
| Çizelge 4.62. Makarnalık buğday un örneklerine ait Beklemeli SDS sedimentasyon değeri için oluşturulan modellere ait parametreler..... | 76 |
| Çizelge 4.63. Makarnalık buğday un örneklerine ait beklemeli SDS sedimentasyon değeri için seçilen modele ait parametreler .....       | 76 |
| Çizelge 4.64. Bisküvilik buğday un örneklerine ait % protein değeri için oluşturulan modellere ait parametreler .....                  | 77 |
| Çizelge 4.65. Bisküvilik buğday un örneklerine ait % protein değeri için seçilen modele ait parametreler .....                         | 78 |
| Çizelge 4.66. Bisküvilik buğday un örnekleri ait % sertlik değeri için oluşturulan modellere ait parametreler .....                    | 79 |
| Çizelge 4.67. Bisküvilik buğday un örneklerine ait % sertlik değeri için seçilen modele ait parametreler .....                         | 79 |
| Çizelge 4.68. Bisküvilik buğday un örneklerine ait % kuru gluten değeri için oluşturulan modellere ait parametreler .....              | 80 |
| Çizelge 4.69. Bisküvilik buğday un örneklerine ait % kuru gluten değeri için seçilen modele ait parametreler .....                     | 81 |
| Çizelge 4.70. Bisküvilik buğday un örneklerine ait % yaş gluten değeri için oluşturulan modellere ait parametreler .....               | 81 |
| Çizelge 4.71. Bisküvilik buğday un örneklerine ait % yaş gluten değeri için seçilen modele ait parametreler .....                      | 82 |
| Çizelge 4.72. Bisküvilik buğday un örneklerine ait % su absorpsiyon değeri için oluşturulan modellere ait parametreler .....           | 83 |
| Çizelge 4.73. Bisküvilik buğday un örneklerine ait % su absorpsiyon değeri için seçilen modele ait parametreler .....                  | 83 |
| Çizelge 4.74. Bisküvilik buğday un örneklerine ait gelişme süresi değeri için oluşturulan modellere ait parametreler .....             | 84 |

|  |    |
|--|----|
| Çizelge 4.75. Bisküvilik buğday un örneklerine ait gelişme süresi değeri için seçilen modele ait parametreler .....                        | 84 |
| Çizelge 4.76. Bisküvilik buğday un örneklerine ait stabilite değeri için oluşturulan modellere ait parametreler .....                      | 85 |
| Çizelge 4.77. Bisküvilik buğday un örneklerine ait stabilite değeri için seçilen modele ait parametreler .....                             | 85 |
| Çizelge 4.78. Bisküvilik buğday un örneklerine ait yumuşama derecesi değeri için oluşturulan modellere ait parametreler .....              | 86 |
| Çizelge 4.79. Bisküvilik buğday un örneklerine ait yumuşama derecesi değeri için seçilen modele ait parametreler .....                     | 86 |
| Çizelge 4.80. Bisküvilik buğday un örneklerine ait Zeleny sedimentasyon değeri için oluşturulan modellere ait parametreler .....           | 87 |
| Çizelge 4.81. Bisküvilik buğday un örneklerine ait Zeleny sedimentasyon değeri için seçilen modele ait parametreler .....                  | 88 |
| Çizelge 4.82. Bisküvilik buğday un örneklerine ait Beklemeli Zeleny sedimentasyon değeri için oluşturulan modellere ait parametreler ..... | 88 |
| Çizelge 4.83. Bisküvilik buğday un örneklerine ait beklemeli Zeleny sedimentasyon değeri için seçilen modele ait parametreler .....        | 89 |
| Çizelge 4.84. Bisküvilik buğday un örneklerine ait AKTS değeri için oluşturulan modellere ait parametreler .....                           | 90 |
| Çizelge 4.85. Bisküvilik buğday un örneklerine ait AKTS değeri için seçilen modele ait parametreler .....                                  | 90 |
| Çizelge 4.86. Bisküvilik buğday un örneklerine ait alveograf W değeri için oluşturulan modellere ait parametreler .....                    | 91 |
| Çizelge 4.87. Bisküvilik buğday un örneklerine ait alveograf W değeri için seçilen modele ait parametreler .....                           | 92 |
| Çizelge 4.88. Bisküvilik buğday un örneklerine ait alveograf P değeri için oluşturulan modellere ait parametreler .....                    | 92 |
| Çizelge 4.89. Bisküvilik buğday un örneklerine ait alveograf P değeri için seçilen modele ait parametreler .....                           | 93 |

|   |     |
|---|-----|
| Çizelge 4.90. Bisküvilik buğday un örneklerine ait alveograf L değeri için oluşturulan modellere ait parametreler .....   | 93  |
| Çizelge 4.91. Bisküvilik buğday un örneklerine ait alveograf L değeri için seçilen modele ait parametreler .....          | 94  |
| Çizelge 4.92. Bisküvilik buğday un örneklerine ait alveograf P/L değeri için oluşturulan modellere ait parametreler ..... | 94  |
| Çizelge 4.93. Bisküvilik buğday un örneklerine ait alveograf P/L değeri için seçilen modele ait parametreler .....        | 95  |
| Çizelge 4.94. SBE kırma örneklerine ait % protein değeri için oluşturulan modellere ait parametreler .....                | 96  |
| Çizelge 4.95. SBE kırma örneklerine ait % protein değeri için seçilen modele ait parametreler .....                       | 97  |
| Çizelge 4.96. SBE kırma örneklerine ait % rutubet değeri için oluşturulan modellere ait parametreler .....                | 97  |
| Çizelge 4.97. SBE kırma örneklerine ait % rutubet değeri için seçilen modele ait parametreler .....                       | 98  |
| Çizelge 4.98. SBE un örneklerine ait % sertlik değeri için oluşturulan modellere ait parametreler .....                   | 99  |
| Çizelge 4.99. SBE unlara ait % sertlik değeri için seçilen modele ait parametreler .....                                  | 99  |
| Çizelge 4.100. SBE unlara ait % yaş gluten değeri için oluşturulan modellere ait parametreler .....                       | 100 |
| Çizelge 4.101. SBE un örneklerine ait % yaş gluten değeri için seçilen modele ait parametreler .....                      | 100 |
| Çizelge 4.102. SBE un örneklerine ait % kuru gluten değeri için oluşturulan modellere ait parametreler .....              | 101 |
| Çizelge 4.103. SBE unlara ait % kuru gluten değeri için seçilen modele ait parametreler .....                             | 102 |
| Çizelge 4.104. SBE un örneklerine ait renk $L^*$ değeri için oluşturulan modellere ait parametreler .....                 | 102 |

|   |     |
|---|-----|
| Çizelge 4.105. SBE un örneklerine ait renk $L^*$ değeri için seçilen modele ait parametreler.....                   | 103 |
| Çizelge 4.106. SBE un örneklerine ait renk $a^*$ değeri için oluşturulan modellere ait parametreler.....            | 103 |
| Çizelge 4.107. SBE un örneklerine ait renk $a^*$ değeri için seçilen modele ait parametreler.....                   | 104 |
| Çizelge 4.108. SBE un örneklerine ait renk $b^*$ değeri için oluşturulan modellere ait parametreler.....            | 104 |
| Çizelge 4.109. SBE un örneklerine ait renk $b^*$ değeri için seçilen modele ait parametreler.....                   | 105 |
| Çizelge 4.110. SBE un örneklerine ait % su absorpsiyon değeri için oluşturulan modellere ait parametreler .....     | 106 |
| Çizelge 4.111. SBE un örneklerine ait % su absorpsiyon değeri için seçilen modele ait parametreler .....            | 106 |
| Çizelge 4.112. SBE un örneklerine ait gelişme süresi değeri için oluşturulan modellere ait parametreler .....       | 107 |
| Çizelge 4.113. SBE un örneklerine ait gelişme süresi değeri için seçilen modele ait parametreler.....               | 107 |
| Çizelge 4.114. SBE un örneklerine ait stabilite değeri için oluşturulan modellere ait parametreler.....             | 108 |
| Çizelge 4.115. SBE un örneklerine ait stabilite değeri için seçilen modele ait parametreler.....                    | 108 |
| Çizelge 4.116. SBE un örneklerine ait yumuşama derecesi değeri için oluşturulan modellere ait parametreler .....    | 109 |
| Çizelge 4.117. SBE un örneklerine ait yumuşama derecesi değeri için seçilen modele ait parametreler .....           | 109 |
| Çizelge 4.118. SBE un örneklerine ait Zeleny sedimentasyon değeri için oluşturulan modellere ait parametreler ..... | 110 |
| Çizelge 4.119. SBE un örneklerine ait Zeleny sedimentasyon değeri seçilen modele ait parametreler .....             | 111 |

|   |     |
|---|-----|
| Çizelge 4.120. SBE un örneklerine ait beklemeli Zeleny sedimentasyon değeri için oluşturulan modellere ait parametreler ..... | 111 |
| Çizelge 4.121. SBE un örneklerine ait beklemeli Zeleny sedimentasyon değeri için seçilen modele ait parametreler .....        | 112 |
| Çizelge 4.122. SBE un örneklerine ait alveograf W değeri için oluşturulan modellere ait parametreler .....                    | 113 |
| Çizelge 4.123. SBE un örneklerine ait alveograf W değeri için seçilen modelin parametreleri .....                             | 113 |
| Çizelge 4.124. SBE un örneklerine ait alveograf P değeri için oluşturulan modellere ait parametreler .....                    | 114 |
| Çizelge 4.125. SBE un örneklerine ait alveograf P değeri için seçilen modele ait parametreler .....                           | 114 |
| Çizelge 4.126. SBE un örneklerine ait alveograf L değeri için oluşturulan modellere ait parametreler .....                    | 115 |
| Çizelge 4.127. SBE un örneklerine ait alveograf L değeri için seçilen modele ait parametreler .....                           | 115 |
| Çizelge 4.128. SBE un örneklerine ait alveograf G değeri için oluşturulan modellere ait parametreler .....                    | 116 |
| Çizelge 4.129. SBE un örneklerine alveograf G değeri için seçilen modele ait parametreler .....                               | 116 |
| Çizelge 4.130. SBE un örneklerine ait alveograf P/G değeri için oluşturulan modellere ait parametreler .....                  | 117 |
| Çizelge 4.131. SBE un örneklerine ait alveograf P/G değeri için seçilen modele ait parametreler .....                         | 117 |
| Çizelge 5.1. Ekmeklik buğday kırma ve un örneklerine ait kalite parametreleri için seçilen modellere ait parametreler .....   | 120 |
| Çizelge 5.2. Makarnalık buğday kırma ve un örneklerine ait kalite parametreleri için seçilen modellere ait parametreler ..... | 121 |
| Çizelge 5.3. Bisküvilik buğday un örneklerine ait kalite parametrelerine için seçilen modellere ait parametreler .....        | 122 |

|  |     |
|--|-----|
| Çizelge 5.4. SBE örneklerine ait kalite parametrelerine için seçilen modellere ait parametreler..... | 123 |
|--|-----|

## **ŞEKİLLER ÇİZELGESİ**

|   |    |
|---|----|
| Şekil 2.1. Buğday tanesinin kısımlarının şemasal gösterimi..... | 4  |
| Şekil 2.2. Farinograf analiz grafiği .....                      | 12 |
| Şekil 2.3. NIR absorpsiyon bantları .....                       | 14 |
| Şekil 2.4. NIR Cihaz bileşenlerinin gösterimi.....              | 15 |
| Şekil 2.5. MIR absorpsiyon bantları .....                       | 16 |
| Şekil 2.6. MIR cihaz bileşenlerinin gösterimi .....             | 16 |
| Şekil 3.1. Thermo Scientific Nicolet iS50 Spektrometresi.....   | 28 |
| Şekil 3.2. NIR örneklem haznesi ve örnek kabı .....             | 29 |
| Şekil 3.3. MIR örneklem haznesi .....                           | 29 |
| Şekil 4.1. Un örneklerine ait NIR spektrumları.....             | 34 |
| Şekil 4.2. Kırma örneklerine ait NIR spektrumları .....         | 34 |
| Şekil 4.3. Un örneklerine ait MIR spektrumları .....            | 35 |
| Şekil 4.4. Kırma örneklerine ait MIR spektrumları .....         | 36 |



## SİMGELER VE KISALTMALAR

### Simgeler

|                |   |                                |
|----------------|---|--------------------------------|
| ~              | : | Yaklaşık                       |
| °C             | : | Santigrat derece               |
| %              | : | Yüzde                          |
| CN             | : | Karbon Azot Bağı               |
| CH             | : | Karbon Hidrojen Bağı           |
| G              | : | Kabarma İndeksi                |
| L              | : | Uzunluk                        |
| N              | : | Azot                           |
| NH             | : | Azot Hidrojen Bağı             |
| n              | : | Örnek sayısı                   |
| OH             | : | Oksijen Hidrojen Bağı          |
| P              | : | Basınç                         |
| R <sup>2</sup> | : | Determinasyon katsayısı        |
| r              | : | Korelasyon katsayısı           |
| y <sub>i</sub> | : | Referans değer                 |
| $\bar{y}$      | : | Referans değerlerin ortalaması |
| $\hat{y}_i$    | : | Tahmin edilen değişken değer   |
| W              | : | Enerji                         |

## Kısaltmalar

|                |   |  |
|----------------|---|--|
| AACC           | : | Amerikan Tahıl Kimyacıları Birliği (American Association of Cereal Chemists)                                   |
| B              | : | Bisküvilik   |
| BU             | : | Brabender Unit   |
| dk             | : | Dakika   |
| E              | : | Ekmeklik   |
| EMSC           | : | Genişletilmiş Dağılım Düzeltmesi (Extended Scatter Correction)   |
| g              | : | Gram   |
| HI             | : | Sertlik İndeksi (Hardness Index)   |
| ICC            | : | Uluslararası Tahıl Bilimi ve Teknolojisi Derneği (International Association for Cereal Science and Technology) |
| J              | : | Joule  |
| M              | : | Makarnalık   |
| mL             | : | Mililitre  |
| mg:            | : | Miligram   |
| MPLS           | : | Modifiye Kısmi En Küçük Kareler (Modified Partial Least Square)  |
| ms             | : | Milisaniye   |
| MVA            | : | Çok Değişkenli Analiz  |
| NIR            | : | Yakın Kızılötesi Spektroskopi (Near Infrared Spectroscopy)   |
| nm             | : | Nanometre  |
| MIR            | : | Orta Kızılötesi Spektroskopi (Mid Infrared Spectroscopy)   |
| O <sub>2</sub> | : | Oksijen  |
| OSC            | : | Orthogonal Signal Correction   |
| PCA            | : | Temel Bileşen Analizi (Principal Component Analysis)   |
| PI             | : | Soyma Sayısı (Pearing Index)   |
| PLS            | : | Kısmi En Küçük Kareler (Partial Least Square)  |
| PSI            | : | Parçacık İriliği Sayısı (Particle Index Size)  |
| REP            | : | Tahmin Değerlerinin Bağıl Hatası (Relative Error of Prediction)  |

|        |   |  |
|--------|---|--|
| RMSE   | : | Hata Kareler Ortalamasının Karekökü (Root Mean Square Error)                           |
| RMSEC  | : | Kalibrasyon Hata Kareler Ortalaması (Root Mean Square Error of Calibration)            |
| RMSECV | : | Çapraz Validasyon Hata Kareler Ortalaması (Root Mean Square Error of Cross Validation) |
| RMSEP  | : | Tahminin Hata Kareler Ortalamasının Karekökü (Root Mean Square Error of Prediction)    |
| rpm    | : | 1 dakikadaki devir sayısı (Revolution per Minute)                                      |
| s      | : | Saniye   |
| SBE    | : | Sulu Bölge Ekmeklik  |
| SDS    | : | Sodyum Dodesil Sülfat  |
| SKCS   | : | Tek Tane Karakterizasyon Sistemi (Single Kernel Characterization System)               |
| SNV    | : | Standard Normal Variate  |

# 1. GİRİŞ

Dünya'nın birçok bölgesinde insanların ana besin kaynağı bitkisel bazlı besinlerdir. Özellikle hububat ürünleri dünya nüfusunun günlük enerji ihtiyacının % 60'dan fazlasını karşılamaktadır. Ülkemizdeki günlük beslenme diyeti göz önüne alındığında ise ana besin kaynağı olarak buğday ve undan elde edilen ekme ve makarna gösterilebilir. Buğday üretiminin bu kadar yaygın olmasının nedenleri arasında yetiştirilmesinin kolay ve ucuz olması, veriminin yüksek olması, besin değerinin yüksek olması ve doyurucu olması gösterilebilir [1].

Buğdayın kalitesi genetik ve çevresel etkenler olmak üzere iki ana faktörden etkilenmektedir. Aynı zamanda genotip X çevre interaksyonları da buğdayda kaliteyi önemli ölçüde etkilemektedir [2]. Buğdayda kalite "özel bir amaç için kullanılmaya yarayışlılık derecesi" olarak tanımlanabilir. Buğdayın değirmenlerde öğütülmesinden elde edilen un ekme, makarna, bisküvi ve kek gibi birçok ürünün hammaddesidir. Ekme ve makarna üretiminde protein değeri yüksek ve sert buğdaydan elde edilen un kullanımı tercih edilirken; bisküvi ve kek üretiminde protein değeri düşük ve yumuşak un kullanımı tercih edilmektedir.

Unun kalite kriterleri fiziksel kalite kriterleri (yabancı madde tayini, hektolitreye ağırlığı, bin tane ağırlığı, camsılık vb.), kimyasal kalite kriterleri (rutubet, kül, protein vb.), fizikokimyasal kalite kriterleri (düşme sayısı, gluten analizleri, sedimentasyon analizleri vb. ), reolojik kalite kriterleri (farinograf analizleri, alveograf analizleri vb.) ve teknolojik kalite kriterleri (ekme yapımı analizleri, makarna analizleri vb.) olmak üzere beş ana başlık altında toplanabilir [1]. Buğday ununun kalitesini belirlemeye yönelik yapılan klasik analizlerin uzun zaman alması, uzman eleman gerektirmesi, zararlı kimyasal ve özel cihaz kullanımı gerektirmesi nedenleriyle günümüzde tercih edilmemektedir. Teknolojinin gelişmesiyle hem üreticiyi hem de tüketiciyi tatmin edecek hızlı, güvenilir ve çevre dostu analiz yöntemleri geliştirilmeye başlanmıştır. Bu teknolojik analiz yöntemlerinin en önemlilerinden birisi de spektroskopik analizlerdir [3].

Spektroskopik analizler, örnekteki atom, molekül veya iyonlarda bulunan elektronların uyarılması sonucunda dönme, titreşim ve enerji seviyelerindeki

değişiklikler sırasında absorplanan ya da yayılan elektromanyetik ışımının ölçülmesi ve yorumlanması temeline dayanmaktadır [4]. Günümüzde gıda analizlerinde en sık kullanılan spektroskopik analizlerden birisi de kızılötesi (Infrared-IR) spektroskopisidir. Kızılötesi bölgesi üçe ayrılmaktadır. Bunlar; yakın kızılötesi (Near Infrared-NIR), orta kızılötesi (Middle Infrared-MIR) ve uzak kızılötesi (Far Infrared-FIR). Yakın kızılötesi ışınların dalga sayısı aralığı 750-2500 nm, orta kızılötesi ışınların dalga sayısı aralığı 2500-25000 nm ve uzak kızılötesi ışınların dalga sayısı aralığı 25000-100000 nm'dir [5]. Gıda analizlerinde genellikle yakın ve orta kızılötesi bölgeleri yaygın olarak kullanılmaktadır.

Tez kapsamında NIR ve MIR spektrumları kullanılarak ekmeklik, bisküvilik ve makarnalık buğday unlarda kalite parametrelerini tahmin edecek kalibrasyon modelleri geliştirilmiştir. Modelleri geliştirmek için kısmi en küçük kareler metodu, modifiye kısmi en küçük kareler metodu ve yapay sinir ağları kullanılmıştır. Her üç yöntemle oluşturulan modellerin uygulanabilirliği test etmek için modelden bağımsız örnek setleri kullanılmıştır. Test sonucunda her parametre için en uygun model seçilmiştir.

## 2. GENEL BİLGİLER

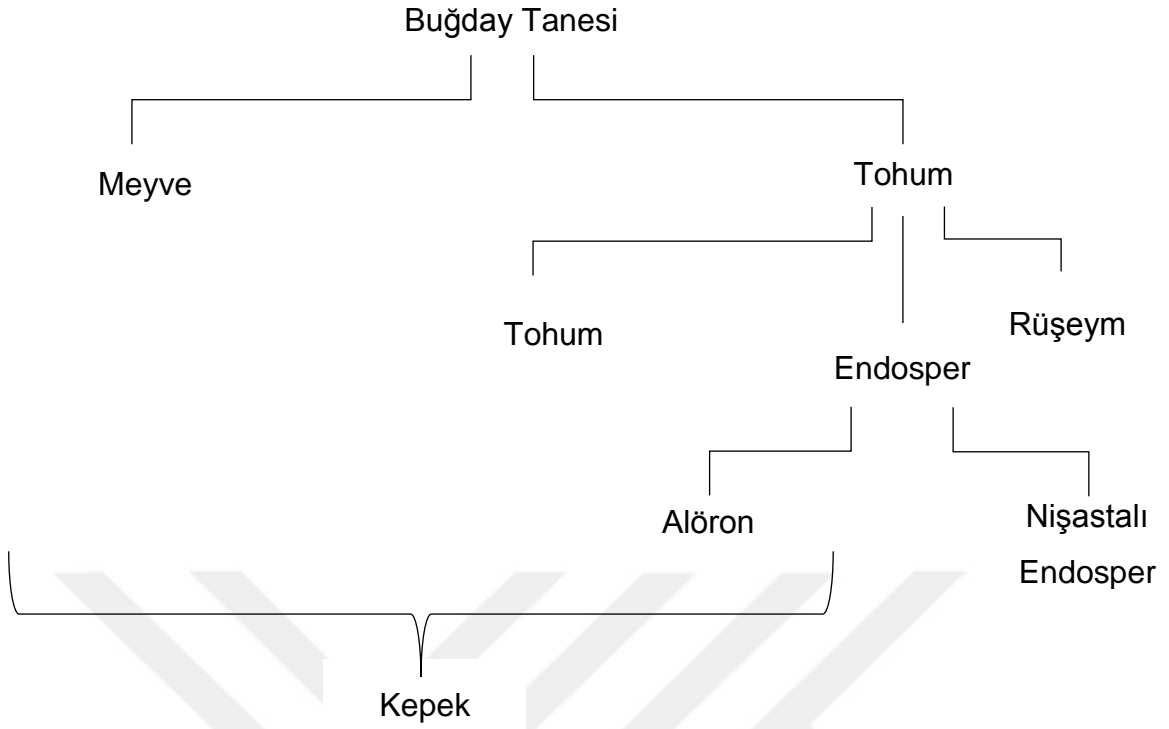
### 2.1 Buğday

Buğday insan beslenmesinde çok eski çağlardan beri önemli bir yer kaplamaktadır. İlk tarım bitkisi olarak kullanımının nerede ve ne zaman başladığı bilinmemekle beraber M.Ö. 8000-10000 yıllarında Anadolu ve çevresinde yetiştirilmeye başlandığı ve buradan dünyaya yayıldığı düşünülmektedir [6].

Taksonomik olarak incelendiğinde bütün buğdaylar *Gramineae* familyasının *Triticum (Tr.)* cinsinde yer almaktadırlar. Buğdayların sınıflandırılmasında botanik ve teknolojik olmak üzere iki tane sınıflandırma sistemi kullanılabilir. Botanik sınıflandırma sisteminde buğdayların kromozom sayıları baz alınmaktadır ve üç sınıf vardır: diploid buğdaylar (14 kromozom), tetraploid buğdaylar (28 kromozom) ve hexaploid buğdaylar (42 kromozom). Teknolojik sınıflandırma sisteminde ise buğdayın sertliği (yumuşak-sert), ekim mevsimi (yazlık-kışkık) ve buğdayın rengi (beyaz-kırmızı) baz alınmaktadır [6].

### 2.2 Buğday Tanesinin Yapısı

Buğday tanesinde esas olarak üç ana kısım vardır: kabuk (%13-16), endosperm (%83-85) ve rüşeym (%2,5-3,5). En iç kısımda endosperm ve embriyonun (rüşeym) etrafında tohum, tohum kabuğu ve perisperm yer almaktadır. En dışta yer alan meyve kabuğu (perikarp) ise tohum kabuğuyla (testa) yapışık haldedir. Tanenin kısımları şematik olarak Şekil 2.1.'de gösterilmektedir [1, 6].



Şekil 2.1. Buğday tanesinin kısımlarının şemasal gösterimi

Meyve kabuğu, tanenin en dışında yer almaktadır ve tohumu koruyucu örtü görevi yapmaktadır. Meyve kabuğunun hemen altında bulunan tohum kabuğu taneye rengini veren pigmentlerin bulunduğu kısımdır. Endosperm kısmı, tanenin kimyasal yapısında iki önemli unsur olan alöron ve nişastalı endosperm tabakalarını bulundurmaktadır. Alöron tabakası protein, kül, toplam fosfor, fitat fosforu, yağ, niasin, tiamin ve riboflavin bakımından zengindir. Fakat besleyici yönü kuvvetli olmasına rağmen içerdiği protein gluten oluşturma yeteneğinde olmadığı için ekmek teknolojisi açısından fazla önemli değildir ve diğer üst tabakalarla birlikte kepek olarak ayrılmaktadır. Nişastalı endosperm tabakası, alöron tabakasının hemen altındadır. Öğütme işlemi sırasında nişastalı endospermin hücre duvarları ve hücre içeriği unu oluşturmaktadır. Rüşeym tanenin endospermden ayrı ve farklı bir kısmıdır. Tanenin büyüme ve çimlenme dönemi boyunca besin ihtiyacını karşılamaktadır [6].

### 2.3 Buğdayın Öğütülmesi

Buğdayın öğütülmesinde temel amaç endospermi kabuk ve rüşeym kısımlarından ayırarak mümkün olduğunca inceltip un elde etmektir. Öğütme işlemi kırma,

ufalama, ayırma ve sınıflama işlemlerini kapsamaktadır. Günümüzde öğütme işlemi kademeli olarak yapılmaktadır ve her kademedede farklı un pasajları (flour streams) elde edilmektedir. Bu un pasajları değirmenin elde edildiği kısmının adı ile adlandırılmaktadır. Örneğin kırma eleklerinden elde edilen un kırma unu olarak adlandırılmaktadır. Kırma unu buğday tanesinin bütün anatomik kısımlarını içermektedir [6].

Türk Gıda Kodeksi Buğday Unu Tebliğine (Tebliğ no:2013/9) göre buğday unu “yabancı maddelerden temizlenmiş ve tavllanmış buğdayın tekniğine uygun olarak öğütülmesi ile elde edilen un” olarak tanımlanmaktadır. Aynı tebliği göre buğday unlarının (tam buğday unu hariç) en az % 98'i 212 mikronluk elekten geçebilmesi gerekmektedir [7].

Türk Gıda Kodeksi İrmik Tebliğine (Tebliğ no:2002/21) göre buğday irmiği “yabancı maddelerden temizlenmiş ve tavllanmış *Triticum durum* buğdayının irmik öğütme tekniğine uygun olarak öğütülmesi ile elde edilen ürün” olarak tanımlanmaktadır. Makarna üretiminde kullanılacak irmik 125-130 mikron elekleri arasında kalan ürün olup elek altı miktarı % 10'u ve elek üstü miktarı % 1'i geçmemelidir [8].

#### **2.4 Unun Kalite Parametreleri**

Unlarda kalite analizlerinin yapılmasının temel amacı buğdaydan elde edilen unun hangi ürüne yönelik kullanımının en uygun olduğunu belirlemektir. Ekmeklik buğday unlarda istenilen kalite özellikleri ile bisküvilik ve makarnalık buğday unlarda istenilen kalite özellikleri birbirinden farklıdır. Kalite analizleri yapılan unlar sınıflandırılmakta ve istenilen kalitede un elde edilecek şekilde paçal yapılabilmektedir [9]. Bu kalite analizleri beş ana parametre grubu başlığı altında toplanabilir:

- Fiziksel Kalite Parametreleri
- Kimyasal Kalite Parametreleri
- Fizikokimyasal Kalite Parametreleri
- Reolojik Kalite Parametreleri
- Teknolojik Kalite Parametreleri



### **2.4.1 Fiziksel Kalite Parametreleri**

Fiziksel kalite parametreleri daha çok tane halindeki buğday ile alakalıdır. Bu parametreler içinde sertlik, camsılık, bin tane ağırlığı, hektolitre ağırlığı, tane rengi ve şekli sayılabilir.

#### **2.4.1.1 Sertlik parametresi**

Sertlik parametresinin buğdayın genetik yapısına ve endospermdeki nişasta ve protein bağlarının kuvvetine bağlı olduğu düşünülmektedir. Sertlik değeri öğütme açısından ve unun hangi üründe kullanılacağına belirlenmesi açısından oldukça önemli bir parametredir. Sert ve yumuşak buğdaylar aynı şartlarda öğütüldüklerinde bile sert buğdayların unları daha granüllü yapıda olmaktadır. Aynı zamanda sert unlar ekmek ve makarna yapımı için tercih edilirken, yumuşak unlar bisküvi ve kek yapımı için tercih edilmektedir [1, 6]. Sertlik değerinin belirlenmesinde en çok kullanılan iki yöntem PSI ve PI testleridir.

- Parçacık iriliği sayısı (Particle size index-PSI); standart koşullarda öğütülen belli bir miktar unu standart bir elekten elenip elekten geçen kısmının miktarının hesaplanması prensibine dayanmaktadır.
- Soyma sayısı (Pearcing index-PI); özel olarak tasarlanmış bir soyucudan belli bir süre geçirilen buğday tanelerinin yüzeyinde meydana gelen soyulma miktarının belirlenmesi prensibine dayanmaktadır.

#### **2.4.1.2 Camsılık parametresi**

Tanenin camsı veya unsu görünüşü endospermde içinde hava olup olmamasına bağlıdır. Hava boşluğu içeren tanelerden ışık kırılmadan geçmekte ve unsu-opak bir görünüme neden olmaktadır. Camsılık parametresi, sertlik parametresiyle ilişkilendirilmektedir. Genel olarak sert buğdaylar camsı, yumuşak buğdayların unsu görünüme sahip oldukları söylenebilir. Camsılık testinde taneler enlemesine ikiye kesilerek kesit yüzeyleri incelenmektedir [6].

#### **2.4.1.3 Bin tane ağırlığı parametresi**

Tanenin yoğunluğu ve iriliği tanenin ağırlığına etki etmektedir. Endosperm yoğunluğu kabuğun yoğunluğundan daha yüksektir. Bu durumda endosperm oranı fazla olan tanelerin ağırlığının da yüksek olması beklenmektedir [1].

#### **2.4.1.4 Hektolitre ağırlığı parametresi**

Hektolitre ağırlığı, 100 litrelik hacim kabındaki buğdayın kg cinsinden değerini ifade etmektedir. Buğdayın yoğunluğu ve şekli hektolitre ağırlığına etki eden iki önemli değişkendir. Tane şeklinin tekdüzeliği hacim kabına yerleşme tarzında etki ettiği için önemlidir [10].

#### **2.4.1.5 Renk kalite parametreleri**

Tüketiciler bir ürünün kalitesine öncelikle rengine bakarak karar vermektedir. Elde edilen son ürünün rengi unun renginden etkilendiği için unun renk değerlerinin belirlenmesi önemlidir. Unun rengi buğdayın endosperm rengine ve içerdiği kül miktarına göre değişkenlik gösterebilmektedir [6]. Aynı zamanda içerdiği karetonoid pigmentleri ve lipoksigenaz enzimleri son rengin belirlenmesinde etkilidir. Makarna ürünlerinde renk önemli bir kalite parametresidir ve parlak-sarı renk istenmektedir [11, 12]. Renk değerleri 3 ayrı parametre ile ifade edilmektedir:  $L^*$  değeri; 1-100 değerleri arasında parlaklığı ifade etmektedir. 100 değeri beyaz rengi 0 değeri siyah rengi belirtmektedir.

Renk  $a^*$  değeri; kırmızı ve yeşil rengi ifade eden parametredir. Yüksek ve pozitif  $a^*$  değerleri kırmızı rengin göstergesidir.

Renk  $b^*$  değeri; sarı ve mavi rengi ifade eden parametredir. Yüksek ve pozitif  $b^*$  değerleri sarı rengin göstergesidir.

#### **2.4.2 Kimyasal Kalite Parametreleri**

Kimyasal analizler, unların kimyasal bileşimi hakkında bilgi veren analizlerdir.

##### **2.4.2.1 Rutubet parametresi**

Tanedeki rutubet miktarının belirlenmesi teknolojik ve ekonomik açıdan oldukça önemlidir. Rutubet miktarı ticari alım satımlarda buğdayın değerinin belirleyen parametreler arasında sayılmaktadır. Rutubet miktarı yüksek olan buğday tanelerinin kuru madde miktarı az olacağı için fiyatı düşmektedir. Depolama sırasında ise yüksek rutubete sahip buğdaylarda küf, mantar veya böcek zararı oluşabilmektedir ve bu gıdanın insan sağlığı açısından tüketilebilirliğini azaltmaktadır. Bu durumda buğdayın teknolojik değeri düşmektedir. Aynı zamanda çok kuru buğdaylar da taşıma ve işleme sırasında zarar görebilmektedir. Bu nedenlerin dışında klasik analiz sonuçlarının birçoğu kuru madde veya belirli bir

rutubet deęeri üzerinden dzeltilerek verilmektedir [1]. Rutubet miktarı, belirli bir miktar rneęin sabit sıcaklıkta (130°C veya 135°C) belli bir sre (2 saat) tutulması sonucunda oluřan aęırlık kaybının belirlenmesiyle hesaplanmaktadır ve % olarak ifade edilmektedir.

#### **2.4.2.2 Protein parametresi**

Buędayların hangi amaca ynelik kullanılacaęının belirlenmesinde kullanılan en nemli parametre protein miktarı ve kalitesidir. Buędayın protein miktarı yetiřtięi evrenin toprak ve iklim kořullarına baęlı olarak deęiřmektedir. Topraktaki alınabilir azot miktarı arttıkça tanedeki protein miktarı da artmaktadır. Ayrıca buędayın olgunlařma evresinde bol yaęıř alması protein miktarının dřrmektedir [6, 10].

Yksek protein miktarına sahip unlar ekmek ve makarna yapımında kullanılırken dřk protein miktarına sahip unlar biskvi ve kek yapımında kullanılmaktadır. Ekmek yapımında protein miktarı arttıkça ekmeęin hacmi ve piřme kalitesinin arttığđ belirtilmektedir [10, 13]. Makarna yapımında ise protein miktarının azlıęđ, irmięin su almasını yavařlamasına ve hamurun yoęurma sresi uzamasına neden olmaktadır. Bu durum da kurutma sırasında sorunlara, makarnanın kolay kırılmasına ve piřirme zelliklerinin azalmasına yol amaktadır. Genellikle protein miktarı arttıkça makarna piřme kaybđ azalırken, makarnanın sertlięđ ve piřirmeye karřđ dayanıklılıęđının arttığđ belirtilmektedir [11, 14].

Protein miktarının belirlenmesinde kullanılan en yaygın yntem Kjeldahl yntemidir. Bu yntem, nce rnekteki azot miktarının saptanması daha sonra da bu deęerin rne uygun bir protein faktr ile arpılması prensibine dayamaktadır.

#### **2.4.2.3 Kl parametresi**

Unda inorganik maddelerin miktarđ kl miktarını ifade etmektedir. Unda kl miktarđ arttıkça randıman artmakta ama ekmeklik kalitesi dřmektedir. Bu nedenle unda kl miktarının yksek olması istenmez. Buędayda inorganik maddelerin byk bir kısmđ kabuk kısmında bulunmaktadır ve ętme iřlemi sırasında kabuk kısmđ ayrılmaktadır [1, 10]. rnekteki tm organik maddeler, minerallere zarar

verilmeksizin, yakılıp geriye kalan inorganik madde miktarı hesaplanarak kül miktarı tayini yapılmaktadır.

### **2.4.3 Fizikokimyasal Parametreler**

#### **2.4.3.1 Gluten parametresi**

Gluten tahıllar içerisinde sadece buğdayda bulunan bir depo proteindir. Glutenin ve gliadin olmak üzere iki çeşit proteinden oluşmaktadır. Hamura glutenin yapışkanlık özelliğini gliadin ise elastikiyet özelliğini vermektedir. Unun su ile karıştırılıp yoğrulması sırasında gluten proteinleri ağ yapısı oluşturarak, fermantasyon süresince mayaların ürettiği CO<sub>2</sub> gazı ile nişasta granüllerini ve diğer bileşenleri oluşturduğu yapı içerisinde tutulmasını sağlamaktadır. Kuvvetli glutene sahip unlardan yüksek hacimli son ürünler elde edilmektedir. Bu nedenle bisküvilik buğday unlarda düşük gluten miktarı ve kalitesi, makarnalık ve ekmeklik buğday unlarda ise yüksek gluten miktarı ve kalitesi istenmektedir [13, 15, 16].

Gluten proteinleri ve makarnanın pişme kalitesi arasında önemli bir ilişki vardır. Gluten kalitesi yüksek olduğunda pişirme işlemi sırasında oluşan yapışkanlığı azaltmaktadır. Bu yüzden makarnalık buğday unlarda yüksek ve kaliteli protein içeriği ve kuvvetli gluten istenmektedir [11, 17].

Gluten analizi, buğday unundan elde edilen belli bir konsistenste hamurun seyreltik tuz çözeltisi ile yıkanarak nişasta ve diğer proteinlerin uzaklaştırılması ve geriye kalan hamurumsu yapının miktarının belirlenmesi prensibine dayanmaktadır. Bu hamurumsu yapı yaş gluten olarak adlandırılmaktadır. Yaş glutenin yüksek sıcaklıkta ve kısa sürede kurutulması ile elde edilen kuru yapı ise kuru gluten olarak adlandırılmaktadır. Her iki gluten parametresi de ağırlıkça % olarak ifade edilmektedir.

#### **2.4.3.2 Gluten indeks parametresi**

Gluten indeks değeri gluten kalitesini belirlemek için kullanılan başka bir parametredir. Yaş glutenin 6000 rpm devirde 60 saniye boyunca santrifüj edilmesi sonucunda elekten geçmeyen gluten miktarının toplam gluten miktarına oranı

gluten indeks deęerini verir. Gluten indeks deęeri arttıkça buędayın gluten kalitesi de artmaktadır [1].

#### **2.4.3.3 Zeleny sedimentasyon parametresi**

Zeleny sedimentasyon deęeri undaki gluten miktarı ve gluten kalitesi hakkında bilgi veren bir parametredir. Gluten miktarının yüksek ve kalitesinin iyi olduęu unların Zeleny sedimentasyon deęeri de yüksek çıkmaktadır. Dolayısıyla Zeleny sedimentasyon deęeri yüksek unlar ekmek veya makarna yapımı için tercih edilirken, düşük unlar bisküvi veya kek yapımı için tercih edilmektedir. Zeleny sedimentasyon testinin prensibi belli bir miktar unun zayıf asit çözeltisinde belli bir süre bekletilip un parçacıklarının hacminin gluten kalitesine baęlı olarak artması ve belli bir süre sonrasında parçacıkların çöken miktarının ölçülmesi esasına dayanmaktadır [1, 10, 18].

#### **2.4.3.4 Beklemeli zeleny sedimentasyon parametresi**

Zeleny sedimentasyon testi modifiye edilerek undaki süne-kıvıllı zararı hakkında bilgi sahibi olunmaktadır. Bu böceklerin bıraktıkları proteolitik enzimler undaki gluten proteinlerin parçalanmasına neden olmaktadır. Süne-kıvıllı zararına uğrayan buędaylardan öğütölen unların teknolojik olarak işlenmesi zor olmaktadır. Beklemeli Zeleny sedimentasyon testi, zayıf asit çözeltisinde belli bir süre bekletilen un parçacıklarının oluşturduęu çökelti miktarının gluten proteinlerinin hidrolizine baęlı olarak azalması prensibine dayanmaktadır. İki sedimentasyon testi sonuçları arasındaki fark fazla olması süne-kıvıllı zararının fazlalığını göstermektedir [1].

#### **2.4.3.5 Alkali su tutma kapasitesi**

Unların özellikle bisküvili yapımına uygunluęunu belirlemede kullanılan önemli bir kalite parametresidir. Analizin prensibi belli bir miktar un tarafından santrifüj sırasında sodyum karbonat çözeltisinin tutulmasına dayanmaktadır. Tutulan sodyum karbonat çözeltisinin miktarı % olarak ifade edilmektedir. ASTK deęeri yumuşak ve sert buędayların ayırımının yapılmasında ve bisküvi pişirme kalitesinin belirlenmesinde kullanılmaktadır [19].

#### **2.4.4 Reolojik Kalite Parametreleri**

Reolojik kalite parametreleri unun ekmeklik kalitesi hakkında en kesin bilgi veren parametrelerdir [20]. Reolojik analizler alveograf, farinograf ve ekstensograf cihazları kullanılarak yapılmaktadır.

##### **2.4.4.1 Alveograf kalite parametreleri**

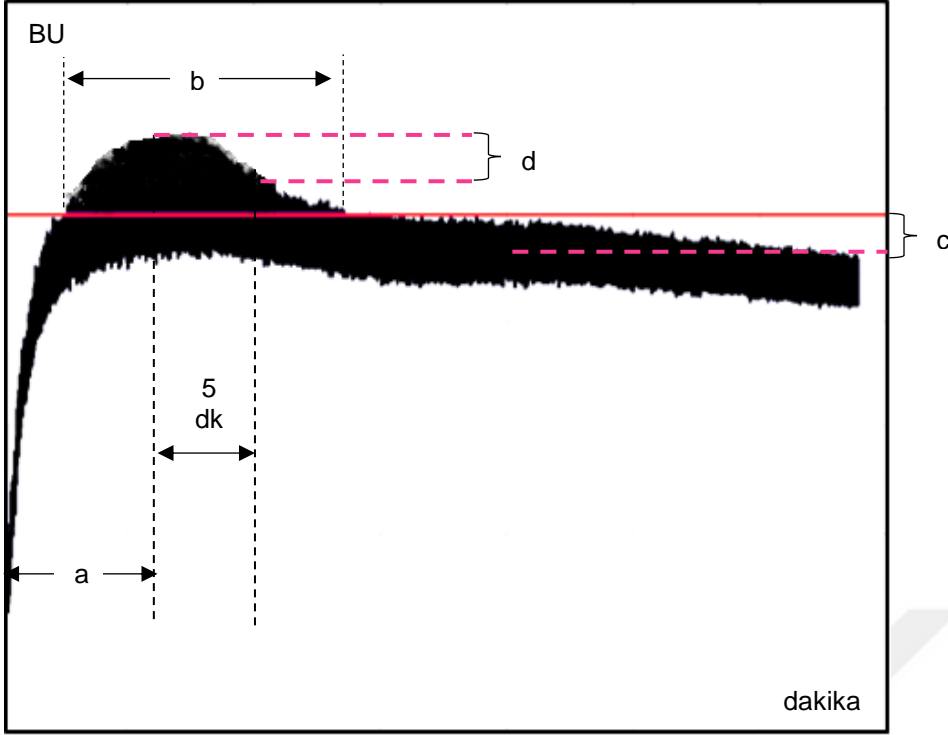
Alveograf analizinin prensibi, belli bir miktar un, su ve tuz karıştırılarak elde edilen hamurun sabit şartlar altında belli bir süre bekletilmesi ve içerisine hava üflenerek şişmeye karşı gösterdiği direncin ölçülmesine dayanmaktadır. Ölçülen direnç grafik olarak kaydedilmekte ve alveograf kalite parametreleri grafik üzerinden hesaplanmaktadır.

Alveograf kalite parametreleri:

- P (basınç); hamurun şişirilme esnasındaki maksimum basıncı yansıtmaktadır. Eğrinin tepe noktasının metrik olarak ölçülmesi ile hesaplanmaktadır. Yüksek P değeri unun gluten kuvvetinin yüksek olduğunu göstermektedir. Bu tip unlar ekmek yapımında kullanılmaktadır.
- L(uzunluk); hamurun uzayabilirliğini göstermektedir. Eğri tabanın metrik olarak ölçülmesi ile hesaplanmaktadır.
- W (enerji); hamuru patlatıncaya kadar şişirmek için gerekli olan enerji miktarını göstermektedir..
- G (kabarma indeksi); hamuru şişirmek için gereken hava miktarı ile ilişkili bir parametredir. Gereken hava miktarının karekökü alınarak hesaplanır.
- P/G veya P/L; hamurun viskoelastik yapısı hakkında bilgi vermektedir [21, 22].

##### **2.4.4.2 Farinograf kalite parametreleri**

Farinograf cihazı hamurun yoğrulma özelliklerini belirlemek ve unun ekmeklik kalitesi hakkında bilgi sahibi olmak için kullanılmaktadır. Belli bir miktar un ve suyun hamur oluşturmak için karıştırılırken karıştırıcı paletlere karşı gösterdiği direnç zamana karşı bir grafik olarak kaydedilmektedir. Farinograf parametreleri bu grafik üzerinden hesaplanmaktadır. Farinograf analizinde elde edilen örnek grafik Şekil 2.2.'de gösterilmektedir.



Şekil 2.2. Farinograf analiz grafiği

Farinograf kalite parametreleri:

- Su absorpsiyonu; 500 konsistensde hamur elde etmek için una eklenen su miktarıdır. Un ağırlığı üzerinden % olarak ifade edilmektedir.
- Gelişme süresi (a); eğrinin başlangıç noktasından 500 konsistens çizgisini ortaladığı noktaya ulaşması geçen sürenin dakika cinsinden ifadesidir.
- Stabilite (b); eğrinin 500 konsistens çizgisini ilk kestiği nokta ve ayrıldığı nokta arasındaki zaman farkıdır.
- Yumuşama derecesi (c); eğrinin 20 dakika sonraki orta noktası ile 500 konsistens çizgisi arasındaki mesafedir ve BU cinsinden ifade edilmektedir.
- Yoğurma tolerans değeri (d); eğrinin 500 konsistens çizgisini ortaladığı noktadan 5 dakika sonraki tepe noktası ve eğrinin tepe noktası arasındaki mesafenin BU cinsinden değeridir.

Unun % su absorpsiyonu, unun ilk rutubet miktarına bağlı bir parametredir. Protein miktarı yüksek ve kaliteli unlarda gelişme süresi ve stabilite değerinin yüksek; yumuşama derecesinin düşük olması beklenmektedir [1, 20, 21].

#### **2.4.5 Teknolojik Kalite Parametreleri**

Teknolojik kalite parametreleri ekme analizlerini, makarna analizlerini ve bisküvi analizlerini kapsamaktadır [23].

Ekme analizlerinde ekme pişirme analizleri yapılmakta ve ekmeğin hacmi, ağırlığı, gözenek yapısı belirlenmektedir. Aynı zamanda duyu analizler ve tekstür analizleri yapılmaktadır.

Makarna analizlerinde makarna pişirilmekte ve suya geçen madde miktarı, hacim artışı, su absorpsiyonu, toplam organik madde miktarı hesaplanmaktadır. Bunların dışında tekstür analizleri ve duyu analizler de yapılmaktadır.

Bisküvi analizlerinde bisküvi yapılmakta ve bisküvinin çapı, kalınlığı, yayılma oranı, kırılma kuvveti hesaplanmaktadır. Ayrıca duyu analizler ve tekstür analizleri yapılmaktadır.

#### **2.5 Infrared Spektroskopisi**

Infrared spektroskopisi, atomların titreşimine dayanan bir tekniktir. Infrared bölgesindeki ışınlar Herschel tarafından 1800 yılında keşfedilmiştir. Infrared ışınlar elektromanyetik spektrumda 700 - 1.000.000 nm arasındaki dalga boyunu kapsamaktadır. Infrared bölgedeki ışınlar dalga boyu aralığına göre üç kısma ayrılır:

- 1- Yakın kızılötesi (Near-Infrared)
- 2- Orta kızılötesi (Mid-Infrared)
- 3- Uzak kızılötesi (Far-Infrared) [24].

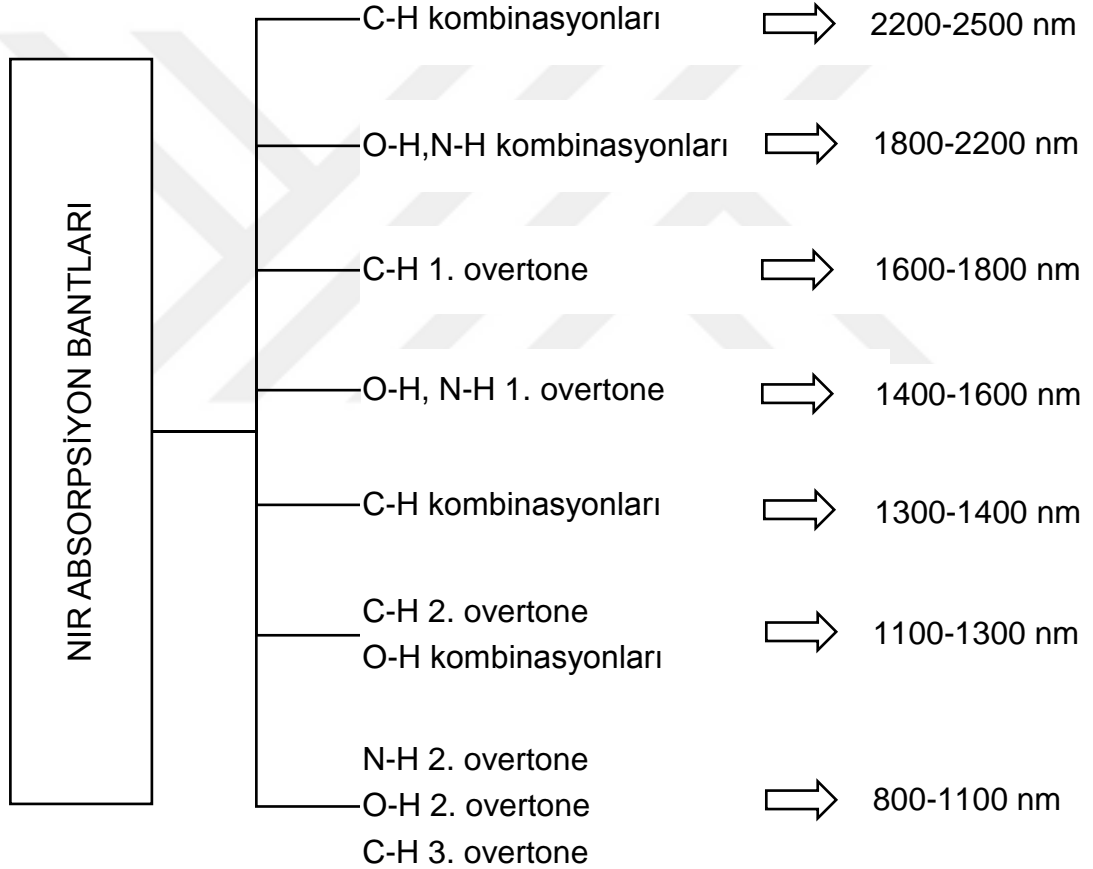
##### **2.5.1 NIR Spektroskopisi**

NIR spektroskopisi 780-2500 nm dalga boyu ( $4000-13000 \text{ cm}^{-1}$  dalga sayısı) aralığındaki elektromanyetik radyasyon absorpsiyonuna dayanmaktadır. Kimyasal bağlar belirli frekanslarda atom ağırlığına, molekülün şekline, bağların kuvvetine ve titreşimsel kenetlenme periyoduna bağlı olarak titreşim hareketi yapmaktadırlar.

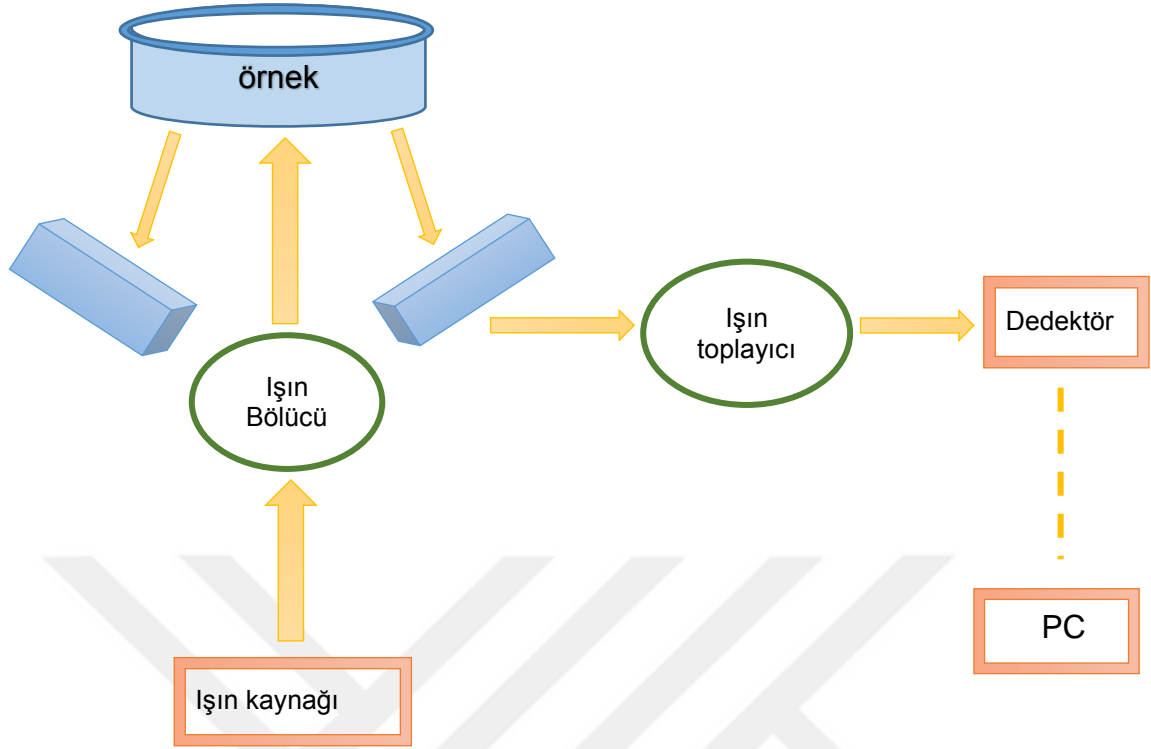


Bu titreşim hareketi aynı zamanda molekülün dipolar momenti ile de ilişkilendirilmektedir. Dipolar moleküllerin sadece gerilim hareketi yapan bir bağı vardır. Daha karmaşık moleküller ise daha çok bağa sahiptir ve gerilim (stretching) ve eğilme (bending) olmak üzere iki olası titreşim hareketi yapmaktadırlar [25, 26].

Organik moleküllerin NIR spektrumları  $-CH$ ,  $-NH$  ve  $-OH$  gibi kimyasal bağların overtone ve titreşim hareketlerinin kombinasyonlarına karşılık gelen ve genellikle birbiriyle çakışan absorpsiyon bantları içermektedir. NIR absorpsiyon bantlarının karşılık geldiği dalga boyları Şekil 2.3.'de gösterilmektedir [27]. NIR cihaz bileşenleri Şekil 2.4.'de verilmiştir.



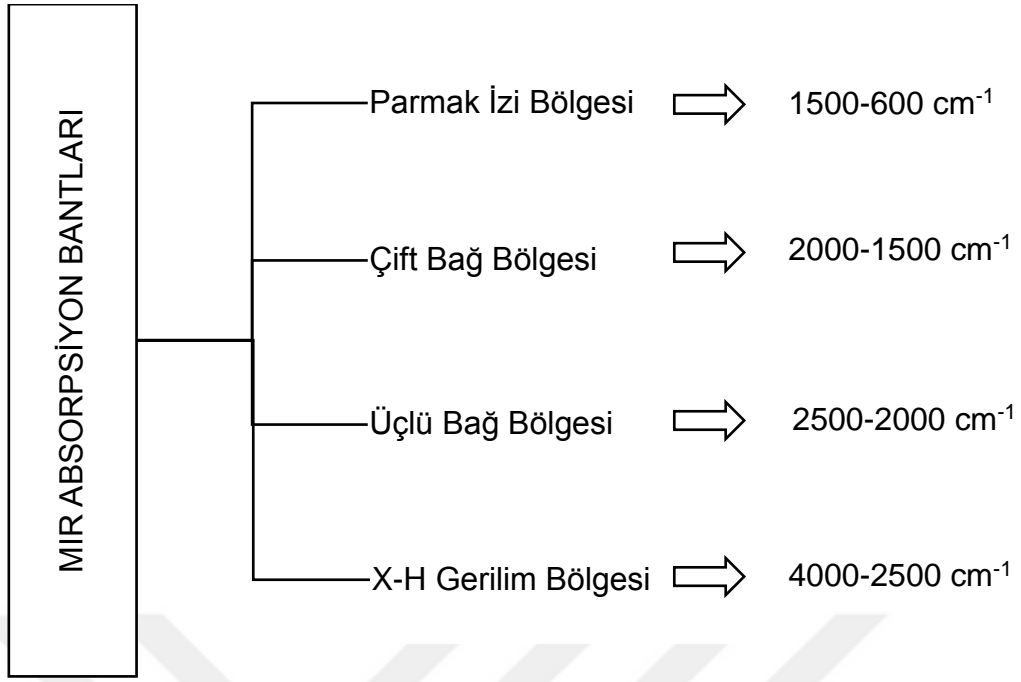
Şekil 2.3. NIR absorpsiyon bantları



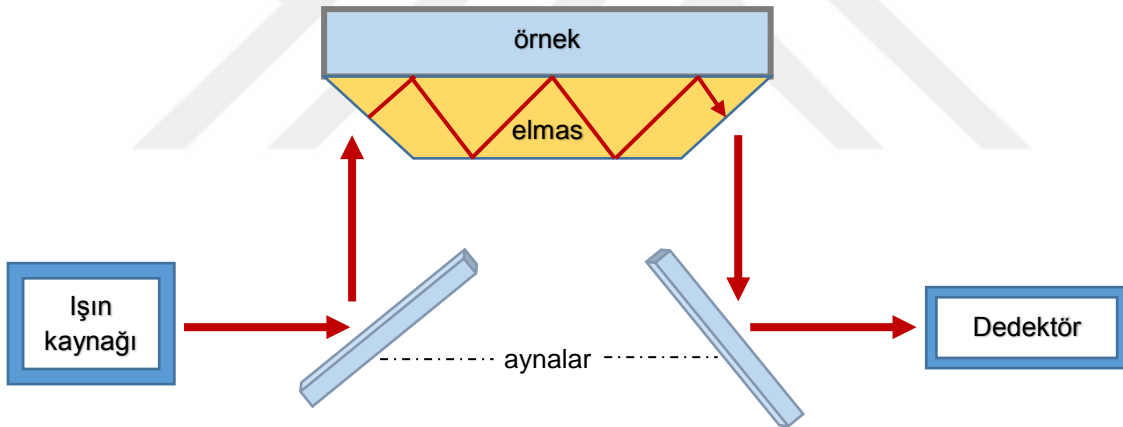
Şekil 2.4. NIR Cihaz bileşenlerinin gösterimi

### 2.5.2 MIR Spektroskopisi

Orta kızılötesi (Mid-Infrared-MIR) ışınları, yakın kızılötesi ışınlarının keşfinden daha sonra keşfedilmiştir. MIR ışınları elektromanyetik spektrumda 2500-25000 nm dalga boyu ( $400-4000 \text{ cm}^{-1}$  dalga sayısı) aralığını kapsamaktadır. NIR spektrumlarında olduğu gibi MIR spektrumları da organik moleküllerin kimyasal bağları hakkına bilgi vermektedir. MIR absorpsiyon bantlarının karşılık geldiği dalga boyları Şekil 2.5.'de gösterilmektedir [5]. MIR cihaz bileşenleri Şekil 2.6.'de verilmiştir.



Şekil 2.5. MIR absorpsiyon bantları



Şekil 2.6. MIR cihaz bileşenlerinin gösterimi

## 2.6 Kemometrik yöntemler

Kemometri, ilk olarak 1970'li yıllarda ortaya çıkmış bir kavramdır. Fiziksel ve kimyasal verilerden bilgi alınmasını sağlayan istatistiksel ve matematiksel yöntemlerin bilgisayar programları aracılığıyla uygulanmasını belirtir. En önemli ve en yaygın kemometrik yöntemler çoklu değişken kalibrasyonu ve çoklu değişken sınıflandırılmasıdır. Çoklu değişken kalibrasyonun amacı spektrum ve geleneksel yöntemlerle hesaplanan veriler gibi iki veri seti arasında kantitatif ilişki kurmaktır.

Elde edilen kalibrasyon modelleri daha sonra bilinmeyen bir örnekteki istenilen parametrelerin tahmin edilmesinde kullanılmaktadır [28, 29].

### **2.6.1 Regresyon teknikleri**

İki veri seti arasında ilişki kurulmasını sağlayan birçok regresyon yöntemi vardır. Bu teknikler arasında en eski olanı çoklu doğrusal regresyon 'dur (Multiple Linear Regression- MLR). Bunun dışında temel bileşen regresyonu (Principal Component Regression-PCR), destekli vektör regresyonu (Support Vector Regression- SVR) ve en küçük kareler regresyonu (Least Squares Regression- LSR) gibi regresyon yöntemleri kullanılmaktadır. Günümüzde en yaygın olarak kullanılan regresyon yöntemi ise kısmi en küçük kareler regresyonu (Partial Least Squares Regression-PLSR)'dur [30].

PLS metodunda regresyon en küçük kareler algoritmasıyla hesaplanmaktadır. PLS'nin amacı spektral veri X ve referans değerler Y olan iki matris arasında doğrusal bir ilişki kurmaktır. Bu teknik X matrisindeki, Y matrisini en iyi tanımlayan değişkenleri bulmak için hem X hem de Y'yi modellemektedir. Model için kullanılan değişkenlerin doğrusal kombinasyonları gizli değişken, faktörler veya bileşenler olarak adlandırılmaktadır. Bu faktörler X matrisi hakkında maksimum düzeyde bilgiye sahiptir ve bu sayede Y matrisinin tahmin edilmesinde kullanılmaktadır. PLS metodu diğer regresyon metodlarının sahip olduğu birçok avantaja sahiptir. Aynı zamanda veri ve araştırılan parametre arasındaki kovaryans matrisine göre seçilen gizli değişken sayesinde diğer yöntemlerin dezavantajlarına sahip değildir [31, 32].

### **2.6.2 Veri ön işleme**

Spektrumlara uygulanan ön işlemlerinin ana amacı, verileri Beer kanununun (analit konsantrasyonu ve absorban arasındaki doğrusal ilişkiyi belirtir) uygulanabileceği forma dönüştürmektir [33]. Spektrumlarda genellikle ışık saçılımından, spektrometreden sıcaklık, yoğunluk ve tane boyutu değişiminden kaynaklanan gürültü ve temel çizgide (baseline) kaymalar gözlenmektedir. Bu istenmeyen spektral değişiklikleri düzeltmek için ön işlemler uygulanmaktadır. Gürültüyü azaltmak için hareketli ortalama ve Savitzky-Golay yöntemleri yaygın olarak kullanılmaktadır. Türev alma, Çarpımsal Dağılım Düzeltmesi (Multiplicative Scatter

Correction- MSC), Dikey Sinyal Düzeltmesi (Orthogonal Signal Correction- OSC), Standart Normal Değişim (Standard Normal Variate- SNV) ve normalizasyon yöntemi temel çizgideki kaymaların düzeltilmesi için uygulanabilir. Spektrumlardaki çakışan ve gizli bantlar ayırıcılık artırılarak veya "mean center" metodu kullanılarak çözümlenmektedir [34, 35].

### **2.6.3 Yapay Sinir Ağları**

Yapay sinir ağları biyolojik sistemlerin öğrenme mekanizmasını taklit eden hesaplama modelleridir. Yapay sinir ağlarının en önemli avantajı hesaplanan veri ve tahmin değerleri arasında doğrusal olmayan ilişkiye sahip modeller geliştirebilecek yeteneklerinin olmasıdır [36].

Yapay sinir ağları üç ana katmana sahiptir. Spektral verinin olduğu ilk katman girdi olarak adlandırılmaktadır. Çıktı olarak adlandırılan diğer katmanda ise referans değerleri temsil edilmektedir. Gizli katman olarak adlandırılan kısım ise modelleme işlemini temsil etmektedir. Gizli katmanların ağı istenilen tahmin yeteneğini kazanması için eğitilmeleri gerekmektedir. Eğitim işlemi girdilerden çıktılara dönüşüm fonksiyonları ile gerçekleştirilmektedir. Sinir ağları bir kere eğitildikleri zaman tahmin değerlerini almak için girdi değişkenleri üzerinde kullanılmaktadır. Yapay sinir ağlarının kullanımı gizli sinirlerin veya ağı eğitmek için tekrarlanma sayısının, veri ön işlemlerinin seçimi ve dalga boylarının seçimi gibi birçok parametrenin optimizasyonunu gerektirmektedir [31, 37].

### **2.6.4 Model ve test için örneklerin seçimi**

Kalibrasyon eşitliğinin kalitesi kantitatif ve kalitatif analizde kullanılan örneklerin sayısına bağlıdır. Elde edilen modelin tahmin yeteneği genelde örnek sayısı arttıkça artmaktadır. Örnekler kalibrasyon setinde ve validasyon setinde kullanılmak üzere ikiye ayrılmaktadır. Kalibrasyon modelini kurmak için seçilen örnekler bütün spektral ve referans değerlerdeki değişimleri kapsayacak şekilde mümkün olduğunca geniş aralıkta seçilmelidir. Tarım ürünleri ile ilgili yapılan çalışmalarda örnek setinde üretim yılı ve bölgesi, olgunluk seviyesi ve çeşidi farklı olan örnekler yer almalıdır [24, 38].

### 2.6.5 Validasyon

Kalibrasyon modeli geliştirildikten sonra modelin performansı bilinmeyen örnek seti kullanılarak test edilmelidir. Bu işlem validasyon olarak adlandırılmaktadır ve bilinmeyen örnek setine de validasyon örnek seti denilmektedir. Validasyon, alternatif kalibrasyon metotları arasında seçim yapmak ve kalibrasyonda faktör sayısının kaç olacağına karar vermek için oldukça önemli bir işlemdir. Ortalama hata kareleri kökü (Root Mean Square Error-RMSE) kalibrasyon modelinin kabul edilebilirliği açısından önemli bir kriterdir ve mümkün olduğunca düşük olması istenmektedir [29].

#### 2.6.5.1 Kalibrasyonun ortalama hata kareleri kökü

Kalibrasyonun ortalama hata kareleri kökü (Root Mean Square Error of Calibration-RMSEC) kalibrasyon setindeki referans değerlerin tahmin hatasının ampirik değeridir. Oluşturulan model, kalibrasyon verileri üzerinden iç validasyon yaparak test edilir. Bu nedenler, tahminin hatasından çok modelin hatasını ifade eder. RMSEC değeri Eşitlik 2.1.'e göre hesaplanmaktadır [24, 29]. Bu eşitlikte  $\hat{y}_i$  tahmin edilen değeri,  $y_i$  referans değeri ve  $n$  kalibrasyon setindeki örnek sayısını temsil etmektedir.

$$RMSEC = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (\hat{y}_i - y_i)^2}{n}}$$

Eşitlik. 2.1.

#### 2.6.5.2 Çapraz validasyonun ortalama hata kareleri kökü

Çapraz validasyonun ortalama hata kareleri kökü (Root Mean Square Error of Cross-Validation-RMSECV) sadece kalibrasyon verileri baz alınarak hesaplanmaktadır. Bu işlemde örnekler veya örnek grupları sırasıyla kalibrasyon setinden silinmektedir ve kalibrasyon modeli geriye kalan örneklerle geliştirilmektedir. Sonra, silinen örneğin veya örnek grubunun değeri tahmin edilmektedir ve referans değerlerle karşılaştırılmaktadır. Silinen örnek veya örnek grubu kalibrasyon setine geri eklenip, sıradaki örnek veya örnek grubu için aynı işlemler yapılmaktadır. Bu prosedür bütün örnekler birer defa silinene kadar tekrarlanmaktadır. RMSECV değeri Eşitlik 2.2.'ye göre hesaplanmaktadır [29, 39]. Bu eşitlikte  $y_i$  referans değeri,  $\hat{y}_i$  tahmin edilen değeri ve  $n$  örnek sayısını temsil etmektedir.

$$RMSECV = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (\hat{y}_i - y_i)^2}{n}}$$

Eşitlik. 2.2.

### 2.6.5.3 Tahminin ortalama hata kareleri kökü

Tahminin ortalama hata kareleri kökü (Root Mean Square Error of Prediction - RMSEP) validasyon setinde kullanılan örneklerin model kullanılarak tahmin edilen parametre değerlerinin referans değerlerine göre hatasını ifade etmektedir. RMSEP değeri Eşitlik 2.3. kullanılarak hesaplanmaktadır [40]. Bu eşitlikte  $\hat{y}_i$  tahmin edilen değeri,  $y_i$  referans değeri ve  $n_{val}$  validasyon setindeki örnek sayısını temsil etmektedir.

$$RMSEP = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^{n_{val}} (\hat{y}_i - y_i)^2}{n_{val}}}$$

Eşitlik. 2.3.

### 2.6.5.4 Determinasyon katsayısı/ korelasyon katsayısı ( $R^2$ )

Determinasyon katsayısı bir modelin kullanıma uygunluğu hakkında bilgi vermektedir.  $R^2$  değeri 0-1,0 arasında değerlere sahiptir.  $R^2$  'nin 0 olması tahmin edilen ve referans değerler arasında korelasyon olmadığını ifade ederken, 1,0 olması değerler arasında mükemmel bir doğrusal ilişki olduğunu ifade etmektedir. Bu nedenle  $R^2$  değerinin olabildiğince 1,0'a yakın olması istenmektedir. Referans değerlere karşı tahmin edilen değerlerin grafiğe geçirilmesi model hakkında bilgi vermektedir. İyi kalibrasyon modellerinde grafik eğrisi x- ve y- eksenleri arasında ortadan geçmektedir.  $R^2$  değeri Eşitlik 2.4. kullanılarak hesaplanmaktadır [24, 39]. Bu eşitlikte  $\hat{y}_i$  tahmin edilen değeri,  $y_i$  referans değeri ve  $\bar{y}$  referans değerlerin ortalamasını temsil etmektedir.

$$R^2 = \frac{\sum_{i=1}^n (\hat{y}_i - \bar{y})^2}{\sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2}$$

Eşitlik. 2.4.

### 2.6.6 Faktör sayısının seçimi

Kalibrasyon modelinde kullanılacak optimum faktör sayınının, gizli değişkenin veya bileşen seçimi veri işleme teknikleri bakımından oldukça önemli bir konudur. Çok

az faktör kullanımı güvenilir olmayan ve spektral verinin ilgili bütün bilgilerini içermeyen model kurulmasına neden olmaktadır. Aynı zamanda, çok fazla faktör kullanımı modelde spektral gürültüyü desteklemektedir. Bunun sonucunda da veriye çok bağımlı ve aşırı uyumlu model elde edilmektedir. Aşırı uyum etkisi daha çok sayıda veri kullanılarak azaltılabilmektedir [29, 40].

Validasyon testi genellikle kalibrasyon için optimum faktör sayısının karar verilmesinde kullanılmaktadır. RMSEP değerine karşı faktör sayısının grafiğinin çizilmesi kullanılan bileşen sayısının belirlenmesi için oldukça önemlidir. Yaklaşık olarak aynı tahmin hatasına sahip faktör sayılarından küçük olanı tercih edilmektedir [29, 40].

Validasyon setinde kullanılmak üzere ayrılan örnek sayısının yetersiz olması durumunda RMSECV değeri baz alınarak çapraz validasyon işlemi optimum faktör sayısının seçiminde kullanılmaktadır. Fakat bu işlem yüksek faktör sayısına sahip ve aşırı uyumlu modellerin seçimine neden olmaktadır. Bu problemi aşmak için modelin seçiminde ve değerlendirilmesinde tekrarlayan çapraz validasyon ve iç içe çapraz validasyon yöntemleri uygulanmaktadır [41, 42].

### **2.6.7 Aykırı değerlerin belirlenmesi**

Aykırı değerler modele uymayan örneklerdir. Anormal spektral veri veya referans ve tahmin değeri arasındaki farkın çok yüksek olması ile karakterize edilmektedirler. Aykırı değerlerin çıkarılması modelin performansını yükseltmektedir. Fakat yararlı bir değişkenin modelden çıkarılması yeni örnek setinde kötü tahmine neden olabilmektedir. Bu nedenle aykırı değerlerin çıkarılması sorunun kaynağı ve nedeni kesin belli olduğunda yapılmalıdır [24, 43].

Hotelling's  $T^2$  ve Q değerinin grafiği ve leverage istatistikleri kalibrasyondaki aykırı değerlerin belirlenmesinde kullanılmaktadır. Q istatistiği her örneğin modele uyumunu hesaplamak için uygulanmaktadır. Hotelling's  $T^2$  istatistiği normalize kare skorları toplamını baz alarak, modeldeki her bir örneğin varyasyonunu belirlemektedir. Leverage istatistiği örneğin modelin merkezinden uzaklığının nedenini açıklamaktadır [44].



## 2.7 Gıda Sektöründeki Uygulamalar

Tarım ve gıda sektörü NIR spektroskopisini analitik teknik olarak kullanan ilk sektördür. K. H. Norris ve ekip arkadaşları uygulamayı gerçek manada geliştiren ve ilk uygulayan kişilerdir. Norris çeşitli tohumlardaki nem miktarını metanol ekstraktlarını kullanarak hesaplamıştır [45]. Gelişen teknoloji ve bilgisayar programlarıyla birlikte ekstrakt yerine direk örnek üzerinden tahmin yapılmaya çalışılmış ve başarılmıştır. Buğday ununun % protein, % rutubet, % kuru gluten, % yaş gluten ve % kül miktarlarının tahmin edilmesine yönelik yapılan bir çalışmada  $r^2$  değerleri ve SEP değerleri sırasıyla 0,99; 0,14, 0,99; 0,15, 0,99; 0,22, 0,96; 0,86 ve 0,98;0,024 olarak elde edilmiştir [46]. Yapılan başka bir çalışmada % glutenin ve % gliadin miktarları NIR spektrumları ve PLS metodu kullanılarak tahmin edilmeye çalışılmıştır. Elde edilen istatistiki değerler % glutenin için  $R^2= 0,83$ ,  $SECV=0,38$  ve  $SEP= 0,65$  ve % gliadin için  $R^2= 0,78$ ,  $SECV=0,43$  ve  $SEP= 1,02$ 'dir [47]. Yapay sinir ağları ve NIR spektrumları kullanılarak yapılan bir çalışmada buğday ununun bazı kalite parametrelerini tahmin edecek modeller oluşturulmaya çalışılmıştır. % Protein, % nem, alveograf basınç(P), Zeleny sedimentasyon ve farinograf % su absorpsiyonu için elde edilen  $R^2$  değerleri sırasıyla 0,952, 0,920, 0,948, 0,917 ve 0,832'dir. Aynı parametreler için elde edilen % hata değerleri ise sırasıyla 0,991, 0,976, 1,040, 0,934 ve 0,998'dir [48].

Buğday unlarının kimyasal kompozisyonunun tahmin edilmesine yönelik yapılan araştırmaların yanı sıra reolojik özellikleri de tahmin edilmeye çalışılmıştır. Alveograf uzunluk, enerji, basınç ve P/L değerlerinin tahmin edilmesi için yapılan bir çalışmada NIR spektrumları ve PLS metodu kullanılmış ve  $R^2$  değerleri sırasıyla 0,66, 0,60, 0,27 ve 0,61 olarak elde edilmiştir. Hesaplanan SEP değerleri ise 8,05, 13,7, 4,87 ve 0,049'dur [49]. Farinograf ve ekstensograf parametrelerinin NIR spektrumları kullanılarak belirlenmesi araştırılmıştır. Farinograf parametrelerinden % su absorpsiyonu, gelişme süresi, stabilite ve karıştırma toleransı için elde edilen  $r$  ve SEP değerleri sırasıyla 0,401; 3,4, 0,619; 1,4, 0,202; 4,7 ve 0,415; 34,3'dür. Ekstensograf parametreleri için elde edilen sonuçların  $r$  değerleri ise çok küçüktür. Aynı çalışmada düşme sayısı için hesaplanan  $r$  ve SEP değerleri ise 0,219 ve 60,3'dür [50]. Alveograf analiz parametreleri için yapılan başka bir araştırma da ise örnekler sert ve yumuşak buğday olarak ikiye ayrılmıştır. Sert unlardan elde edilen sonuçlar yumuşak unlara göre daha

yüksektir. Enerji, basınç ve P/L değerleri için elde edilen  $r^2$  ve SEP değerleri sırasıyla 0,95-24, 0,86-6,7 ve 0,66-0,16'dır [46].

İrmik örneklerinin kalite parametrelerinin tahmin edilmesine yönelik yapılan bir araştırmada ise % protein, % gluten, gluten indeksi, enerji ve P/L değerleri FT-NIR ve PCR metodu kullanılarak belirlenmeye çalışılmıştır. Aynı parametreler için elde edilen  $r$  ve RMSEP değerleri sırasıyla 0,98-0,20, 0,94-0,29, 0,82-5,40, 0,92-17,60 ve 0,88-0,19'dur [51].

Buğday ve un örneklerinin kalite parametrelerinin kantitatif analizinde kullanımının yanı sıra NIR ve MIR spektroskopileri arpa [52-55], yulaf [54, 56, 57], pirinç [58, 59] ve soya fasulyesi [60] gibi tahıl ürünlerinin bazı kalite parametrelerinin tahmin edilmesi için de kullanılmıştır. Farklı tahıl örneklerinin kalitatif analizi için de NIR ve MIR spektrumları kullanılmıştır [60-62].

Et ve et ürünlerinin kimyasal bileşenlerinin belirlenmesinde ve etin kalitesine göre sınıflandırılmasında NIR ve MIR spektroskopisi kullanılmaktadır. Özellikle on-line olarak % protein, % nem, % yağ miktarı [63-65], pH değeri [64, 66, 67], su aktivitesi değeri [68] ve renk  $L^*$ ,  $a^*$ ,  $b^*$  değerleri [67, 69] gibi kalite parametrelerinin belirlenmesinde NIR spektroskopisi kullanılmaktadır. MIR spektroskopisi kullanılarak farklı et örneklerinde toplam canlı mikroorganizma sayımı yapılmaya çalışılmıştır [70-72]. Aynı zamanda spektroskopik yöntemler kullanılarak et ürünlerinde taşıyıcı ve kalite sınıflandırılması yapılmıştır [73-76].

Süt ve süt ürünlerinin analizinde MIR spektroskopisinin kullanımı NIR spektroskopisine göre daha eskidir [4]. Sütün kimyasal bileşiminde önemli yer tutan protein, yağ ve laktoz miktarının belirlenmesine yönelik araştırmalar yapılmıştır [77-81]. Süt koagülasyon özelliklerinin belirlenmesi için genellikle MIR spektroskopisi kullanılmıştır [82, 83].

Meyve ve sebze alanında spektroskopik analiz teknikleri kullanımı özellikle örnekler fiziksel olarak herhangi bir zarar vermediği için tercih edilmektedir [24]. % Şeker [84, 85], % nem [86-88], % yağ (özellikle zeytinde) [87, 88] ve % serbest yağ asidi miktarının [85, 86, 88, 89] tahmin edilmesine yönelik çalışmalar vardır.

Özellikle şarap başta olmak üzere safran gibi diğer meyve sebze ürünlerinin analizlerinde coğrafik orijin ve çeşitliliğe göre sınıflandırılmasına yönelik araştırmalar vardır [90-92].



### **3. MATERYAL VE METOT**

#### **3.1 Materyal**

Analizlerde kullanılan un, kırma ve irmik örnekleri Tarla Bitkileri Merkez Araştırma Enstitüsü Kalite Değerlendirme Bölümü tarafından temin edilmiştir. Ekmeklik buğday unların kalite parametrelerinin tahmin edilmesi için 226 adet kırma ve 222 adet un örneği ile çalışılmıştır. Aynı zamanda sulu bölgede yetiştirilen buğdaydan elde edilen unların kalite parametrelerini belirlemek için 48 kırma ve un örneği ile çalışılmıştır. Makarnalık buğday unların kalite parametrelerini belirlemek için 144 adet kırma ve un örneği ile çalışılmıştır. Bisküvilik buğday unların kalite parametreleri belirlemek için 47 adet un örneği ile çalışılmıştır.

#### **3.2 Metot**

Bu çalışmada ekmeklik, makarnalık ve bisküvilik buğday kırma ve unlar için bazı kalite parametreleri NIR spektroskopisi ve MIR spektroskopisi kullanılarak belirlenmeye çalışılmıştır. Kalite parametrelerini tahmin etmeye yönelik 3 ayrı metot kullanılmıştır. Bu yöntemler kısmi en küçük kareler metodu, modifiye kısmi en küçük kareler metodu ve yapay sinir ağları metodudur. Kalite parametreleri klasik yöntemler kullanılarak belirlenmiş ve bu değerler referans değerler olarak kullanılmıştır. Referans değerler ve oluşturulan modeller kullanılarak elde edilen değerler karşılaştırılmıştır.

##### **3.2.1 Referans Analizlerin Yapılması**

Kırma, un ve irmik örneklerinde referans analizler “Sanayici, Çiftçi ve Tüketici İstekleri Doğrultusunda Yeni Ekmeklik ve Makarnalık Buğday Hat ve Çeşitlerinin Geliştirilmesi” isimli TUBİTAK projesi kapsamında Gıda, Tarım ve Hayvancılık Bakanlığı, Tarla Bitkileri Merkez Araştırma Enstitüsü Kalite Değerlendirme Bölümü’nde yapılmıştır.

##### **3.2.1.1 Sertlik analizi**

Sertlik analizi AACC Metot No:55-31.01 [93] yöntemine göre Tek Tane Karakterizasyon Sistemi (Single Kernel Characterization System-SKCS) cihazı kullanılarak yapılmıştır. Buğday tanesini kırmak için gereken gücü hesaplayarak sertlik analizi yapılmaktadır. Yabancı maddelerden ve kırık tanelerden temizlenmiş

buğday taneleri belli bir miktar buğday tanesi tartılıp cihaza veriliyor. Cihaz 300 tane buğdayı alıp analiz yapıyor. Sonuçlar sertlik indeksi (hardness index-HI) ve PSI olarak verilmektedir.

#### **3.2.1.2 Protein analizi**

Kırma örneklerinde protein analizi AACC metot No:46-30.01 [94] metoduna uygun olarak yapılmıştır. Bu analiz için Dumas azot analiz cihazı (Velp Scientifica NDA-701, İtalya) kullanılmıştır. 200 mg özel kalay kaplara tartılmıştır. Örnek yüksek sıcaklıkta (950°C) yakılmakta ve azot (N) hariç diğer yanma sonucu oluşan moleküller (CO<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>O vb.) sistem tarafından tutulmaktadır. Termal iletken detektör kullanılarak örnekteki % azot miktarı belirlenmekte ve % azot protein dönüştürme faktörü (5,70) ile çarpılarak % protein miktarı hesaplanmaktadır.

#### **3.2.1.3 Rutubet analizi**

Rutubet analizi AACC Metot No:55-31.01 [93] metoduna uygun olarak SKCS cihazı kullanılarak yapılmıştır.

#### **3.2.1.4 Gluten analizleri**

Un ve irmik örneklerinde yaş gluten miktarı ve gluten indeks değeri AACC Metot No:38-12.02. [95] metoduna göre belirlenmiştir. Un ve saf suyun karıştırılmasıyla elde edilen hamur tuzlu su çözeltisiyle gluten yıkama cihazı (Glumatic System 2200, Perten, Huddinge, İsveç) kullanılarak yıkanmıştır. Elde edilen yaş gluten, gluten indeks cihazında (Gluten İndeks 2015, Perten, Huddinge, İsveç) santrifüjlenerek gluten indeks değeri hesaplanmıştır. Yaş gluten, glutork cihazı (Glutork 2020, Perten, Huddinge, İsveç) kullanılarak Özkaya 'ya [96] uygun olarak kurutulmuş ve kuru gluten değeri belirlenmiştir.

#### **3.2.1.5 Renk analizleri**

Un ve irmik örneklerinde renk analizleri American Society for Testing and Materials (ASTM) Method No: E 1164 [97] yöntemine uygun olarak yapılmıştır. Analiz için BYK Gardner Laboratory Color-View Spectrophotometer cihazı kullanılmıştır.

#### **3.2.1.6 Zeleny sedimentasyon analizi**

Ekmeklik ve bisküvilik buğday un örneklerinde Zeleny sedimentasyon analizi ICC Standart No.116-1 'ye [98] göre yapılmıştır.

### **3.2.1.7 Modifiye Zeleny sedimentasyon analizi**

Ekmeklik ve bisküvilik buğday un örneklerinde modifiye Zeleny sedimentasyon değeri Köksel vd.'in [99] belirlediği metoda uygun olarak hesaplanmıştır.

### **3.2.1.8 SDS sedimentasyon analizleri**

Makarnalık buğday un örneklerinde sodyum dodesil sülfat (SDS) sedimentasyon analizi Williams'a [100] uygun olarak yapılmıştır.

### **3.2.1.9 Modifiye SDS sedimentasyon analizi**

Makarnalık buğday un örneklerine SDS sedimentasyon analizi yapılırken, örnekler brom fenol mavisi çözeltisi ile 37°C'de 2 saat boyunca bekletildikten sonra üzerlerine SDS-laktik asit çözeltisi eklenmiş ve analizin devamı Williams'a [100] uygun olarak yapılmıştır.

### **3.2.1.10 Alkali su tutma kapasitesi analizi**

Bisküvilik buğday unlarda alkali su tutma kapasitesi değeri Yamazaki'nin [101] belirlediği yöntemle uygun olarak hesaplanmıştır.

### **3.2.1.11 Alveograf analizleri**

Ekmeklik ve bisküvilik buğday un örneklerinde alveograf analizi AACC Metot No:54-30 Metotuna [102] uygun olarak alveograf analiz cihazı (Chopin Alveograph, Villeneuve-la-Garenne, Fransa) kullanılarak yapılmıştır. Alveograf analiz sonuçlarından enerji (W), basınç (P), uzunluk (L), kabarma indeksi (G) ve P/G veya P/L parametreleri değerlendirilmiştir.

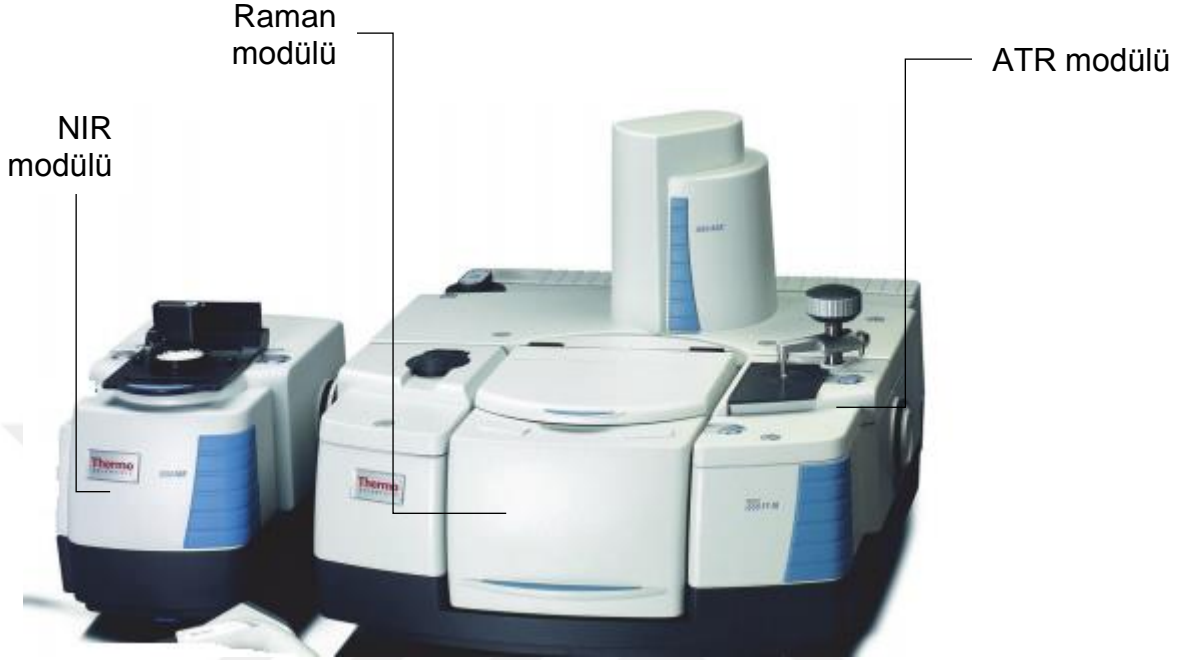
### **3.2.1.12 Farinograf analizleri**

Ekmeklik ve bisküvilik buğday un örneklerinde farinograf analizi AACC Metot No:54-21.02.'e [103] göre farinograf analiz cihazı (Brabender Farinograf, Duisburg, Almanya) kullanılarak yapılmıştır. Farinograf grafiğinin değerlendirilmesi yapılırken Shuey 'in yöntemi baz alınmıştır ve su absorpsiyonu, gelişme süresi, stabilite ve yumuşama derecesi parametreleri belirlenmiştir [104].

## **3.2.2 Spektroskopik Ölçümlerin Alınması**

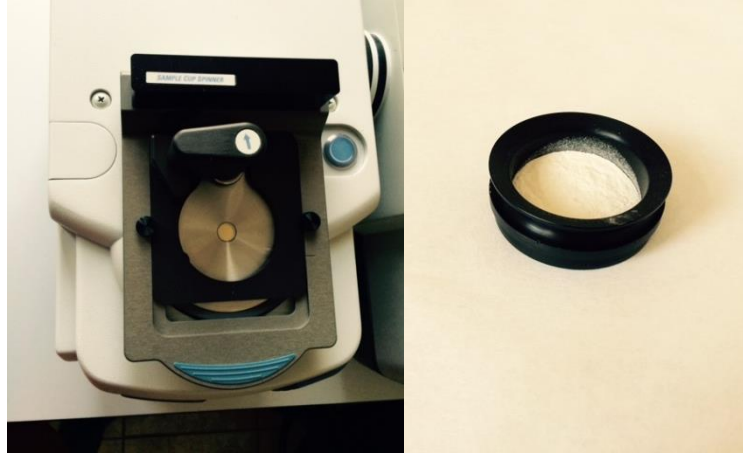
Spektrumların alınması için Thermo Scientific Nicolet iS50 Spektrometresi (Thermo Fisher Scientific Inc., Madison, WI, USA) kullanılmıştır. Sistemde iS50 NIR, iS50 Raman ve iS50 ATR olmak üzere üç ayrı ölçüm modülü bulunmaktadır.

Yapılan tez çalışması kapsamında Raman modülü kullanılmamıştır. Cihazın görüntüsü Şekil 3.1.'de verilmektedir.



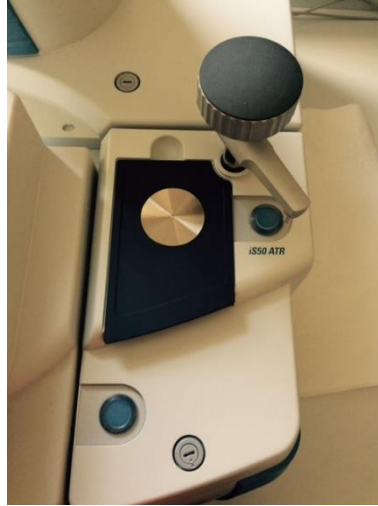
Şekil 3.1. Thermo Scientific Nicolet iS50 Spektrometresi

Bütün NIR spektrumları  $10000-4000\text{ cm}^{-1}$  dalga sayısı aralığında alınmıştır. İndiyum-Galyum-Arsenür detektörü kullanılmıştır. Ölçüm parametreleri tarama sayısı 32, ayırıcılık 8 ve dalga sayısı aralığı  $3,85\text{ cm}^{-1}$  olacak şekilde ayarlanmıştır. Spektrumlar  $\log(1/R)$  formatında kaydedilmiştir. 2 saatlik aralıklarla arka plan ölçümleri alınmıştır. Kullanılan ölçüm kabının çapı 5 cm ve derinliği 2,5 cm'dir. Ölçüm kabı döner tabluya yerleştirilmiş ve bu sayede örneklerin farklı noktalarından ölçüm alınması sağlanmıştır. Ölçümler için kullanılan örnek miktarları un örnekleri için 10 g ve kırma örnekleri için 8,5 g'dır. Örnek kabı ve örneklem haznesi Şekil 3.2.'de gösterilmektedir.



Şekil 3.2. NIR örneklem haznesi ve örnek kabı

Bütün MIR spektrumları  $4000-400\text{ cm}^{-1}$  dalga sayısı aralığında kaydedilmiştir. Dötoryumlanmış triglisin sülfat (DTGS) detektörü kullanılmıştır. Ölçüm parametreleri tarama sayısı 16, ayırıcılık 4 ve dalga sayısı aralığı  $0,48\text{ cm}^{-1}$  olacak şekilde ayarlanmıştır. Arka plan ölçümler 2 saatlik aralıklarla alınmıştır. Kristal olarak çapı 2,8 mm olan elmas tip IIa kullanılmıştır. Ölçüm alınırken elmasın üzerini kapatacak şekil örnek konulmuş ve basınç kolu kullanılarak sıkıştırılmıştır. Örneklem haznesi Şekil 3.3.'de gösterilmektedir.



Şekil 3.3. MIR örneklem haznesi



### **3.2.3 Kemometrik Analizlerin Yapılması**

#### **3.2.3.1 PLS Metodu ile Analiz**

PLS metodu kullanılarak kalite parametrelerin tahmin edecek kalibrasyon modellerin geliştirilmesi için PLS Toolbox 794 (Eigenvector, Research, Inc., ABD) programı kullanılmıştır. Örneklerin arasından rastgele seçilen bir grup (yaklaşık olarak 1/3'ü) validasyon seti için ayrılmıştır. Geriye kalan örneklerle kalibrasyon modelleri oluşturulmaya çalışılmıştır. Model kurulurken birini dışarda bırak çapraz validasyon yöntemi kullanılmıştır. Modelin gizli değişken sayısına RMSECV değerine göre karar verilmiştir. En küçük RMSECV değerine sahip gizli değişken sayısı seçilmiş ve o sayıdaki model kullanılmıştır. Modelin geliştirilmesi sırasında spektrumlara farklı ön işlemler uygulanmış ve eğer aykırı değerler varsa o örnekler modelden çıkarılmıştır. Oluşturulan modelin test edilmesi için validasyon için ayrılan örnek grubu sisteme yüklenmiştir. Hem kalibrasyon hem de validasyon veri grubu için % hata değerleri hesaplanmıştır.

#### **3.2.3.2 MPLS metodu ile analiz**

MPLS metodu kullanılarak kalite parametrelerinin tahmin edebilme yeteneğine sahip modellerin oluşturulması için WinISI 16.1 (Infrasoft International LLC., ABD) programı kullanılmıştır. Her parametre için PLS Toolbox programında kullanılan aynı kalibrasyon ve validasyon veri setleri MPLS programında da kullanılmıştır. Model oluşturulurken birini dışarda bırak çapraz validasyon metodu kullanılmıştır. Modelin geliştirilmesi için spektrumlara farklı ön işlemler ve matematiksel işlemler uygulanmıştır. Programda kalibrasyon modelleri kurulurken program otomatik, eğer varsa, aykırı değerleri çıkarmıştır. En düşük RMSECV ve en yüksek  $R^2$  değerine sahip model seçilmiştir. Modelin performansı validasyon seti kullanılarak test edilmiştir. Kalibrasyon ve validasyon veri grubu için % hata değerleri hesaplanmıştır.

#### **3.2.3.3 Yapay sinir ağları ile analiz**

Tez kapsamında kullanılan yapay sinir ağı sistemi, genellikle gıda alanında kullanılan ileri beslemeli yapay sinir ağı baz alınarak kurulmuştur. Sisteme verilen girdilerin bir sonraki katmana taşınması için 3 farklı (tansig, logsig ve pürelin)

aktarım fonksiyonu ve bunların kombinasyonları kullanılmıştır. Eğitim fonksiyonunda ise 10 farklı algoritma kullanılmıştır:

- `traingd`; basit gradiyent düşürücü algoritma
- `traingdm`; gradiyent düşürücü algoritma
- `traingda`; geriye yayılmacı adaptif öğrenme kurallı gradiyent düşürücü algoritma
- `trainrp`; geriye yayılmacı algoritma
- `traincgf`; Fletcher-Reeves konjige gradiyen algoritması
- `traincgb`; Polak Ribieri konjige gradiyen algoritması
- `traincgp`; Powel Beal gradiyen algoritması
- `trainscg`; konjige gradiyen algoritması
- `trainoss`; tek basamaklı sekans algoritması
- `trainlm`; Levenberg- Marquardt geri yayılım algoritması

Ağ performansının gizli katman sayısından ve nöron sayısından nasıl etkilendiğini incelemek için gizli katman olmadan ve gizli katman sayısı bir olduğunda ve nöron sayısı 1-10 arasında değiştirilerek çalışılmıştır. Aynı zamanda ağın ezber yapmasını engellemek ve optimum iterasyon sayısını bulmak için iterasyon sayısı 0-500 arasında değiştirilmiştir. Yapay sinir ağı sisteminin kurulumu aşamasında elde edilen bütün ağ kombinasyonlarının denenmesini kolaylaştırmak amacıyla H. Efe Geniş 'in "Alkollü içeceklerde bulunan etanol ve metanolün Raman spektroskopisi ile nicel tayini" adlı yüksek lisans tez çalışması kapsamında yazdığı Matlab kodu kullanılmıştır [105].

## 4. SONUÇLAR

### 4.1 Un ve Kırma Örneklerine Ait Kalite Parametreleri

Tez çalışması kapsamında fiziksel özellik olarak % sertlik ve renk analiz sonuçları değerlendirilmiştir. Kimyasal kalite parametreleri arasında % rutubet ve % protein miktarları değerlendirilmiştir. Fizikokimyasal analizlerde gluten analizleri ve sedimentasyon analizleri yapılmıştır. Alveograf ve farinograf analizleri ise reolojik özelliklerin değerlendirilmesi için yapılmıştır. Ekmeklik, bisküvilik ve makarnalık olmak üzere üç farklı buğday çeşidi ile çalışılmıştır. Ayrıca çeşitliliği artırmak ve coğrafik etkileri incelemek amacıyla ekmeklik buğdaylardan sulu bölgede yetiştirilen buğday örnekleri ile çalışılmıştır. Analizleri yapılan kalite parametrelerinin sonuçları Çizelge 4.1.'de gösterilmektedir.

Çizelge 4.1. Analizleri yapılan kalite parametrelerinin sonuçları

| Parametre              | Ekmeklik   |       | Sulu Bölge Ekmeklik |       | Bisküvilik |       | Makarnalık |      |
|------------------------|------------|-------|---------------------|-------|------------|-------|------------|------|
|                        | Aralık     | Ort.  | Aralık              | Ort.  | Aralık     | Ort.  | Aralık     | Ort. |
| % Protein              | 9,3-16,7   | 13,8  | 9,9-17,2            | 13,4  | 8,5-12,8   | 10,8  | 10,4-18,7  | 15,1 |
| % Rutubet              | 7,5-11,2   | 9,5   | 9,2-10,8            | 10,0  | -          | -     | 8,5-11,7   | 9,3  |
| % Sertlik              | 6,6-80,5   | 55,8  | 11,9-75,2           | 49,4  | 6,1-73,8   | 26,9  | -          | -    |
| % Yaş gluten           | 21-54      | 35,5  | 14,8-43,5           | 29,5  | 17,3-33,3  | 23,9  | 16,8-55,3  | 36,5 |
| % Kuru Gluten          | 6,9-15,3   | 11,8  | 5,0-14,4            | 9,8   | 5,6-10,7   | 7,7   | 5,5-18,5   | 12,5 |
| L*                     | 92,7-101,6 | 97,5  | 93,8-101,6          | 97,6  | -          | -     | 92,9-96,7  | 94,5 |
| Renk a*                | 0,4-2,5    | 1,7   | 0,9-2,1             | 1,4   | -          | -     | 1,5-2,8    | 2,1  |
| Renk b*                | 6,1-13,7   | 10,9  | 7,1-13,4            | 10,4  | -          | -     | 17,1-27,8  | 22,7 |
| % Su abs.              | 53,3-67,3  | 61,9  | 51,6-66,2           | 59,8  | 51,4-59,9  | 54,6  | 57,7-75,2  | 67,1 |
| Gel. Süresi            | 1,1-17,5   | 6,1   | 1,1-8,2             | 3,5   | 1,1-7,2    | 2,1   | 1,2-17,6   | 4,7  |
| Stabilite              | 2,1-16,1   | 7,7   | 1,6-14,4            | 6,4   | 2,0-17,0   | 6,1   | 1,1-16,5   | 6,5  |
| Yum. derecesi          | 12-219     | 79,1  | 10-181              | 74,3  | 17-163     | 81,9  | 22-182     | 71,7 |
| Zeleny sedi.           | 19-68      | 41,1  | 21-62,5             | 38,8  | 14,5-45    | 30,7  | 15-87      | 57,0 |
| Beklemeli Zeleny sedi. | 21-73      | 49,5  | 28,5-73             | 54,4  | 27-66,5    | 39,5  | 20-91      | 60,0 |
| W değeri               | 58-441     | 179,5 | 61,5-447            | 191,4 | 69,1-240,7 | 119,6 | -          | -    |
| P değeri               | 3,3-15,5   | 7,8   | 3,3-12,8            | 7,9   | 3-9,8      | 4,9   | -          | -    |
| L değeri               | 3,2-18,9   | 7,8   | 3,5-14,7            | 8     | 2,9-15     | 8,8   | -          | -    |

|            |           |      |         |      |         |      |   |   |
|------------|-----------|------|---------|------|---------|------|---|---|
| G değeri   | 12,6-30,6 | 19,4 | 13,2-27 | 19,7 | -       | -    | - | - |
| P/G değeri | 1,4-10,5  | 4,3  | 1,3-9,1 | 4,3  | 0,2-3,4 | 0,7  | - | - |
| ASTK       | -         | -    | -       | -    | 49,6-70 | 57,0 | - | - |

Elde edilen klasik analiz sonuçları incelendiği zaman her bir parametrenin bütün buğday çeşitlerinde geniş bir aralıkta değiştiği görülmüştür. Aynı zamanda sonuç aralıklarının literatürdeki farklı yıllarda (2004-2015) ve farklı yerlerde (Türkiye, İspanya, Avusturya) yapılan çalışmalarla uyum içinde olduğu söylenebilir [48, 49, 106, 107].

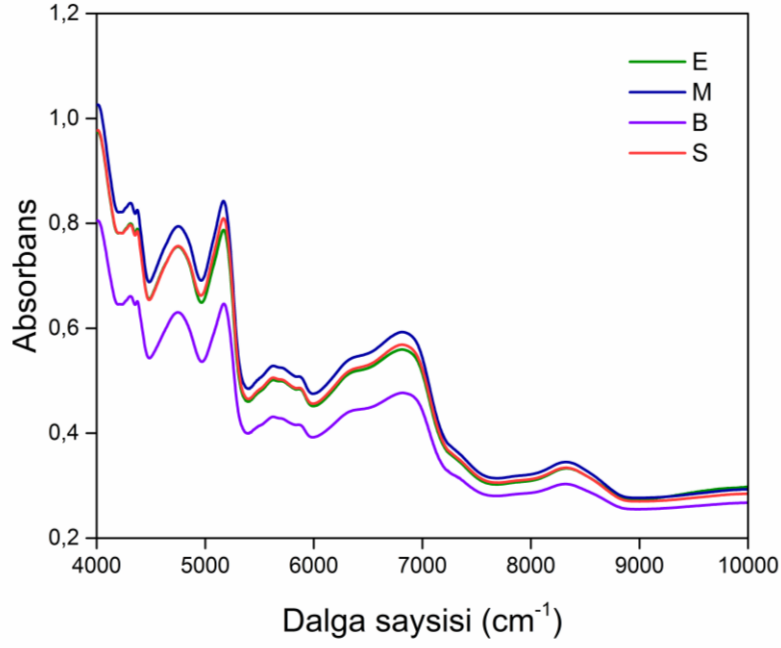
#### 4.2 Un ve Kıрма Örneklerinin NIR ve MIR Spektrumları

Kalibrasyon modellerinin oluşturulması için ekmeklik, bisküvilik ve makarnalık buğday un ve kırma örnekleriyle çalışılmıştır. Çevresel etkenlerden kaynaklanan farklılıkları en aza indirmek amacıyla Ankara Fakültesi, Malya, Altınova, Ulaş ve Gözlü olmak üzere 5 farklı lokasyonda çalışılmıştır. Aynı zamanda çeşitliliği arttırmak için ekmeklik buğday un örneklerinin 72 tanesi sulu bölgede yetiştirilmiş ve onlar için ayrı kalibrasyon modelleri geliştirilmiştir. Kalibrasyon modellerinin kurulmasında kullanılan toplam örnek sayıları Çizelge 4.2.'de verilmektedir.

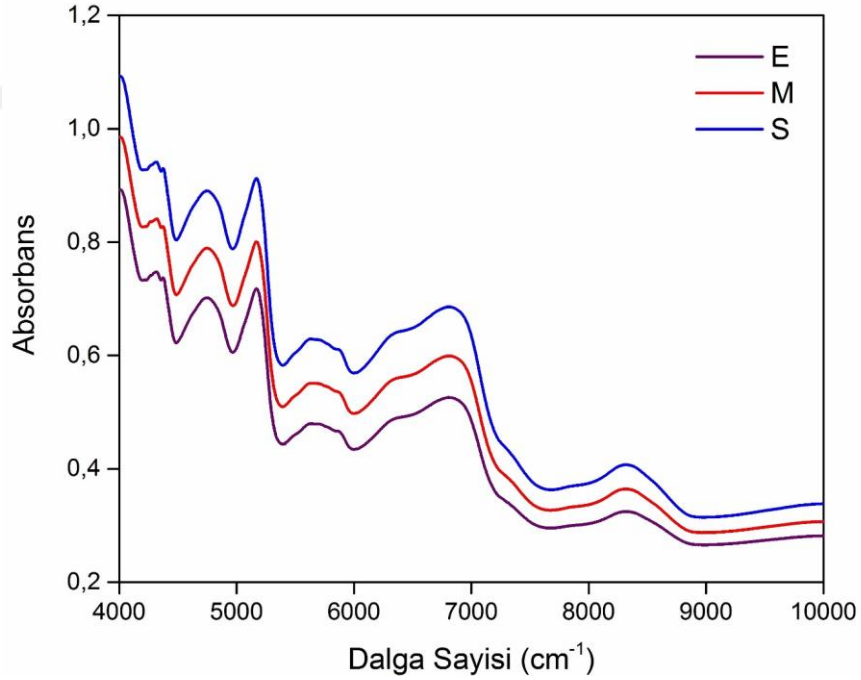
Çizelge 4.2. Modellerin oluşturulmasında kullanılan örnek sayıları

| Örnek Çeşidi        | Un  | Kırma |
|---------------------|-----|-------|
| Ekmeklik            | 222 | 226   |
| Makarnalık          | 144 | 144   |
| Bisküvilik          | 42  | -     |
| Sulu Bölge Ekmeklik | 48  | 72    |

Un ve kırma örneklerinin ortalama NIR spektrumları Şekil 4.1. ve Şekil 4.2.'de gösterilmektedir.



Şekil 4.1. Un örneklerine ait NIR spektrumları (E: Ekmeklik, M: Makarnalık, B: Bisküvilik, S: Sulu Bölge Ekmeklik)

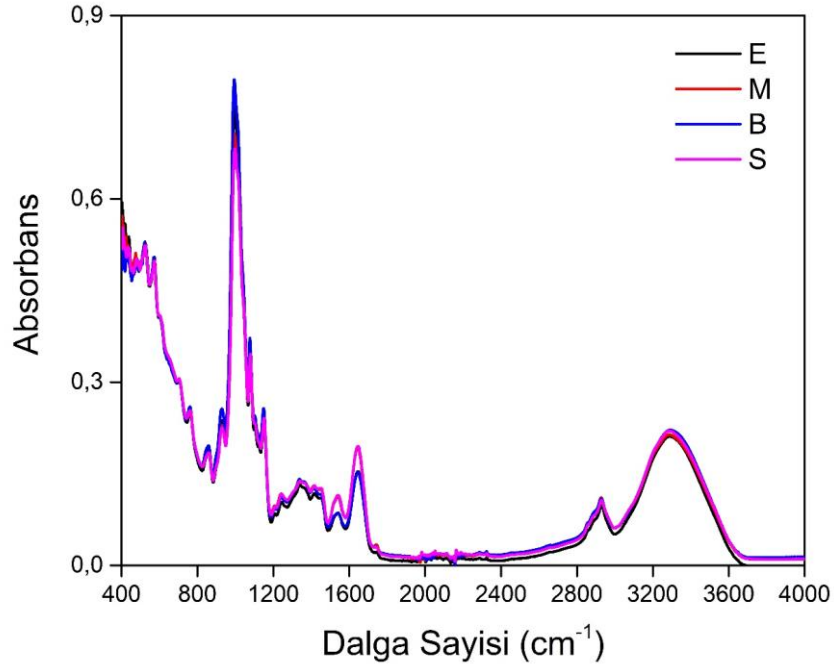


Şekil 4.2. Kırma örneklerine ait NIR spektrumları (E: Ekmeklik, M: Makarnalık, S: Sulu Bölge Ekmeklik)

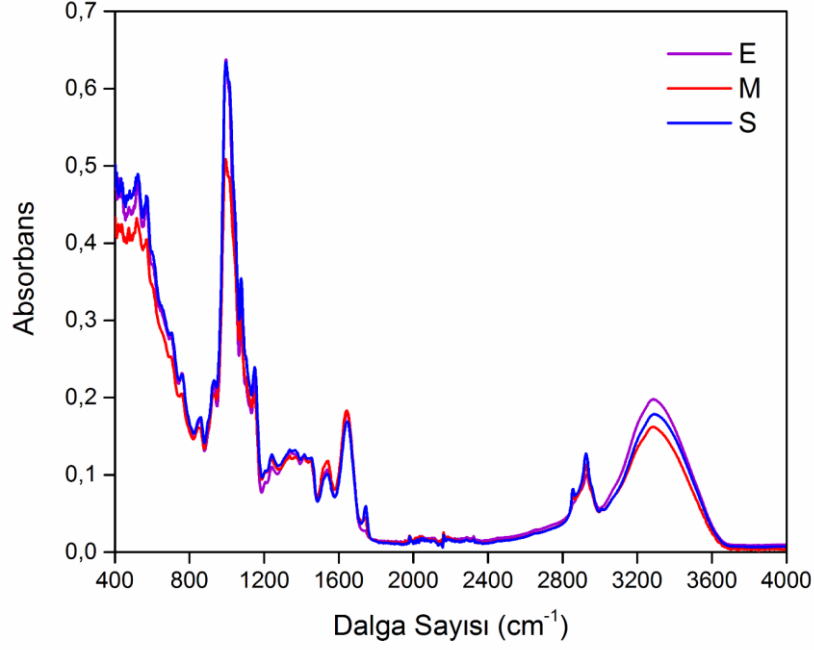
Su, protein ve nişasta hububat ürünlerinin kimyasal bileşimini oluşturan temel bileşenlerdir. NIR spektrumları incelendiğinde su molekülünü temsil eden iki ana

absorpsiyon bandı gözlenmektedir. Bu bantlar O-H geriliminin 1. overtonunun neden olduğu incelendiğinde  $6900-7000\text{ cm}^{-1}$  dalga sayısı civarındaki geniş kavisli bant ve O-H kombinasyonuna karşılık gelen  $5000-5100\text{ cm}^{-1}$  dalga sayısı etrafındaki dar kavisli banttir. Protein ve nişasta molekülleri daha karmaşık yapıda oldukları için bu molekülleri temsil eden absorpsiyon bantlarının daha fazladır. Bu bantlar: C-H geriliminin 2. overtonuna karşılık gelen  $8275\text{ cm}^{-1}$  dalga sayısı etrafındaki bant, N-H ve O-H geriliminin 1. overtonuna karşılık gelen  $6825\text{ cm}^{-1}$  dalga sayısı etrafındaki bant, C-H geriliminin 1. overtonunun neden olduğu  $5750\text{ cm}^{-1}$  dalga sayısı etrafındaki bant,  $4580\text{ cm}^{-1}$ ,  $4850\text{ cm}^{-1}$  ve  $5175\text{ cm}^{-1}$  dalga sayılarındaki N-H ve O-H gerilim kombinasyonlarının sebep olduğu bantlar ve  $4270\text{ cm}^{-1}$  ve  $4344\text{ cm}^{-1}$  dalga sayılarındaki C-H kombinasyonlarına karşılık gelen bant şeklinde sıralanabilir [108].

Un ve kırma örneklerine ait ortalama MIR spektrumları Şekil 4.4 ve Şekil 4.5.'de verilmektedir.



Şekil 4.3. Un örneklerine ait MIR spektrumları (E: Ekmeklik, M: Makarnalık, B: Bisküvilik, S: Sulu Bölge Ekmeklik)



Şekil 4.4. Kıрма örneklerine ait MIR spektrumları (E: Ekmeklik, M: Makarnalık, S: Sulu Bölge Ekmeklik)

MIR spektrumları incelendiğinde su molekülü temsil eden absorpsiyon bantları 3200-3600  $\text{cm}^{-1}$  dalga sayısı aralığındaki geniş kavisli bant ve 1650  $\text{cm}^{-1}$  dalga sayısındaki banttır. Protein molekülünü temsil eden absorpsiyon banları ise şöyle sıralanabilir: 1600-1690  $\text{cm}^{-1}$  dalga sayısı aralığındaki amit I (C=O gerilimi), 1480-1575  $\text{cm}^{-1}$  dalga sayısı aralığındaki amit II (C-N gerilimi ve N-H bükülmesi) ve 1230-1300  $\text{cm}^{-1}$  dalga sayısı aralığındaki amit III (C-N gerilimi ve N-H bükülmesi). Karbonhidrat moleküllerine ait absorpsiyon bantları ise 2800-3000  $\text{cm}^{-1}$  dalga sayısı aralığındaki C-H gerilimi ve 800-1400  $\text{cm}^{-1}$  dalga sayısı aralığındaki iskeletsel gerilme ve bükülme hareketlerinin neden olduğu bantlardır.

#### 4.3 Ekmeklik buğday un Ve Kıрма Örneklerine Ait Kalite Parametreleri için Kalibrasyon Modellerinin Elde Edilmesi

Ekmeklik buğday kıрма örnekleri için % protein, % rutubet ve % sertlik kalite parametrelerinin tahmin edilmesi için kalibrasyon modelleri elde edilmeye çalışılmıştır. Kıрма örnekleriyle çalışılırken örneklerin arasından rastgele seçilen bir grup örnek (45-60) validasyon için ayrılmıştır. Geriye kalan örnekler (99-131) ise kalibrasyon modellerinin oluşturulmasında kullanılmıştır. Ekmeklik buğday un örnekleri içinse alveograf analiz parametreleri, farinograf analiz parametreleri, renk analiz parametreleri, gluten analiz parametreleri ve Zeleny sedimentasyon

parametrelerinin tahmin edilmesi için kalibrasyon modelleri elde edilmeye çalışılmıştır. Un örneklerinin arasından seçilen bir grup örnek (35-65) validasyon için ayrılırken geriye kalan örnekler (80-165) kalibrasyon için kullanılmıştır.

#### 4.3.1 Protein Analiz Sonuçlarını Değerlendirilmesi

Ekmeklik buğday kırma örneklerine ait % protein parametresinin tahmin edilmesinde kullanılması için kalibrasyon modelleri geliştirilmeye çalışılmıştır. Referans değerler ve NIR/MIR spektrumları arasında ilişki kurulması amacıyla PLS metodu, MPLS metodu ve yapay sinir ağları kullanılmış ve spektrumlara farklı ön işlemler ve matematiksel işlemler uygulanmıştır. Modellerin kurulması için yapılan analizler sırasında Malya ve Fakülte lokasyonlarına ait örneklerin referans değerleri ve spektrumları arasında ilişki kurulamadığı görüldüğü için bu örnekler aykırı değer olarak değerlendirilmiş ve veri setlerinden çıkarılmıştır. Elde edilen modellere ait parametreler Çizelge 4.3.'de verilmiştir.

Çizelge 4.3. Ekmeklik buğday kırma örneklerine ait % protein değeri için oluşturulan modellere ait parametreler

| Spektrum | Metot | $R^2_{CAL}$ | $R^2_{VAL}$ | Eğim  | % Hata (kal.) | % Hata (val.) | Veri Sayısı |
|----------|-------|-------------|-------------|-------|---------------|---------------|-------------|
| NIR      | PLS   | 0,976       | 0,963       | 0,999 | 1,4           | 1,8           | 100-45      |
|          | MPLS  | 0,980       | 0,943       | 0,999 | 1,3           | 1,9           | 99-45       |
|          | ANN   | 0,871       | 0,867       | 0,998 | 3,2           | 2,9           | 100-45      |
| MIR      | PLS   | 0,979       | 0,958       | 0,999 | 1,4           | 1,8           | 100-51      |
|          | MPLS  | 0,956       | 0,917       | 0,999 | 2,1           | 2,3           | 100-50      |
|          | ANN   | 0,912       | 0,923       | 0,999 | 3,0           | 2,1           | 100-51      |

Ekmeklik buğday kırma örneklerine ait % protein değerinin tahmin edilmesi için elde edilen modeller incelendiği zaman genel olarak NIR spektrumları kullanılarak geliştirilen modellerin, MIR spektrumları kullanılarak geliştirilen modellere göre daha iyi sonuç verdiği görülmüştür. En düşük % hata değerine ve en yüksek  $R^2$  değerine sahip modelin PLS metodu ve NIR spektrumları kullanıldığında elde edildiği görülmüştür. Bu modelin oluşturulmasında NIR spektrumlarına "Poisson (Sqrt Mean) Scaling", "Log Decay Scaling (scale = 0.330)" ve "SNV" ön işlemleri uygulanmıştır. Seçilen modele ait parametreler Çizelge 4.4.'de verilmektedir.



Çizelge 4.4. Ekmeklik buğday kırma örneklerine ait % protein değeri için seçilen modele ait parametreler

|                         |        |
|-------------------------|--------|
| RMSEP                   | 0,3    |
| RMSEC                   | 0,2    |
| RMSECV                  | 0,4    |
| R <sup>2</sup> CV       | 0,933  |
| LV                      | 9      |
| % hata (kalibrasyon)    | 1,4    |
| % hata (validasyon)     | 1,8    |
| Veri sayısı (kal.-val.) | 100-45 |

Seçilen model literatürdeki çalışmalarda kıyaslandığı zaman, yapay sinir ağları ve NIR kullanılarak yapılan bir çalışmada kurulan modele ( $R^2=0,952$ ) göre daha iyi sonuç verdiği [48] fakat Başlar ve Ergutay tarafından yapılan bir çalışmada ise çoklu lineer regresyon (Multiple Linear Regression -MLR) ve kısmi en küçük kareler yöntemi (Partial Least Squares -PLS) kullanıldığında geliştirilen modele ( $R^2=0,985$ ) göre daha zayıf sonuç verdiği görülmüştür [109]. Seçilen modelin parametreleri kullanılabilirlik açısından incelendiği zaman % hata değerinin % 5'den küçük olduğu ve  $R^2$  değerinin yeterince yüksek olduğu görülmüştür.

#### 4.3.2 Rutubet Analiz Sonuçlarını Değerlendirilmesi

Ekmeklik buğday kırma örneklerine ait % rutubet değerinin NIR veya MIR spektrumlarının kullanılarak tahmin edilebilmesi için PLS metodu, MPLS metodu ve ANN yöntemi kullanılmış ve spektrumlara farklı ön işlemler ve matematiksel işlemler uygulanmıştır. Oluşturulan modellere ait parametreler Çizelge 4.5.'de verilmiştir.

Çizelge 4.5. Ekmeklik buğday kırma örneklerine ait % rutubet değeri için oluşturulan kalibrasyon modellerine ait parametreler

| Spektrum | Metot | R2CAL | R2VAL | Eğim  | % Hata<br>(kal.) | % Hata<br>(val.) | Veri<br>Sayısı |
|----------|-------|-------|-------|-------|------------------|------------------|----------------|
| NIR      | PLS   | 0,981 | 0,942 | 0,999 | 0,9              | 1,5              | 128-57         |
|          | MPLS  | 0,948 | 0,922 | 0,999 | 1,4              | 1,5              | 125-60         |
|          | ANN   | 0,976 | 0,807 | 1,000 | 0,9              | 2,4              | 128-57         |
| MIR      | PLS   | 0,968 | 0,903 | 0,999 | 1,1              | 1,7              | 128-59         |
|          | MPLS  | 0,921 | 0,847 | 0,999 | 1,7              | 2,4              | 129-56         |
|          | ANN   | 0,838 | 0,836 | 0,999 | 2,3              | 2,4              | 128-59         |

Rutubet değerinin tahmin edilmesi için kurulan kalibrasyon modelleri karşılaştırıldığında NIR spektrumları kullanılarak oluşturulan modellerin, MIR spektrumları kullanılarak oluşturulan modellere göre daha düşük % hata değeri ve daha yüksek  $R^2$  ile daha iyi sonuç verdiği söylenebilir. En doğru tahmini yapan kalibrasyon modelinin ise NIR spektrumları ve PLS metodu kullanılarak oluşturulan model olduğu görülmüştür. Bu modelin elde edilmesinde NIR spektrumlarına ön işlem olarak “Normalizasyon (2-Norm, Length = 1)”, “Baseline (Automatic Whittaker Filter (100/0.003))” ve “Pareto (Sqrt Std) Scaling” uygulanmıştır. Ekmeklik buğday kırma örneklerine ait % rutubet değerinin tahmin edilmesi için seçilen modelin parametreleri Çizelge 4.6.’da verilmiştir.

Çizelge 4.6. Ekmeklik buğday kırma örneklerine ait % rutubet değeri için seçilen modele ait parametreler

|                          |        |
|--------------------------|--------|
| RMSEP                    | 0,2    |
| RMSEC                    | 0,1    |
| RMSECV                   | 0,4    |
| $R^2$ CV                 | 0,724  |
| LV                       | 8      |
| % hata (kalibrasyon)     | 0,9    |
| % hata (validasyon)      | 1,5    |
| Veri Sayısı (kal.- val.) | 128-57 |

NIR spektrumları kullanılarak buğday veya undaki tahmin edilmeye çalışılan ilk parametre % rutubet miktarıdır [110]. Literatürde % rutubet miktarının tahmin edilmesi için model elde edilmesi için yapılan birçok çalışma vardır. Bu çalışmalar arasında Mutlu ve ark. ( $R^2=0,920$ ) [48] ve Dowell ve ark. ( $R^2=0,970$ ) [111] gösterilebilir. Tez kapsamında ekmeklik buğday kırma örneklerinin % rutubet değerini tahmin etmek için seçilen modelin literatürdeki bazı çalışmalara göre daha iyi bazılarına göre ise daha zayıf kaldığı söylenebilir. Seçilen modelin kullanılabilirliği değerlendirildiği zaman % hata değerinin %5'den küçük olması olumlu yönde etkilerken  $R^2$  değerinin 0,95'den küçük olması olumsuz yönde etkilemektedir.

#### 4.3.3 Sertlik Analiz Sonuçlarının Değerlendirilmesi

Ekmeklik buğday kırma örneklerine ait % sertlik değerinin tahmin edilmesi için NIR ve MIR spektrumlarına yapay sinir ağları, PLS metodu ve MPLS metodu kullanılarak farklı ön işlemler ve matematiksel işlemler uygulanarak kalibrasyon modelleri geliştirilmiştir. Elde edilen modellerin kullanılabilirliği validasyon setiyle test edilmiştir. Modellere ait parametreler Çizelge 4.7.'de verilmiştir.

Çizelge 4.7. Ekmeklik buğday kırma örneklerine ait % sertlik değeri için oluşturulan modellere ait parametreler

| Spektrum | Metot | $R^2_{CAL}$ | $R^2_{VAL}$ | Eğim  | % Hata<br>(kal.) | % Hata<br>(val.) | Veri<br>Sayısı |
|----------|-------|-------------|-------------|-------|------------------|------------------|----------------|
| NIR      | PLS   | 0,939       | 0,935       | 0,997 | 4,9              | 4,9              | 126-60         |
|          | MPLS  | 0,956       | 0,931       | 0,998 | 4,3              | 4,5              | 126-59         |
|          | ANN   | 0,963       | 0,896       | 1,002 | 4,0              | 6,8              | 126-59         |
| MIR      | PLS   | 0,948       | 0,901       | 0,998 | 4,0              | 5,7              | 128-57         |
|          | MPLS  | 0,940       | 0,917       | 0,997 | 4,7              | 5,7              | 131-57         |
|          | ANN   | 0,797       | 0,828       | 0,989 | 8,3              | 6,1              | 128-57         |

Geliştirilen kalibrasyon modelleri karşılaştırıldığında NIR spektrumları kullanılarak oluşturulan modellerin, MIR spektrumları kullanılarak oluşturulan modellere göre daha yüksek  $R^2$  değerine ve daha düşük % hata değerine sahip olduğu görülmüştür. En yüksek  $R^2$  değerine sahip model ise NIR spektrumları ve PLS metodu kullanıldığında elde edilmiştir. Bu model oluşturulurken "Poisson (Sqrt

Mean) Scaling”, “1. dereceden türev (order: 2, window: 15 pt, incl only, tails: polyinterp)” ve “MSC (median)” ön işlemleri kullanılmıştır. Elde edilen modele ait parametreler Çizelge 4.8.’de gösterilmektedir.

Çizelge 4.8. Ekmeklik buğday kırma örneklerine ait % sertlik değeri için seçilen modele ait parametreler

|                          |        |
|--------------------------|--------|
| RMSEP                    | 3,6    |
| RMSEC                    | 3,4    |
| RMSECV                   | 5,5    |
| R <sup>2</sup> CV        | 0,846  |
| LV                       | 9      |
| % hata (kalibrasyon)     | 4,9    |
| % hata (validasyon)      | 4,9    |
| Veri Sayısı (kal.- val.) | 126-60 |

Dowell ve ark. [111] yazlık kırmızı tam buğday ununda ( $R^2=0,57$ ;  $SECV=3,18$ ) ve kırmızı kışlık tam buğday ununda ( $R^2=0,47$ ;  $SECV=3,51$ ) sertlik değeri için elde edilen modellerle, % sertlik değeri için seçilen model kıyaslandığı zaman seçilen modelin daha iyi sonuç verdiği söylenebilir. % Sertlik değeri için geliştirilen modelin tahmin etme yeteneği değerlendirildiği zaman modelin % hata değerlerinin % 5’den küçük olduğu ama  $R^2$  değerlerinin yeterince yüksek olmadığı görülmüştür. Bu nedenle seçilen modelin tahmin etmede endüstriyel bazda kullanılması mümkün görülmemektedir.

#### 4.3.4 Alveograf Analiz Parametrelerinin Değerlendirilmesi

Ekmeklik buğday un örneklerinde yapılan alveograf analizlerinde basınç (P), enerji (W), uzunluk (L), kabarma indeksi (G) ve P/G parametreleri değerlendirilmiştir.

Ekmeklik buğday un örneklerine ait alveograf basınç (P) değerinin tahmin edebilecek kalibrasyon modellerinin elde edilmesi için yapay sinir ağları, PLS metodu ve MPLS metodu kullanılarak NIR ve MIR spektrumlarına farklı ön işlemler ve matematiksel işlemler uygulanmıştır. Alveograf P parametresi için elde edilen modellere ait parametreler Çizelge 4.9.’da verilmiştir.

Çizelge 4.9. Ekmeklik buğday un örneklerine ait P değeri için elde edilen modellere ait parametreler

| Spektrum | Metot | R <sup>2</sup> <sub>CAL</sub> | R <sup>2</sup> <sub>VAL</sub> | Eğim  | % Hata<br>(kal.) | % Hata<br>(val.) | Veri<br>Sayısı |
|----------|-------|-------------------------------|-------------------------------|-------|------------------|------------------|----------------|
| NIR      | PLS   | 0,835                         | 0,883                         | 0,984 | 11,4             | 10,8             | 165-53         |
|          | MPLS  | 0,894                         | 0,722                         | 0,99  | 16,8             | 9,8              | 160-51         |
|          | ANN   | 0,044                         | 0,543                         | 0,941 | 10,7             | 11,4             | 165-53         |
| MIR      | PLS   | 0,794                         | 0,652                         | 0,981 | 13,0             | 18,1             | 162-50         |
|          | MPLS  | 0,788                         | 0,665                         | 0,981 | 13,8             | 16,1             | 161-49         |
|          | ANN   | 0,780                         | 0,789                         | 0,978 | 13,3             | 13,6             | 162-50         |

Alveograf P değerinin tahmin edilmesi için geliştirilen modeller incelendiği zaman, modellerin R<sup>2</sup> değerlerinin genel olarak düşük ve % hata değerlerinin yüksek olduğu görülmüştür. En yüksek R<sup>2</sup> değerine ve en düşük % hata değerine sahip modelin NIR spektrumları ve PLS metodu kullanıldığı zaman elde edildiği görülmüştür. Bu model oluşturulurken spektrumlara “Baseline (Automatic Whittaker Filter)” ve “Detrend (linear)” ön işlemleri uygulanmıştır. PLS metodu ve NIR spektrumları kullanılarak oluşturulan modele ait parametreler Çizelge 4.10.’da verilmiştir.

Çizelge 4.10. Ekmeklik buğday un örneklerine ait P değeri için seçilen modele ait parametreler

|                          |        |
|--------------------------|--------|
| RMSECV                   | 1,8    |
| RMSEC                    | 1,1    |
| LV                       | 8      |
| R <sup>2</sup> CV        | 0,609  |
| % hata (kalibrasyon)     | 11,4   |
| % hata (validasyon)      | 10,8   |
| Veri Sayısı (kal.- val.) | 165-53 |

Alveograf enerji (W) değerini NIR veya MIR spektrumları kullanılarak tahmin edilmesi için spektrumlara PLS metodu, MPLS metodu ve yapay sinir ağları kullanılarak farklı ön işlemler ve matematiksel işlem uygulanmış ve kalibrasyon

modelleri oluşturulmuştur. Elde edilen modellere ait parametreler Çizelge 4.11.'de verilmiştir.

Çizelge 4.11. Ekmeklik buğday un örneklerine ait W değeri için oluşturulan modellere ait parametreler

| Spektrum | Metot | R <sup>2</sup> <sub>CAL</sub> | R <sup>2</sup> <sub>VAL</sub> | Eğim  | % Hata<br>(kal.) | % Hata<br>(val.) | Veri<br>Sayısı |
|----------|-------|-------------------------------|-------------------------------|-------|------------------|------------------|----------------|
| NIR      | PLS   | 0,813                         | 0,766                         | 0,98  | 13,0             | 11,4             | 161-51         |
|          | MPLS  | 0,813                         | 0,702                         | 0,983 | 12,1             | 12,5             | 159-49         |
|          | ANN   | 0,032                         | 0,620                         | 0,937 | 21,3             | 15,8             | 159-49         |
| MIR      | PLS   | 0,649                         | 0,515                         | 0,967 | 17,5             | 12,9             | 162-48         |
|          | MPLS  | 0,786                         | 0,601                         | 0,979 | 14,1             | 16,1             | 159-49         |
|          | ANN   | 0,150                         | 0,652                         | 0,949 | 20,4             | 11,5             | 159-48         |

Ekmeklik buğday un örneklerine ait W değerinin tahmin edilmesi için elde edilen modeller incelendiği zaman en yüksek R<sup>2</sup> değerine ve en düşük % hata değerine sahip modelin PLS metodu ve NIR spektrumları kullanıldığında elde edildiği görülmüştür. Bu modelin elde edilmesinde “1. Dereceden türev (order: 3, window: 9 pt, incl only, tails: polyinterp)” ön işlemi kullanılmıştır. W değeri için seçilen modele ait parametreler Çizelge 4.12.'de verilmiştir.

Çizelge 4.12. Ekmeklik buğday un örneklerine ait W değeri için seçilen modele ait parametreler

|                          |        |
|--------------------------|--------|
| RMSECV                   | 51,9   |
| RMSEC                    | 26,7   |
| LV                       | 8      |
| R <sup>2</sup> CV        | 0,417  |
| % hata (kalibrasyon)     | 13,0   |
| % hata (validasyon)      | 11,4   |
| Veri Sayısı (kal.- val.) | 161-51 |

Ekmeklik buğday un örneklerine ait alveograf uzunluk (L) değeri ile NIR ve MIR spektrumları arasında ilişki kurabilmek için yapay sinir ağları, PLS metodu ve MPLS metodu kullanılmış ve spektrumlara farklı ön işlemler ve matematiksel

işlemler uygulanmıştır. Fakat MPLS metodunu uygulamak için kullanılan MPLS programı kullanıldığında MIR spektrumları ve L değeri arasında ilişki kurulamamış ve kalibrasyon modeli elde edilememiştir. Elde edilen modellere ait parametreler Çizelge 4.13.'de verilmiştir.

Çizelge 4.13. Ekmeklik buğday un örneklerine ait L değeri için oluşturulan modellere ait parametreler

| Spektrum | Metot | R <sup>2</sup> <sub>CAL</sub> | R <sup>2</sup> <sub>VAL</sub> | Eğim  | % Hata<br>(kal.) | % Hata<br>(val.) | Veri<br>Sayısı |
|----------|-------|-------------------------------|-------------------------------|-------|------------------|------------------|----------------|
| NIR      | PLS   | 0,744                         | 0,454                         | 0,974 | 15,2             | 20,5             | 157-54         |
|          | MPLS  | 0,601                         | 0,420                         | 0,969 | 16,3             | 18,5             | 160-49         |
|          | ANN   | 0,515                         | 0,614                         | 0,965 | 21,7             | 18,8             | 157-50         |
| MIR      | PLS   | 0,501                         | 0,261                         | 0,956 | 19,3             | 24,0             | 150-60         |
|          | MPLS  | -                             | -                             | -     | -                | -                | -              |
|          | ANN   | 0,343                         | 0,203                         | 0,949 | 22,7             | 23,2             | 150-59         |

Alveograf L değerinin tahmin edilmesi için oluşturulan modeller R<sup>2</sup> değeri ve % hata değeri bazında karşılaştırıldığı zaman, en iyi modelin NIR spektrumları ve MPLS metodu kullanıldığında elde edildiği görülmüştür. Bu modelin elde edilmesi için ön işlem olarak “detrend” ve matematiksel işlem olarak “1.dereceden türev” ve “smoothing(1)” uygulanmıştır. Gap aralığı olarak “1” seçilmiştir. Alveograf L değeri için seçilen modele ait parametreler Çizelge 4.14.'de gösterilmektedir.

Çizelge 4.14. Ekmeklik buğday un örneklerine ait L değeri için seçilen modele ait parametreler

|                          |        |
|--------------------------|--------|
| RMSECV                   | 24,0   |
| RMSEC                    | 14,4   |
| R <sup>2</sup> CV        | 0,200  |
| % hata (kalibrasyon)     | 16,3   |
| % hata (validasyon)      | 18,5   |
| Veri Sayısı (kal.- val.) | 160-49 |

Ekmeklik buğday un örneklerine ait alveograf kabarma indeksi (G) değerinin tahmin edilmesi için referans değerler ile NIR ve MIR spektrumları arasında PLS

metodu, MPLS metodu ve yapay sinir ağıları kullanılarak ilişki kurulmaya çalışılmıştır. Fakat MIR spektrumları ve alveograf G değeri arasında MPLS metodunu uygulamak için kullanılan MPLS programı ve yapay sinir ağıları kullanıldığında ilişki kurulamamıştır. Oluşturulan diğer modellere ait parametreler Çizelge 4.15.'de verilmiştir.

Çizelge 4.15. Ekmeklik buğday un örneklerine ait G değeri için oluşturulan modellere ait parametreler

| Spektrum | Metot | $R^2_{CAL}$ | $R^2_{VAL}$ | Eğim  | % Hata<br>(kal.) | % Hata<br>(val.) | Veri<br>Sayısı |
|----------|-------|-------------|-------------|-------|------------------|------------------|----------------|
| NIR      | PLS   | 0,83        | 0,207       | 1,000 | 6,1              | 12,3             | 161-49         |
|          | MPLS  | 0,713       | 0,218       | 0,993 | 7,2              | 8,2              | 160-49         |
|          | ANN   | 0,907       | 0,528       | 0,997 | 4,1              | 8,4              | 160-49         |
| MIR      | PLS   | 0,326       | 0,228       | 0,986 | 10,2             | 11,2             | 150-60         |
|          | MPLS  | -           | -           | -     | -                | -                | -              |
|          | ANN   | -           | -           | -     | -                | -                | -              |

Oluşturulan kalibrasyon modelleri karşılaştırıldığında ekmeklik buğday un örneklerine ait alveograf G değerini, en yüksek  $R^2$  değeri ve en düşük % hata oranı değerleriyle tahmin eden modelin yapay sinir ağıları ve NIR spektrumları kullanıldığında elde edildiği görülmüştür.

Ekmeklik buğday un örneklerine ait alveograf P/G değerinin tahmin edilmesi için farklı kalibrasyon modelleri, NIR ve MIR spektrumları ile PLS metodu, MPLS metodu ve yapay sinir ağıları kullanılarak oluşturulmuştur. Elde edilen modellere ait parametreler Çizelge 4.16.'da verilmiştir.



Çizelge 4.16. Ekmeklik buğday un örneklerine ait P/G değeri için oluşturulan modellere ait parametreler

| Spektrum | Metot | R <sup>2</sup> <sub>CAL</sub> | R <sup>2</sup> <sub>VAL</sub> | Eğim  | % Hata<br>(kal.) | % Hata<br>(val.) | Veri<br>Sayısı |
|----------|-------|-------------------------------|-------------------------------|-------|------------------|------------------|----------------|
| NIR      | PLS   | 0,827                         | 0,807                         | 0,970 | 18,7             | 13,7             | 150-58         |
|          | MPLS  | 0,693                         | 0,552                         | 0,953 | 27,0             | 20,6             | 153-59         |
|          | ANN   | 0,932                         | 0,692                         | 0,984 | 12,4             | 19,6             | 150-58         |
| MIR      | PLS   | 0,808                         | 0,453                         | 0,967 | 20,9             | 26,8             | 153-60         |
|          | MPLS  | 0,471                         | 0,555                         | 0,939 | 32,4             | 27,1             | 155-54         |
|          | ANN   | 0,623                         | 0,536                         | 0,943 | 24,1             | 26,1             | 155-54         |

Alveograf P/G değeri ile spektrumlar arasında üç yöntem kullanılarak ilişki kurulması başarılmıştır. En yüksek korelasyon katsayısı ve en düşük % hata oranı ile oluşturulan model PLS metodu ve NIR spektrumları kullanıldığında elde edilmiştir. Bu modelin oluşturulması için kullanılan ön işlemler “Baseline (Automatic Whittaker Filter)”, “Detrend” ve “Median Center”dir. Alveograf P/G değeri için seçilen modele ait parametreler Çizelge 4.17.’de gösterilmektedir.

Çizelge 4.17. Ekmeklik buğday un örneklerine ait P/G değeri için seçilen modele ait parametreler

|                              |        |
|------------------------------|--------|
| RMSEP                        | 1,2    |
| RMSEC                        | 0,8    |
| RMSECV                       | 1,5    |
| R <sup>2</sup> <sub>CV</sub> | 0,513  |
| LV                           | 9      |
| % hata (kalibrasyon)         | 18,7   |
| % hata (validasyon)          | 13,7   |
| Veri Sayısı (kal.- val.)     | 150-58 |

Alveograf testinin parametreleri için oluşturulan modeller değerlendirildiğinde en iyi modellerin NIR spektrumları kullanılarak elde edildiği görülmektedir. Elde edilen modeller doğrultusunda NIR spektrumları ve alveograf parametreleri arasında en iyi korelasyonu P değerinin gösterdiği söylenebilir.

Alveograf analiz parametreleri unların ekmek yapımındaki kalitesini belirleyen önemli parametrelerden oldukları için literatürde alveograf parametrelerinin tahminine yönelik birçok çalışma bulunmaktadır. Arazuri ve ark. tam buğday ununda, PLS metodu ve NIR spektrumları kullanarak reolojik parametreleri (W, L, P, P/L) tahmin edilmesi için kullanılmak üzere kalibrasyon modelleri elde etmeye çalışmışlardır. Yapılan bu çalışmada alveograf W, L, P, P/L parametreleri için geliştirilen modellerde ulaşılan  $R^2$  değerleri sırasıyla 0,86, 0,92, 0,77, 0,95'dir [49]. Miralbes tarafından yapılan başka bir çalışmada ise bazı alveograf analiz parametrelerini tahmin edebilme yeteneğine sahip kalibrasyon modelleri geliştirilmeye çalışılmıştır. Alveograf analiz parametrelerinden W, P ve P/L değerleri için oluşturulan modellerin  $r^2$  değerleri 0,95, 0,90 ve 0,79'dur [107]. Alveograf analiz parametreleri için seçilen modeller incelendiği zaman P ve P/G değerleri ve NIR spektrumları arasındaki ilişkinin diğer alveograf parametrelerine göre nispeten daha iyi olduğu söylenebilir. Fakat bütün alveograf parametreleri için seçilen modellerde % hata değerlerinin %5'den yüksek olması modellerin kullanılamaz olduğunun göstergesidir.

#### **4.3.5 Farinograf Analiz Parametrelerinin Değerlendirilmesi**

Ekmeklik buğday un örneklerinde farinograf analiz parametreleri olarak % su absorpsiyonu, gelişme süre değeri, stabilite değeri ve yumuşama derecesi değeri değerlendirilmiştir.

Ekmeklik buğday un örneklerine ait farinograf % su absorpsiyon değerinin tahmin edilmesi için NIR ve MIR spektrumlarına PLS metodu, MPLS metodu ve yapay sinir ağları kullanılarak farklı ön işlemler ve matematiksel işlemler uygulanmış ve farklı kalibrasyon modelleri oluşturulmuştur. Elde edilen kalibrasyon modellerine ait parametreler Çizelge 4.18.'de verilmiştir.

Çizelge 4.18. Ekmeklik buğday un örneklerine ait % su absorpsiyon değeri için oluşturulan modellere ait parametreler

| Spektrum | Metot | R <sup>2</sup> <sub>CAL</sub> | R <sup>2</sup> <sub>VAL</sub> | Eğim  | % Hata<br>(kal.) | % Hata<br>(val.) | Veri<br>Sayısı |
|----------|-------|-------------------------------|-------------------------------|-------|------------------|------------------|----------------|
| NIR      | PLS   | 0,915                         | 0,902                         | 0,999 | 1,0              | 1,2              | 154-60         |
|          | MPLS  | 0,870                         | 0,896                         | 0,999 | 1,3              | 1,0              | 153-60         |
|          | ANN   | 0,986                         | 0,860                         | 1,000 | 0,4              | 1,3              | 154-60         |
| MIR      | PLS   | 0,898                         | 0,819                         | 0,999 | 1,1              | 1,4              | 153-60         |
|          | MPLS  | 0,870                         | 0,782                         | 0,999 | 1,3              | 1,0              | 154-60         |
|          | ANN   | 0,782                         | 0,801                         | 0,999 | 1,8              | 1,5              | 153-60         |

Ekmeklik buğday un örneklerine % su absorpsiyon değerini tahmin etmek için geliştirilen modeller incelendiği zaman en yüksek doğrulukta tahmin eden modelin NIR spektrumları ve PLS metodu kullanıldığında elde edildiği görülmüştür. Bu model oluşturulurken NIR spektrumlarına “Baseline (Automatic Whittaker Filter)” ve “SNV” ön işlemleri uygulanmıştır. Ekmeklik buğday un örneklerine ait % su absorpsiyon değeri için seçilen modele ait parametreler Çizelge 4.19.’da gösterilmektedir.

Çizelge 4.19. Ekmeklik buğday un örneklerine ait % su absorpsiyon değeri için seçilen modele ait parametreler

|                          |        |
|--------------------------|--------|
| RMSEP                    | 1,1    |
| RMSEC                    | 0,8    |
| RMSECV                   | 1,3    |
| R <sup>2</sup> CV        | 0,800  |
| LV                       | 8      |
| % Hata (Kalibrasyon)     | 1,0    |
| % Hata (Validasyon)      | 1,2    |
| Veri Sayısı (kal.- val.) | 154-60 |

Ekmeklik buğday un örneklerine ait farinograf gelişme süresi değeri ile NIR ve MIR spektrumları arasındaki ilişki PLS metodu, MPLS metodu ve yapay sinir ağları kullanılarak araştırılmıştır. Fakat WinISI programı kullanılarak MPLS yöntemi uygulandığında spektrumlar ile gelişme süresi değeri arasında ilişki

kurulamamıştır. Yapay sinir ağları kullanıldığında ise sadece NIR spektrumları ile ilişki kurulabilmiştir. Elde edilen modellere ait parametreler Çizelge 4.20.'de verilmiştir.

Çizelge 4.20. Ekmeklik buğday un örneklerine ait gelişme süresi değeri için oluşturulan modellere ait parametreler

| Spektrum | Metot | R <sup>2</sup> <sub>CAL</sub> | R <sup>2</sup> <sub>VAL</sub> | Eğim  | % Hata<br>(kal.) | % Hata<br>(val.) | Veri<br>Sayısı |
|----------|-------|-------------------------------|-------------------------------|-------|------------------|------------------|----------------|
| NIR      | PLS   | 0,368                         | 0,046                         | 1,139 | 22,4             | 32,1             | 150-65         |
|          | MPLS  | -                             | -                             | -     | -                | -                | -              |
|          | ANN   | 0,823                         | 0,141                         | 1,017 | 24,4             | 36,5             | 150-65         |
| MIR      | PLS   | 0,446                         | 0,264                         | 0,922 | 27,3             | 32,5             | 150-64         |
|          | MPLS  | -                             | -                             | -     | -                | -                | -              |
|          | ANN   | -                             | -                             | -     | -                | -                | -              |

Ekmeklik buğday un örneklerine ait gelişme süresi değeri için kurulan modeller incelendiğinde spektrumlar ve referans değerler arasında ilişkinin çok kötü olduğu görülmüştür. R<sup>2</sup> değerlerinin çok düşük ve % hata değerlerinin çok yüksek olduğu görülmüştür. En yüksek R<sup>2</sup> değerine sahip model MIR spektrumları ve PLS metodu kullanıldığında elde edilmiştir. Gelişme süresi değeri için seçilen modele ait parametreler Çizelge 4.21.'de verilmiştir.

Çizelge 4.21. Ekmeklik buğday un örneklerine ait gelişme süresi değeri için seçilen modele ait parametreler

|                          |        |
|--------------------------|--------|
| RMSEP                    | 2,3    |
| RMSEC                    | 1,9    |
| RMSECV                   | 3,1    |
| R <sup>2</sup> CV        | 0,150  |
| LV                       | 5      |
| % hata (kalibrasyon)     | 27,3   |
| % hata (validasyon)      | 32,5   |
| Veri Sayısı (kal.- val.) | 150-64 |

Ekmeklik buğday un örneklerine ait stabilite değerinin tahmin edilmesi için kalibrasyon modelleri elde edilmeye çalışılmıştır. PLS metodu, MPLS metodu ve

yapay sinir ağırları kullanılmış ve spektrumlara farklı ön işlemler ve matematiksel işlemler uygulanmıştır. Fakat MPLS metodunun uygulanması için WinISI programı kullanıldığında spektrumlar ve referans değerler arasında herhangi bir ilişki kurulamamış ve kalibrasyon modeli elde edilememiştir. Elde edilen modellere ait parametreler Çizelge 4.22.'de verilmiştir.

Çizelge 4.22. Ekmeklik buğday un örneklerine ait stabilite değeri için oluşturulan modellere ait parametreler

| Spektrum | Metot | R <sup>2</sup> <sub>CAL</sub> | R <sup>2</sup> <sub>VAL</sub> | Eğim  | % Hata<br>(kal.) | % Hata<br>(val.) | Veri<br>Sayısı |
|----------|-------|-------------------------------|-------------------------------|-------|------------------|------------------|----------------|
| NIR      | PLS   | 0,727                         | 0,690                         | 0,969 | 19,1             | 14,1             | 125-50         |
|          | MPLS  | -                             | -                             | -     | -                | -                | -              |
|          | ANN   | 0,921                         | 0,361                         | 0,993 | 12,1             | 19,7             | 125-50         |
| MIR      | PLS   | 0,603                         | 0,335                         | 0,962 | 19,9             | 21,0             | 125-50         |
|          | MPLS  | -                             | -                             | -     | -                | -                | -              |
|          | ANN   | 0,066                         | 0,138                         | 0,928 | 25,8             | 21,0             | 125-50         |

Oluşturulan modeller karşılaştırıldığında en yüksek R<sup>2</sup> değerine sahip modelin NIR spektrumları ve PLS metodu kullanıldığında elde edildiği görülmüştür. Bu model elde edilirken kullanılan ön işlemler “Baseline (Automatic Whittaker Filter)” ve “EMSC” dir. Ekmeklik buğday un örneklerine stabilite değeri için seçilen modele ait parametreler Çizelge 4.23.'de gösterilmektedir.

Çizelge 4.23. Ekmeklik buğday un örneklerine ait stabilite değeri için seçilen modele ait parametreler

|                          |        |
|--------------------------|--------|
| RMSEP                    | 1,3    |
| RMSEC                    | 1,4    |
| RMSECV                   | 2,8    |
| R <sup>2</sup> CV        | 0,224  |
| LV                       | 9      |
| % hata (kalibrasyon)     | 19,1   |
| % hata (validasyon)      | 14,1   |
| Veri Sayısı (kal.- val.) | 125-50 |

Ekmeklik buğday un örneklerine ait farinograf yumuşama derecesi değeri ile NIR ve MIR spektrumları arasında, PLS metodu, MPLS metodu ve yapay sinir ağları kullanılarak ilişki kurulmaya çalışılmıştır. Fakat referans değerleri ve spektrumlar arasında ilişkinin çok zayıf olduğu görülmüştür. NIR spektrumları kullanıldığında sadece PLS metodu uygulandığında kalibrasyon modeli geliştirilebilmiştir. MIR spektrumları içinse hem PLS metodu hem de yapay sinir ağları uygulandığında model kurulabilmiştir. Elde edilen modellere ait parametreler Çizelge 4.24.'de verilmiştir.

Çizelge 4.24. Ekmeklik buğday un örneklerine ait yumuşama derecesi için oluşturulan modellere ait parametreler

| Spektrum | Metot | $R^2_{CAL}$ | $R^2_{VAL}$ | Eğim  | % Hata<br>(kal.) | % Hata<br>(val.) | Veri<br>Sayısı |
|----------|-------|-------------|-------------|-------|------------------|------------------|----------------|
| NIR      | PLS   | 0,314       | 0,151       | 0,921 | 28,5             | 31               | 80-35          |
|          | MPLS  | -           | -           | -     | -                | -                | -              |
|          | ANN   | -           | -           | -     | -                | -                | -              |
| MIR      | PLS   | 0,259       | 0,128       | 0,917 | 34,4             | 27,1             | 80-35          |
|          | MPLS  | -           | -           | -     | -                | -                | -              |
|          | ANN   | 0,342       | 0,146       | 0,93  | 30,1             | 26,3             | 80-35          |

Elde edilen modeller karşılaştırıldığı zaman yumuşama derecesi için en yüksek  $R^2$  değeri ve en düşük % hata değerine sahip modelin MIR spektrumları ve yapay sinir ağları kullanıldığında elde edildiği görülmüştür.

Ekmeklik buğday un örneklerine ait farinograf analiz parametreleri için geliştirilen modeller literatürdeki Hruskova ve ark. [50] tarafından (% su absorpsiyonu;  $r=0,401$ , gelişme süresi;  $r=0,619$ , stabilite;  $r=0,202$  ve karıştırma toleransı;  $r=0,415$ ) yapılan çalışma ile kıyaslandığı zaman daha iyi ve Miralbes [107] tarafından (% su absorpsiyonu;  $r^2=0,97$ , stabilite;  $r^2=0,88$ , yumuşama derecesi;  $r^2=0,93$  ve farinograf kalite sayısı;  $r^2=0,92$ ) yapılan çalışma ile kıyaslandığı zaman daha zayıf olduğu görülmüştür. Farinograf analiz parametrelerinden % su absorpsiyonu değeri için seçilen model incelendiği zaman % hata değerinin %5'den küçük olması olumlu yönde etkili olurken  $R^2$  değerinin düşük olması olumsuz yönde etkilemektedir. Diğer farinograf analiz parametreleri için seçilen

modellerin % hata değerlerinin yüksek olması ve  $R^2$  değerlerinin düşük olması nedeniyle modellerin kullanılamaz olduğu söylenebilir.

#### 4.3.6 Renk Analiz Parametrelerinin Değerlendirilmesi

Ekmeklik buğday un örneklerine ait renk  $L^*$  değerinin tahmin edecek kalibrasyon modellerinin geliştirilmesi için NIR ve MIR spektrumlarına PLS metodu, MPLS metodu ve yapay sinir ağları kullanılmış ve farklı ön işlemler ve matematiksel işlemler uygulanmıştır. Oluşturulan modellere ait parametreler Çizelge 4.25.'de verilmiştir.

Çizelge 4.25. Ekmeklik buğday un örneklerine ait renk  $L^*$  değeri için oluşturulan modellere ait parametreler

| Spektrum | Metot | $R^2_{CAL}$ | $R^2_{VAL}$ | Eğim  | % Hata<br>(kal.) | % Hata<br>(val.) | Veri<br>Sayısı |
|----------|-------|-------------|-------------|-------|------------------|------------------|----------------|
| NIR      | PLS   | 0,839       | 0,806       | 0,999 | 0,6              | 0,7              | 150-65         |
|          | MPLS  | 0,809       | 0,816       | 0,999 | 0,6              | 0,6              | 147-65         |
|          | ANN   | 0,981       | 0,820       | 1,000 | 0,2              | 0,8              | 147-65         |
| MIR      | PLS   | 0,794       | 0,749       | 0,999 | 0,7              | 0,7              | 150-65         |
|          | MPLS  | 0,856       | 0,786       | 1,000 | 0,6              | 0,7              | 149-65         |
|          | ANN   | 0,641       | 0,719       | 0,999 | 0,8              | 0,6              | 149-65         |

Ekmeklik buğday un örneklerine ait renk  $L^*$  değeri için elde edilen modeller incelendiğinde en yüksek  $R^2$  değeri ve en düşük % hata oranı ile tahmin yapan modelin yapay sinir ağları ve NIR spektrumları kullanıldığında elde edildiği görülmüştür.

Ekmeklik buğday un örneklerine ait renk  $a^*$  değerinin tahmin edilmesi için kalibrasyon modelleri elde edilmeye çalışılmıştır. Bunun için PLS metodu, MPLS metodu ve yapay sinir ağları kullanılmış ve NIR/MIR spektrumlarına farklı ön işlemler ve matematiksel işlemler uygulanmıştır. Elde edilen modellere ait parametreler Çizelge 4.26.'da verilmiştir.

Çizelge 4.26. Ekmeklik buğday un örneklerine ait renk a\* değeri için oluşturulan modellere ait parametreler

| Spektrum | Metot | R <sup>2</sup> <sub>CAL</sub> | R <sup>2</sup> <sub>VAL</sub> | Eğim  | % Hata<br>(kal.) | % Hata<br>(val.) | Veri<br>Sayısı |
|----------|-------|-------------------------------|-------------------------------|-------|------------------|------------------|----------------|
| NIR      | PLS   | 0,857                         | 0,891                         | 0,995 | 6,1              | 4,7              | 151-65         |
|          | MPLS  | 0,954                         | 0,866                         | 0,998 | 3,5              | 5,7              | 150-65         |
|          | ANN   | 0,993                         | 0,844                         | 0,999 | 1,5              | 6,4              | 150-65         |
| MIR      | PLS   | 0,839                         | 0,826                         | 0,995 | 6,0              | 6,7              | 150-65         |
|          | MPLS  | 0,900                         | 0,814                         | 0,996 | 5,0              | 6,2              | 147-65         |
|          | ANN   | 0,68                          | 0,767                         | 0,989 | 8,1              | 7,0              | 150-65         |

Oluşturulan modeller incelendiğinde ekmeklik buğday un örneklerine ait renk a\* değerini en yüksek doğrulukta tahmin eden modelin NIR spektrumları ve MPLS metodu kullanıldığında elde edildiği görülmüştür. Bu modelin elde edilmesinde matematiksel işlem olarak “1. dereceden türev” ve “smoothing(1)” kullanılmış ve gap aralığı olarak “6” seçilmiştir. Ekmeklik buğday un örneklerine ait renk a\* değeri için seçilen modele ait parametreler Çizelge 4.27.’de gösterilmektedir.

Çizelge 4.27. Ekmeklik buğday un örneklerine ait renk a\* değeri için seçilen modele ait parametreler

|                          |        |
|--------------------------|--------|
| RMSECV                   | 0,2    |
| RMSEC                    | 0,1    |
| R <sup>2</sup> CV        | 0,714  |
| % hata (kalibrasyon)     | 3,5    |
| % hata (validasyon)      | 5,7    |
| Veri Sayısı (kal.- val.) | 150-65 |

Ekmeklik buğday un örneklerine ait renk b\* değeri ve NIR/MIR spektrumları arasında ilişki kurulması ve kalibrasyon modellerinin oluşturulması için PLS metodu, MPLS metodu ve yapay sinir ağları kullanılmıştır. Spektrumlara aynı zamanda farklı önışlemler ve matematiksel işlemler uygulanmıştır. Elde edilen modellere ait parametreler Çizelge 4.28.’de verilmiştir.



Çizelge 4.28. Ekmeklik buğday un örneklerine ait renk b\* değeri için oluşturulan modellere ait parametreler

| Spektrum | Metot | R <sup>2</sup> <sub>CAL</sub> | R <sup>2</sup> <sub>VAL</sub> | Eğim  | % Hata<br>(kal.) | % Hata<br>(val.) | Veri<br>Sayısı |
|----------|-------|-------------------------------|-------------------------------|-------|------------------|------------------|----------------|
| NIR      | PLS   | 0,854                         | 0,807                         | 0,997 | 4,4              | 4,4              | 152-65         |
|          | MPLS  | 0,915                         | 0,803                         | 0,998 | 3,3              | 4,7              | 148-64         |
|          | ANN   | 0,972                         | 0,833                         | 0,999 | 2,0              | 3,9              | 148-64         |
| MIR      | PLS   | 0,907                         | 0,841                         | 0,998 | 3,7              | 4,1              | 150-64         |
|          | MPLS  | 0,787                         | 0,783                         | 0,996 | 5,5              | 4,6              | 150-65         |
|          | ANN   | 0,744                         | 0,738                         | 0,995 | 5,8              | 4,9              | 150-64         |

Ekmeklik buğday un örneklerine ait renk b\* değeri için oluşturulan modeller en yüksek R<sup>2</sup> değeri ve en düşük % hata değeri bazında incelendiğinde en iyi kalibrasyon modelinin NIR spektrumları ve yapay sinir ağları kullanıldığında elde edildiği görülmüştür.

Renk analiz parametreleri ile NIR ve MIR spektrumları arasında her üç yöntem kullanılarak ilişki kurulabilmiştir. En yüksek korelasyona sahip model renk a\* değeri için oluşturulmuştur. Yapılan bir çalışmada 4 farklı spektrometre kullanılarak yazlık ve kışlık kırmızı buğday unlarının renk analiz parametreleri tahmin edilmeye çalışılmıştır. Renk L\*, a ve b değerlerinin kırmızı kışlık buğday unu için elde edilen en yüksek R<sup>2</sup> değerleri sırasıyla 0,40, 0,96 ve 0,97'dir. Kırmızı yazlık buğday unu için elde edilen en yüksek R<sup>2</sup> değerleri ise sırasıyla 0,75, 0,96 ve 0,97'dir [111]. Renk analiz parametreleri için seçilen modellerin % hata değerleri genel olarak % 5'den küçük olması kullanılabilirlik açısından uygundur. Fakat kalibrasyon modelleri validasyon seti kullanılarak test edildiğinde R<sup>2</sup> değerlerinin 0,95'den küçük olması modellerin kullanılamaz olduğunun göstergesidir.

#### 4.3.7 Gluten Analiz Parametrelerinin Değerlendirilmesi

Gluten analizlerinde 3 tane parametre değerlendirilmiştir: % yaş gluten, % kuru gluten ve gluten indeks değeri.

Ekmeklik buğday un örneklerine ait % yaş gluten değerinin tahmin edilmesi için kalibrasyon modellerinin geliştirilmiştir. Bunun için PLS metodu, MPLS metodu ve

yapay sinir ağıları kullanılmış ve NIR/MIR spektrumlarına farklı ön işlemler ve matematiksel işlemler uygulanmıştır. Geliştirilen kalibrasyon modellerine ait parametreler Çizelge 4.29.'da gösterilmektedir.

Çizelge 4.29. Ekmeklik buğday un örneklerine ait % yaş gluten değeri için oluşturulan modellere ait parametreler

| Spektrum | Metot | R <sup>2</sup> <sub>CAL</sub> | R <sup>2</sup> <sub>VAL</sub> | Eğim  | % Hata<br>(kal.) | % Hata<br>(val.) | Veri<br>Sayısı |
|----------|-------|-------------------------------|-------------------------------|-------|------------------|------------------|----------------|
| NIR      | PLS   | 0,972                         | 0,917                         | 0,999 | 2,5              | 3,6              | 147-56         |
|          | MPLS  | 0,906                         | 0,931                         | 0,996 | 3,7              | 3,4              | 144-56         |
|          | ANN   | 0,976                         | 0,911                         | 0,999 | 2,1              | 3,6              | 144-56         |
| MIR      | PLS   | 0,907                         | 0,752                         | 0,998 | 4                | 6,3              | 148-56         |
|          | MPLS  | 0,881                         | 0,742                         | 0,998 | 4,2              | 5,3              | 150-51         |
|          | ANN   | 0,823                         | 0,83                          | 0,998 | 5,4              | 5,2              | 148-56         |

Ekmeklik buğday un örneklerine ait % yaş gluten değerinin tahmin edilmesinde kullanılacak modeller incelendiğinde en yüksek doğrulukla tahmin eden modelin PLS metodu ve NIR spektrumları kullanıldığında elde edildiği görülmüştür. Bu modelin oluşturulmasında ön işlem olarak “SNV” ve “1. Dereceden türev (order: 3, window: 7 pt, incl only, tails: polyinterp)” uygulanmıştır. % Yaş gluten değeri için seçilen modele ait parametreler Çizelge 4.30.'da gösterilmektedir.

Çizelge 4.30. Ekmeklik buğday un örneklerine ait % yaş gluten değeri için seçilen modele ait parametreler

|                              |        |
|------------------------------|--------|
| RMSEP                        | 1,7    |
| RMSEC                        | 1,0    |
| RMSECV                       | 2,5    |
| R <sub>cv</sub> <sup>2</sup> | 0,828  |
| LV                           | 8      |
| % hata (kalibrasyon)         | 2,5    |
| % hata (validasyon)          | 3,6    |
| Veri Sayısı (kal.- val.)     | 147-56 |

Ekmeklik buğday un örneklerine ait % kuru gluten miktarının tahmin edilmesi için NIR ve MIR spektrumlarına farklı ön işlemler ve matematiksel işlemler uygulanmış ve PLS metodu, MPLS metodu ve yapay sinir ağları kullanılarak kalibrasyon modelleri geliştirilmeye çalışılmıştır. Elde edilen kalibrasyon modellerine ait parametreler Çizelge 4.31.'de gösterilmektedir.

Çizelge 4.31. Ekmeklik buğday un örneklerine ait % kuru gluten değeri için oluşturulan modellere ait parametreler

| Spektrum | Metot | R <sup>2</sup> <sub>CAL</sub> | R <sup>2</sup> <sub>VAL</sub> | Eğim  | % Hata<br>(kal.) | % Hata<br>(val.) | Veri<br>Sayısı |
|----------|-------|-------------------------------|-------------------------------|-------|------------------|------------------|----------------|
| NIR      | PLS   | 0,959                         | 0,943                         | 0,999 | 2,8              | 3,5              | 147-60         |
|          | MPLS  | 0,958                         | 0,938                         | 0,999 | 2,6              | 3,3              | 144-54         |
|          | ANN   | 0,831                         | 0,918                         | 0,996 | 4,8              | 4,1              | 144-54         |
| MIR      | PLS   | 0,868                         | 0,839                         | 0,996 | 4,7              | 5,4              | 151-55         |
|          | MPLS  | 0,854                         | 0,702                         | 0,992 | 4,6              | 5,4              | 149-52         |
|          | ANN   | 0,874                         | 0,85                          | 0,998 | 4,8              | 5,1              | 151-56         |

Ekmeklik buğday un örneklerine ait % kuru gluten değerinin tahmin edilmesi için elde edilen kalibrasyon modelleri incelendiğinde en yüksek R<sup>2</sup> değeri ile tahmin eden modelin PLS metodu ve NIR spektrumları kullanıldığında elde edildiği görülmüştür. Bu modelin elde edilmesinde “Variance (Std) Scaling” ve “1.dereceden türev (order: 2, window: 7 pt, incl only, tails: weighted)” ön işlem olarak uygulanmıştır. Ekmeklik buğday un örneklerine ait % kuru gluten miktarı için seçilen modele ait parametreler Çizelge 4.32.'de gösterilmektedir.

Çizelge 4.32. Ekmeklik buğday un örneklerine % kuru gluten değeri için seçilen modele ait parametreler

|                          |        |
|--------------------------|--------|
| RMSEP                    | 0,5    |
| RMSEC                    | 0,4    |
| RMSECV                   | 0,9    |
| R <sup>2</sup> CV        | 0,808  |
| LV                       | 8      |
| % hata (kalibrasyon)     | 2,8    |
| % hata (validasyon)      | 3,5    |
| Veri Sayısı (kal.- val.) | 147-60 |

Ekmeklik buğday un örneklerine ait gluten indeks ile NIR ve MIR spektrumları arasındaki ilişki PLS metodu, MPLS metodu ve yapay sinir ağları kullanılarak araştırılmıştır. Fakat MIR spektrumları ve PLS metodu kullanıldığında gluten indeks değeri ve spektrumlar arasında ilişki kurulamamıştır. Elde edilen modellere ait parametreler Çizelge 4.33.'de verilmektedir.

Çizelge 4.33. Ekmeklik buğday un örneklerine ait gluten indeks değeri için oluşturulan modellere ait parametreler

| Spektrum | Metot | R <sup>2</sup> <sub>CAL</sub> | R <sup>2</sup> <sub>VAL</sub> | Eğim  | % Hata<br>(kal.) | % Hata<br>(val.) | Veri<br>Sayısı |
|----------|-------|-------------------------------|-------------------------------|-------|------------------|------------------|----------------|
| NIR      | PLS   | 0,893                         | 0,630                         | 0,996 | 5,4              | 8,3              | 147-55         |
|          | MPLS  | 0,564                         | 0,572                         | 0,989 | 9,3              | 9,7              | 147-55         |
|          | ANN   | 0,835                         | 0,673                         | 0,995 | 6,5              | 8,9              | 147-55         |
| MIR      | PLS   | -                             | -                             | -     | -                | -                | -              |
|          | MPLS  | 0,731                         | 0,459                         | 0,993 | 7,6              | 11,6             | 152-50         |
|          | ANN   | 0,138                         | 0,392                         | 0,985 | 12,7             | 10,3             | 152-52         |

Ekmeklik buğday un örneklerine ait gluten indeks değerinin tahmin edilmesi için oluşturulan modeller en yüksek R<sup>2</sup> değeri ve en düşük % hata değeri bazında karşılaştırıldığında en iyi sonucu veren modelin PLS metodu ve NIR spektrumları kullanıldığında elde edildiği görülmüştür. Bu model oluşturulmasında ön işlem olarak “1.dereceden türev (order: 3, window: 9 pt, incl only, tails: weighted)”, “Baseline (Automatic Whittaker Filter)” ve “Poisson (Sqrt Mean) Scaling”

uygulanmıştır. Gluten indeks değeri için seçilen modele ait parametreler Çizelge 4.34.'de verilmektedir.

Çizelge 4.34. Ekmeklik buğday un örneklerine ait gluten indeks değeri için seçilen modele ait parametreler

|                          |        |
|--------------------------|--------|
| RMSEP                    | 7,5    |
| RMSEC                    | 4,4    |
| RMSECV                   | 12,3   |
| R <sup>2</sup> CV        | 0,289  |
| LV                       | 7      |
| % Hata (kalibrasyon)     | 5,4    |
| % Hata (validasyon)      | 8,3    |
| Veri Sayısı (kal.- val.) | 147-55 |

Ekmeklik buğday un örneklerine ait gluten parametreleri için geliştirilen modellerle literatürde yapılan çalışmalarla karşılaştırıldığı zaman Cozzolino ve ark.'nın çalışması sonucu % yaş gluten değeri ( $R^2=0,50$ -SEP=4,14) için elde edilen modele göre daha iyi sonuç verdiği görülmüştür [112]. Aynı zamanda Ergutay ve Başlar [109] tarafından yapılan bir çalışmada % yaş gluten ( $r=0,976$ ) ve % kuru gluten ( $r=0,953$ ) için oluşturulan modellerle kıyaslandığında daha zayıf sonuç verdiği görülmüştür. Gluten analiz parametreleri için seçilen modeller kullanılabilirlik açısından değerlendirildiği zaman %hata değerlerinin % 5'den küçük olması olumlu yönde etkili olurken  $R^2$  değerlerinin düşük olması olumsuz yönde etkili olmaktadır.

#### 4.3.8 Sedimentasyon Analiz Parametrelerinin Değerlendirilmesi

Ekmeklik buğday un örneklerine ait Zeleny sedimentasyon değerinin tahmin edilmesi için kalibrasyon modelleri elde edilmeye çalışılmıştır. Bunun için PLS metodu, MPLS metodu ve yapay sinir ağları kullanılmış ve NIR/MIR spektrumlarına farklı matematiksel işlemler ve ön işlemler uygulanmıştır. Elde edilen modellere ait parametreler Çizelge 4.35.'de verilmektedir.

Çizelge 4.35. Ekmeklik buğday un örneklerine ait Zeleny sedimentasyon değeri için oluşturulan modellere ait parametreler

| Spektrum | Metot | R <sup>2</sup> <sub>CAL</sub> | R <sup>2</sup> <sub>VAL</sub> | Eğim  | % Hata<br>(kal.) | % Hata<br>(val.) | Veri<br>Sayısı |
|----------|-------|-------------------------------|-------------------------------|-------|------------------|------------------|----------------|
| NIR      | PLS   | 0,863                         | 0,709                         | 0,990 | 8,7              | 10,3             | 155-56         |
|          | MPLS  | 0,605                         | 0,561                         | 0,958 | 11,0             | 11,9             | 150-56         |
|          | ANN   | 0,355                         | 0,607                         | 0,968 | 15,0             | 11,2             | 150-56         |
| MIR      | PLS   | 0,856                         | 0,752                         | 0,990 | 9,3              | 15,2             | 155-56         |
|          | MPLS  | 0,756                         | 0,732                         | 0,984 | 10,3             | 10,9             | 154-57         |
|          | ANN   | 0,580                         | 0,751                         | 0,975 | 11,9             | 10,2             | 153-56         |

Ekmeklik buğday un örneklerine ait Zeleny sedimentasyon değeri için oluşturulan modeller incelendiğinde MIR spektrumları kullanılarak oluşturulan modellerin, NIR spektrumları kullanılarak oluşturulan modellere göre daha yüksek R<sup>2</sup> değerine sahip olduğu görülmüştür. MIR spektrumları kullanılarak oluşturulan modeller, en yüksek R<sup>2</sup> değeri ve en düşük % hata değeri bazında karşılaştırıldığında en iyi modelin MIR spektrumları ve PLS metodu kullanılarak oluşturulan model olduğu görülmüştür. Bu modelin oluşturulması için kullanılan ön işlemler “Baseline (Automatic Whittaker Filter)”, “SNV” ve “Poisson (Sqrt Mean) Scaling”dir. Zeleny sedimentasyon değeri için seçilen modele ait parametreler Çizelge 4.36.’da verilmektedir.

Çizelge 4.36. Ekmeklik buğday un örneklerine ait Zeleny sedimentasyon değeri için seçilen modele ait parametreler

|                              |        |
|------------------------------|--------|
| RMSEP                        | 8,8    |
| RMSEC                        | 4,3    |
| RMSECV                       | 8,6    |
| R <sup>2</sup> <sub>CV</sub> | 0,511  |
| LV                           | 8      |
| % hata (kalibrasyon)         | 9,3    |
| % hata (validasyon)          | 15,2   |
| Veri Sayısı (kal.- val.)     | 155-56 |

Ekmeklik buğday un örneklerine ait beklemeli Zeleny sedimentasyon değeri ve spektrumlar arasındaki ilişki PLS metodu, MPLS metodu ve yapay sinir ağları kullanılarak araştırılmıştır. Hem NIR hem de MIR spektrumları kullanıldığında ilişki kurulması başarılmıştır. Oluşturulan kalibrasyon modellerine ait parametreler Çizelge 4.37.'de verilmektedir.

Çizelge 4.37. Ekmeklik buğday un örneklerine ait Beklemeli Zeleny sedimentasyon değeri için oluşturulan modellere ait parametreler

| Spektrum | Metot | R <sup>2</sup> <sub>CAL</sub> | R <sup>2</sup> <sub>VAL</sub> | Eğim  | % Hata<br>(kal.) | % Hata<br>(val.) | Veri<br>Sayısı |
|----------|-------|-------------------------------|-------------------------------|-------|------------------|------------------|----------------|
| NIR      | PLS   | 0,761                         | 0,742                         | 0,986 | 10,9             | 11,0             | 155-56         |
|          | MPLS  | 0,853                         | 0,649                         | 0,991 | 8,4              | 12,9             | 150-56         |
|          | ANN   | 0,214                         | 0,676                         | 0,964 | 15,4             | 10,2             | 155-56         |
| MIR      | PLS   | 0,819                         | 0,795                         | 0,988 | 10,1             | 10,9             | 154-57         |
|          | MPLS  | 0,843                         | 0,811                         | 0,989 | 9,5              | 9,6              | 156-58         |
|          | ANN   | 0,323                         | 0,775                         | 0,968 | 15,6             | 9,6              | 156-58         |

Ekmeklik buğday un örneklerine ait beklemeli Zeleny sedimentasyon değeri için elde edilen modeller incelendiği zaman en yüksek R<sup>2</sup> değeri ile tahmin yapan modelin MPLS programı ve MIR spektrumları kullanıldığında elde edildiği görülmüştür. Bu modelin oluşturulmasında ön işlem olarak “Weighted MSC” ve matematiksel işlem olarak “3.dereceden türev” ve “smoothing(4)” uygulanmış ve “gap aralığı” olarak 4 seçilmiştir. Beklemeli Zeleny sedimentasyon değeri için seçilen modele ait parametreler Çizelge 4.38.'de gösterilmektedir.

Çizelge 4.38. Ekmeklik buğday un örneklerine ait beklemeli Zeleny sedimentasyon değeri için seçilen modele ait parametreler

|                          |        |
|--------------------------|--------|
| RMSECV                   | 8,9    |
| RMSEC                    | 5,2    |
| R <sup>2</sup> CV        | 0,591  |
| % hata (kalibrasyon)     | 9,5    |
| % hata (validasyon)      | 9,6    |
| Veri Sayısı (kal.- val.) | 156-58 |

Zeleny sedimentasyon değeri unun ekmeklik kalitesi hakkında bilgi veren en önemli parametrelerden biri olduğu için ve analizin geleneksel yöntemlerle yapılmasının zaman alması ve kimyasal kullanımı gerektirdiği için birçok araştırma yapılmıştır. Jirsa ve ark.'nın kurduğu model ( $R^2=0,60$ ) [113], Mutlu ve ark. tarafından oluşturulan model ( $R^2=0,917$ ) [48] ve Başlar ve ark. [109] tarafından oluşturulan model ( $r=0,924$ ) bu araştırmalar arasında gösterilebilir. Her iki sedimentasyon parametresi için seçilen modellerde % hata değerlerinin yüksek olması ve  $R^2$  değerlerinin düşük olması nedenleriyle bu modellerin kullanılamaz olduğu söylenebilir. Fakat bu parametrelerde dikkat çekici bir nokta diğer kalite parametrelerinde, modeller NIR spektrumlarının kullanılmasıyla seçilirken sedimentasyon parametrelerinde MIR spektrumlarının kullanılmasıyla seçilmiştir.

#### **4.4 Makarnalık buğday kırma ve Un Örneklerine Ait Kalite Parametreleri için Kalibrasyon Modellerinin Elde Edilmesi**

Makarnalık buğday kırma örnekleri için % protein ve % rutubet parametrelerinin tahmin edebilecek yeteneğe sahip kalibrasyon modelleri geliştirilmeye çalışılmıştır. Bunun için örneklerin 1/3'lük kısmı (36-42) rastgele seçilerek validasyon için ayrılmıştır. Geriye kalan 2/3'lük kısım ise (97-104) modellerin geliştirilmesinde kullanılmıştır. Makarnalık buğday un örneklerinde ise gluten analiz parametreleri, renk analiz parametreleri, farinograf analiz parametreleri ve sedimentasyon analiz parametreleri değerlendirilmiştir. Kırma örneklerinde olduğu gibi örneklerin 1/3'ü (30-47) validasyon için ayrılmış ve 2/3'ü (71-101) kalibrasyon için kullanılmıştır.

##### **4.4.1 Protein Analiz Sonuçlarının Değerlendirilmesi**

Makarnalık buğday kırma örneklerine ait % protein değerini tahmin edilmesinde kullanılacak kalibrasyon modellerinin elde edilmesi için PLS metodu, MPLS metodu ve yapay sinir ağları kullanılmış ve NIR ve MIR spektrumlarına farklı ön işlemler ve matematiksel işlemler uygulanmıştır. Elde edilen modellere ait parametreler Çizelge 4.39.'da verilmektedir.



Çizelge 4.39. Makarnalık buğday kırma örneklerine ait % protein değeri için oluşturulan modellere ait parametreler

| Spektrum | Metot | R <sup>2</sup> <sub>CAL</sub> | R <sup>2</sup> <sub>VAL</sub> | Eğim  | % Hata<br>(kal.) | % Hata<br>(val.) | Veri<br>Sayısı |
|----------|-------|-------------------------------|-------------------------------|-------|------------------|------------------|----------------|
| NIR      | PLS   | 0,985                         | 0,976                         | 0,999 | 1,2              | 1,7              | 103-41         |
|          | MPLS  | 0,971                         | 0,965                         | 0,999 | 0,7              | 2,0              | 103-40         |
|          | ANN   | 0,997                         | 0,979                         | 1,000 | 0,5              | 1,5              | 104-40         |
| MIR      | PLS   | 0,950                         | 0,935                         | 0,999 | 2,2              | 2,5              | 100-40         |
|          | MPLS  | 0,953                         | 0,930                         | 0,999 | 2,1              | 2,6              | 101-40         |
|          | ANN   | 0,876                         | 0,906                         | 0,999 | 3,6              | 2,9              | 103-41         |

Makarnalık buğday kırma örneklerine ait % protein değeri için oluşturulan modeller incelendiğinde NIR spektrumları kullanılarak kurulan modellerin, MIR spektrumları kullanılarak kurulan modellere göre daha iyi sonuç verdiği görülmüştür. NIR spektrumları kullanılarak oluşturulan modeller içinde de en yüksek R<sup>2</sup> değerine ve en düşük % hata değerine sahip modelin yapay sinir ağları kullanıldığında elde edildiği görülmüştür.

Yapılan bir çalışmada FT-NIR spektrumları ve PLS metodu kullanılarak irmik örneklerinin bazı kalite parametreleri tahmin edilmeye çalışılmıştır. % Protein değerine ait r<sub>VAL</sub> değeri 0,97 ve RPD 4,3'dür [51]. % Protein değeri için seçilen model kullanılabilirlik açısından değerlendirildiği zaman % hata değerinin %5'den küçük ve R<sup>2</sup> değerinin 1'e yakın olmasıyla endüstriyel anlamda kullanılabilir olduğu söylenebilir. Fakat modeller oluşturulurken kullanılan veri sayısının artırılması gerekmektedir.

#### 4.4.2 Rutubet Analiz Sonuçlarının Değerlendirilmesi

Makarnalık buğday kırma örneklerine ait % rutubet miktarının tahmin edebilecek kalibrasyon modellerinin geliştirilmesi için NIR ve MIR spektrumlarına farklı ön işlemler ve matematiksel işlemler uygulanmış ve PLS metodu, MPLS metodu ve yapay sinir ağları kullanılmıştır. Geliştirilen farklı kalibrasyon modellerine ait parametreler Çizelge 4.40.'da verilmektedir.

Çizelge 4.40. Makarnalık buğday kırma örneklerine ait % rutubet değeri için oluşturulan modellere ait parametreler

| Spektrum | Metot | R <sup>2</sup> <sub>CAL</sub> | R <sup>2</sup> <sub>VAL</sub> | Eğim  | % Hata<br>(kal.) | % Hata<br>(val.) | Veri<br>Sayısı |
|----------|-------|-------------------------------|-------------------------------|-------|------------------|------------------|----------------|
| NIR      | PLS   | 0,962                         | 0,941                         | 0,999 | 0,9              | 1,3              | 100-40         |
|          | MPLS  | 0,981                         | 0,834                         | 1,000 | 0,5              | 1,4              | 97-40          |
|          | ANN   | 0,737                         | 0,777                         | 0,999 | 1,9              | 1,6              | 100-42         |
| MIR      | PLS   | 0,899                         | 0,872                         | 0,999 | 1,5              | 1,4              | 100-38         |
|          | MPLS  | 0,924                         | 0,818                         | 0,999 | 1,1              | 1,6              | 99-36          |
|          | ANN   | 0,701                         | 0,783                         | 0,999 | 2,4              | 1,9              | 100-41         |

Makarnalık buğday kırma örneklerine ait % rutubet miktarı için elde edilen modeller karşılaştırıldığı zaman en yüksek R<sup>2</sup> değerine sahip modelin NIR spektrumları ve PLS metodu kullanıldığında elde edildiği görülmüştür. Bu modelin oluşturulmasında “1. Dereceden türev (order: 3, window: 19 pt, incl only, tails: weighted)” ön işlemi uygulanmıştır. % Rutubet değeri için seçilen modele ait parametreler Çizelge 4.41.’de gösterilmektedir.

Çizelge 4.41. Makarnalık buğday kırma örneklerinin % rutubet değerinin tahmin edilmesi için seçilen modele ait parametreler

|                          |        |
|--------------------------|--------|
| RMSEP                    | 0,1    |
| RMSEC                    | 0,1    |
| RMSECV                   | 0,3    |
| R <sup>2</sup> CV        | 0,615  |
| LV                       | 9      |
| % hata (kalibrasyon)     | 0,9    |
| % hata (validasyon)      | 1,3    |
| Veri Sayısı (kal.- val.) | 100-40 |

% Rutubet değeri için seçilen modelin % hata değerinin %5’den düşük olması modelin kullanılabilirliğini olumlu yönde etkilerken, validasyon R<sup>2</sup> değerinin 0,95’den küçük olması olumsuz yönde etkili olmaktadır.

#### 4.4.3 Gluten Analiz Parametrelerinin Değerlendirilmesi

Makarnalık buğday un örneklerinde gluten analiz parametrelerinde % yaş gluten ve % kuru gluten değerlendirilmiştir.

Makarnalık buğday un örneklerine ait % yaş gluten değeri ile NIR ve MIR spektrumları arasındaki ilişki PLS metodu, MPLS metodu ve yapay sinir ağıları kullanılarak araştırılmıştır. Spektrumlara farklı ön işlemler ve matematiksel işlemler uygulanmıştır. Elde edilen modellere ait parametreler Çizelge 4.42.'de verilmektedir.

Çizelge 4.42. Makarnalık buğday un örneklerine ait % yaş gluten değeri için oluşturulan modellere ait parametreler

| Spektrum | Metot | R <sup>2</sup> <sub>CAL</sub> | R <sup>2</sup> <sub>VAL</sub> | Eğim  | % Hata<br>(kal.) | % Hata<br>(val.) | Veri<br>Sayısı |
|----------|-------|-------------------------------|-------------------------------|-------|------------------|------------------|----------------|
| NIR      | PLS   | 0,971                         | 0,934                         | 0,999 | 2,9              | 4,8              | 97-43          |
|          | MPLS  | 0,950                         | 0,928                         | 0,998 | 3,9              | 4,9              | 95-43          |
|          | ANN   | 0,789                         | 0,812                         | 0,990 | 6,9              | 6,6              | 97-47          |
| MIR      | PLS   | 0,905                         | 0,879                         | 0,994 | 5,1              | 4,8              | 101-41         |
|          | MPLS  | 0,881                         | 0,910                         | 0,995 | 6,3              | 4,3              | 97-40          |
|          | ANN   | 0,875                         | 0,819                         | 0,994 | 5,9              | 5,7              | 101-43         |

Makarnalık buğday un örneklerine ait % yaş gluten değeri için oluşturulan modeller, en yüksek R<sup>2</sup> değeri ve en düşük % hata değeri bazında karşılaştırıldığında en doğru tahmini yapan modelin PLS metodu ve NIR spektrumları kullanıldığında elde edildiği görülmüştür. Model geliştirilirken ön işlem olarak “1. Dereceden türev (order: 3, window: 19 pt, incl only, tails: weighted)” kullanılmıştır. Makarnalık buğday un örneklerine ait % yaş gluten miktarı için seçilen modele ait parametreler Çizelge 4.43.'de gösterilmektedir.

Çizelge 4.43. Makarnalık buğday un örneklerine ait % yaş gluten değerinin tahmin edilmesi için seçilen modele ait parametreler

|                      |       |
|----------------------|-------|
| RMSEP                | 2,0   |
| RMSEC                | 1,3   |
| RMSECV               | 2,8   |
| R <sup>2</sup> CV    | 0,872 |
| LV                   | 8     |
| % hata (kalibrasyon) | 2,9   |
| % hata (validasyon)  | 4,8   |

Makarnalık buğday un örneklerine ait % kuru gluten değerini tahmin etmede kullanılacak kalibrasyon modellerinin kurulması için NIR ve MIR spektrumlarına farklı ön işlemler ve matematiksel işlemler uygulanmıştır. PLS metodu, MPLS metodu ve yapay sinir ağları kullanılmıştır. Elde edilen modellere ait parametreler Çizelge 4.44.'de gösterilmektedir.

Çizelge 4.44. Makarnalık buğday un örneklerine ait % kuru gluten değeri için oluşturulan modellere ait parametreler

| Spektrum | Metot | R <sup>2</sup> <sub>CAL</sub> | R <sup>2</sup> <sub>VAL</sub> | Eğim  | % Hata<br>(kal.) | % Hata<br>(val.) | Veri<br>Sayısı |
|----------|-------|-------------------------------|-------------------------------|-------|------------------|------------------|----------------|
| NIR      | PLS   | 0,961                         | 0,956                         | 0,999 | 3,5              | 2,9              | 100-40         |
|          | MPLS  | 0,944                         | 0,940                         | 0,998 | 3,6              | 4,4              | 98-40          |
|          | ANN   | 0,896                         | 0,918                         | 0,994 | 5,2              | 3,9              | 100-41         |
| MIR      | PLS   | 0,984                         | 0,878                         | 0,999 | 2,2              | 6,1              | 97-41          |
|          | MPLS  | 0,956                         | 0,912                         | 0,998 | 3,7              | 4,5              | 96-40          |
|          | ANN   | 0,849                         | 0,895                         | 0,992 | 6,4              | 5,1              | 100-42         |

Makarnalık buğday un örneklerine ait % kuru gluten miktarı için elde edilen modeller incelendiği zaman en yüksek doğrulukta tahmin yapan modelin PLS metodu ve NIR spektrumları kullanıldığında elde edildiği görülmüştür. Bu modelin oluşturulmasında “1. Dereceden türev (order: 2, window: 19 pt, incl only, tails: polyinterp)” ve “Normalize (inf-Norm, Maximum = 1)” ön işlemleri uygulanmıştır. % Kuru gluten değeri için seçilen modele ait parametreler Çizelge 4.45.'de gösterilmektedir.

Çizelge 4.45. Makarnalık buğday un örneklerine ait % kuru gluten değeri için seçilen modele ait parametreler

|                          |        |
|--------------------------|--------|
| RMSEP                    | 0,4    |
| RMSEC                    | 0,5    |
| RMSECV                   | 0,7    |
| R <sup>2</sup> CV        | 0,913  |
| LV                       | 9      |
| % hata (kalibrasyon)     | 3,5    |
| % hata (validasyon)      | 2,9    |
| Veri Sayısı (kal.- val.) | 100-40 |

Sinelli ve ark. tarafından yapılan bir çalışmada irmik örneklerinin % yaş gluten değeri  $r_{VAL}$  0,90 olarak hesaplanmıştır. Çalışmada FT-NIR spektrumları ve PLS metodu kullanılmıştır [51]. Gluten parametreleri için kurulan modellerin %hata değerlerinin % 5'den küçük olması ve R<sup>2</sup> değerlerinin yüksek olması modellerin kullanılabilir olduğunun göstergesidir.

#### 4.4.4 Renk Analiz Parametrelerinin Değerlendirilmesi

Makarnalık buğday un örneklerine ait renk  $L^*$  değerinin tahmin edilmesinde kullanılmak üzere kalibrasyon modellerinin geliştirilmesi için PLS metodu, MPLS metodu ve yapay sinir ağları kullanılmıştır. NIR ve MIR spektrumlarına farklı ön işlemler ve matematiksel işlemler uygulanmıştır. Oluşturulan modellere ait parametreler Çizelge 4.46.'da verilmektedir.

Çizelge 4.46. Makarnalık buğday un örneklerine ait renk  $L^*$  değeri için oluşturulan modellere ait parametreler

| Spektrum | Metot | R <sup>2</sup> <sub>CAL</sub> | R <sup>2</sup> <sub>VAL</sub> | Eğim | % Hata<br>(kal.) | % Hata<br>(val.) | Veri<br>Sayısı |
|----------|-------|-------------------------------|-------------------------------|------|------------------|------------------|----------------|
| NIR      | PLS   | 0,678                         | 0,651                         | 1    | 0,3              | 0,4              | 95-42          |
|          | MPLS  | 0,462                         | 0,549                         | 1    | 0,4              | 0,4              | 96-42          |
|          | ANN   | 0,996                         | 0,449                         | 1    | 0,1              | 0,4              | 95-43          |
| MIR      | PLS   | 0,491                         | 0,378                         | 1    | 0,4              | 0,5              | 96-42          |
|          | MPLS  | 0,404                         | 0,440                         | 1    | 0,4              | 0,4              | 94-43          |
|          | ANN   | 0,614                         | 0,411                         | 1    | 0,3              | 0,4              | 94-43          |

Makarnalık buğday un örneklerine ait renk  $L^*$  değeri için geliştirilen modeller en yüksek  $R^2$  değeri ve en düşük % hata değeri bazında karşılaştırıldığı zaman en yüksek doğrulukta tahmin yapan modelin PLS metodu ve NIR spektrumları kullanıldığında elde edildiği görülmüştür. Bu modelin oluşturulmasında ön işlem olarak “EMSC (Extended Scatter Correction)” ve “Normalizasyon (2-Norm, Length = 1)” uygulanmıştır. Renk  $L^*$  değeri için seçilen modele ait parametreler Çizelge 4.47.’de gösterilmektedir.

Çizelge 4.47. Makarnalık buğday un örneklerine ait renk  $L^*$  değeri için seçilen modele ait parametreler

|                          |       |
|--------------------------|-------|
| RMSEP                    | 0,4   |
| RMSEC                    | 0,4   |
| RMSECV                   | 0,6   |
| $R^2$ CV                 | 0,500 |
| LV                       | 9     |
| % hata (kalibrasyon)     | 0,3   |
| % hata (validasyon)      | 0,4   |
| Veri Sayısı (kal.- val.) | 95-42 |

Makarnalık buğday un örneklerine ait renk  $a^*$  değerinin tahmin edilmesi için NIR/MIR spektrumları ve PLS metodu, MPLS metodu ve yapay sinir ağları kullanılarak farklı kalibrasyon modelleri elde edilmeye çalışılmıştır. Elde edilen modellere ait parametreler Çizelge 4.48.’de verilmektedir.

Çizelge 4.48. Makarnalık buğday un örneklerine renk a\* değeri için oluşturulan modellere ait parametreler

| Spektrum | Metot | R <sup>2</sup> <sub>CAL</sub> | R <sup>2</sup> <sub>VAL</sub> | Eğim  | % Hata<br>(kal.) | % Hata<br>(val.) | Veri<br>Sayısı |
|----------|-------|-------------------------------|-------------------------------|-------|------------------|------------------|----------------|
| NIR      | PLS   | 0,574                         | 0,616                         | 0,994 | 6,5              | 5,3              | 96-42          |
|          | MPLS  | 0,756                         | 0,134                         | 0,996 | 5,2              | 6,7              | 95-42          |
|          | ANN   | 0,997                         | 0,346                         | 0,999 | 0,7              | 7,3              | 96-42          |
| MIR      | PLS   | 0,846                         | 0,682                         | 0,998 | 3,9              | 6,4              | 96-42          |
|          | MPLS  | 0,933                         | 0,731                         | 0,999 | 2,8              | 6,0              | 94-42          |
|          | ANN   | 0,506                         | 0,468                         | 0,994 | 6,5              | 6,0              | 94-44          |

Makarnalık buğday un örneklerine ait renk a\* değeri için elde edilen modeller incelendiğinde en yüksek R<sup>2</sup> değerine ve en düşük % hata değerine sahip modelin MIR spektrumları ve MPLS programı kullanıldığında elde edildiği görülmüştür. Bu modelin oluşturulmasında matematiksel işlem olarak “1. Dereceden türev” ve “smoothing(4)” uygulanmış ve “gap aralığı” olarak 4 seçilmiştir. Renk a\* değeri için seçilen modele ait parametreler Çizelge 4.49.’da gösterilmektedir.

Çizelge 4.49. Makarnalık buğday un örneklerine ait renk a\* değeri için seçilen modele ait parametreler

|                          |       |
|--------------------------|-------|
| RMSECV                   | 0,2   |
| RMSEC                    | 0,1   |
| R <sup>2</sup> CV        | 0,543 |
| % hata (kalibrasyon)     | 2,8   |
| % hata (validasyon)      | 6,0   |
| Veri Sayısı (kal.- val.) | 94-42 |

Makarnalık buğday un örneklerine ait renk b\* değeri ile NIR ve MIR spektrumları arasında ilişki PLS metodu, MPLS metodu ve yapay sinir ağları kullanılarak kurulmaya çalışılmıştır. Spektrumlara farklı önışlemler ve matematiksel işlemler uygulanmıştır. Fakat MIR spektrumları ve MPLS metodunun uygulanması için kullanılan WinISI programı ve yapay sinir ağları kullanıldığı zaman renk b\* değeri ve spektrumlar arasında ilişki kurulamamıştır. Elde edilen modellere ait parametreler Çizelge 4.50.’de verilmektedir.

Çizelge 4.50. Makarnalık buğday un örneklerine ait renk b\* değeri için oluşturulan modellere ait parametreler

| Spektrum | Metot | R <sup>2</sup> <sub>CAL</sub> | R <sup>2</sup> <sub>VAL</sub> | Eğim  | % Hata<br>(kal.) | % Hata<br>(val.) | Veri<br>Sayısı |
|----------|-------|-------------------------------|-------------------------------|-------|------------------|------------------|----------------|
| NIR      | PLS   | 0,738                         | 0,721                         | 0,997 | 4,4              | 5,1              | 96-43          |
|          | MPLS  | 0,576                         | 0,57                          | 0,996 | 5,3              | 5,0              | 96-43          |
|          | ANN   | 0,933                         | 0,271                         | 1,001 | 2,9              | 5,6              | 92-44          |
| MIR      | PLS   | 0,718                         | 0,377                         | 0,997 | 4,2              | 5,7              | 95-43          |
|          | MPLS  | -                             | -                             | -     | -                | -                | -              |
|          | ANN   | -                             | -                             | -     | -                | -                | -              |

Makarnalık buğday un örneklerine ait renk b\* değeri ve spektrumlar arasında ilişki kurulması başarılarak oluşturulan modeller incelendiğinde en yüksek R<sup>2</sup> değerine sahip modelin NIR spektrumları ve PLS metodu kullanıldığında elde edildiği görülmüştür. Bu model oluşturulurken kullanılan ön işlemler “Variance (Std) Scaling” ve “1. Dereceden türev (order: 1, window: 17 pt, incl only, tails: polyinterp)”dir. Renk b\* değeri için seçilen modele ait parametreler Çizelge 4.51.’de gösterilmektedir.

Çizelge 4.51. Makarnalık buğday un örneklerine ait renk b\* değeri için seçilen modele ait parametreler

|                          |       |
|--------------------------|-------|
| RMSEP                    | 1,4   |
| RMSEC                    | 1,2   |
| RMSECV                   | 2,5   |
| R <sup>2</sup> CV        | 0,157 |
| LV                       | 8     |
| % hata (kalibrasyon)     | 4,4   |
| % hata (validasyon)      | 5,1   |
| Veri Sayısı (kal.- val.) | 96-43 |

Yapılan bir çalışmada irmik örneklerinin bazı kalite parametreleri ve NIR spektrumları kullanılarak ilişkilendirilmeye çalışılmıştır. Renk b\* değeri için elde edilen en yüksek r<sup>2</sup> değeri 0,65’dir [114]. Renk analizlerinde genellikle görünür bölgede çalışmanın daha iyi sonuç verdiği söylenebilir. McCaig tarafından yapılan



bir çalışmada, üç farklı görünür bölge-NIR spektrofotometre kombine sistemi kullanılarak farklı gıda ürünlerinde renk analizi yapılmıştır. Renk L\*, a ve b değerleri için R<sup>2</sup> 0,99 elde edilmiştir [115]. Renk analiz parametreleri ve spektrumlar arasında ilişkinin genel olarak yüksek bir korelasyona sahip olduğu görülmüştür ve seçilen modellerin % hata değerleri genel olarak % 5'den küçük olduğu görülmüştür. Fakat R<sup>2</sup> değerlerinin küçük olması modellerin kullanılamaz olduğunu göstermektedir.

#### 4.4.5 Farinograf Analiz Parametrelerinin Değerlendirilmesi

Makarnalık buğday un örneklerinde farinograf analiz parametreleri arasında % su absorpsiyonu, gelişme süresi, stabilite ve yumuşama derecesi parametreleri değerlendirilmiştir.

Makarnalık buğday un örneklerine ait % su absorpsiyon değerinin tahmin edilmesi için NIR ve MIR spektrumlarına farklı ön işlemler ve matematiksel işlemler uygulanıp kalibrasyon modelleri elde edilmiştir. Bunun için aynı zamanda PLS metodu, MPLS metodu ve yapay sinir ağları kullanılmıştır. Elde edilen modellere ait parametreler Çizelge 4.52.'de verilmektedir.

Çizelge 4.52. Makarnalık buğday un örneklerine ait % su absorpsiyon değeri için oluşturulan modellere ait parametreler

| Spektrum | Metot | R <sup>2</sup> <sub>CAL</sub> | R <sup>2</sup> <sub>VAL</sub> | Eğim  | % Hata<br>(kal.) | % Hata<br>(val.) | Veri<br>Sayısı |
|----------|-------|-------------------------------|-------------------------------|-------|------------------|------------------|----------------|
| NIR      | PLS   | 0,940                         | 0,920                         | 0,999 | 1,0              | 1,0              | 98-43          |
|          | MPLS  | 0,954                         | 0,914                         | 0,99  | 0,9              | 1,1              | 98-41          |
|          | ANN   | 0,623                         | 0,714                         | 0,999 | 2,2              | 1,8              | 98-46          |
| MIR      | PLS   | 0,913                         | 0,860                         | 0,999 | 1,2              | 1,7              | 97-42          |
|          | MPLS  | 0,961                         | 0,758                         | 0,999 | 0,8              | 2,1              | 96-43          |
|          | ANN   | 0,786                         | 0,773                         | 0,999 | 1,8              | 2,1              | 97-45          |

Makarnalık buğday un örneklerine ait % su absorpsiyon değeri için elde edilen modeller incelendiği zaman en yüksek R<sup>2</sup> değerine sahip modelin PLS metodu ve NIR spektrumları kullanıldığında oluşturulduğu görülmüştür. Bu modelin oluşturulmasında ön işlem olarak "SNV" ve "1. Dereceden türev (order: 2, window: 15 pt, incl only, tails: polyinterp)" kullanılmıştır. Makarnalık buğday un örneklerine

ait % su absorpsiyon deęeri için seilen modele ait parametreler izelge 4.53.'de gsterilmektedir.

izelge 4.53. Makarnalık buęday un rneklarine ait % su absorpsiyon deęeri için seilen modele ait parametreler

|                          |       |
|--------------------------|-------|
| RMSEP                    | 0,8   |
| RMSEC                    | 0,9   |
| RMSECV                   | 1,3   |
| R <sup>2</sup> CV        | 0,868 |
| LV                       | 8     |
| % hata (kalibrasyon)     | 1,0   |
| % hata (validasyon)      | 1,0   |
| Veri Sayısı (kal.- val.) | 98-43 |

Makarnalık buęday un rneklarine ait farinograf gelişme süresi deęeri ile NIR ve MIR spektrumları arasındaki ilişki PLS metodu, MPLS metodu ve yapay sinir aęları kullanılarak araştırılmış ve kalibrasyon modelleri elde edilmeye alışılmıştır. Fakat referans deęerleri ve MIR spektrumları arasında ilişki kurulamamıştır. Sadece NIR spektrumları kullanıldığında modeller oluşturulabilmiştir. Elde edilen modellere ait parametreler izelge 4.54.'de verilmektedir.

izelge 4.54. Makarnalık buęday un rneklarine ait gelişme süresi deęeri için oluşturulan modellere ait parametreler

| Spektrum | Metot | R <sup>2</sup> <sub>CAL</sub> | R <sup>2</sup> <sub>VAL</sub> | Eęim  | % Hata (kal.) | % Hata (val.) | Veri Sayısı |
|----------|-------|-------------------------------|-------------------------------|-------|---------------|---------------|-------------|
| NIR      | PLS   | 0,570                         | 0,385                         | 0,947 | 9,0           | 21            | 96-42       |
|          | MPLS  | 0,565                         | 0,137                         | 0,968 | 18,0          | 20,8          | 92-43       |
|          | ANN   | 0,942                         | 0,441                         | 1,015 | 10,6          | 23,7          | 92-42       |

Makarnalık buęday un rneklarine ait gelişme süresi deęerleri için elde edilen modeller karşılaştırıldığında en yüksek R<sup>2</sup> deęerine sahip modelin PLS metodu kullanıldığında elde edildięi görülmüştür. Bu modelin oluşturulması için uygulanan ön işlemler "1. Dereceden türev (order: 2, window: 15 pt, incl only, tails:

polyinterp)''dir. Gelişme süresi için seçilen modele ait parametreler Çizelge 4.55.'de gösterilmektedir.

Çizelge 4.55. Makarnalık buğday un örneklerine ait gelişme süresi değeri için seçilen modele ait parametreler

|                          |       |
|--------------------------|-------|
| RMSEP                    | 1,2   |
| RMSEC                    | 1,2   |
| RMSECV                   | 2,2   |
| R <sup>2</sup> CV        | 0,088 |
| LV                       | 9     |
| % hata (kalibrasyon)     | 21,0  |
| % hata (validasyon)      | 23,7  |
| Veri Sayısı (kal.- val.) | 96-42 |

Makarnalık buğday un örneklerine ait farinograf stabilite değeri ile NIR ve MIR spektrumları arasında ilişki kurabilmek için PLS metodu, MPLS metodu ve yapay sinir ağları kullanılmış ve spektrumlara farklı önışlemler ve matematiksel işlemler uygulanmıştır. Fakat referans değerler ve spektrumlar arasında ilişki kurulması ve kalibrasyon modellerinin geliştirilmesinin oldukça zor olduğu görülmüştür. NIR spektrumları kullanıldığında sadece PLS metodu ile kalibrasyon modeli elde edilebilmiştir. MIR spektrumları kullanıldığında ise hem PLS metodu hem de MPLS metodu ile model oluşturulması başarılıdır. Elde edilen modellere ait parametreler Çizelge 4.56.'da verilmektedir.

Çizelge 4.56. Makarnalık buğday un örnekleri ait stabilite değeri için oluşturulan modellere ait parametreler

| Spektrum | Metot | R <sup>2</sup> <sub>CAL</sub> | R <sup>2</sup> <sub>VAL</sub> | Eğim  | % Hata (kal.) | % Hata (val.) | Veri Sayısı |
|----------|-------|-------------------------------|-------------------------------|-------|---------------|---------------|-------------|
| NIR      | PLS   | 0,486                         | 0,186                         | 0,920 | 32,3          | 30,8          | 83-30       |
|          | MPLS  | -                             | -                             | -     | -             | -             | -           |
|          | ANN   | -                             | -                             | -     | -             | -             | -           |
| MIR      | PLS   | 0,466                         | 0,401                         | 0,916 | 36,6          | 29,9          | 80-33       |
|          | MPLS  | 0,986                         | 0,774                         | 0,997 | 6,1           | 29,6          | 76-33       |

Oluşturulan modeller en yüksek  $R^2$  değeri ve en düşük % hata oranı bazında karşılaştırıldığı zaman en iyi modelin MPLS metodu ve MIR spektrumları kullanıldığında elde edildiği görülmüştür. Bu model geliştirilmesi için ön işlem olarak “Weighted MSC”, matematiksel işlem olarak “1. Dereceden türev” ve “smoothing(2)” uygulanmış ve “gap aralığı” olarak 8 seçilmiştir. Makarnalık buğday un örneklerine ait farinograf stabilite değeri için elde edilen modele ait parametreler Çizelge 4.57.’de gösterilmektedir.

Çizelge 4.57. Makarnalık buğday un örneklerine ait stabilite değeri için seçilen modele ait parametreler

|                          |       |
|--------------------------|-------|
| RMSECV                   | 2,6   |
| RMSEC                    | 0,4   |
| $R^2$ CV                 | 0.256 |
| % hata (kalibrasyon)     | 6,1   |
| % hata (validasyon)      | 29,6  |
| Veri Sayısı (kal.- val.) | 76-33 |

Makarnalık buğday un örneklerine ait farinograf yumuşama derecesi değeri ve NIR/MIR spektrumları arasında PLS metodu, MPLS metodu ve yapay sinir ağları kullanılarak ilişki kurulmaya çalışılmıştır. Fakat MIR spektrumları ile stabilite parametresi arasında her üç metot kullanıldığında da ilişki kurulamamıştır. Elde edilen diğer modellere ait parametreler Çizelge 4.58.’de gösterilmektedir.

Çizelge 4.58. Makarnalık buğday un örneklerine ait yumuşama derecesi için oluşturulan modellere ait parametreler

| Spektrum | Metot | $R^2_{CAL}$ | $R^2_{VAL}$ | Eğim  | % Hata<br>(kal.) | % Hata<br>(val.) | Veri<br>Sayısı |
|----------|-------|-------------|-------------|-------|------------------|------------------|----------------|
| NIR      | PLS   | 0,799       | 0,390       | 0,963 | 19,4             | 29,4             | 76-32          |
|          | MPLS  | 0,855       | 0,024       | 0,976 | 15,9             | 30,4             | 72-30          |
|          | ANN   | 0,726       | 0,172       | 1,023 | 34,6             | 41,6             | 71-31          |

Makarnalık buğday un örneklerine ait yumuşama derecesi değeri için elde edilen modeller incelendiğinde NIR spektrumları ile yumuşama derecesi değeri arasında en iyi ilişki kuran modelin PLS metodu kullanıldığında oluşturulduğu görülmüştür. Bu modelin oluşturulmasında ön işlem olarak “Baseline (Automatic Weighted

Least Squares)” ve “1. Dereceden türev (order: 2, window: 15 pt, incl only, tails: polyinterp)” kullanılmıştır. Yumuşama derecesi için seçilen modele ait parametreler Çizelge 4.59.’de gösterilmektedir.

Çizelge 4.59. Makarnalık buğday un örneklerine ait yumuşama derecesi için seçilen modele ait parametreler

|                          |       |
|--------------------------|-------|
| RMSEP                    | 22,7  |
| RMSEC                    | 15,8  |
| RMSECV                   | 29,2  |
| R <sup>2</sup> CV        | 0,42  |
| LV                       | 8     |
| % hata (kalibrasyon)     | 19,4  |
| % hata (validasyon)      | 29,4  |
| Veri Sayısı (kal.- val.) | 76-32 |

Farinograf analiz parametreleri için literatürdeki çalışmalar incelendiği zaman % su absorpsiyon ve gelişme süresi değerlerini tahmin etmeye yönelik modeller oluşturulmaya çalışılmıştır. Sissons ve ark. tarafından yapılan bu araştırmada NIR spektrumları ve MPLS metodu kullanılmış % su absorpsiyon ve gelişme süresi değerlerine ait r<sup>2</sup> değerleri sırasıyla 0,70 ve 0,28’dir [114]. Farinograf analiz parametreleri ve spektrumlar arasında ilişkinin, % su absorpsiyonu değeri hariç, genel olarak zayıf olduğu söylenebilir. % Su absorpsiyonu parametresi için seçilen model diğer parametrelere göre nispeten daha iyi olmasına rağmen modelin R<sup>2</sup> değerinin düşük olması nedeniyle seçilen modelin kullanılamaz olduğu söylenebilir.

#### 4.4.6 Sedimentasyon Analiz Parametrelerinin Değerlendirilmesi

Makarnalık buğday un örneklerine ait sedimentasyon analiz parametrelerinde SDS sedimentasyon parametresi ve beklemeli SDS sedimentasyon parametresi değerlendirilmiştir.

Makarnalık buğday un örneklerine ait SDS sedimentasyon parametresinin tahmin edilmesinde kullanılmak üzere kalibrasyon modellerinin geliştirilmesi için PLS metodu, MPLS metodu ve yapay sinir ağları kullanılmış ve NIR/MIR

spektrumlarına farklı matematiksel işlemler ve ön işlemler uygulanmıştır. Elde edilen modellere ait parametreler Çizelge 4.60.'da verilmektedir.

Çizelge 4.60. Makarnalık buğday un örneklerine ait SDS sedimentasyon değeri için oluşturulan modellere ait parametreler

| Spektrum | Metot | R <sup>2</sup> <sub>CAL</sub> | R <sup>2</sup> <sub>VAL</sub> | Eğim  | % Hata<br>(kal.) | % Hata<br>(val.) | Veri<br>Sayısı |
|----------|-------|-------------------------------|-------------------------------|-------|------------------|------------------|----------------|
| NIR      | PLS   | 0,864                         | 0,825                         | 0,99  | 9,6              | 7,2              | 96-41          |
|          | MPLS  | 0,937                         | 0,564                         | 0,995 | 6,6              | 12,4             | 96-43          |
|          | ANN   | 0,931                         | 0,667                         | 1,002 | 7,0              | 9,9              | 94-42          |
| MIR      | PLS   | 0,877                         | 0,374                         | 0,991 | 9,0              | 17,4             | 97-41          |
|          | MPLS  | 0,869                         | 0,111                         | 0,992 | 8,5              | 20,4             | 94-43          |
|          | ANN   | 0,319                         | 0,008                         | 0,972 | 16,6             | 17,2             | 93-42          |

Makarnalık buğday un örneklerine ait SDS sedimentasyon değeri için oluşturulan modeller karşılaştırıldığında en yüksek R<sup>2</sup> değerine ve % hata değerine sahip modelin PLS metodu ve NIR spektrumları kullanıldığında elde edildiği görülmüştür. Bu modelin oluşturulmasında kullanılan ön işlemler “OSC (Orthogonal Signal Correction)” ve “1. Dereceden türev (order: 2, window: 21 pt, incl only, tails: polyinterp)” dir. SDS sedimentasyon değeri için seçilen modele ait parametreler Çizelge 4.61.'de gösterilmektedir.

Çizelge 4.61. Makarnalık buğday un örneklerine ait SDS sedimentasyon değeri için seçilen modele ait parametreler

|                          |       |
|--------------------------|-------|
| RMSEP                    | 5,6   |
| RMSEC                    | 6,0   |
| RMSECV                   | 9,4   |
| R <sup>2</sup> CV        | 0,701 |
| LV                       | 10    |
| % hata (kalibrasyon)     | 9,6   |
| % hata (validasyon)      | 7,2   |
| Veri Sayısı (kal.- val.) | 96-41 |

Makarnalık buğday un örneklerine ait beklemeli SDS sedimentasyon değeri için NIR/MIR spektrumlarına farklı ön işlemler ve farklı matematiksel işlemler

uygulanmış ve PLS metodu, MPLS metodu ve yapay sinir ağıları kullanılarak farklı kalibrasyon modelleri elde edilmiştir. Oluşturulan modellere ait parametreler Çizelge 4.62.'de verilmektedir.

Çizelge 4.62. Makarnalık buğday un örneklerine ait Beklemeli SDS sedimentasyon değeri için oluşturulan modellere ait parametreler

| Spektrum | Metot | R <sup>2</sup> <sub>CAL</sub> | R <sup>2</sup> <sub>VAL</sub> | Eğim  | % Hata<br>(kal.) | % Hata<br>(val.) | Veri<br>Sayısı |
|----------|-------|-------------------------------|-------------------------------|-------|------------------|------------------|----------------|
| NIR      | PLS   | 0,907                         | 0,752                         | 0,993 | 7,0              | 11,7             | 97-41          |
|          | MPLS  | 0,786                         | 0,655                         | 0,987 | 10,8             | 12,9             | 96-43          |
|          | ANN   | 0,927                         | 0,594                         | 0,992 | 6,6              | 12,6             | 94-42          |
| MIR      | PLS   | 0,725                         | 0,300                         | 0,983 | 13,4             | 17,9             | 97-41          |
|          | MPLS  | 0,405                         | 0,355                         | 0,971 | 15,9             | 15,6             | 95-42          |
|          | ANN   | 0,269                         | 0,162                         | 0,972 | 16,1             | 15,6             | 93-43          |

Makarnalık buğday un örneklerine ait beklemeli SDS sedimentasyon değeri için kurulan modeller incelendiğinde en iyi tahmini yapan modelin PLS metodu ve NIR spektrumları kullanıldığında elde edildiği görülmüştür. Bu modeli oluşturulması için “SNV”, “Poisson (Sqrt Mean) Scaling” ve “1. Dereceden türev (order: 1, window: 15 pt, incl only, tails: polyinterp)” ön işlemleri uygulanmıştır. Beklemeli SDS sedimentasyon değeri için elde edilen modele ait parametreler Çizelge 4.63.'de gösterilmektedir.

Çizelge 4.63. Makarnalık buğday un örneklerine ait beklemeli SDS sedimentasyon değeri için seçilen modele ait parametreler

|                          |       |
|--------------------------|-------|
| RMSEP                    | 11,0  |
| RMSEC                    | 5,1   |
| RMSECV                   | 10,8  |
| R <sup>2</sup> CV        | 0,606 |
| LV                       | 10    |
| % hata (kalibrasyon)     | 7,0   |
| % hata (validasyon)      | 11,7  |
| Veri Sayısı (kal.- val.) | 97-41 |

Sedimentasyon analiz parametreleri için seçilen modeller değerlendirildiği zaman modellerin % hata değerlerinin yüksek olması ve  $R^2$  değerlerinin düşük olması nedenleriyle modellerin kullanılamaz olduğu söylenebilir.

#### 4.5 Bisküvilik buğday un Örneklerine Ait Kalite Parametreleri İçin Kalibrasyon Modellerinin Elde Edilmesi

Bisküvilik buğday un örneklerinde % protein, % sertlik, gluten analiz parametreleri, farinograf analiz parametreleri, sedimentasyon analiz parametreleri ve alveograf analiz parametreleri değerlendirilmiştir. Örneklerin 1/3'lük kısmı (9-15) rastgele seçilerek validasyon için ayrılmıştır. Geriye kalan örnekler (27-32) kalibrasyon modellerinin geliştirilmesi için kullanılmıştır.

##### 4.5.1 Protein Analiz Parametresinin Değerlendirilmesi

Bisküvilik buğday un örneklerine ait % protein değerinin tahmin edilebilmesi için NIR ve MIR spektrumlarına farklı ön işlem ve matematiksel işlemler uygulanıp PLS metodu, MPLS metodu ve yapay sinir ağları kullanılarak kalibrasyon modelleri elde edilmiştir. Elde edilen modellere ait parametreler Çizelge 4.64.'de verilmektedir.

Çizelge 4.64. Bisküvilik buğday un örneklerine ait % protein değeri için oluşturulan modellere ait parametreler

| Spektrum | Metot | $R^2_{CAL}$ | $R^2_{VAL}$ | Eğim  | % Hata<br>(Kal.) | % Hata<br>(Val.) | Veri<br>Sayısı |
|----------|-------|-------------|-------------|-------|------------------|------------------|----------------|
| NIR      | PLS   | 0,989       | 0,956       | 0,999 | 0,7              | 1,6              | 28-11          |
|          | MPLS  | 0,993       | 0,932       | 0,999 | 0,6              | 2,5              | 28-11          |
|          | ANN   | 0,999       | 0,754       | 1,000 | 0,1              | 5,1              | 28-10          |
| MIR      | PLS   | 0,893       | 0,707       | 0,999 | 2,4              | 2,6              | 28-11          |
|          | MPLS  | 0,916       | 0,681       | 0,999 | 1,8              | 3,9              | 29-11          |
|          | ANN   | 0,647       | 0,658       | 0,998 | 3,9              | 3,2              | 28-12          |

Bisküvilik buğday un örneklerine ait % protein değeri için elde edilen modeller en yüksek  $R^2$  değeri ve en düşük % hata değeri bazında karşılaştırıldığı zaman en yüksek doğrulukta tahmin yapan modelin PLS metodu ve NIR spektrumları kullanıldığında elde edildiği görülmüştür. Bu modelin elde edilmesinde uygulanan ön işlemler "SNV" ve "1. Dereceden türev (order: 3, window: 15 pt, incl only, tails: polyinterp)" dir. Seçilen modele ait parametreler Çizelge 4.65.'de gösterilmektedir.



Çizelge 4.65. Bisküvilik buğday un örneklerine ait % protein değeri için seçilen modele ait parametreler

|                          |       |
|--------------------------|-------|
| RMSEP                    | 0,2   |
| RMSEC                    | 0,1   |
| RMSECV                   | 0,6   |
| R <sup>2</sup> CV        | 0,540 |
| LV                       | 7     |
| % hata (kalibrasyon)     | 0,7   |
| % hata (validasyon)      | 1,6   |
| Veri Sayısı (kal.- val.) | 28-11 |

Bisküvi yapımı için kullanılacak unlarda genel olarak protein miktarının % 10' un altında olması istenmektedir [116]. Literatürde bisküvilik buğday unların kalite parametrelerinin tahmin edilmesine yönelik çalışmalarının az olduğu görülmüştür. Yumuşak unlarla ilgili çalışma olarak Miralbes [46]'ın yaptığı araştırma örnek gösterilebilir. Bu çalışmada % protein miktarı için geliştirilen modelin  $r^2$  değeri 0,99'dur. % Protein değeri için seçilen modelin % hata değerinin % 5'den küçük olması ve  $R^2$  değerinin yüksek olması nedenleriyle modelin endüstriyel anlamda kullanılabilir olduğu söylenebilir. Fakat veri sayısı artırılarak modelin geliştirilmesi gerekmektedir.

#### 4.5.2 Sertlik Analiz Parametresinin Değerlendirilmesi

Bisküvilik buğday un örneklerine ait % sertlik değerinin tahmin edebilecek kalibrasyon modellerinin oluşturulması için PLS metodu, MPLS metodu ve yapay sinir ağları kullanılmış ve NIR/MIR spektrumlarına farklı ön işlemler ve matematiksel işlemler uygulanmıştır. Oluşturulan kalibrasyon modellerine ait parametreler Çizelge 4.66.'da gösterilmektedir.

Çizelge 4.66. Bisküvilik buğday un örnekleri ait % sertlik değeri için oluşturulan modellere ait parametreler

| Spektrum | Metot | R <sup>2</sup> <sub>CAL</sub> | R <sup>2</sup> <sub>VAL</sub> | Eğim  | % Hata<br>(Kal.) | % Hata<br>(Val.) | Veri<br>Sayısı |
|----------|-------|-------------------------------|-------------------------------|-------|------------------|------------------|----------------|
| NIR      | PLS   | 0,991                         | 0,956                         | 0,998 | 7,2              | 9,2              | 28-10          |
|          | MPLS  | 0,845                         | 0,267                         | 0,988 | 12,1             | 13,7             | 26-10          |
|          | ANN   | 0,899                         | 0,922                         | 0,962 | 13,4             | 13,9             | 24-14          |
| MIR      | PLS   | 0,961                         | 0,860                         | 0,992 | 12,2             | 9,1              | 28-11          |
|          | MPLS  | 0,816                         | 0,501                         | 0,985 | 14,2             | 19,3             | 27-11          |
|          | ANN   | 0,558                         | 0,385                         | 0,915 | 14,1             | 33,1             | 25-10          |

Bisküvilik buğday un örneklerine ait % sertlik değeri için oluşturulan modeller incelendiği zaman en yüksek R<sup>2</sup> değerine sahip modelin PLS metodu ve NIR spektrumları kullanıldığında elde edildiği görülmüştür. Bu modelin oluşturulmasında spektrumlara ön işlem olarak “Normalizasyon (1-Norm, Area = 1)” ve “1. Dereceden türev (order: 2, window: 15 pt, incl only, tails: polyinterp)” uygulanmıştır. % Sertlik miktarının tahmin edilmesinde kullanılmak üzere seçilen modele ait parametreler Çizelge 4.67.’de gösterilmektedir.

Çizelge 4.67. Bisküvilik buğday un örneklerine ait % sertlik değeri için seçilen modele ait parametreler

|                          |       |
|--------------------------|-------|
| RMSEP                    | 4,1   |
| RMSEC                    | 1,3   |
| RMSECV                   | 8,0   |
| R <sup>2</sup> CV        | 0,667 |
| LV                       | 8     |
| % hata (kalibrasyon)     | 7,2   |
| % hata (validasyon)      | 9,2   |
| Veri Sayısı (kal.- val.) | 28-10 |

% Sertlik değeri için seçilen model kullanılabilirlik açısından değerlendirildiği zaman modelin % hata değerlerinin % 5’den küçük olması ve kalibrasyon modelinin R<sup>2</sup> değerinin bire yakın olması ve aynı zamanda validasyon R<sup>2</sup> değerinin yüksek olması modelin kullanılabilir olduğunun göstergesidir.

### 4.5.3 Gluten Analiz Parametrelerinin Değerlendirilmesi

Bisküvilik buğday un örneklerine ait % kuru gluten parametresinin tahmin edebilecek yeteneğe sahip kalibrasyon modellerinin oluşturulması için NIR ve MIR spektrumlarına farklı ön işlemler ve matematiksel işlemler uygulanmış ve PLS metodu, MPLS metodu ve yapay sinir ağları kullanılmıştır. Elde edilen modellere ait parametreler Çizelge 4.68.'de verilmektedir.

Çizelge 4.68. Bisküvilik buğday un örneklerine ait % kuru gluten değeri için oluşturulan modellere ait parametreler

| Spektrum | Metot | R <sup>2</sup> <sub>CAL</sub> | R <sup>2</sup> <sub>VAL</sub> | Eğim  | % Hata<br>(Kal.) | % Hata<br>(Val.) | Veri<br>Sayısı |
|----------|-------|-------------------------------|-------------------------------|-------|------------------|------------------|----------------|
| NIR      | PLS   | 0,985                         | 0,928                         | 0,999 | 1,6              | 3,7              | 28-11          |
|          | MPLS  | 0,979                         | 0,884                         | 0,999 | 1,8              | 4,0              | 27-11          |
|          | ANN   | 0,830                         | 0,810                         | 0,994 | 4,9              | 5,3              | 26-14          |
| MIR      | PLS   | 0,946                         | 0,908                         | 0,999 | 3,3              | 7,6              | 28-12          |
|          | MPLS  | 0,867                         | 0,758                         | 0,996 | 5,3              | 7,3              | 29-11          |
|          | ANN   | 0,726                         | 0,713                         | 0,995 | 6,6              | 8,1              | 27-15          |

Elde edilen kalibrasyon modelleri karşılaştırıldığı zaman en yüksek R<sup>2</sup> değerine ve en düşük % hata değerine sahip modelin PLS metodu ve NIR spektrumları kullanıldığında elde edildiği görülmüştür. Bu modelin oluşturulmasında “Baseline (Automatic Weighted Least Squares)” ve “SNV” ön işlemleri uygulanmıştır. % Kuru gluten miktarı için seçilen modele ait parametreler Çizelge 4.69.'da gösterilmektedir.

Çizelge 4.69. Bisküvilik buğday un örneklerine ait % kuru gluten değeri için seçilen modele ait parametreler

|                          |       |
|--------------------------|-------|
| RMSEP                    | 0,3   |
| RMSEC                    | 0,1   |
| RMSECV                   | 0,7   |
| R <sup>2</sup> CV        | 0,647 |
| LV                       | 8     |
| % hata (kalibrasyon)     | 1,6   |
| % hata (validasyon)      | 3,7   |
| Veri Sayısı (kal.- val.) | 28-11 |

Bisküvilik buğday un örneklerine ait % yaş gluten miktarının tahmin edilmesinde kullanılmak üzere kalibrasyon modellerinin kurulması için NIR ve MIR spektrumlarına farklı ön işlemler ve matematiksel işlemler uygulanmış ve PLS metodu, MPLS metodu ve yapay sinir ağları kullanılarak, % yaş gluten değeri ve spektrumları arasında ilişki kurulmaya çalışılmıştır. Elde edilen modellere ait parametreler Çizelge 4.70.'de verilmektedir.

Çizelge 4.70. Bisküvilik buğday un örneklerine ait % yaş gluten değeri için oluşturulan modellere ait parametreler

| Spektrum | Metot | R <sup>2</sup> <sub>CAL</sub> | R <sup>2</sup> <sub>VAL</sub> | Eğim  | % Hata<br>(Kal.) | % Hata<br>(Val.) | Veri<br>Sayısı |
|----------|-------|-------------------------------|-------------------------------|-------|------------------|------------------|----------------|
| NIR      | PLS   | 0,998                         | 0,954                         | 1,000 | 0,5              | 2,3              | 28-10          |
|          | MPLS  | 0,979                         | 0,922                         | 0,999 | 1,6              | 2,4              | 26-11          |
|          | ANN   | 0,560                         | 0,903                         | 0,993 | 6,1              | 3,6              | 28-14          |
| MIR      | PLS   | 0,922                         | 0,738                         | 0,998 | 3,4              | 5,0              | 28-11          |
|          | MPLS  | 0,750                         | 0,696                         | 0,994 | 6,5              | 6,4              | 29-11          |
|          | ANN   | 0,791                         | 0,562                         | 0,998 | 5,2              | 5,5              | 26-11          |

Bisküvilik buğday un örneklerine ait % yaş gluten değeri için kurulan modeller incelendiğinde en yüksek R<sup>2</sup> değerine ve en düşük % hata oranına sahip modelin PLS metodu ve NIR spektrumları kullanıldığında elde edildiği görülmüştür. Bu model için kullanılan ön işlemler “SNV” ve “1. Dereceden türev (order: 2, window: 15 pt, incl only, tails: weighted)” dir. % Yaş gluten miktarının tahmin edilmesi için seçilen modele ait parametreler Çizelge 4.71.'de gösterilmektedir.

Çizelge 4.71. Bisküvilik buğday un örneklerine ait % yaş gluten değeri için seçilen modele ait parametreler

|                          |       |
|--------------------------|-------|
| RMSEP                    | 0,7   |
| RMSEC                    | 0,2   |
| RMSECV                   | 2,5   |
| R <sup>2</sup> CV        | 0,542 |
| LV                       | 8     |
| % hata (kalibrasyon)     | 0,5   |
| % hata (validasyon)      | 2,3   |
| Veri Sayısı (kal.- val.) | 28-10 |

Literatürde yumuşak buğday unlarıyla ilgili olarak çalışmalarla gluten parametreleri için elde edilen modeller karşılaştırıldığı zaman hem % yaş gluten ( $R^2=0,95$ ) hem de % kuru gluten ( $R^2=0,97$ ) için seçilen modellerin zayıf olduğu söylenebilir [46]. Gluten analiz parametreleri için seçilen modellerin % hata değerlerinin %5'den küçük olması olumlu yönde etkili olmaktadır.  $R^2$  değerleri değerlendirildiği zaman % yaş gluten için seçilen model kullanılabilir, % kuru gluten için seçilen modelin kullanılamaz olduğu görülmüştür.

#### 4.5.4 Farinograf Analiz Parametrelerinin Değerlendirilmesi

Bisküvilik buğday un örneklerine ait farinograf % su absorpsiyon değerinin tahmin edilmesi için NIR ve MIR spektrumlarına ön işlemler ve matematiksel işlemler uygulanmış ve PLS metodu, MPLS metodu ve yapay sinir ağları kullanılmıştır. Elde edilen modellere ait parametreler Çizelge 4.72.'de verilmektedir.

Çizelge 4.72. Bisküvilik buğday un örneklerine ait % su absorpsiyon değeri için oluşturulan modellere ait parametreler

| Spektrum | Metot | R <sup>2</sup> <sub>CAL</sub> | R <sup>2</sup> <sub>VAL</sub> | Eğim  | % Hata<br>(Kal.) | % Hata<br>(Val.) | Veri<br>Sayısı |
|----------|-------|-------------------------------|-------------------------------|-------|------------------|------------------|----------------|
| NIR      | PLS   | 0,986                         | 0,944                         | 1,000 | 0,3              | 0,9              | 28-11          |
|          | MPLS  | 0,945                         | 0,662                         | 0,999 | 0,8              | 1,1              | 28-10          |
|          | ANN   | 0,576                         | 0,584                         | 0,999 | 1,8              | 2,3              | 28-14          |
| MIR      | PLS   | 0,987                         | 0,933                         | 1,000 | 0,4              | 1,0              | 28-11          |
|          | MPLS  | 0,913                         | 0,866                         | 0,999 | 1,0              | 1,7              | 28-11          |
|          | ANN   | 0,889                         | 0,763                         | 1,000 | 1,3              | 2,4              | 28-12          |

Bisküvilik buğday un örneklerine ait % su absorpsiyon değeri için oluşturulan modeller en düşük % hata değeri ve en yüksek R<sup>2</sup> değeri bazında karşılaştırıldığı zaman en iyi doğrulukta tahmin yapan modelin NIR spektrumları ve PLS metodu kullanıldığında elde edildiği görülmüştür. Bu modelin oluşturulmasın ön işlem olarak “SNV” ve “1. Dereceden türev (order: 2, window: 15 pt, incl only, tails: weighted)” kullanılmıştır. Farinograf % su absorpsiyon değeri için seçilen modele ait parametreler Çizelge 4.73.’de gösterilmektedir.

Çizelge 4.73. Bisküvilik buğday un örneklerine ait % su absorpsiyon değeri için seçilen modele ait parametreler

|                          |       |
|--------------------------|-------|
| RMSEP                    | 0,6   |
| RMSEC                    | 0,2   |
| RMSECV                   | 1,5   |
| R <sup>2</sup> CV        | 0,610 |
| LV                       | 8     |
| % hata (kalibrasyon)     | 0,3   |
| % hata (validasyon)      | 0,9   |
| Veri Sayısı (kal.- val.) | 28-11 |

Bisküvilik buğday un örneklerine ait farinograf gelişme süresi parametresi ile NIR ve MIR spektrumları arasında ilişki kurup kalibrasyon modellerinin geliştirilmesi için yapay sinir ağları, PLS metodu ve MPLS metodu kullanılmıştır. Fakat yapay sinir ağları kullanıldığında NIR spektrumları ile gelişme süresi değeri arasında ilişki

kurulamamıştır. Elde edilen modellere ait parametreler Çizelge 4.74.'de gösterilmektedir.

Çizelge 4.74. Bisküvilik buğday un örneklerine ait gelişme süresi değeri için oluşturulan modellere ait parametreler

| Spektrum | Metot | R <sup>2</sup> <sub>CAL</sub> | R <sup>2</sup> <sub>VAL</sub> | Eğim  | % Hata<br>(Kal.) | % Hata<br>(Val.) | Veri<br>Sayısı |
|----------|-------|-------------------------------|-------------------------------|-------|------------------|------------------|----------------|
| NIR      | PLS   | 0,986                         | 0,485                         | 0,996 | 7,9              | 22,3             | 28-10          |
|          | MPLS  | 0,246                         | 0,337                         | 1,018 | 21,4             | 27,5             | 25-10          |
|          | ANN   | -                             | -                             | -     | -                | -                | -              |
| MIR      | PLS   | 0,828                         | 0,813                         | 0,956 | 26,8             | 22,5             | 29-10          |
|          | MPLS  | 0,929                         | 0,398                         | 0,989 | 8,9              | 31,9             | 26-10          |
|          | ANN   | 0,772                         | 0,295                         | 0,941 | 25,7             | 28,1             | 26-10          |

Bisküvilik buğday un örneklerine ait gelişme süresi değeri için elde edilen modeller incelendiği zaman en yüksek R<sup>2</sup> değerine sahip modelin MIR spektrumları ve PLS metodu kullanıldığında oluşturulduğu görülmüştür. Bu modelin elde edilmesi için spektrumlara “SNV” ön işlemi uygulanmıştır. Elde edilen modele ait parametreler Çizelge 4.75.'de gösterilmektedir.

Çizelge 4.75. Bisküvilik buğday un örneklerine ait gelişme süresi değeri için seçilen modele ait parametreler

|                          |       |
|--------------------------|-------|
| RMSEP                    | 0,8   |
| RMSEC                    | 0,5   |
| RMSECV                   | 1,8   |
| R <sup>2</sup> CV        | 0,100 |
| LV                       | 6     |
| % hata (kalibrasyon)     | 26,8  |
| % hata (validasyon)      | 22,5  |
| Veri Sayısı (kal.- val.) | 29-10 |

Bisküvilik buğday un örneklerine ait farinograf stabilite değeri ile NIR ve MIR spektrumları arasındaki ilişki PLS metodu, MPLS metodu ve yapay sinir ağları kullanılarak araştırılmıştır. Spektrumlara farklı ön işlemler ve matematiksel işlemler

uygulanmıştır. Fakat yapay sinir ağları kullanıldığı zaman spektrumlar ve stabilite parametresi arasında ilişki kurulamadığı görülmüştür. Elde edilen modellere ait parametreler Çizelge 4.76.'da verilmektedir.

Çizelge 4.76. Bisküvilik buğday un örneklerine ait stabilite değeri için oluşturulan modellere ait parametreler

| Spektrum | Metot | R <sup>2</sup> <sub>CAL</sub> | R <sup>2</sup> <sub>VAL</sub> | Eğim  | % Hata<br>(Kal.) | % Hata<br>(Val.) | Veri<br>Sayısı |
|----------|-------|-------------------------------|-------------------------------|-------|------------------|------------------|----------------|
| NIR      | PLS   | 0,907                         | 0,616                         | 0,977 | 19,4             | 29,9             | 28-10          |
|          | MPLS  | 0,985                         | 0,151                         | 0,996 | 8,9              | 26,3             | 28-10          |
|          | ANN   | -                             | -                             | -     | -                | -                | -              |
| MIR      | PLS   | 0,902                         | 0,363                         | 0,974 | 21,6             | 36,4             | 28-10          |
|          | MPLS  | 0,904                         | 0,790                         | 0,970 | 24,2             | 23,9             | 28-10          |
|          | ANN   | -                             | -                             | -     | -                | -                | -              |

Bisküvilik buğday un örneklerine ait stabilite değeri için oluşturulan modeller incelendiğinde en yüksek R<sup>2</sup> değerine sahip modelin MIR spektrumları ve MPLS metodu kullanıldığında elde edildiği görülmüştür. Bu modelin oluşturulmasında ön işlem olarak “standart MSC”, matematiksel işlem olarak “1. Dereceden türev” ve “smoothing(4)” uygulanmış ve “gap aralığı” olarak 4 seçilmiştir. Elde edilen modele ait parametreler Çizelge 4.77.'de gösterilmektedir.

Çizelge 4.77. Bisküvilik buğday un örneklerine ait stabilite değeri için seçilen modele ait parametreler

|                          |       |
|--------------------------|-------|
| RMSECV                   | 4,2   |
| RMSEC                    | 1,3   |
| R <sup>2</sup> CV        | 0,022 |
| % hata (kalibrasyon)     | 24,2  |
| % hata (validasyon)      | 23,9  |
| Veri Sayısı (kal.- val.) | 28-10 |

Bisküvilik buğday un örneklerine ait yumuşama derecesi değeri ile NIR/MIR spektrumları arasında ilişki kurulması için spektrumlara farklı ön işlemler ve matematiksel işlemler uygulanmış ve PLS metodu, MPLS metodu ve yapay sinir



ağları kullanılmıştır. Ama yapay sinir ağları kullanıldığında spektrumlarla yumuşama derecesi arasında ilişki kurulamadığı görülmüştür. Elde edilen modellere ait parametreler Çizelge 4.78.'de verilmektedir.

Çizelge 4.78. Bisküvilik buğday un örneklerine ait yumuşama derecesi değeri için oluşturulan modellere ait parametreler

| Spektrum | Metot | R <sup>2</sup> <sub>CAL</sub> | R <sup>2</sup> <sub>VAL</sub> | Eğim  | % Hata<br>(Kal.) | % Hata<br>(Val.) | Veri<br>Sayısı |
|----------|-------|-------------------------------|-------------------------------|-------|------------------|------------------|----------------|
| NIR      | PLS   | 0,925                         | 0,280                         | 0,990 | 9,6              | 17,3             | 27-10          |
|          | MPLS  | 0,250                         | 0,560                         | 0,906 | 30,6             | 18,4             | 27-10          |
|          | ANN   | -                             | -                             | -     | -                | -                | -              |
| MIR      | PLS   | 0,969                         | 0,352                         | 0,996 | 7,1              | 27,5             | 28-10          |
|          | MPLS  | 0,337                         | 0,294                         | 0,944 | 32,4             | 31,7             | 27-12          |
|          | ANN   | -                             | -                             | -     | -                | -                | -              |

Yumuşama derecesi için geliştirilen kalibrasyon modelleri incelendiğinde en yüksek R<sup>2</sup> değerine sahip modelin MIR spektrumları ve PLS metodu kullanıldığında elde edildiği görülmüştür. Bu kalibrasyon modeli “SNV”, “OSC (Orthogonal Signal Correction)” ve “Variance (Std) Scaling” ön işlemleri uygulandığında elde edilmiştir. Elde edilen modele ait parametreler Çizelge 4.79.'da gösterilmektedir.

Çizelge 4.79. Bisküvilik buğday un örneklerine ait yumuşama derecesi değeri için seçilen modele ait parametreler

|                          |       |
|--------------------------|-------|
| RMSEP                    | 23,9  |
| RMSEC                    | 5,8   |
| RMSECV                   | 32,7  |
| R <sup>2</sup> CV        | 0,167 |
| LV                       | 7     |
| % hata (kalibrasyon)     | 7,1   |
| % hata (validasyon)      | 27,5  |
| Veri Sayısı (kal.- val.) | 28-10 |

Farinograf analiz parametreleri için seçilen modeller kullanılabilirlik açısından değerlendirildiği zaman modellerin % su absorpsiyon için seçilen model hariç, %

hata değerlerinin yüksek ve  $R^2$  değerlerinin düşük olması nedeniyle modellerin kullanılamaz olduğu söylenebilir. % Su absorpsiyon değeri için seçilen modelin % hata değerinin düşük olması ve kalibrasyon  $R^2$  değerinin yüksek olması olumlu açıdan etkili olurken, validasyon  $R^2$  değerinin nispeten düşük olması modelin kullanılabilirliği açısından olumsuz yönde etkili olmaktadır.

#### 4.5.5 Sedimentasyon Analiz Parametrelerinin Değerlendirilmesi

Bisküvilik buğday un örneklerine ait Zeleny sedimentasyon değerini tahmin etmek için NIR ve MIR spektrumlarına farklı ön işlemler ve matematiksel işlemler uygulanmış ve PLS metodu, MPLS metodu ve yapay sinir ağları kullanılarak kalibrasyon modelleri elde edilmeye çalışılmıştır. Fakat yapay sinir ağları kullanıldığında NIR spektrumları ve Zeleny sedimentasyon değeri arasında ilişki kurulamamış ve kalibrasyon modeli elde edilememiştir. Elde edilen modellere ait parametreler Çizelge 4.80.'de verilmektedir.

Çizelge 4.80. Bisküvilik buğday un örneklerine ait Zeleny sedimentasyon değeri için oluşturulan modellere ait parametreler

| Spektrum | Metot | $R^2_{CAL}$ | $R^2_{VAL}$ | Eğim  | % Hata<br>(Kal.) | % Hata<br>(Val.) | Veri<br>Sayısı |
|----------|-------|-------------|-------------|-------|------------------|------------------|----------------|
| NIR      | PLS   | 0,946       | 0,636       | 0,998 | 3,9              | 8,3              | 28-10          |
|          | MPLS  | 0,698       | 0,620       | 0,984 | 6,7              | 4,4              | 25-10          |
|          | ANN   | -           | -           | -     | -                | -                | -              |
| MIR      | PLS   | 0,796       | 0,802       | 0,993 | 7,1              | 9,7              | 28-10          |
|          | MPLS  | 0,877       | 0,565       | 0,996 | 5,2              | 10,9             | 27-10          |
|          | ANN   | 0,568       | 0,427       | 0,972 | 7,6              | 11,3             | 25-10          |

Bisküvilik buğday un örneklerine ait Zeleny sedimentasyon değerinin tahmin edilmesinde kullanılması için oluşturulan kalibrasyon modelleri incelendiği zaman en yüksek  $R^2$  değerine sahip modelin MIR spektrumları ve PLS metodu kullanıldığında elde edildiği görülmüştür. Bu modelin oluşturulmasında ön işlem olarak "Variance (Std) Scaling", "OSC (Orthogonal Signal Correction)" ve "SNV" uygulanmıştır. Elde edilen modele ait parametreler Çizelge 4.81.'de gösterilmektedir.

Çizelge 4.81. Bisküvilik buğday un örneklerine ait Zeleny sedimentasyon değeri için seçilen modele ait parametreler

|                          |       |
|--------------------------|-------|
| RMSEP                    | 3,6   |
| RMSEC                    | 2,6   |
| RMSECV                   | 6,6   |
| R <sup>2</sup> CV        | 0,175 |
| LV                       | 7     |
| % hata (kalibrasyon)     | 7,1   |
| % hata (validasyon)      | 9,7   |
| Veri Sayısı (kal.- val.) | 28-10 |

Bisküvilik buğday un örneklerine ait beklemeli Zeleny sedimentasyon değerini tahmin edilmesinde kullanılması için PLS metodu, MPLS metodu ve yapay sinir ağları kullanılmış ve NIR/MIR spektrumlarına farklı ön işlemler ve matematiksel işlemler uygulanmıştır. Elde edilen modellere ait parametreler Çizelge 4.82.'de gösterilmektedir.

Çizelge 4.82. Bisküvilik buğday un örneklerine ait Beklemeli Zeleny sedimentasyon değeri için oluşturulan modellere ait parametreler

| Spektrum | Metot | R <sup>2</sup> <sub>CAL</sub> | R <sup>2</sup> <sub>VAL</sub> | Eğim  | % Hata<br>(Kal.) | % Hata<br>(Val.) | Veri<br>Sayısı |
|----------|-------|-------------------------------|-------------------------------|-------|------------------|------------------|----------------|
| NIR      | PLS   | 0,908                         | 0,837                         | 0,996 | 4,4              | 6,5              | 28-10          |
|          | MPLS  | 0,683                         | 0,604                         | 1,010 | 7,8              | 8,3              | 24-11          |
|          | ANN   | 0,534                         | 0,564                         | 0,990 | 7,6              | 9,8              | 26-12          |
| MIR      | PLS   | 0,965                         | 0,930                         | 0,998 | 3,4              | 3,4              | 28-10          |
|          | MPLS  | 0,912                         | 0,793                         | 0,997 | 4,1              | 7,4              | 27-10          |
|          | ANN   | 0,759                         | 0,411                         | 1,004 | 11,7             | 15,9             | 25-11          |

Bisküvilik buğday un örneklerine ait beklemeli Zeleny sedimentasyon parametresi için oluşturulan modeller en düşük % hata değeri ve en yüksek R<sup>2</sup> değeri bazında karşılaştırıldığı zaman en iyi modelin MIR spektrumları ve PLS metodu kullanıldığında elde edildiği görülmüştür. Bu modeli elde etmek için “Poisson (Sqrt Mean) Scaling” ve “SNV” ön işlemleri uygulanmıştır. Seçilen modele ait parametreler Çizelge 4.83.'de gösterilmektedir.

Çizelge 4.83. Bisküvilik buğday un örneklerine ait beklemeli Zeleny sedimentasyon değeri için seçilen modele ait parametreler

|                          |       |
|--------------------------|-------|
| RMSEP                    | 1,4   |
| RMSEC                    | 1,6   |
| RMSECV                   | 9,3   |
| R <sup>2</sup> CV        | 0,109 |
| LV                       | 8     |
| % hata (kalibrasyon)     | 3,4   |
| % hata (validasyon)      | 3,4   |
| Veri Sayısı (kal.- val.) | 28-10 |

Zeleny sedimentasyon değeri için seçilen modelin % hata değerlerinin % 5'den yüksek olması ve R<sup>2</sup> değerinin düşük olması modelin kullanılamaz olduğunun göstergesidir. Beklemeli Zeleny sedimentasyon değeri için seçilen modelin % hata değerinin % 5'den düşük olması kullanılabilirlik açısından olumlu yönde etkili olurken validasyon R<sup>2</sup> değerinin 0,95'den küçük olması olumsuz yönde etkili olmaktadır.

#### 4.5.6 Alkali Su Tutma Kapasitesi Parametresinin Değerlendirilmesi

Alkali su tutma kapasitesi testi unların bisküvilik kalitesini değerlendirmek için ve yumuşak ve sert buğday arasındaki ayrımı yapmak için kullanılmaktadır. İyi bir bisküvilik buğday unda ASTK değerinin % 59'dan küçük olması beklenmektedir [117].

Bisküvilik buğday un örneklerine ait alkali su tutma kapasitesi değerinin tahmin edilmesinde kullanılması için kalibrasyon modelleri elde edilmeye çalışılmıştır. Bunun için PLS metodu, MPLS metodu ve yapay sinir ağları kullanılmış ve NIR ve MIR spektrumlarına farklı ön işlemler ve matematiksel işlemler uygulanmıştır. Elde edilen modellere ait parametreler Çizelge 4.84.'de verilmektedir.

Çizelge 4.84. Bisküvilik buğday un örneklerine ait AKTS değeri için oluşturulan modellere ait parametreler

| Spektrum | Metot | R <sup>2</sup> <sub>CAL</sub> | R <sup>2</sup> <sub>VAL</sub> | Eğim  | % Hata<br>(Kal.) | % Hata<br>(Val.) | Veri<br>Sayısı |
|----------|-------|-------------------------------|-------------------------------|-------|------------------|------------------|----------------|
| NIR      | PLS   | 0,992                         | 0,978                         | 1,000 | 0,5              | 1,2              | 27-10          |
|          | MPLS  | 0,969                         | 0,716                         | 0,999 | 0,7              | 2,8              | 26-10          |
|          | ANN   | 0,551                         | 0,583                         | 0,998 | 3,3              | 3,2              | 27-14          |
| MIR      | PLS   | 0,904                         | 0,748                         | 0,999 | 1,6              | 1,7              | 28-10          |
|          | MPLS  | 0,862                         | 0,738                         | 0,995 | 2,0              | 1,9              | 27-10          |
|          | ANN   | 0,921                         | 0,483                         | 0,999 | 1,5              | 2,1              | 26-10          |

Bisküvilik buğday un örneklerine ait alkali su tutma kapasitesi için oluşturulan kalibrasyon modelleri en düşük % hata değeri ve en yüksek R<sup>2</sup> değeri bazında karşılaştırıldığında en uygun modelin NIR spektrumları ve PLS metodu kullanıldığında elde edildiği görülmüştür. Bu modelin oluşturulmasında kullanılan ön işlemler “Normalizasyon (1-Norm, Area = 1)” ve “1. Dereceden türev (order: 1, window: 15 pt, incl only, tails: polyinterp)” dir. AKTS değeri için seçilen modele ait parametreler Çizelge 4.85.’de gösterilmektedir.

Çizelge 4.85. Bisküvilik buğday un örneklerine ait AKTS değeri için seçilen modele ait parametreler

|                          |       |
|--------------------------|-------|
| RMSEP                    | 0,9   |
| RMSEC                    | 0,3   |
| RMSECV                   | 3,0   |
| R <sup>2</sup> CV        | 0,488 |
| LV                       | 8     |
| % hata (kalibrasyon)     | 0,5   |
| % hata (validasyon)      | 1,2   |
| Veri Sayısı (kal.- val.) | 27-10 |

Alkali su tutma kapasitesi değeri için seçilen modelin % hata değerinin düşük ve R<sup>2</sup> değerinin yüksek olması nedenleriyle modelin kullanılabilir olduğu söylenebilir.

#### 4.5.7 Alveograf Analiz Parametrelerinin Değerlendirilmesi

Alveograf test analiz sonuçlarından enerji (W), basınç (P), uzunluk (L) ve P/L parametreleri değerlendirilmiştir.

Bisküvilik buğday un örneklerine ait enerji (W) değeri ve spektrumlar arasında ilişki kurabilmek için PLS metodu, MPLS metodu ve yapay sinir ağları kullanılmıştır. Fakat yapay sinir ağları kullanıldığında NIR ve MIR spektrumları ve referans değerler arasında ilişki kurulamamıştır. Elde edilen modellere ait parametreler Çizelge 4.86.'da verilmektedir.

Çizelge 4.86. Bisküvilik buğday un örneklerine ait alveograf W değeri için oluşturulan modellere ait parametreler

| Spektrum | Metot | R <sup>2</sup> <sub>CAL</sub> | R <sup>2</sup> <sub>VAL</sub> | Eğim  | % Hata<br>(Kal.) | % Hata<br>(Val.) | Veri<br>Sayısı |
|----------|-------|-------------------------------|-------------------------------|-------|------------------|------------------|----------------|
| NIR      | PLS   | 0,952                         | 0,571                         | 0,996 | 4,8              | 18,3             | 28-10          |
|          | MPLS  | 0,583                         | 0,587                         | 0,964 | 10,0             | 21,0             | 26-14          |
|          | ANN   | -                             | -                             | -     | -                | -                | -              |
| MIR      | PLS   | 0,895                         | 0,702                         | 0,991 | 9,3              | 17,8             | 28-9           |
|          | MPLS  | 0,968                         | 0,562                         | 0,998 | 3,6              | 15,4             | 28-10          |
|          | ANN   | -                             | -                             | -     | -                | -                | -              |

Bisküvilik buğday un örneklerine ait alveograf W değeri için oluşturulan modeller incelendiği zaman en yüksek R<sup>2</sup> değerine ve en düşük % hata oranına sahip modelin MIR spektrumları ve PLS metodu kullanıldığında elde edildiği görülmüştür. Bu model için “Normalizasyon (1-Norm, Area = 1)” ve “OSC (Orthogonal Signal Correction)” ön işlemleri birlikte kullanılmıştır. Bisküvilik buğday un örneklerine ait alveograf W değeri için seçilen modele ait parametreler Çizelge 4.87.'de verilmektedir.

Çizelge 4.87. Bisküvilik buğday un örneklerine ait alveograf W değeri için seçilen modele ait parametreler

|                          |       |
|--------------------------|-------|
| RMSEP                    | 23,1  |
| RMSEC                    | 12,1  |
| RMSECV                   | 31,7  |
| R <sup>2</sup> CV        | 0,402 |
| LV                       | 7     |
| % hata (kalibrasyon)     | 9,3   |
| % hata (validasyon)      | 17,8  |
| Veri Sayısı (kal.- val.) | 28-10 |

Bisküvilik buğday un örneklerine ait alveograf basınç (P) değerinin tahmin edilmesi için yapay sinir ağları, PLS metodu ve MPLS metodu kullanılmış ve NIR/MIR spektrumlarına farklı ön işlemler ve matematiksel işlemler uygulanmıştır. Elde edilen kalibrasyon modellerine ait parametreler Çizelge 4.88.'de verilmektedir.

Çizelge 4.88. Bisküvilik buğday un örneklerine ait alveograf P değeri için oluşturulan modellere ait parametreler

| Spektrum | Metot | R <sup>2</sup> <sub>CAL</sub> | R <sup>2</sup> <sub>VAL</sub> | Eğim  | % Hata<br>(Kal.) | % Hata<br>(Val.) | Veri<br>Sayısı |
|----------|-------|-------------------------------|-------------------------------|-------|------------------|------------------|----------------|
| NIR      | PLS   | 0,989                         | 0,934                         | 0,999 | 3,8              | 6,3              | 27-10          |
|          | MPLS  | 0,927                         | 0,903                         | 0,994 | 7,0              | 8,9              | 27-10          |
|          | ANN   | 0,642                         | 0,625                         | 0,977 | 13,2             | 9,5              | 24-13          |
| MIR      | PLS   | 0,986                         | 0,942                         | 0,999 | 3,0              | 9,6              | 28-10          |
|          | MPLS  | 0,88                          | 0,879                         | 0,993 | 7,6              | 9,2              | 28-13          |
|          | ANN   | 0,993                         | 0,713                         | 1,002 | 2,4              | 11,2             | 25-11          |

Bisküvilik buğday un örneklerine ait alveograf P değeri için oluşturulan modeller incelendiği zaman en yüksek R<sup>2</sup> değerine sahip modelin PLS metodu ve MIR spektrumları kullanıldığında elde edildiği görülmüştür. Bu model “1. Dereceden türev (order: 2, window: 15 pt, incl only, tails: weighted)” ve “Pareto (Sqrt Std) Scaling” ön işlemleri uygulandığında elde edilmiştir. Seçilen modele ait parametreler Çizelge 4.89.'da verilmektedir.

Çizelge 4.89. Bisküvilik buğday un örneklerine ait alveograf P değeri için seçilen modele ait parametreler

|                          |       |
|--------------------------|-------|
| RMSEP                    | 0,5   |
| RMSEC                    | 0,2   |
| RMSECV                   | 1,1   |
| R <sup>2</sup> CV        | 0,418 |
| LV                       | 6     |
| % hata (kalibrasyon)     | 3,0   |
| % hata (validasyon)      | 9,6   |
| Veri Sayısı (kal.- val.) | 28-10 |

Bisküvilik buğday un örneklerine ait alveograf uzunluk (L) değerinin tahmin edilmesi için kalibrasyon modelleri elde edilmeye çalışılmıştır. Bunun için PLS metodu, MPLS metodu ve yapay sinir ağları kullanılmış ve NIR ve MIR spektrumlarına farklı ön işlemler ve matematiksel işlemler uygulanmıştır. Elde edilen modellere ait parametreler Çizelge 4.90.'da verilmektedir.

Çizelge 4.90. Bisküvilik buğday un örneklerine ait alveograf L değeri için oluşturulan modellere ait parametreler

| Spektrum | Metot | R <sup>2</sup> <sub>CAL</sub> | R <sup>2</sup> <sub>VAL</sub> | Eğim  | % Hata<br>(Kal.) | % Hata<br>(Val.) | Veri<br>Sayısı |
|----------|-------|-------------------------------|-------------------------------|-------|------------------|------------------|----------------|
| NIR      | PLS   | 0,950                         | 0,704                         | 0,996 | 6,9              | 10,5             | 27-10          |
|          | MPLS  | 0,978                         | 0,722                         | 0,998 | 4,0              | 13,3             | 27-10          |
|          | ANN   | 0,981                         | 0,469                         | 1,003 | 3,0              | 16,2             | 24-10          |
| MIR      | PLS   | 0,919                         | 0,891                         | 0,993 | 10,4             | 11,0             | 28-10          |
|          | MPLS  | 0,614                         | 0,638                         | 0,973 | 14,8             | 11,2             | 28-11          |
|          | ANN   | 0,573                         | 0,504                         | 0,976 | 15,0             | 16,3             | 25-12          |

Alveograf L değerinin tahmin edilmesinde kullanılmak üzere oluşturulan modeller karşılaştırıldığında en yüksek R<sup>2</sup> değerine sahip modelin PLS metodu ve MIR spektrumları kullanıldığında elde edildiği görülmüştür. Bu modelin oluşturulmasında ön işlem olarak “1. Dereceden türev (order: 2, window: 15 pt, incl only, tails: weighted)” ve “Pareto (Sqrt Std) Scaling” uygulanmıştır. Seçilen modele ait parametreler Çizelge 4.91.'de gösterilmektedir.



Çizelge 4.91. Bisküvilik buğday un örneklerine ait alveograf L değeri için seçilen modele ait parametreler

|                          |       |
|--------------------------|-------|
| RMSEP                    | 1,1   |
| RMSEC                    | 0,8   |
| RMSECV                   | 2,8   |
| R <sup>2</sup> CV        | 0,133 |
| LV                       | 6     |
| % hata (kalibrasyon)     | 10,4  |
| % hata (validasyon)      | 11,0  |
| Veri Sayısı (kal.- val.) | 28-10 |

Bisküvilik buğday un örneklerine ait alveograf P/L değerinin tahmin edilmesinde kullanılması için PLS metodu, MPLS metodu ve yapay sinir ağları kullanılmış ve spektrumlara farklı ön işlemler ve matematiksel işlemler uygulanarak kalibrasyon modelleri oluşturulmaya çalışılmıştır. Geliştirilen kalibrasyon modellerine ait parametreler Çizelge 4.92.'de verilmektedir.

Çizelge 4.92. Bisküvilik buğday un örneklerine ait alveograf P/L değeri için oluşturulan modellere ait parametreler

| Spektrum | Metot | R <sup>2</sup> <sub>CAL</sub> | R <sup>2</sup> <sub>VAL</sub> | Eğim  | % Hata<br>(Kal.) | % Hata<br>(Val.) | Veri<br>Sayısı |
|----------|-------|-------------------------------|-------------------------------|-------|------------------|------------------|----------------|
| NIR      | PLS   | 0,986                         | 0,928                         | 0,994 | 10,8             | 19,7             | 27-10          |
|          | MPLS  | 0,959                         | 0,534                         | 0,995 | 7,9              | 25,0             | 27-9           |
|          | ANN   | 0,897                         | 0,889                         | 0,95  | 21,4             | 17,1             | 24-12          |
| MIR      | PLS   | 0,925                         | 0,835                         | 0,97  | 24,8             | 17,0             | 28-10          |
|          | MPLS  | 0,388                         | 0,499                         | 0,953 | 24,1             | 17,5             | 27-11          |
|          | ANN   | 0,889                         | 0,410                         | 0,992 | 28,1             | 35,6             | 25-10          |

Bisküvilik buğday un örneklerine ait alveograf P/L değeri için oluşturulan modeller incelendiği zaman en yüksek R<sup>2</sup> değerine sahip modelin PLS metodu ve NIR spektrumları kullanıldığında elde edildiği görülmüştür. Bu modelin oluşturulmasında sırasıyla "Pareto (Sqrt Std) Scaling", "OSC (Orthogonal Signal

Correction)” ve “SNV” önişlemleri uygulanmıştır. Seçilen modele ait parametreler Çizelge 4.93.’de gösterilmektedir.

Çizelge 4.93. Bisküvilik buğday un örneklerine ait alveograf P/L değeri için seçilen modele ait parametreler

|                          |       |
|--------------------------|-------|
| RMSEP                    | 0,1   |
| RMSEC                    | 0,2   |
| RMSECV                   | 0,5   |
| R <sup>2</sup> CV        | 0,396 |
| LV                       | 6     |
| % hata (kalibrasyon)     | 10,8  |
| % hata (validasyon)      | 19,7  |
| Veri Sayısı (kal.- val.) | 27-10 |

Literatürde yumuşak buğday unlarına ait alveograf analiz parametrelerinden P ( $r^2=0,80$ ), P/L ( $r^2=0,76$ ) ve W ( $r^2=0,87$ ) değerleri için geliştirilen modeller ile tez kapsamında seçilen modeller karşılaştırıldığı zaman W değeri hariç diğer modellerin daha iyi olduğu görülmüştür [46]. Alveograf analiz parametreleri için seçilen modeller değerlendirildiği zaman parametreler ve spektrumlar arasında ilişkinin nispeten iyi olduğu söylenebilir. Fakat modellerin % hata değerlerinin yüksek olması nedeniyle modellerin kullanılamaz olduğu söylenebilir.

#### 4.6 Sulu Bölge Ekmeklik buğday kırma ve Un Örneklerine Ait Kalite Parametreleri İçin Kalibrasyon Modellerinin Elde Edilmesi

Ekmeklik buğday un örneklerinde buğdayın yetiştirilmesinde coğrafi koşulların etkisi görmek amacıyla su miktarının nispeten fazla olduğu bir bölgede yetiştirilen 48 buğday örneğiyle çalışılmıştır. Bu örneklerin 1/3'lük kısmı (11-15) validasyon için ayrılmış geriye kalan (30-35) örneklerle kalibrasyon modelleri geliştirilmiştir. Sulu bölgede yetiştirilen ekmeklik buğday kırma örnekleriyle % protein, % rutubet ve % sertlik parametreleriyle çalışılmıştır. Ekmeklik buğday un örnekleriyle ise gluten analiz, renk analiz, farinograf analiz, sedimentasyon analiz ve alveograf analiz parametreleriyle çalışılmıştır.

#### 4.6.1 Protein Analiz Parametresinin Değerlendirilmesi

Sulu bölge ekmeklik buğday kırma örneklerinin % protein parametresinin tahmin edilmesi için yapay sinir ağıları, PLS metodu ve MPLS metodu kullanılmış ve NIR ve MIR spektrumlarına farklı ön işlemler ve matematiksel işlemler uygulanmıştır. Farklı kalibrasyon modelleri elde edilmiştir. Elde edilen modellere ait parametreler Çizelge 4.94.'de gösterilmektedir.

Çizelge 4.94. SBE kırma örneklerine ait % protein değeri için oluşturulan modellere ait parametreler

| Spektrum | Metot | R <sup>2</sup> <sub>CAL</sub> | R <sup>2</sup> <sub>VAL</sub> | Eğim  | % Hata<br>(kal.) | % Hata<br>(val.) | Veri<br>Sayısı |
|----------|-------|-------------------------------|-------------------------------|-------|------------------|------------------|----------------|
| NIR      | PLS   | 0,993                         | 0,983                         | 0,999 | 1,2              | 1,7              | 31-15          |
|          | MPLS  | 0,997                         | 0,983                         | 0,998 | 0,3              | 1,5              | 30-15          |
|          | ANN   | 0,956                         | 0,952                         | 1,003 | 2,9              | 3,3              | 30-15          |
| MIR      | PLS   | 0,988                         | 0,950                         | 0,999 | 1,6              | 3,0              | 35-10          |
|          | MPLS  | 0,986                         | 0,899                         | 0,999 | 1,8              | 3,8              | 32-13          |
|          | ANN   | 0,969                         | 0,961                         | 0,999 | 2,4              | 2,5              | 35-10          |

Sulu bölge ekmeklik buğday kırma örnekleri için oluşturulan modeller karşılaştırıldığı zaman % protein değerini en düşük % hata değeri ve en yüksek R<sup>2</sup> değeriyle en iyi doğrulukta tahmin eden modelin MPLS metodu ve NIR spektrumları kullanıldığı zaman elde edildiği görülmüştür. Bu modelin oluşturulmasında ön işlem olarak “SNV”, matematiksel işlem olarak “1. Dereceden türev” ve “smoothing(4)” uygulandığında ve “gap aralığı” olarak 4 seçilmiştir. Sulu bölge ekmeklik buğday kırma örneklerine ait % protein değeri için modele ait parametreler Çizelge 4.95.'de gösterilmektedir.

Çizelge 4.95. SBE kırma örneklerine ait % protein değeri için seçilen modele ait parametreler

|                          |       |
|--------------------------|-------|
| RMSECV                   | 0,3   |
| RMSEC                    | 0,1   |
| R <sup>2</sup> CV        | 0,986 |
| % hata (kalibrasyon)     | 0,3   |
| % hata (validasyon)      | 1,5   |
| Veri Sayısı (kal.- val.) | 30-15 |

Sulu bölge kırma örneklerine ait % protein değeri için seçilen model kullanılabilirlik açısından değerlendirildiği zaman modelin % hata değerlerinin % 5'den küçük ve R<sup>2</sup> değerlerinin yeterince yüksek olduğu görülmüştür. Bu nedenlerle seçilen modelin tahmin yapmada kullanılabilir olduğu söylenebilir. Ama modelin oluşturulmasında kullanılan veri sayısı artırılarak model geliştirilmelidir.

#### 4.6.2 Rutubet Analiz Parametresinin Değerlendirilmesi

Sulu bölgede yetiştirilen ekmeklik buğdaydan elde edilen unlarına % rutubet değerinin tahmin edebilecek yeteneğe sahip kalibrasyon modellerinin geliştirilmesi için NIR ve MIR spektrumlarına farklı önışlemler ve matematiksel işlemler uygulanmış ve PLS metodu, MPLS metodu ve yapay sinir ağları kullanılmıştır. Elde edilen modellere ait parametreler Çizelge 4.96.'da gösterilmektedir.

Çizelge 4.96. SBE kırma örneklerine ait % rutubet değeri için oluşturulan modellere ait parametreler

| Spektrum | Metot | R <sup>2</sup> <sub>CAL</sub> | R <sup>2</sup> <sub>VAL</sub> | Eğim  | % Hata<br>(kal.) | % Hata<br>(val.) | Veri<br>Sayısı |
|----------|-------|-------------------------------|-------------------------------|-------|------------------|------------------|----------------|
| NIR      | PLS   | 0,991                         | 0,946                         | 1,000 | 0,4              | 0,9              | 33-13          |
|          | MPLS  | 0,983                         | 0,955                         | 1,000 | 0,6              | 1,0              | 30-15          |
|          | ANN   | 0,563                         | 0,708                         | 0,999 | 1,8              | 2,2              | 33-13          |
| MIR      | PLS   | 0,955                         | 0,905                         | 0,999 | 0,8              | 1,6              | 33-13          |
|          | MPLS  | 0,986                         | 0,604                         | 1,000 | 0,5              | 2,3              | 33-12          |
|          | ANN   | 0,782                         | 0,840                         | 0,999 | 1,7              | 1,3              | 33-13          |

Sulu bölge ekmeklik buğday un örneklerine ait modeller incelendiği zaman en yüksek doğrulukta tahmini yapan modelin MPLS metodu ve NIR spektrumları

kullanıldığında elde edildiği görülmüştür. Model elde edilirken kullanılan ön işlem “SNV”, matematiksel işlem “1. Dereceden türev” ve “smoothing(4)” dir. “Gap aralığı” olarak 4 seçilmiştir. Sulu bölge ekmeçlik buğday kırma örneklerine ait % rutubet değeri için seçilen modele ait parametreler Çizelge 4.97.’de gösterilmektedir.

Çizelge 4.97. SBE kırma örneklerine ait % rutubet değeri için seçilen modele ait parametreler

|                          |       |
|--------------------------|-------|
| RMSECV                   | 0,3   |
| RMSEC                    | 0,1   |
| R <sup>2</sup> CV        | 0,764 |
| % hata (kalibrasyon)     | 0,6   |
| % hata (validasyon)      | 1,4   |
| Veri Sayısı (kal.- val.) | 30-15 |

Rutubet değeri için seçilen modelin parametreleri incelendiği zaman % hata değerlerinin % 5’den küçük ve R<sup>2</sup> değerlerinin 0,95’den büyük olduğu görülmüştür. Bu nedenle modelin kullanılabilir olduğu söylenebilir.

#### **4.6.3 Sertlik Analiz Parametresinin Değerlendirilmesi**

Sulu bölge ekmeçlik buğday un örneklerine ait % sertlik değerinin tahmin edilmesi için NIR ve MIR spektrumlarına farklı ön işlemler ve matematiksel işlemler uygulanıp yapay sinir ağları, PLS metodu ve MPLS metodu kullanılmış ve farklı kalibrasyon modelleri elde edilmiştir. Oluşturulan modellere ait parametreler Çizelge 4.98.’de verilmektedir.

Çizelge 4.98. SBE un örneklerine ait % sertlik değeri için oluşturulan modellere ait parametreler

| Spektrum | Metot | R <sup>2</sup> <sub>CAL</sub> | R <sup>2</sup> <sub>VAL</sub> | Eğim  | % Hata<br>(kal.) | % Hata<br>(val.) | Veri<br>Sayısı |
|----------|-------|-------------------------------|-------------------------------|-------|------------------|------------------|----------------|
| NIR      | PLS   | 0,760                         | 0,557                         | 0,978 | 13,3             | 15,6             | 32-12          |
|          | MPLS  | 0,984                         | 0,568                         | 0,998 | 4,1              | 15,3             | 31-12          |
|          | ANN   | 0,414                         | 0,412                         | 0,972 | 21,3             | 16,8             | 30-12          |
| MIR      | PLS   | 0,931                         | 0,833                         | 0,993 | 8,0              | 16,8             | 32-12          |
|          | MPLS  | 0,935                         | 0,704                         | 0,994 | 7,0              | 17,0             | 31-11          |
|          | ANN   | 0,415                         | 0,394                         | 0,982 | 15,8             | 17,8             | 29-16          |

Oluşturulan modeller incelendiği zaman % sertlik değerinin en yüksek doğrulukta tahmin eden modelin MIR spektrumları ve PLS metodu kullanıldığı zaman elde edildiği görülmüştür. Bu model oluşturulurken ön işlem olarak “Detrend” ve “Pareto (Sqrt Std) Scaling” uygulanmıştır. Sulu bölgede yetiştirilen buğdaydan elde edilen ekmeklik buğday unlara ait % sertlik değerinin tahmin edilmesinde kullanılmak üzere seçilen modele ait parametreler Çizelge 4.99.’da verilmektedir.

Çizelge 4.99. SBE unlara ait % sertlik değeri için seçilen modele ait parametreler

|                          |       |
|--------------------------|-------|
| RMSEP                    | 8,8   |
| RMSEC                    | 4,4   |
| RMSECV                   | 12,5  |
| R <sup>2</sup> CV        | 0,516 |
| LV                       | 7     |
| % hata (kalibrasyon)     | 8,0   |
| % hata (validasyon)      | 16,8  |
| Veri Sayısı (kal.- val.) | 32-12 |

Sulu bölge kırma örneklerine ait % sertlik değeri için seçilen modelin %hata değerlerinin % 5’den büyük olması ve R<sup>2</sup> değerlerinin yeterince yüksek olmaması seçilen modelin tahmin yapmada kullanılamaz olduğunun göstergesidir.

#### 4.6.4 Gluten Analiz Parametrelerinin Değerlendirilmesi

Sulu bölge ekmeçlik buğday unlara ait % yaş gluten miktarı ve NIR/MIR spektrumları arasında ilişki kurulması için PLS metodu, MPLS metodu ve yapay sinir ağıları kullanılmıştır. Yapılan çalışmalar sonucunda yüksek korelasyon değerine sahip farklı kalibrasyon modelleri elde edilmiştir. Modellere ait parametreler Çizelge 4.100.'de verilmektedir.

Çizelge 4.100. SBE unlara ait % yaş gluten değeri için oluşturulan modellere ait parametreler

| Spektrum | Metot | R <sup>2</sup> <sub>CAL</sub> | R <sup>2</sup> <sub>VAL</sub> | Eğim  | % Hata<br>(kal.) | % Hata<br>(val.) | Veri<br>Sayısı |
|----------|-------|-------------------------------|-------------------------------|-------|------------------|------------------|----------------|
| NIR      | PLS   | 0,992                         | 0,961                         | 0,999 | 2,5              | 3,5              | 33-12          |
|          | MPLS  | 0,986                         | 0,962                         | 0,999 | 2,5              | 3,2              | 33-13          |
|          | ANN   | 0,993                         | 0,945                         | 0,999 | 2,0              | 4,4              | 33-13          |
| MIR      | PLS   | 0,963                         | 0,941                         | 0,998 | 3,8              | 4,6              | 32-13          |
|          | MPLS  | 0,931                         | 0,952                         | 0,996 | 5,2              | 4,1              | 32-13          |
|          | ANN   | 0,960                         | 0,920                         | 0,998 | 4,1              | 5,1              | 32-13          |

Sulu bölgede yetiştirilen ekmeçlik buğdaydan elde edilen unlara ait % yaş gluten değeri için oluşturulan model en düşük % hata değeri ve en yüksek R<sup>2</sup> değeri bazında karşılaştırıldığı zaman en iyi modelin NIR spektrumları ve MPLS metodu kullanıldığında elde edildiği görülmüştür. Bu modelin elde edilmesinde uygulanan ön işlem "standart MSC", matematiksel işlem "1. Dereceden türev" ve "smoothing(6)" ve seçilen "gap aralığı" 6'dır. Seçilen modele ait parametreler Çizelge 4.101.'de gösterilmektedir.

Çizelge 4.101. SBE un örneklerine ait % yaş gluten değeri için seçilen modele ait parametreler

|                          |       |
|--------------------------|-------|
| RMSECV                   | 2,4   |
| RMSEC                    | 0,9   |
| R <sup>2</sup> CV        | 0,902 |
| % hata (kalibrasyon)     | 2,5   |
| % hata (validasyon)      | 3,2   |
| Veri Sayısı (kal.- val.) | 33-13 |

Sulu bölge ekmeklik buğday un örneklerine ait % kuru gluten değerinin tahmin edilmesinde kullanılmak üzere NIR ve MIR spektrumları PLS metodu, MPLS metodu ve yapay sinir ağlarında işlenerek kalibrasyon modelleri elde edilmeye çalışılmıştır. Elde edilen kalibrasyon modellerine ait parametreler Çizelge 4.102.'de verilmektedir.

Çizelge 4.102. SBE un örneklerine ait % kuru gluten değeri için oluşturulan modellere ait parametreler

| Spektrum | Metot | R <sup>2</sup> <sub>CAL</sub> | R <sup>2</sup> <sub>VAL</sub> | Eğim  | % Hata<br>(kal.) | % Hata<br>(val.) | Veri<br>Sayısı |
|----------|-------|-------------------------------|-------------------------------|-------|------------------|------------------|----------------|
| NIR      | PLS   | 0,999                         | 0,964                         | 1,000 | 0,4              | 3,7              | 32-13          |
|          | MPLS  | 0,996                         | 0,969                         | 0,999 | 1,3              | 4,3              | 32-12          |
|          | ANN   | 0,866                         | 0,890                         | 0,992 | 8,0              | 6,6              | 32-13          |
| MIR      | PLS   | 0,960                         | 0,956                         | 0,998 | 4,5              | 4,9              | 32-12          |
|          | MPLS  | 0,910                         | 0,883                         | 0,995 | 6,6              | 6,7              | 32-12          |
|          | ANN   | 0,862                         | 0,817                         | 0,991 | 7,7              | 7,6              | 32-12          |

SBE unlara ait % kuru gluten değeri için geliştirilen modeller incelendiği zaman en iyi doğrulukta tahmin yapan modelin PLS metodu ve NIR spektrumları kullanıldığında elde edildiği görülmüştür. Bu modeli oluşturmak için “SNV” ve “1. Dereceden türev (order: 3, window: 13 pt, incl only, tails: weighted)” ön işlemleri uygulanmıştır. Sulu bölgede yetiştirilen ekmeklik buğdaydan elde edilen unlara ait % kuru gluten değeri için oluşturulan modele ait parametreler Çizelge 4.103.'de gösterilmektedir.



Çizelge 4.103. SBE unlara ait % kuru gluten değeri için seçilen modele ait parametreler

|                          |       |
|--------------------------|-------|
| RMSEP                    | 0,5   |
| RMSEC                    | 0,1   |
| RMSECV                   | 0,9   |
| R <sup>2</sup> CV        | 0,882 |
| LV                       | 8     |
| % hata (kalibrasyon)     | 0,4   |
| % hata (validasyon)      | 3,7   |
| Veri Sayısı (kal.- val.) | 32-13 |

Gluten analiz parametreleri için seçilen modellerin % hata değerlerinin % 5'den küçük olması ve R<sup>2</sup> değerlerinin bire yeterince yakın olması nedenleriyle modellerin tahmin yapmada kullanılabilir olduğu söylenebilir.

#### 4.6.5 Renk Analiz Parametrelerinin Değerlendirilmesi

Sulu bölge ekmeklik buğday unlara ait renk  $L^*$  değerinin tahmin edilmesi için yapay sinir ağları, PLS metodu ve MPLS metodu kullanılmıştır. NIR ve MIR spektrumlarına farklı ön işlemler ve matematiksel işlemler uygulanmıştır. Elde edilen kalibrasyon modellerine ait parametreler Çizelge 4.104.'de verilmektedir.

Çizelge 4.104. SBE un örneklerine ait renk  $L^*$  değeri için oluşturulan modellere ait parametreler

| Spektrum | Metot | R <sup>2</sup> <sub>CAL</sub> | R <sup>2</sup> <sub>VAL</sub> | Eğim  | % Hata<br>(kal.) | % Hata<br>(val.) | Veri<br>Sayısı |
|----------|-------|-------------------------------|-------------------------------|-------|------------------|------------------|----------------|
| NIR      | PLS   | 0,988                         | 0,929                         | 1,000 | 0,2              | 0,8              | 33-11          |
|          | MPLS  | 0,945                         | 0,921                         | 1,000 | 0,4              | 0,5              | 33-11          |
|          | ANN   | 0,603                         | 0,843                         | 0,999 | 0,9              | 0,8              | 33-11          |
| MIR      | PLS   | 0,976                         | 0,922                         | 1,000 | 0,3              | 0,4              | 31-12          |
|          | MPLS  | 0,936                         | 0,873                         | 1,000 | 0,4              | 0,7              | 31-12          |
|          | ANN   | 0,882                         | 0,769                         | 0,999 | 0,5              | 0,8              | 31-12          |

SBE un örneklerine ait renk  $L^*$  değeri için geliştirilen kalibrasyon modelleri en düşük % hata değeri ve en yüksek R<sup>2</sup> değeri bazında karşılaştırıldıklarında en doğru tahmini yapan modelin NIR spektrumları ve PLS metodu kullanıldığında

elde edildiği görülmüştür. Bu model oluşturulurken kullanılan ön işlemler sırasıyla “Log Decay Scaling (scale = 0.330)” ve “EMSC (Extended Scatter Correction)”dir. Seçilen modele ait parametreler Çizelge 4.105.’de gösterilmektedir.

Çizelge 4.105. SBE un örneklerine ait renk  $L^*$  değeri için seçilen modele ait parametreler

|                          |       |
|--------------------------|-------|
| RMSEP                    | 0,9   |
| RMSEC                    | 0,2   |
| RMSECV                   | 1,3   |
| $R^2$ CV                 | 0,652 |
| LV                       | 9     |
| % hata (kalibrasyon)     | 0,2   |
| % hata (validasyon)      | 0,8   |
| Veri Sayısı (kal.- val.) | 33-11 |

Sulu bölgede yetiştirilen ekmeklik buğday un örneklerine ait renk  $a^*$  değerinin tahmin edilmesi için yapay sinir ağları, MPLS metodu ve PLS metodu kullanılmış ve NIR/MIR spektrumlarına farklı ön işlemler ve matematiksel işlemler uygulanmıştır. Elde edilen modellere ait parametreler Çizelge 4.106.’da verilmektedir.

Çizelge 4.106. SBE un örneklerine ait renk  $a^*$  değeri için oluşturulan modellere ait parametreler

| Spektrum | Metot | $R^2_{CAL}$ | $R^2_{VAL}$ | Eğim  | % Hata (kal.) | % Hata (val.) | Veri Sayısı |
|----------|-------|-------------|-------------|-------|---------------|---------------|-------------|
| NIR      | PLS   | 0,964       | 0,942       | 0,998 | 3,4           | 4,6           | 32-11       |
|          | MPLS  | 0,987       | 0,922       | 0,999 | 2,2           | 4,9           | 32-12       |
|          | ANN   | 0,807       | 0,861       | 0,992 | 7,5           | 6,3           | 32-11       |
| MIR      | PLS   | 0,916       | 0,885       | 0,996 | 5,3           | 7,3           | 32-12       |
|          | MPLS  | 0,900       | 0,823       | 0,996 | 5,9           | 6,5           | 32-11       |
|          | ANN   | 0,843       | 0,859       | 0,993 | 7,0           | 6,9           | 32-12       |

Sulu bölge ekmeklik buğday un örneklerine ait renk  $a^*$  değeri için geliştirilen kalibrasyon modelleri incelendiği zaman en yüksek  $R^2$  değeri ve en düşük % hata

oranına sahip modelin PLS metodu ve NIR spektrumları kullanıldığında elde edildiği görülmüştür. Bu model oluşturulurken “1. Dereceden türev (order: 2, window: 15 pt, incl only, tails: polyinterp)” ön işleme uygulanmıştır. SBE un örneklerine ait renk a\* değeri için seçilen modele ait parametreler Çizelge 4.107.’de gösterilmektedir.

Çizelge 4.107. SBE un örneklerine ait renk a\* değeri için seçilen modele ait parametreler

|                          |       |
|--------------------------|-------|
| RMSEP                    | 0,1   |
| RMSECV                   | 0,2   |
| RMSEC                    | 0,1   |
| R <sup>2</sup> CV        | 0,703 |
| % hata (kalibrasyon)     | 3,4   |
| % hata (validasyon)      | 4,6   |
| Veri Sayısı (kal.- val.) | 32-11 |

Sulu bölgede yetiştirilen buğdaylardan elde edilen un örneklerine ait renk b\* değeri NIR/MIR spektrumları ve PLS metodu, MPLS metodu ve yapay sinir ağları kullanılarak tahmin edilmeye çalışılmıştır. Bunun için spektrumlara farklı ön işlemler ve matematiksel işlemler uygulanmıştır. Elde edilen kalibrasyon modellerine ait parametreler Çizelge 4.108.’de verilmektedir.

Çizelge 4.108. SBE un örneklerine ait renk b\* değeri için oluşturulan modellere ait parametreler

| Spektrum | Metot | R <sup>2</sup> <sub>CAL</sub> | R <sup>2</sup> <sub>VAL</sub> | Eğim  | % Hata (kal.) | % Hata (val.) | Veri Sayısı |
|----------|-------|-------------------------------|-------------------------------|-------|---------------|---------------|-------------|
| NIR      | PLS   | 0,926                         | 0,849                         | 0,998 | 3,1           | 7,1           | 32-11       |
|          | MPLS  | 0,797                         | 0,813                         | 0,996 | 5,1           | 5,9           | 30-12       |
|          | ANN   | 0,179                         | 0,389                         | 0,989 | 8,5           | 7,3           | 32-11       |
| MIR      | PLS   | 0,833                         | 0,725                         | 0,997 | 5,1           | 6,0           | 31-12       |
|          | MPLS  | 0,716                         | 0,605                         | 0,995 | 5,9           | 6,5           | 31-12       |
|          | ANN   | 0,731                         | 0,584                         | 0,995 | 5,5           | 6,3           | 31-12       |

Sulu bölge ekmeklik buğday un örneklerine ait renk b\* değeri için kurulan modeller incelendiği zaman en yüksek R<sup>2</sup> değerine sahip modelin PLS metodu ve NIR spektrumları kullanıldığında elde edildiği görülmüştür. Bu modelin oluşturulmasında “SNV” ve “2. Dereceden türev (order: 3, window: 11 pt, incl only, tails: weighted)” ön işlemleri kullanılmıştır. Elde edilen modele ait parametreler Çizelge 4.109.’de gösterilmektedir.

Çizelge 4.109. SBE un örneklerine ait renk b\* değeri için seçilen modele ait parametreler

|                          |       |
|--------------------------|-------|
| RMSEP                    | 0,8   |
| RMSEC                    | 0,4   |
| RMSECV                   | 1,2   |
| R <sup>2</sup> CV        | 0,450 |
| LV                       | 5     |
| % hata (kalibrasyon)     | 3,1   |
| % hata (validasyon)      | 7,1   |
| Veri Sayısı (kal.- val.) | 32-11 |

Renk analiz parametreleri için seçilen modellerin % hata değerlerinin genel olarak % 5’den küçük olduğu görülmüştür. Fakat R<sup>2</sup> değerlerinin özellikle modellerin test edilmesi aşamasında, validasyon işlemi esnasında, elde edilen R<sup>2</sup> değerlerinin düşük olması modellerin kullanılamaz olduğunun göstergesidir.

#### 4.6.6 Farinograf Analiz parametrelerinin değerlendirilmesi

Sulu bölgede yetiştirilen buğdaylardan elde edilen ekmeklik buğday un örneklerine ait % su absorpsiyon değeri ile NIR/MIR spektrumları arasında yapay sinir ağları, PLS metodu ve MPLS metodu kullanılarak ilişki kurulmaya çalışılmıştır. Yapılan çalışmalar sonucunda farklı kalibrasyon modelleri elde edilmiştir. Modellere ait parametreler Çizelge 4.110.’da verilmektedir.

Çizelge 4.110. SBE un örneklerine ait % su absorpsiyon değeri için oluşturulan modellere ait parametreler

| Spektrum | Metot | R <sup>2</sup> <sub>CAL</sub> | R <sup>2</sup> <sub>VAL</sub> | Eğim  | % Hata<br>(kal.) | % Hata<br>(val.) | Veri<br>Sayısı |
|----------|-------|-------------------------------|-------------------------------|-------|------------------|------------------|----------------|
| NIR      | PLS   | 0,959                         | 0,946                         | 0,999 | 0,9              | 1,0              | 31-12          |
|          | MPLS  | 0,994                         | 0,951                         | 1,000 | 0,3              | 1,2              | 33-12          |
|          | ANN   | 0,747                         | 0,911                         | 0,999 | 1,9              | 1,3              | 33-12          |
| MIR      | PLS   | 0,979                         | 0,912                         | 0,999 | 0,7              | 1,5              | 32-12          |
|          | MPLS  | 0,891                         | 0,929                         | 0,999 | 1,3              | 1,4              | 33-12          |
|          | ANN   | 0,540                         | 0,613                         | 0,999 | 2,5              | 2,4              | 32-12          |

SBE un örneklerine ait % su absorpsiyon değeri için kurulan modeller incelendiğinde en yüksek doğrulukta tahmin yapan modelin NIR spektrumları ve MPLS metodu kullanıldığında elde edildiği görülmüştür. Bu modelin elde edilmesinde matematiksel işlem olarak “1. Dereceden türev” ve “smoothing(2)” uygulanmış ve “gap aralığı” olarak 4 seçilmiştir. SBE un örneklerine ait % su absorpsiyon değeri için elde edilen modele ait parametreler Çizelge 4.111.’de verilmektedir.

Çizelge 4.111. SBE un örneklerine ait % su absorpsiyon değeri için seçilen modele ait parametreler

|                          |       |
|--------------------------|-------|
| RMSECV                   | 1,6   |
| RMSEC                    | 0,2   |
| R <sup>2</sup> CV        | 0,742 |
| % hata (kalibrasyon)     | 0,3   |
| % hata (validasyon)      | 1,2   |
| Veri Sayısı (kal.- val.) | 33-12 |

Sulu bölgede yetiştirilen ekmeklik buğday un örneklerine ait gelişme süresinin tahmin edilmesi için NIR ve MIR spektrumları kullanılarak kalibrasyon modelleri oluşturulmaya çalışılmıştır. Bunun için yapay sinir ağları, PLS metodu ve MPLS metodu kullanılmış ve spektrumlara farklı ön işlemler ve matematiksel işlemler uygulanmıştır. Oluşturulan modellere ait parametreler Çizelge 4.112.’de verilmektedir.

Çizelge 4.112. SBE un örneklerine ait gelişme süresi değeri için oluşturulan modellere ait parametreler

| Spektrum | Metot | R <sup>2</sup> <sub>CAL</sub> | R <sup>2</sup> <sub>VAL</sub> | Eğim  | % Hata<br>(kal.) | % Hata<br>(val.) | Veri<br>Sayısı |
|----------|-------|-------------------------------|-------------------------------|-------|------------------|------------------|----------------|
| NIR      | PLS   | 0,952                         | 0,886                         | 0,991 | 10,6             | 17,8             | 32-11          |
|          | MPLS  | 0,376                         | 0,718                         | 0,916 | 26,9             | 15,2             | 33-12          |
|          | ANN   | 0,291                         | 0,651                         | 0,916 | 31,0             | 22,6             | 32-11          |
| MIR      | PLS   | 0,929                         | 0,896                         | 0,986 | 12,4             | 18,0             | 31-11          |
|          | MPLS  | 0,444                         | 0,846                         | 0,930 | 27,8             | 13,0             | 31-11          |
|          | ANN   | 0,836                         | 0,797                         | 0,970 | 16,2             | 18,1             | 31-11          |

Elde edilen modeller incelendiği zaman en yüksek R<sup>2</sup> değerine sahip modelin MIR spektrumları ve PLS metodu kullanıldığında elde edildiği görülmüştür. Bu model oluşturulurken “EMSC (Extended Scatter Correction)” ve “Variance (Std) Scaling” önışlemleri uygulanmıştır. Elde edilen modele ait parametreler Çizelge 4.113.’de gösterilmektedir.

Çizelge 4.113. SBE un örneklerine ait gelişme süresi değeri için seçilen modele ait parametreler

|                          |       |
|--------------------------|-------|
| RMSEP                    | 0,5   |
| RMSEC                    | 0,5   |
| RMSECV                   | 0,5   |
| R <sup>2</sup> CV        | 0,358 |
| LV                       | 7     |
| % hata (kalibrasyon)     | 12,4  |
| % hata (validasyon)      | 18,0  |
| Veri Sayısı (kal.- val.) | 31-11 |

Sulu bölgede yetiştirilen buğdaylardan elde edilen un örneklerine ait stabilite değeri ve NIR/MIR spektrumları arasında ilişki yapay sinir ağları, PLS metodu ve MPLS metodu kullanılarak kurulmaya çalışılmıştır. Fakat yapay sinir ağları ve MPLS metodunun uygulanması için WinISI programı kullanıldığında stabilite parametresi ve spektrumlar arasında ilişki kurulamamıştır. Elde edilen modellere ait parametreler Çizelge 4.114.’de verilmektedir.

Çizelge 4.114. SBE un örneklerine ait stabilite değeri için oluşturulan modellere ait parametreler

| Spektrum | Metot | R <sup>2</sup> <sub>CAL</sub> | R <sup>2</sup> <sub>VAL</sub> | Eğim  | % Hata<br>(kal.) | % Hata<br>(val.) | Veri<br>Sayısı |
|----------|-------|-------------------------------|-------------------------------|-------|------------------|------------------|----------------|
| NIR      | PLS   | 0,797                         | 0,171                         | 0,968 | 29,9             | 18,4             | 30-10          |
|          | MPLS  | -                             | -                             | -     | -                | -                | -              |
|          | ANN   | -                             | -                             | -     | -                | -                | -              |
| MIR      | PLS   | 0,694                         | 0,540                         | 0,949 | 24,8             | 23,0             | 30-9           |
|          | MPLS  | -                             | -                             | -     | -                | -                | -              |
|          | ANN   | -                             | -                             | -     | -                | -                | -              |

Sulu bölge ekmeklik buğday un örneklerine ait stabilite değeri için oluşturulan modeller karşılaştırıldığında MIR spektrumları kullanıldığında daha doğru sonuçlar alındığı söylenebilir. Bu modelin elde edilmesi için kullanılan ön işlemler “OSC (Orthogonal Signal Correction)” ve “Pareto (Sqrt Std) Scaling” dir. Elde edilen modele ait parametreler Çizelge 4.115.’de gösterilmektedir.

Çizelge 4.115. SBE un örneklerine ait stabilite değeri için seçilen modele ait parametreler

|                          |       |
|--------------------------|-------|
| RMSEP                    | 1,7   |
| RMSEC                    | 1,7   |
| RMSECV                   | 4,3   |
| R <sup>2</sup> CV        | 0,041 |
| LV                       | 5     |
| % hata (kalibrasyon)     | 24,8  |
| % hata (validasyon)      | 23,0  |
| Veri Sayısı (kal.- val.) | 30-9  |

Sulu bölge ekmeklik buğday un örneklerine ait farinograf yumuşama derecesi parametresi ve spektrumlar arasındaki ilişki PLS metodu, MPLS metodu ve yapay sinir ağları kullanılarak araştırılmıştır. Bunun için spektrumlara farklı ön işlemler ve matematiksel işlemler uygulanmıştır. Fakat yapay sinir ağları kullanıldığında spektrumlar ve yumuşama derecesi değeri arasında ilişki kurulamamıştır. Elde edilen modellere ait parametreler Çizelge 4.116.’da verilmektedir.

Çizelge 4.116. SBE un örneklerine ait yumuşama derecesi değeri için oluşturulan modellere ait parametreler

| Spektrum | Metot | R <sup>2</sup> <sub>CAL</sub> | R <sup>2</sup> <sub>VAL</sub> | Eğim  | % Hata<br>(kal.) | % Hata<br>(val.) | Veri<br>Sayısı |
|----------|-------|-------------------------------|-------------------------------|-------|------------------|------------------|----------------|
| NIR      | PLS   | 0,789                         | 0,552                         | 0,96  | 32,4             | 21,4             | 28-9           |
|          | MPLS  | 0,975                         | 0,222                         | 0,995 | 9,0              | 33,7             | 26-9           |
|          | ANN   | -                             | -                             | -     | -                | -                | -              |
| MIR      | PLS   | 0,929                         | 0,891                         | 0,985 | 16,2             | 19,9             | 26-11          |
|          | MPLS  | 0,789                         | 0,579                         | 0,964 | 24,5             | 30,8             | 27-10          |
|          | ANN   | -                             | -                             | -     | -                | -                | -              |

SBE un örneklerine ait yumuşama derecesi değerinin tahmin edilmesinde kullanılması için geliştirilen kalibrasyon modelleri % hata değeri ve R<sup>2</sup> değeri bazında karşılaştırıldığı zaman en iyi modelin MIR spektrumları ve PLS metodu kullanıldığında elde edildiği görülmüştür. Bu model oluşturulurken ön işlem olarak “Pareto (Sqrt Std) Scaling” uygulanmıştır. Elde edilen modele ait parametreler Çizelge 4.117.’de gösterilmektedir.

Çizelge 4.117. SBE un örneklerine ait yumuşama derecesi değeri için seçilen modele ait parametreler

|                          |       |
|--------------------------|-------|
| RMSEP                    | 11,1  |
| RMSEC                    | 10,9  |
| RMSECV                   | 56,2  |
| R <sup>2</sup> CV        | 0,008 |
| LV                       | 8     |
| % hata (kalibrasyon)     | 16,2  |
| % hata (validasyon)      | 19,9  |
| Veri Sayısı (kal.- val.) | 26-11 |

Farinograf analiz parametreleri için seçilen modellerin parametreleri incelendiği zaman % hata değerlerinin, % su absorpsiyon parametresi hariç, % 5’den büyük olması seçilen modellerin kullanılamaz olduğunun göstergesidir. % Su absorpsiyonu parametresi için ise R<sup>2</sup> değeri incelendiği zaman değerlerin



yeterince yüksek olmaması nedeniyle seçilen modelin kullanılamaz olduğu söylenebilir.

#### 4.6.7 Sedimentasyon Analiz Parametrelerinin Değerlendirilmesi

Sulu bölge ekmeçlik buğday un örneklerine ait Zeleny sedimentasyon parametresi PLS metodu, MPLS metodu ve yapay sinir ağıları kullanılarak kalibrasyon modelleri oluşturulup tahmin edilmeye çalışılmıştır. Bunun için NIR ve MIR spektrumlarına farklı ön işlemler ve matematiksel işlemler uygulanmıştır. Elde edilen modellere ait parametreler Çizelge 4.118.'de verilmektedir.

Çizelge 4.118. SBE un örneklerine ait Zeleny sedimentasyon değeri için oluşturulan modellere ait parametreler

| Spektrum | Metot | R <sup>2</sup> <sub>CAL</sub> | R <sup>2</sup> <sub>VAL</sub> | Eğim  | % Hata<br>(kal.) | % Hata<br>(val.) | Veri<br>Sayısı |
|----------|-------|-------------------------------|-------------------------------|-------|------------------|------------------|----------------|
| NIR      | PLS   | 0,963                         | 0,851                         | 0,998 | 4,8              | 10,1             | 31-12          |
|          | MPLS  | 0,955                         | 0,813                         | 0,997 | 4,7              | 10,1             | 32-10          |
|          | ANN   | 0,415                         | 0,394                         | 0,982 | 15,8             | 17,8             | 29-16          |
| MIR      | PLS   | 0,967                         | 0,946                         | 0,998 | 4,5              | 8,6              | 32-10          |
|          | MPLS  | 0,975                         | 0,887                         | 0,998 | 3,8              | 6,6              | 32-10          |
|          | ANN   | 0,741                         | 0,713                         | 0,995 | 11,7             | 16,2             | 30-11          |

SBE un örneklerine ait Zeleny sedimentasyon değeri için oluşturulan modeller incelendiği zaman en yüksek R<sup>2</sup> değerine sahip modelin PLS metodu ve MIR spektrumları kullanıldığında elde edildiği görülmüştür. Bu model oluşturulurken "Log Decay Scaling (scale = 0.330)" ve "Baseline (Specified points)" ön işlemleri uygulanmıştır. Elde edilen modele ait parametreler Çizelge 4.119.'da gösterilmektedir.

Çizelge 4.119. SBE un örneklerine ait Zeleny sedimentasyon değeri seçilen modele ait parametreler

|                          |       |
|--------------------------|-------|
| RMSEP                    | 4,1   |
| RMSEC                    | 1,8   |
| RMSECV                   | 6,5   |
| R <sup>2</sup> CV        | 0,612 |
| LV                       | 8     |
| % hata (kalibrasyon)     | 4,5   |
| % hata (validasyon)      | 8,6   |
| Veri Sayısı (kal.- val.) | 32-10 |

Sulu bölge ekmeklik buğday un örneklerine ait beklemeli Zeleny sedimentasyon değerinin tahmin edilmesi için NIR ve MIR spektrumlarına farklı ön işlemler ve matematiksel işlemler uygulanmış ve PLS metodu, MPLS metodu ve yapay sinir ağları kullanılmıştır. Bunun sonucunda kalibrasyon modelleri elde edilmiştir. Bu modellere ait parametreler Çizelge 4.120.'de verilmektedir.

Çizelge 4.120. SBE un örneklerine ait beklemeli Zeleny sedimentasyon değeri için oluşturulan modellere ait parametreler

| Spektrum | Metot | R <sup>2</sup> <sub>CAL</sub> | R <sup>2</sup> <sub>VAL</sub> | Eğim  | % Hata (kal.) | % Hata (val.) | Veri Sayısı |
|----------|-------|-------------------------------|-------------------------------|-------|---------------|---------------|-------------|
| NIR      | PLS   | 0,983                         | 0,919                         | 0,999 | 2,6           | 5,1           | 32-11       |
|          | MPLS  | 0,685                         | 0,862                         | 0,989 | 9,2           | 7,6           | 32-12       |
|          | ANN   | 0,379                         | 0,369                         | 0,961 | 9,8           | 10,2          | 28-15       |
| MIR      | PLS   | 0,95                          | 0,845                         | 0,998 | 4,4           | 8,4           | 32-11       |
|          | MPLS  | 0,995                         | 0,878                         | 0,999 | 1,3           | 5,3           | 32-10       |
|          | ANN   | 0,737                         | 0,733                         | 0,989 | 8,0           | 8,4           | 30-13       |

Sulu bölge ekmeklik buğday un örneklerine ait beklemeli Zeleny sedimentasyon parametresi için oluşturulan modeller incelendiğinde en yüksek R<sup>2</sup> değerine ve en düşük % hata değerine sahip modelin NIR spektrumları ve PLS metodu kullanıldığında elde edildiği görülmüştür. Bu modelin oluşturulmasında uygulanan ön işlemler "1. Dereceden türev (order: 1, window: 19 pt, incl only, tails:

polyinterp)” ve “SNV”dir. SBE un örneklerine Zeleny sedimentasyon değeri için seçilen modele ait parametreler Çizelge 4.121.’de gösterilmektedir.

Çizelge 4.121. SBE un örneklerine ait beklemeli Zeleny sedimentasyon değeri için seçilen modele ait parametreler

|                          |       |
|--------------------------|-------|
| RMSEP                    | 2,9   |
| RMSEC                    | 1,6   |
| RMSECV                   | 15,2  |
| R <sup>2</sup> CV        | 0,079 |
| LV                       | 9     |
| % hata (kalibrasyon)     | 2,6   |
| % hata (validasyon)      | 5,1   |
| Veri Sayısı (kal.- val.) | 32-11 |

Sedimentasyon analiz parametreleri için seçilen modellerin parametreleri kullanılabilirlik açısından incelendiği zaman kalibrasyon modellerinin % hata değerlerinin %5’den küçük olması ve R<sup>2</sup> değerlerinin bire yeterince yakın olması olumlu yönde etkilerken, kalibrasyon modellerinin test edilmesi sırasında validasyon için elde edilen % hata değerlerinin yüksek olması ve R<sup>2</sup> değerlerinin düşük olması olumsuz yönde etkilemektedir.

#### 4.6.8 Alveograf Analiz Parametrelerinin Değerlendirilmesi

Alveograf analizlerinde enerji (W), basınç (P), uzunluk (L), kabarma indeksi (G) ve P/G oranı parametreleri değerlendirilmiştir. PLS metodu, MPLS metodu ve yapay sinir ağları kullanılarak alveograf enerji parametresi ve NIR/MIR spektrumları arasında ilişki kurulmaya çalışılmıştır. Bunun için kullanılan programlar aracılığıyla spektrumlara farklı ön işlemler ve matematiksel işlemler uygulanmıştır. Alveograf W değeri için elde edilen modellere ait parametreler Çizelge 4.122.’de verilmektedir.

Çizelge 4.122. SBE un örneklerine ait alveograf W değeri için oluşturulan modellere ait parametreler

| Spektrum | Metot | R <sup>2</sup> <sub>CAL</sub> | R <sup>2</sup> <sub>VAL</sub> | Eğim  | % Hata<br>(kal.) | % Hata<br>(val.) | Veri<br>Sayısı |
|----------|-------|-------------------------------|-------------------------------|-------|------------------|------------------|----------------|
| NIR      | PLS   | 0,951                         | 0,911                         | 0,993 | 9,9              | 9,1              | 32-10          |
|          | MPLS  | 0,756                         | 0,572                         | 0,982 | 12,3             | 15,9             | 29-11          |
|          | ANN   | 0,623                         | 0,698                         | 0,960 | 16,1             | 21,1             | 30-14          |
| MIR      | PLS   | 0,872                         | 0,670                         | 0,987 | 11,6             | 16,8             | 31-11          |
|          | MPLS  | 0,875                         | 0,827                         | 0,992 | 10,7             | 15,1             | 28-11          |
|          | ANN   | 0,971                         | 0,564                         | 0,997 | 5,4              | 16,1             | 27-10          |

Alveograf W değeri için elde edilen modeller incelendiğinde enerji değerinin en yüksek R<sup>2</sup> ve en düşük % hata değeriyle tahmin yapan modelin PLS metodu ve NIR spektrumları kullanıldığında elde edildiği görülmüştür. Bu model oluşturulurken ön işlem olarak “Variance (Std) Scaling” ve “1. Dereceden türev (order: 2, window: 15 pt, incl only, tails: polyinterp)” uygulanmıştır. Alveograf W değeri için seçilen modele ait parametreler Çizelge 4.123.’de gösterilmektedir.

Çizelge 4.123. SBE un örneklerine ait alveograf W değeri için seçilen modelin parametreleri

|                          |       |
|--------------------------|-------|
| RMSEP                    | 22    |
| RMSEC                    | 17,5  |
| RMSECV                   | 74    |
| R <sup>2</sup> CV        | 0,247 |
| LV                       | 8     |
| % hata (kalibrasyon)     | 9,9   |
| % hata (validasyon)      | 9,1   |
| Veri Sayısı (kal.- val.) | 32-10 |

Sulu bölgede yetiştirilen buğdaylardan elde edilen un örneklerine ait alveograf basınç değerinin tahmin edilmesi için PLS metodu, MPLS metodu ve yapay sinir ağları kullanılmış ve NIR/MIR spektrumlarına farklı ön işlemler ve matematiksel işlemler uygulanmıştır. Böylece kalibrasyon modelleri geliştirilmeye çalışılmıştır. Bu modellere ait parametreler Çizelge 4.124.’de verilmektedir.

Çizelge 4.124. SBE un örneklerine ait alveograf P değeri için oluşturulan modellere ait parametreler

| Spektrum | Metot | R <sup>2</sup> <sub>CAL</sub> | R <sup>2</sup> <sub>VAL</sub> | Eğim  | % Hata<br>(kal.) | % Hata<br>(val.) | Veri<br>Sayısı |
|----------|-------|-------------------------------|-------------------------------|-------|------------------|------------------|----------------|
| NIR      | PLS   | 0,821                         | 0,755                         | 0,987 | 10,9             | 14,4             | 32-10          |
|          | MPLS  | 0,515                         | 0,529                         | 0,971 | 10,4             | 14,2             | 29-11          |
|          | ANN   | -                             | -                             | -     | -                | -                | -              |
| MIR      | PLS   | 0,939                         | 0,754                         | 0,996 | 6,8              | 12,2             | 31-11          |
|          | MPLS  | 0,693                         | 0,531                         | 0,995 | 10,0             | 11,3             | 30-12          |
|          | ANN   | 0,691                         | 0,708                         | 0,987 | 15,2             | 16,0             | 28-15          |

SBE un örnekleri için elde edilen modeller incelendiği zaman en yüksek R<sup>2</sup> değerine sahip modelin MIR spektrumları ve PLS metodu kullanıldığında oluşturulduğu görülmüştür. Bu modelin kurulmasında “Pareto (Sqrt Std) Scaling” ve “Detrend” önişlemleri kullanılmıştır. SBE un örneklerine ait alveograf P değeri için seçilen modele ait parametreler Çizelge 4.125.’de verilmektedir.

Çizelge 4.125. SBE un örneklerine ait alveograf P değeri için seçilen modele ait parametreler

|                          |       |
|--------------------------|-------|
| RMSEP                    | 1,1   |
| RMSEC                    | 0,5   |
| RMSECV                   | 3,3   |
| R <sup>2</sup> CV        | 0,002 |
| LV                       | 7     |
| % hata (kalibrasyon)     | 6,8   |
| % hata (validasyon)      | 12,2  |
| Veri Sayısı (kal.- val.) | 31-11 |

Sulu bölge ekmeçlik buğday un örneklerine ait alveograf L değeri ile NIR ve MIR spektrumları arasında PLS metodu, MPLS metodu ve yapay sinir ağıları kullanılarak ilişki kurulmaya çalışılmıştır. Kullanılan programlar aracılığı ile spektrumlara farklı önişlemler ve matematiksel işlemler uygulanmıştır. Fakat yapay sinir ağıları kullanıldığında NIR spektrumları ve alveograf L parametresi arasında

ilişki kurulamamıştır. Elde edilen kalibrasyon modelleri Çizelge 4.126.'da verilmektedir.

Çizelge 4.126. SBE un örneklerine ait alveograf L değeri için oluşturulan modellere ait parametreler

| Spektrum | Metot | R <sup>2</sup> <sub>CAL</sub> | R <sup>2</sup> <sub>VAL</sub> | Eğim  | % Hata<br>(kal.) | % Hata<br>(val.) | Veri<br>Sayısı |
|----------|-------|-------------------------------|-------------------------------|-------|------------------|------------------|----------------|
| NIR      | PLS   | 0,905                         | 0,853                         | 0,989 | 13,2             | 11,4             | 32-10          |
|          | MPLS  | 0,481                         | 0,584                         | 0,955 | 22,5             | 13,1             | 31-11          |
|          | ANN   | -                             | -                             | -     | -                | -                | -              |
| MIR      | PLS   | 0,845                         | 0,689                         | 0,844 | 13,5             | 19,9             | 31-10          |
|          | MPLS  | 0,824                         | 0,551                         | 0,983 | 13,6             | 21,5             | 31-11          |
|          | ANN   | 0,957                         | 0,725                         | 0,993 | 5,7              | 15,3             | 28-11          |

Alveograf L parametresi için geliştirilen modeller incelendiği zaman en yüksek R<sup>2</sup> değerine sahip modelin PLS metodu ve NIR spektrumları kullanıldığında elde edildiği görülmüştür. Bu modelin oluşturulmasında “Pareto (Sqrt Std) Scaling” ve “1. dereceden türev (order: 2, window: 15 pt, incl only, tails: polyinterp)” ön işlemleri birlikte uygulanmıştır. SBE un örneklerine ait alveograf L değeri için seçilen modele ait parametreler Çizelge 4.127.'de verilmektedir.

Çizelge 4.127. SBE un örneklerine ait alveograf L değeri için seçilen modele ait parametreler

|                          |       |
|--------------------------|-------|
| RMSEP                    | 1,3   |
| RMSEC                    | 0,9   |
| RMSECV                   | 3,3   |
| R <sup>2</sup> CV        | 0,172 |
| LV                       | 7     |
| % hata (kalibrasyon)     | 13,2  |
| % hata (validasyon)      | 11,4  |
| Veri Sayısı (kal.- val.) | 32-10 |

Sulu bölge ekmeklik buğday un örneklerine ait alveograf G değeri yapay sınır ağları, PLS metodu ve MPLS metodu kullanılarak NIR/MIR spektrumları üzerinden

tahmin edilmeye çalışılmıştır. Bunun için spektrumlara farklı matematiksel işlemler ve ön işlemler uygulanmıştır. Elde edilen kalibrasyon modellerine ait parametreler Çizelge 4.128.'de verilmektedir.

Çizelge 4.128. SBE un örneklerine ait alveograf G değeri için oluşturulan modellere ait parametreler

| Spektrum | Metot | R <sup>2</sup> <sub>CAL</sub> | R <sup>2</sup> <sub>VAL</sub> | Eğim  | % Hata<br>(kal.) | % Hata<br>(val.) | Veri<br>Sayısı |
|----------|-------|-------------------------------|-------------------------------|-------|------------------|------------------|----------------|
| NIR      | PLS   | 0,768                         | 0,738                         | 0,993 | 7,3              | 9,3              | 32-10          |
|          | MPLS  | 0,942                         | 0,785                         | 0,999 | 3,0              | 6,4              | 30-11          |
|          | ANN   | 0,441                         | 0,419                         | 0,991 | 10,8             | 10,4             | 29-13          |
| MIR      | PLS   | 0,796                         | 0,366                         | 0,994 | 6,9              | 9,5              | 30-12          |
|          | MPLS  | 0,322                         | 0,381                         | 0,998 | 10,3             | 7,1              | 31-11          |
|          | ANN   | 0,881                         | 0,478                         | 0,997 | 5,3              | 7,8              | 29-10          |

Alveograf G değeri için geliştirilen kalibrasyon modelleri en düşük % hata değeri ve en yüksek R<sup>2</sup> değeri bazında karşılaştırıldığında en uygun modelin MPLS metodu ve NIR spektrumları kullanıldığında elde edildiği görülmüştür. Bu modelin oluşturulması için ön işlem olarak “Weighted MSC” ve matematiksel işlem olarak “2. Dereceden türev” ve “smoothing (4)” uygulanmıştır. Gap aralığı olarak ise 4 seçilmiştir. Alveograf G değeri için seçilen modele ait parametreler Çizelge 4.129.'da verilmektedir.

Çizelge 4.129. SBE un örneklerine alveograf G değeri için seçilen modele ait parametreler

|                          |       |
|--------------------------|-------|
| RMSEC                    | 2,5   |
| RMSECV                   | 2,7   |
| R <sup>2</sup> CV        | 0,445 |
| % hata (kalibrasyon)     | 3     |
| % hata (validasyon)      | 6,4   |
| Veri Sayısı (kal.- val.) | 30-11 |

Sulu bölgede yetiştirilen ekmeçlik buğday un örneklerine ait P/G değerini tahmin etmek için kalibrasyon modellerinin geliştirilmesi amacıyla PLS metodu, MPLS

metodu ve yapay sinir ağıları kullanılmış ve NIR/MIR spektrumlarına ön işlemler ve matematiksel işlemler uygulanmıştır. Oluşturulan kalibrasyon modellerine parametreler Çizelge 4.130.'da verilmektedir.

Çizelge 4.130. SBE un örneklerine ait alveograf P/G değeri için oluşturulan modellere ait parametreler

| Spektrum | Metot | R <sup>2</sup> <sub>CAL</sub> | R <sup>2</sup> <sub>VAL</sub> | Eğim  | % Hata<br>(kal.) | % Hata<br>(val.) | Veri<br>Sayısı |
|----------|-------|-------------------------------|-------------------------------|-------|------------------|------------------|----------------|
| NIR      | PLS   | 0,833                         | 0,735                         | 0,977 | 12,6             | 14,7             | 32-10          |
|          | MPLS  | 0,225                         | 0,479                         | 0,976 | 20,7             | 14,3             | 29-10          |
|          | ANN   | 0,140                         | 0,521                         | 0,931 | 30,2             | 35,1             | 29-15          |
| MIR      | PLS   | 0,961                         | 0,819                         | 0,994 | 8,5              | 15,9             | 32-10          |
|          | MPLS  | 0,659                         | 0,281                         | 0,971 | 16,4             | 13,2             | 31-11          |
|          | ANN   | 0,506                         | 0,741                         | 0,950 | 18,8             | 24,7             | 29-14          |

Alveograf P/G değerinin tahmin edilmesi için kurulan modeller incelendiğinde en yüksek R<sup>2</sup> değerine sahip modelin MIR spektrumları ve PLS metodu kullanıldığında elde edildiği görülmüştür. Bu model için kullanılan ön işlemler sırasıyla “SNV” ve “Variance (Std) Scaling” dir. Alveograf P/G değeri için seçilen modele ait parametreler Çizelge 4.131.'de verilmektedir.

Çizelge 4.131. SBE un örneklerine ait alveograf P/G değeri için seçilen modele ait parametreler

|                          |       |
|--------------------------|-------|
| RMSEP                    | 0,9   |
| RMSEC                    | 0,4   |
| RMSECV                   | 2,0   |
| R <sup>2</sup> CV        | 0,060 |
| LV                       | 8     |
| % hata (kalibrasyon)     | 8,5   |
| % hata (validasyon)      | 15,9  |
| Veri Sayısı (kal.- val.) | 32-10 |

Alveograf analiz parametreleri için seçilen modeller incelendiği zaman % hata değerlerinin %5'den yüksek olması nedeniyle modellerin kullanılamaz olduğu



söylenbilir. Aynı zamanda modellerin  $R^2$  deęerleri de endüstriyel anlamda kullanıma elverişli deęildir.



## 5. YORUM VE TARTIŞMA

Ekmek ve makarnanın kalitesi üzerinde en önemli etken hammadde olan un ve irmiğin kalitesidir. Kullanılan unun ve irmiğin kalitesinin belirlenmesi hem insan sağlığı açısından hem de unun ticari anlamda değerinin belirlenmesi açısından önemlidir. Un veya irmiğin kalitesinin belirlenmesinde ise yaygın olarak geleneksel analizler kullanılmaktadır. Fakat geleneksel yöntemlerin birçok dezavantajı bulunmaktadır. Bunlar arasında zaman alıcı olmaları, zararlı kimyasal kullanılması, deneyimli personel tarafından yapılması, örnek kullanımına neden olmaları vb. gösterilebilir. Bu nedenlerle bilim insanları bu dezavantajların önüne geçebilecek yeni analiz metotları geliştirme arayışına girmişlerdir. IR spektroskopisi ise Dünya'da 1990'lı yıllardan beri kullanılmasına rağmen ülkemizde yeni yeni gelişmeye başlayan bir teknolojidir.

Tez kapsamında ekmeklik, makarnalık ve bisküvilik buğday kırma ve un örneklerine ait kalite parametrelerinin hızlı ve doğru bir şekilde belirlenmesinde kullanılacak kalibrasyon modellerinin geliştirilmesi amaçlanmıştır. Bu amaç doğrultusunda 2 farklı IR (NIR-MIR) bölgesinde numunelerin spektrumları alınıp kaydedilmiştir. Daha sonra 3 farklı kalibrasyon metodu kullanılarak spektrumlara ön işlemler ve matematiksel işlemler uygulanmış ve spektrumlar ile referans değerler arasında ilişki kurulmaya çalışılmıştır.

Ekmeklik buğday kırma ve un örneklerine ait kalite parametreleri için elde edilen kalibrasyon modellerinin arasından seçilen ve en yüksek doğrulukta tahmin yapma yeteneğine sahip modeller Çizelge 5.1.'da gösterilmektedir. Kalite parametreleri için seçilen modellerin kullanılabilirliği  $R^2$ , % hata ve kalibrasyon ve validasyonun ortalama hata kareleri kökü değerleri bazında değerlendirildiği zaman % protein ve % rutubet değerleri için geliştirilen modellerin yeterince hassas sonuçlar verdiği görülmüştür. % Sertlik, % yaş gluten, % kuru gluten ve % su absorpsiyonu değeri için oluşturulan modeller ise çok hassas olmamakla beraber referans yöntemlerin yerine kullanılabilir olduğu görülmüştür.

Çizelge 5.1. Ekmeklik buğday kırma ve un örneklerine ait kalite parametreleri için seçilen modellere ait parametreler

| Parametre              | Spektrum | Metot | Kalibrasyon    |        |       | Validasyon     |        |       |
|------------------------|----------|-------|----------------|--------|-------|----------------|--------|-------|
|                        |          |       | R <sup>2</sup> | % Hata | RMSEC | R <sup>2</sup> | % Hata | RMSEP |
| % Protein              | NIR      | PLS   | 0,976          | 1,4    | 0,2   | 0,963          | 1,8    | 0,3   |
| % Rutubet              | NIR      | PLS   | 0,981          | 0,9    | 0,1   | 0,942          | 1,5    | 0,2   |
| % Sertlik              | NIR      | MPLS  | 0,956          | 4,3    | 3,1   | 0,931          | 4,5    | 4,2   |
| % Yaş gluten           | NIR      | PLS   | 0,972          | 2,5    | 1,0   | 0,917          | 3,6    | 1,7   |
| % Kuru gluten          | NIR      | PLS   | 0,959          | 2,8    | 0,4   | 0,943          | 3,5    | 0,5   |
| Renk L*                | NIR      | ANN   | 0,981          | 0,2    | -     | 0,820          | 0,8    | -     |
| Renk a*                | NIR      | MPLS  | 0,954          | 3,5    | 0,1   | 0,866          | 5,7    | 0,2   |
| Renk b*                | NIR      | ANN   | 0,972          | 2      | -     | 0,833          | 3,9    | -     |
| % Su abs.              | NIR      | PLS   | 0,915          | 1      | 0,9   | 0,902          | 1,2    | 1,1   |
| Gel. süresi            | MIR      | PLS   | 0,446          | 27,3   | 1,9   | 0,264          | 32,5   | 2,3   |
| Stabilite              | NIR      | PLS   | 0,727          | 19,1   | 1,4   | 0,690          | 14,1   | 1,3   |
| Yum. derecesi          | NIR      | PLS   | 0,314          | 28,5   | 24,8  | 0,151          | 31     | 36,2  |
| Zeleny sedı.           | MIR      | PLS   | 0,856          | 9,3    | 4,3   | 0,752          | 15,2   | 8,8   |
| Beklemeli Zeleny sedı. | MIR      | MPLS  | 0,843          | 9,5    | 5,2   | 0,811          | 9,6    | 6,4   |
| W değeri               | NIR      | PLS   | 0,813          | 13     | 26,7  | 0,766          | 11,4   | 32,5  |
| P değeri               | NIR      | PLS   | 0,835          | 11,4   | 1,1   | 0,883          | 10,8   | 1,1   |
| L değeri               | NIR      | ANN   | 0,515          | 21,7   | -     | 0,614          | 18,8   | -     |
| G değeri               | NIR      | ANN   | 0,907          | 4,1    | -     | 0,528          | 8,4    | -     |
| P/G değeri             | NIR      | PLS   | 0,827          | 18,7   | 0,8   | 0,807          | 13,7   | 1,2   |

Makarnalık buğday kırma ve un örneklerine ait kalite parametrelerinin tahmin edilmesinde kullanılmak üzere oluşturulan modellerin arasından en yüksek doğrulukta sonuç veren modeller seçilmiş ve bu modellere ait parametreler Çizelge 5.2.'de gösterilmektedir. Çizelge 5.2. incelendiği zaman % protein ve % rutubet değerleri için seçilen modellerin klasik metotların yerine kullanılabilir doğrulukta sonuçlar verdiği görülmüştür. % Yaş gluten, % kuru gluten ve % su absorpsiyonu değerleri için oluşturulan modellerin ise protein ve rutubet değerleri kadar doğru sonuç vermemekle birlikte geleneksel yöntemlerin yerine kullanılabilir olduğu görülmüştür.

Çizelge 5.2.Makarnalık buğday kırma ve un örneklerine ait kalite parametreleri için seçilen modellere ait parametreler

| Parametre           | Spektrum | Metot | Kalibrasyon    |        |       | Validasyon     |        |       |
|---------------------|----------|-------|----------------|--------|-------|----------------|--------|-------|
|                     |          |       | R <sup>2</sup> | % Hata | RMSEC | R <sup>2</sup> | % Hata | RMSEP |
| % Protein           | NIR      | ANN   | 0,997          | 0,5    | -     | 0,979          | 1,5    | -     |
| % Rutubet           | NIR      | PLS   | 0,962          | 0,9    | 0,1   | 0,941          | 1,3    | 0,1   |
| % Yaş gluten        | NIR      | PLS   | 0,971          | 2,9    | 1,3   | 0,934          | 4,8    | 2     |
| % Kuru gluten       | NIR      | PLS   | 0,961          | 3,5    | 0,5   | 0,956          | 2,9    | 0,4   |
| Renk L*             | NIR      | PLS   | 0,678          | 0,3    | 0,4   | 0,651          | 0,4    | 0,4   |
| Renk a*             | MIR      | MPLS  | 0,933          | 2,8    | 0,1   | 0,731          | 6      | 0,3   |
| Renk b*             | NIR      | PLS   | 0,738          | 4,4    | 1,2   | 0,721          | 5,1    | 1,4   |
| % Su abs.           | NIR      | PLS   | 0,94           | 1      | 0,9   | 0,92           | 1      | 0,8   |
| Gel. süresi         | NIR      | ANN   | 0,942          | 10,6   | -     | 0,441          | 23,7   | -     |
| Stabilite           | MIR      | MPLS  | 0,986          | 6,1    | 0,4   | 0,774          | 29,6   | 3,7   |
| Yum. derecesi       | NIR      | PLS   | 0,799          | 19,4   | 15,8  | 0,39           | 29,4   | 22,7  |
| SDS sedim.          | NIR      | PLS   | 0,864          | 9,6    | 6     | 0,825          | 7,2    | 5,6   |
| Beklemeli SDS sedi. | NIR      | PLS   | 0,907          | 7      | 5,1   | 0,752          | 11,7   | 11,1  |

Bisküvilik buğday un örneklerinin kalite parametrelerinin tahmin edilmesinde kullanılmak üzere geliştirilen modellerin arasında R<sup>2</sup>, % hata ve kalibrasyonun ve validasyonun ortalama hata kareleri kökü değerleri bazında yapılan karşılaştırılma sonucunda seçilen modellere ait parametreler Çizelge 5.3.'de gösterilmektedir. % Protein ve % yaş gluten değerleri için seçilen modellerin parametreleri incelendiği zaman modellerin geleneksel yöntemlerin yerini alabilecek hassasiyette sonuçlar verdiği görülmüştür. % Sertlik, % kuru gluten ve % su absorpsiyonu değerleri için seçilen modellerin ise yeterine hassas olmamakla beraber klasik metotların kullanılabilir olduğu söylenebilir.

Çizelge 5.3. Bisküvilik buğday un örneklerine ait kalite parametrelerine için seçilen modellere ait parametreler

| Parametre              | Spektrum | Metot | Kalibrasyon    |        |       | Validasyon     |        |       |
|------------------------|----------|-------|----------------|--------|-------|----------------|--------|-------|
|                        |          |       | R <sup>2</sup> | % Hata | RMSEC | R <sup>2</sup> | % Hata | RMSEP |
| % Protein              | NIR      | PLS   | 0,989          | 0,7    | 0,1   | 0,956          | 1,6    | 0,2   |
| % Sertlik              | NIR      | PLS   | 0,991          | 7,2    | 1,3   | 0,956          | 9,2    | 4,1   |
| % Yaş gluten           | NIR      | PLS   | 0,998          | 0,5    | 0,2   | 0,954          | 2,3    | 0,7   |
| % Kuru gluten          | NIR      | PLS   | 0,985          | 1,6    | 0,2   | 0,928          | 3,7    | 0,3   |
| % Su abs.              | NIR      | PLS   | 0,986          | 0,3    | 0,3   | 0,944          | 0,9    | 0,6   |
| Stabilite              | MIR      | MPLS  | 0,904          | 24,2   | 1,2   | 0,79           | 23     | 2,1   |
| Gel. süresi            | MIR      | PLS   | 0,828          | 26,8   | 0,5   | 0,813          | 22,5   | 0,5   |
| Yum. derecesi          | NIR      | MPLS  | 0,25           | 30,6   | 29    | 0,56           | 18,4   | 30,4  |
| Zeleny sedi.           | MIR      | PLS   | 0,796          | 7,1    | 2,6   | 0,802          | 9,7    | 3,6   |
| Beklemeli Zeleny sedi. | MIR      | PLS   | 0,965          | 3,4    | 1,6   | 0,93           | 3,4    | 1,4   |
| W değeri               | MIR      | PLS   | 0,895          | 9,3    | 12,1  | 0,702          | 17,8   | 23,1  |
| P değeri               | MIR      | PLS   | 0,986          | 3      | 0,2   | 0,942          | 9,6    | 0,5   |
| L değeri               | MIR      | PLS   | 0,919          | 10,4   | 0,8   | 0,891          | 11     | 1,1   |
| P/G değeri             | NIR      | PLS   | 0,986          | 10,8   | 0,1   | 0,928          | 19,7   | 0,2   |
| ASTK                   | NIR      | PLS   | 0,992          | 0,5    | 0,4   | 0,978          | 1,2    | 0,9   |

Sulu bölgede yetiştirilen ekmeklik buğdaylardan elde edilen kırma ve un örneklerinin kalite parametrelerinin tahmin edilmesinde kullanılmak üzere seçilen modellere ait parametreler Çizelge 5.4.'de gösterilmektedir. Seçilen modellerin parametreleri R<sup>2</sup>, % hata ve kalibrasyonun ve validasyonun ortalama hata kareleri kökü değerleri bazında değerlendirildikleri zaman % protein, % rutubet, % yaş gluten ve % kuru gluten parametreleri için seçilen modellerin referans metotların yerine kullanılabilir hassasiyette olduğu görülmüştür. % Sertlik ve % su absorpsiyonu için seçilen modellerin ise yeterince hassas olmamakla beraber referans yöntemlerin yerini alabilir olduğu söylenebilir.

Çizelge 5.4. SBE örneklerine ait kalite parametrelerine için seçilen modellere ait parametreler

| Parametre              | Spektrum | Metot | Kalibrasyon    |        |       | Validasyon     |        |       |
|------------------------|----------|-------|----------------|--------|-------|----------------|--------|-------|
|                        |          |       | R <sup>2</sup> | % Hata | RMSEC | R <sup>2</sup> | % Hata | RMSEP |
| % Protein              | NIR      | MPLS  | 0,997          | 0,3    | 0,1   | 0,983          | 1,5    | 0,3   |
| % Rutubet              | NIR      | MPLS  | 0,983          | 0,6    | 0,1   | 0,955          | 1      | 0,2   |
| % Sertlik              | MIR      | PLS   | 0,931          | 8      | 4,4   | 0,833          | 16,8   | 8,8   |
| % Yaş gluten           | NIR      | MPLS  | 0,986          | 2,5    | 0,9   | 0,962          | 3,2    | 1,4   |
| % Kuru gluten          | NIR      | PLS   | 0,999          | 0,4    | 0,1   | 0,964          | 3,7    | 0,5   |
| Renk L*                | NIR      | PLS   | 0,988          | 0,2    | 0,2   | 0,929          | 0,8    | 0,9   |
| Renk a*                | NIR      | PLS   | 0,964          | 3,4    | 0,1   | 0,942          | 4,6    | 0,1   |
| Renk b*                | NIR      | PLS   | 0,926          | 3,1    | 0,4   | 0,849          | 7,1    | 0,8   |
| % Su abs.              | NIR      | PLS   | 0,959          | 0,9    | 0,7   | 0,946          | 1      | 0,9   |
| Gel. süresi            | MIR      | PLS   | 0,929          | 12,4   | 0,5   | 0,896          | 18     | 0,5   |
| Stabilite              | MIR      | PLS   | 0,694          | 24,8   | 1,7   | 0,54           | 23     | 1,8   |
| Yum. derecesi          | MIR      | PLS   | 0,929          | 16,2   | 10,9  | 0,891          | 19,9   | 11,1  |
| Zeleny sedi.           | MIR      | MPLS  | 0,975          | 3,8    | 1,8   | 0,887          | 6,6    | 7,3   |
| Beklemeli Zeleny sedi. | NIR      | PLS   | 0,983          | 2,6    | 1,6   | 0,919          | 5,1    | 2,9   |
| W değeri               | NIR      | PLS   | 0,951          | 9,9    | 17,5  | 0,931          | 9,1    | 22    |
| P değeri               | MIR      | PLS   | 0,939          | 6,8    | 0,5   | 0,754          | 12,2   | 1,1   |
| L değeri               | NIR      | PLS   | 0,905          | 13,2   | 0,9   | 0,853          | 11,4   | 1,3   |
| G değeri               | NIR      | MPLS  | 0,942          | 3      | 2,5   | 0,785          | 6,4    | 3     |
| P/G değeri             | MIR      | PLS   | 0,961          | 8,5    | 0,4   | 0,819          | 15,9   | 0,9   |

19 farklı kalite parametresinin tahmin edilmesinde kullanılmak üzere geliştirilen kalibrasyon modellerinde oluşturulmasında,

- üç farklı kalibrasyon programının kullanılması,
- NIR ve MIR olmak üzere 2 farklı elektromanyetik spektrum aralığında çalışılması,
- toplamda 880 numune ile çalışılması,
- saatler süren referans analizlerin 35 saniye de yapılıyor olması,
- 5 farklı lokasyonda yetiştirilen buğdaylarla çalışılması bakımından ülkemizde bu bağlamda yapılan en geniş kapsamlı çalışmadır.

Geliştirilen modeller değerlendirildiğinde ise en yüksek doğrulukta tahmin yeteneğine sahip modellerin genellikle NIR yöntemi ve PLS metodu kullanılarak elde edildiği görülmüştür. Bu yöntem için en uygun modeller ise % protein, % rutubet, % gluten ve % su absorpsiyonu parametreleri için elde edilmiştir.



## 6. ÖNERİLER

Tez kapsamında geliştirilen modeller genel olarak incelendiğinde % protein ve % rutubet parametreleri için oluşturulan kalibrasyon modellerinin geleneksel yöntemlerin yerini alabilecek seviyede tahmin etme yeteneklerinin olduğu görülmüştür. % Kuru gluten, % yaş gluten, % sertlik ve % su absorpsiyonu parametreleri için seçilen modellerin ise çok hassas olmamakla beraber yeterince doğru sonuç verdiği görülmüştür. Bu modellerin biraz daha geliştirilmesi ile birlikte geleneksel metotların yerini alabileceği söylenebilir.

Aynı zamanda renk  $L^*$ ,  $a^*$ ,  $b^*$  ve alveograf enerji (W) değeri gibi parametrelerin ise sonuçlarının çok doğru olmamakla beraber ümit verici olduğu görülmüştür. Bu modellerin daha fazla örnek eklenerek ve örneklerin yetiştirildiği lokasyonların sayısı artırılarak örnek çeşitliği sağlanıp geliştirilmesi sonucunda modellerin doğruluğunun artırılabileneceği ve referans yöntemlerin yerini alabileceği söylenebilir.

Bu tez çalışması kapsamında kalibrasyon modelleri laboratuvar ortamında ve belli miktar ve hacimde örnekler kullanılarak geliştirilmiştir. Endüstriyel anlamda düşünüldüğü zaman buğdayın öğütülme işleminin yapıldığı hat üzerinde analiz yapabilecek kalibrasyon modellerinin geliştirilebilir. Böylece son ürün elde edilmeden gerekli durumlarda müdahale edilebilir.



## KAYNAKLAR

- [1] Unal, S. S., "Hububat Teknolojisi" *Ege Üniversitesi Mühendislik Fakültesi Yayınları*, **1983**.
- [2] Taner, S., Çeri, S., Kaya, Y., Akçura, M., Ayrancı, R., Özer, E., "Bazı ekmeklik buğday (*T. aestivum* L.) genotiplerinin Orta Anadolu Bölgesi kuru koşullarında dane verimi stabilitesi," *Bitkisel Araştırma Dergisi*, vol. 2, pp. 21-26, **2004**.
- [3] Osborne, B. G., "Near-Infrared Spectroscopy in Food Analysis," **2006**.
- [4] Ertugay, M. F., Baslar, M., "Gıdaların Kalite Özelliklerinin Belirlenmesinde Yakın Kızılötesi (NIR) Spektroskopisi," *Gıda*, vol. 36, pp. 49-54, **2011**.
- [5] Stuart, B. H., *Infrared Spectroscopy: Fundamentals and Applications*: John Wiley & Sons, Ltd, **2004**.
- [6] Özkaya, H., Özkaya, B., *Öğütme teknolojisi* vol. 737: Sim Matbaacılık Ltd. Şti., **2005**.
- [7] Mevzuatı, T. B., "Türk Gıda Kodeksi Buğday Unu Tebliği (Tebliğ no:2013/9)," vol. 28606, R. G. M. G. v. Y. G. Müdürlüğü, Ed., ed. Ankara, Türkiye, **2013**.
- [8] Mevzuatı, T. B., "Türk Gıda Kodeksi İrmik Tebliği (Tebliğ no:2002/21)," vol. 24686, R. G. M. G. v. Y. G. Müdürlüğü, Ed., ed. Ankara, Türkiye, **2002**.
- [9] Ünal, S., "Buğdayda kalitenin önemi ve belirlenmesinde kullanılan yöntemler," *Hububat Ürünleri Teknolojisi Kongre ve Sergisi*, pp. 3-4, **2002**.
- [10] Bulut, S., "Ekmeklik buğdayda kalite," *Erciyes Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Dergisi*, vol. 28, pp. 441-446, **2012**.
- [11] Yeyinli, N., Kose, E., "Makarnada Kaliteyi Belirlemede Kullanılan Yöntemler," *Türkiye 9. Gıda Kongresi*, pp. 747-750, **2006**.
- [12] Evlice, A. K., Özkaya, H., "Makarnalık Buğdayda Farklı Cihazlarla Saptanan Renk Değerinin Kalite Yönünden Değerlendirilmesi," *Tarla Bitkileri Merkez Araştırma Enstitüsü Dergisi*, vol. 20, pp. 33-40, **2011**.
- [13] Sertakan, S., G., "Bisküvi ve Kraker Üretiminde Tritikale Ununun Kullanım Olanakları," *Trakya Üniversitesi - Fen Bilimleri Enstitüsü*, pp. 3-20, **2006**.
- [14] Grzybowski, R. A., Donnelly, B. J., "Cooking Properties of Spaghetti - Factors Affecting Cooking Quality," *Journal of Agricultural and Food Chemistry*, vol. 27, pp. 380-384, **1979**.
- [15] Kurtcebe, A., "Buğday Unu Komponentlerinin Kompozisyonu ve Fonksiyonları," Ziraat Fakültesi- Gıda Mühendisliği bölümü, Süleyman Demiral Üniversitesi, Isparta, **2001**.
- [16] Evlice, A. K., A., P., Keceli, A., Sanal, T., "Buğdayda Erken Generasyon Islah Materyalinin Kalitesinin Saptanmasında Kullanılan Mini SDS Sedimentasyon Yönteminin Makro SDS ve Zeleny Sedimentasyon Yöntemleri ile Karşılaştırılması," *Türkiye VII. Tarla Bitkileri Kongresi Bildiriler 1*, pp. 528-530, **2007**.

- [17] Gulec, T., E., Sonmezoglu, O., A.,Yıldırım, A., "Makarnalık Buğdaylarda Kalite ve Kaliteyi Etkileyen Faktörler," *GOÜ. Ziraat Fakültesi Dergisi*, vol. 27, pp. 113-120, **2010**.
- [18] Aydoğan, S., Akçacık, A., G., Şahin, M., Demir, B., Önmez, H.,Çeri, S., "Bazı Makarnalık Buğday Çeşitlerinin Kalite Özelliklerinin Belirlenmesi," *21*, vol. 1, pp. 1-7, **2012**.
- [19] Karaduman, Y., "Seçilmiş Yumuşak Ekmeklik Buğday Hatlarında Bisküvilik Kalite Özelliklerinin Araştırılması," Doktora Tezi, Fen Bilimleri Enstitüsü Gıda Mühendisliği Anabilim Dalı, Ankara Üniversitesi, Ankara, **2013**.
- [20] Dikici, N., Bilgiçli, N., Elgün, A.,Ertaş, N., "Unun Ekmekçilik Kalitesi ile Farklı Metotlarla Ölçülen Hamur Reolojik Özellikleri Arasındaki İlişkiler," *Gıda Dergisi*, vol. 31, **2006**.
- [21] Aydoğan, Ş., Akçacık, A. G., Şahin, M., Kaya, Y., Koç, H., Görgülü, M. N., *et al.*, "Ekmeklik Buğday Unlarında Alveograf, Farinograf ve Miksografda Ölçülen Reolojik Özellikler Arasındaki İlişkinin Belirlenmesi," *SDU Journal of the Faculty of Agriculture/SDÜ Ziraat Fakültesi Dergisi*, vol. 7, **2012**.
- [22] Şahin, M., Aydoğan, S., Göçmen Akçacık, A.,Taner, S., "Orta Anadolu İçin geliştirilmiş bazı ekmeklik buğday genotiplerinin alveograf analizi yönünden değerlendirilmesi," *Bahri Dağdaş Uluslararası Tarımsal Araştırma Enstitüsü Bitkisel Araştırma Dergisi (2009)*, vol. 2, pp. 1-9, **2009**.
- [23] Delcour, J. ,Hoseney, R. C., *Principles of Cereal Science and Technology*, Third Edition ed.: AACC Inetrnational, Inc., **2010**.
- [24] Porep, J. U., Kammerer, D. R.,Carle, R., "On-line application of near infrared (NIR) spectroscopy in food production," *Trends in Food Science & Technology*, vol. 46, pp. 211-230, Dec **2015**.
- [25] Karoui, R., Downey, G.,Blecker, C., "Mid-infrared spectroscopy coupled with chemometrics: a tool for the analysis of intact food systems and the exploration of their molecular structure-quality relationships - a review," *Chem Rev*, vol. 110, pp. 6144-68, Oct 13 **2010**.
- [26] Pasquini, C., "Near infrared spectroscopy: fundamentals, practical aspects and analytical applications," *Journal of the Brazilian Chemical Society*, vol. 14, pp. 198-219, **2003**.
- [27] Osborne, B. G., "Near-infrared spectroscopy in food analysis," *Encyclopedia of analytical Chemistry*, pp. 1-3, **2006**.
- [28] Heise, H. ,Winzen, R., "Chemometrics in Near-Infrared Spectroscopy," *Near-infrared spectroscopy: Principles, instruments, applications*, pp. 125-162, **2002**.
- [29] Naes, T., Isaksson, T., Fearn, T.,Davies, T., *A user friendly guide to multivariate calibration and classification: NIR publications*, **2002**.
- [30] Martens, H. ,Naes, T., *Multivariate calibration: John Wiley & Sons*, **1992**.
- [31] Roggo, Y., Chalus, P., Maurer, L., Lema-Martinez, C., Edmond, A.,Jent, N., "A review of near infrared spectroscopy and chemometrics in pharmaceutical technologies," *Journal of pharmaceutical and biomedical analysis*, vol. 44, pp. 683-700, **2007**.

- [32] Dinç, E., "Kemometri çok değişkenli kalibrasyon yöntemleri," *Hacettepe Üniversitesi, Eczacılık Fakültesi Dergisi*, vol. 27, pp. 61-92, **2007**.
- [33] Rinnan, Å., Nørgaard, L., van den Berg, F., Thygesen, J., Bro, R., Engelsen, S. B., "Data pre-processing," *Infrared spectroscopy for food quality analysis and control*, pp. 29-31, **2009**.
- [34] Rinnan, Å., van den Berg, F., Engelsen, S. B., "Review of the most common pre-processing techniques for near-infrared spectra," *TrAC Trends in Analytical Chemistry*, vol. 28, pp. 1201-1222, **2009**.
- [35] Ozaki, Y., Morita, S., Du, Y., "Spectral analysis," *Near-infrared spectroscopy in food science and technology*, pp. 47-72, **2007**.
- [36] Kheradmanda, S., Nematollahi, O., Ayoobia, A. R., "Clearness index predicting using an integrated artificial neural network (ANN) approach," *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, vol. 58, pp. 1357-1365, **2016**.
- [37] Kılıç, K., Onal-Ulusoy, B., Yıldırım, M., Boyacı, I. H., "Scanner-based color measurement in  $L^* a^* b^*$  format with artificial neural networks (ANN)," *European Food Research and Technology*, vol. 226, pp. 121-126, **2007**.
- [38] Kawano, S., "Sampling and sample presentation," *Near-Infrared Spectroscopy: Principles, Instruments, Applications*, pp. 115-124, **2002**.
- [39] Workman, J., "NIR spectroscopy calibration basics," in *Handbook of Near-Infrared Analysis*. vol. 35, D. A. Burns and E. W. Ciurczak, Eds., 3. ed: CRC Place, **2008**, pp. 123-150.
- [40] Romía, M. B., Bernàrdez, M. A., "Multivariate calibration for quantitative analysis," in *Infrared spectroscopy for food quality analysis and control*, D. W. Sun, Ed., ed Amsterdam, London: Elsevier/Academic Press, **2009**, pp. 51-82.
- [41] Filzmoser, P., Liebmann, B., Varmuza, K., "Repeated double cross validation," *Journal of Chemometrics*, vol. 23, pp. 160-171, **2009**.
- [42] Krstajic, D., Buturovic, L. J., Leahy, D. E., Thomas, S., "Cross-validation pitfalls when selecting and assessing regression and classification models," *Journal of cheminformatics*, vol. 6, p. 1, **2014**.
- [43] Williams, P., "Grain and Seeds," in *Near-infrared spectroscopy in food science and technology*, Y. Ozaki, W. F. McClure, and A. A. Christy, Eds., ed Hoboken: John Wiley & Sons, **2006**, pp. 163-217.
- [44] Ballabio, D., Consonni, V., "Classification tools in chemistry. Part 1: linear models. PLS-DA," *Analytical Methods*, vol. 5, pp. 3790-3798, **2013**.
- [45] Norris, K. H., Hart, J. R., Golumbic, C., "Determination of Moisture Content of seeds by NIRS of their methanol extracts," *Cereal Chemistry*, vol. 39, pp. 94-99, **1962**.
- [46] Miralbes, C., "Prediction Chemical Composition and Alveograph parameters on Wheat by NIR Transmittance," *Journal of Agricultural and Food Chemistry*, vol. 88, pp. 621-628, **2004**.
- [47] Wesley, I. J., Larroque, O., Osborne, B. G., Azudin, N., Allen, H., Skerritt, J. H., "Measurement of Gliadin and Glutenin Content of Flour by NIR Spectroscopy," *Journal of Cereal Science*, vol. 34, pp. 125-133, **2001**.

- [48] Mutlu, A. C., Boyaci, I. H., Genis, H. E., Ozturk, R., Basaran-Akgul, N., Sanal, T., *et al.*, "Prediction of wheat quality parameters using near-infrared spectroscopy and artificial neural networks," *European Food Research and Technology*, vol. 233, pp. 267-274, **2011**.
- [49] Arazuri, S., Ignacio A., J., Arias, N., Arregui, L. M., Gonzalez-Torralba, J., Jaren, C., "Rheological parameters determination using Near Infrared technology in whole wheat grain," *Journal of Food Engineering*, vol. 111, pp. 115-121, **2012**.
- [50] HRUSKOVA, M., BEDNAROVA, M., NOVOTNY, F., "Wheat flour dough rheological characteristics predicted by NIRSystems 6500," *Czech journal of food sciences*, vol. 19, pp. 213-218, **2001**.
- [51] Sinelli, N., Pagani, M. A., Lucisano, M., D'Egidio, M. G., Mariotti, M., "Prediction of semolina technological quality by FT-NIR spectroscopy," *Journal of Cereal Science*, vol. 54, pp. 218-223, **2011**.
- [52] Pujol, S., Pérez-Vendrell, A., Torrallardona, D., "Evaluation of prediction of barley digestible nutrient content with near-infrared reflectance spectroscopy (NIRS)," *Livestock Science*, vol. 109, pp. 189-192, **2007**.
- [53] Lin, C., Chen, X., Jian, L., Shi, C., Jin, X., Zhang, G., "Determination of grain protein content by near-infrared spectrometry and multivariate calibration in barley," *Food chemistry*, vol. 162, pp. 10-15, **2014**.
- [54] Bruno-Soares, A. M., Murray, I., Paterson, R. M., Abreu, J. M., "Use of near infrared reflectance spectroscopy (NIRS) for the prediction of the chemical composition and nutritional attributes of green crop cereals," *Animal Feed Science and Technology*, vol. 75, pp. 15-25, **1998**.
- [55] Cozzolino, D., Roumeliotis, S., Eglinton, J., "Prediction of starch pasting properties in barley flour using ATR-MIR spectroscopy," *Carbohydrate polymers*, vol. 95, pp. 509-514, **2013**.
- [56] Duta, D. E., Culetu, A., "Evaluation of rheological, physicochemical, thermal, mechanical and sensory properties of oat-based gluten free cookies," *Journal of Food Engineering*, vol. 162, pp. 1-8, **2015**.
- [57] Liu, H., Zhou, H., Rena, G., "Using Fourier transform near infrared spectroscopy to estimate the nutritional value in whole and milled naked oats," *Journal of Near Infrared Spectroscopy*, vol. 22, p. 9, **2014**.
- [58] Wu, J., Shi, C., "Calibration model optimization for rice cooking characteristics by near infrared reflectance spectroscopy (NIRS)," *Food chemistry*, vol. 103, pp. 1054-1061, **2007**.
- [59] Wu, J., Shi, C., "Prediction of grain weight, brown rice weight and amylose content in single rice grains using near-infrared reflectance spectroscopy," *Field Crops Research*, vol. 87, pp. 13-21, **2004**.
- [60] Ferreira, D., Galão, O., Pallone, J., Poppi, R., "Comparison and application of near-infrared (NIR) and mid-infrared (MIR) spectroscopy for determination of quality parameters in soybean samples," *Food Control*, vol. 35, pp. 227-232, **2014**.
- [61] Cocchi, M., Corbellini, M., Foca, G., Lucisano, M., Pagani, M. A., Tassi, L., *et al.*, "Classification of bread wheat flours in different quality categories by

- a wavelet-based feature selection/classification algorithm on NIR spectra," *Analytica Chimica Acta*, vol. 544, pp. 100-107, **2005**.
- [62] Cocchi, M., Foca, G., Lucisano, M., Marchetti, A., Pagani, M. A., Tassi, L., *et al.*, "Classification of cereal flours by chemometric analysis of MIR spectra," *Journal of agricultural and food chemistry*, vol. 52, pp. 1062-1067, **2004**.
- [63] Gou, P., Santos-Garces, E., Høy, M., Wold, J., Liland, K., Fulladosa, E., "Feasibility of NIR interactance hyperspectral imaging for on-line measurement of crude composition in vacuum packed dry-cured ham slices," *Meat science*, vol. 95, pp. 250-255, **2013**.
- [64] Liao, Y.-T., Fan, Y.-X., Cheng, F., "On-line prediction of fresh pork quality using visible/near-infrared reflectance spectroscopy," *Meat Science*, vol. 86, pp. 901-907, **2010**.
- [65] O'Farrell, M., Wold, J. P., Høy, M., Tschudi, J., Schulerud, H., "On-line fat content classification of inhomogeneous pork trimmings using multispectral near infrared interactance imaging," *Journal of Near Infrared Spectroscopy*, vol. 18, p. 135, **2010**.
- [66] Liao, Y., Fan, Y., Cheng, F., "On-line prediction of pH values in fresh pork using visible/near-infrared spectroscopy with wavelet de-noising and variable selection methods," *Journal of food engineering*, vol. 109, pp. 668-675, **2012**.
- [67] De Marchi, M., "On-line prediction of beef quality traits using near infrared spectroscopy," *Meat science*, vol. 94, pp. 455-460, **2013**.
- [68] Stawczyk, J., Munoz, I., Collell, C., Comaposada, J., "Control system for sausage drying based on on-line NIR aw determination," *Drying Technology*, vol. 27, pp. 1338-1343, **2009**.
- [69] Prieto, N., Roehe, R., Lavín, P., Batten, G., Andrés, S., "Application of near infrared reflectance spectroscopy to predict meat and meat products quality: A review," *Meat Science*, vol. 83, pp. 175-186, **2009**.
- [70] Ammor, M. S., Argyri, A., Nychas, G.-J. E., "Rapid monitoring of the spoilage of minced beef stored under conventionally and active packaging conditions using Fourier transform infrared spectroscopy in tandem with chemometrics," *Meat Science*, vol. 81, pp. 507-514, **2009**.
- [71] Ellis, D. I., Broadhurst, D., Goodacre, R., "Rapid and quantitative detection of the microbial spoilage of beef by Fourier transform infrared spectroscopy and machine learning," *Analytica Chimica Acta*, vol. 514, pp. 193-201, **2004**.
- [72] Ellis, D. I., Broadhurst, D., Kell, D. B., Rowland, J. J., Goodacre, R., "Rapid and quantitative detection of the microbial spoilage of meat by Fourier transform infrared spectroscopy and machine learning," *Applied and environmental microbiology*, vol. 68, pp. 2822-2828, **2002**.
- [73] Ding, H., Xu, R., "Near-infrared spectroscopic technique for detection of beef hamburger adulteration," *Journal of Agricultural and Food Chemistry*, vol. 48, pp. 2193-2198, **2000**.

- [74] Al-Jowder, O., Kemsley, E., Wilson, R., "Mid-infrared spectroscopy and authenticity problems in selected meats: a feasibility study," *Food Chemistry*, vol. 59, pp. 195-201, **1997**.
- [75] Rannou, H., Downey, G., "Discrimination of raw pork, chicken and turkey meat by spectroscopy in the visible, near-and mid-infrared ranges," *Analytical Communications*, vol. 34, pp. 401-404, **1997**.
- [76] Al-Jowder, O., Kemsley, E., Wilson, R. H., "Detection of adulteration in cooked meat products by mid-infrared spectroscopy," *Journal of agricultural and food chemistry*, vol. 50, pp. 1325-1329, **2002**.
- [77] Karoui, R., Mouazen, A. M., Dufour, É., Schoonheydt, R., De Baerdemaeker, J., "A comparison and joint use of VIS-NIR and MIR spectroscopic methods for the determination of some chemical parameters in soft cheeses at external and central zones: a preliminary study," *European food research and technology*, vol. 223, pp. 363-371, **2006**.
- [78] Karoui, R., Mouazen, A. M., Dufour, É., Pillonel, L., Picque, D., Bosset, J.-O., *et al.*, "Mid-infrared spectrometry: A tool for the determination of chemical parameters in Emmental cheeses produced during winter," *Le Lait*, vol. 86, pp. 83-97, **2006**.
- [79] Lee, S., Jeon, I., Harbers, L., "Near-infrared reflectance spectroscopy for rapid analysis of curds during cheddar cheese making," *Journal of food science*, vol. 62, pp. 53-56, **1997**.
- [80] Albanell, E., Caja, G., Such, X., Rovai, M., Salama, A. A., Casals, R., "Determination of fat, protein, casein, total solids, and somatic cell count in goat's milk by near-infrared reflectance spectroscopy," *Journal of AOAC International*, vol. 86, pp. 746-752, **2003**.
- [81] Šašić, S., Ozaki, Y., "Short-wave near-infrared spectroscopy of biological fluids. 1. Quantitative analysis of fat, protein, and lactose in raw milk by partial least-squares regression and band assignment," *Analytical Chemistry*, vol. 73, pp. 64-71, **2001**.
- [82] De Marchi, M., Dal Zotto, R., Cassandro, M., Bittante, G., "Milk coagulation ability of five dairy cattle breeds," *Journal of Dairy Science*, vol. 90, pp. 3986-3992, **2007**.
- [83] Cecchinato, A., De Marchi, M., Gallo, L., Bittante, G., Carnier, P., "Mid-infrared spectroscopy predictions as indicator traits in breeding programs for enhanced coagulation properties of milk," *Journal of Dairy Science*, vol. 92, pp. 5304-5313, **2009**.
- [84] Porep, J., Mattes, A., Nikfardjam, P., Kammerer, D., Carle, R., "Implementation of an on-line near infrared/visible (NIR/VIS) spectrometer for rapid quality assessment of grapes upon receipt at wineries," *Australian Journal of Grape and Wine Research*, vol. 21, pp. 69-79, **2015**.
- [85] Bureau, S., Ruiz, D., Reich, M., Gouble, B., Bertrand, D., Audergon, J.-M., *et al.*, "Application of ATR-FTIR for a rapid and simultaneous determination of sugars and organic acids in apricot fruit," *Food Chemistry*, vol. 115, pp. 1133-1140, **2009**.

- [86] Salguero-Chaparro, L., Baeten, V., Fernández-Pierna, J. A., Peña-Rodríguez, F., "Near infrared spectroscopy (NIRS) for on-line determination of quality parameters in intact olives," *Food chemistry*, vol. 139, pp. 1121-1126, **2013**.
- [87] Pedreschi, F., Segtnan, V., Knutsen, S., "On-line monitoring of fat, dry matter and acrylamide contents in potato chips using near infrared interactance and visual reflectance imaging," *Food Chemistry*, vol. 121, pp. 616-620, **2010**.
- [88] Salguero-Chaparro, L., Peña-Rodríguez, F., "On-line versus off-line NIRS analysis of intact olives," *LWT-Food Science and Technology*, vol. 56, pp. 363-369, **2014**.
- [89] Dupuy, N., Galtier, O., Ollivier, D., Vanloot, P., Artaud, J., "Comparison between NIR, MIR, concatenated NIR and MIR analysis and hierarchical PLS model. Application to virgin olive oil analysis," *Anal Chim Acta*, vol. 666, pp. 23-31, May 7 **2010**.
- [90] Anastasaki, E., Kanakis, C., Pappas, C., Maggi, L., Del Campo, C., Carmona, M., *et al.*, "Differentiation of saffron from four countries by mid-infrared spectroscopy and multivariate analysis," *European Food Research and Technology*, vol. 230, pp. 571-577, **2010**.
- [91] Cozzolino, D., Cynkar, W., Shah, N., Smith, P., "Technical solutions for analysis of grape juice, must, and wine: the role of infrared spectroscopy and chemometrics," *Analytical and bioanalytical chemistry*, vol. 401, pp. 1475-1484, **2011**.
- [92] Bauer, R., Nieuwoudt, H., Bauer, F. F., Kossmann, J., Koch, K. R., Esbensen, K. H., "FTIR spectroscopy for grape and wine analysis," *Analytical Chemistry*, vol. 80, pp. 1371-1379, **2008**.
- [93] International, A., "Approved Methods of Analysis," in *Method No:55-31.01. Single-Kernel Characterization System for Wheat Kernel Texture*, ed. St. Paul, MN, U.S.A., **November 3, 1999**.
- [94] International, A., "Approved Methods of Analysis," in *Method No:46-30.01*, ed. St. Paul, MN, U.S.A., **November 3, 1999**.
- [95] International, A., "Approved Methods of Analysis," in *Method No:38-12.02. Wet Gluten, Dry Gluten, Water-Binding Capacity, and Gluten Index*, ed. St. Paul, MN, U.S.A., **November 8, 2000**.
- [96] Özkaya, H., Özkaya, B., "Tahıl ve Ürünleri Analiz Yöntemleri," *Gıda Teknolojisi Derneği Yayınları*, vol. 31, p. 157, **2005**.
- [97] (ASTM), A. S. f. T. a. M., "standard practice for obtaining spectrophotometric data for object-color evaluation," in *ASTM E1164*, ed, **1987**.
- [98] Technology, I. A. f. C. S. a., "ICC Standart," in *No.116/1 Determination of the Sedimentation Value (according to Zeleny) as an Approximate Measure of Baking Quality*, ed. Vienna, Austria, **2008**.
- [99] Köksel, H., Sivri, D., Özboy, Ö., Başman, A., Karacan, H., *Hububat laboratuvarı el kitabı* vol. 47. Ankara, **2000**.

- [100] Williams, P., El-Haramein, F. J., Nakkoul, H., Rihawi, S., "Crop quality evaluation methods and guidelines," *ICARDA Technical Manual, International Center for Agricultural Research in the Dry Areas, Syria*, **1988**.
- [101] Yamazaki, W., "An alkaline water retention capacity test for the evaluation of cookie baking potentialities of soft winter wheat flours," *Cereal Chemistry*, vol. 30, pp. 242-246, **1953**.
- [102] International, A., "Alveograph Method for Soft and Hard Wheat Flour," in *Approved Methods of Analysis*, ed. USA, **1999**, p. 8.
- [103] International, A., "Approved Methods of Analysis," in *Method No:54-21.02. Rheological Behavior of Flour by Farinograph: Constant Flour Weight Procedure*, ed. St. Paul, MN, U.S.A., **January 8, 2011**.
- [104] Shuey, W., "Interpretation of the farinogram," in *The farinograph handbook*. vol. 3, B. L. D'Appolonia and W. H. Kunerth, Eds., ed USA: AACC Inc., **1984**, pp. 31-32.
- [105] Genis, H. E., "Alkollü İçeceklerde Bulunan Etanol ve Metanolün Raman Spektroskopisi ile Nicel Tayini," Yüksek Lisans, Gıda Mühendisliği, Hacettepe Üniversitesi, Ankara, **2012**.
- [106] Hell, J., Prückler, M., Danner, L., Henniges, U., Apprich, S., Rosenau, T., et al., "A comparison between near-infrared (NIR) and mid-infrared (ATR-FTIR) spectroscopy for the multivariate determination of compositional properties in wheat bran samples," *Food Control*, vol. 60, pp. 365-369, **2016**.
- [107] Miralbés, C., "Quality control in the milling industry using near infrared transmittance spectroscopy," *Food Chemistry*, vol. 88, pp. 621-628, **2004**.
- [108] Nawrocka, A., Lamorska, J., "Determination of food quality by using spectroscopic methods," *Advances in Agrophysical Research*, pp. 347-367, **2013**.
- [109] Baslar, M., Ertugay, M. F., "Determination of protein and gluten quality-related parameters of wheat flour using near-infrared reflectance spectroscopy (NIRS)," *Turkish Journal of Agriculture and Forestry*, vol. 35, pp. 139-144, **2011**.
- [110] HART, J. R., NORRIS, K. H., GOLUMBIC, C., "<determination of moisture content of seeds by nirs of their methonal extracts.pdf>," *Cereal Chem* vol. 39, pp. 94 - 99, **1961**.
- [111] Dowell, F. E., Maghirang, E. B., Xie, F., Lookhart, G. L., Pierce, R. O., Seabourn, B. W., et al., "Predicting wheat quality characteristics and functionality using near-infrared spectroscopy," *Cereal Chemistry*, vol. 83, pp. 529-536, Sep-Oct **2006**.
- [112] Cozzolino D., D. I., Kholi M., Vázquez D, "Use Of Near Infrared Reflectance Spectroscopy To evaluate Quality Characteristics In Whole-Wheat Grain," *Agricultura Técnica (Chile)*, vol. 66, pp. 370-375, **2006**.
- [113] Jirsa, O., Hrušková, M., Švec, I., "Near-infrared prediction of milling and baking parameters of wheat varieties," *Journal of Food Engineering*, vol. 87, pp. 21-25, **2008**.



- [114] Sissons, M., Osborne, B., Sissons, S., "Application of near infrared reflectance spectroscopy to a durum wheat breeding programme," *Journal of near Infrared Spectroscopy*, vol. 14, pp. 17-25, **2006**.
- [115] McCaig, T. N., "Extending the use of visible/near-infrared reflectance spectrophotometers to measure colour of food and agricultural products," *Food Research International*, vol. 35, pp. 731-736, **2002**.
- [116] KARADUMAN, Y., Arzu, A., TÜRKÖLMEZ, S., TUNCA, Z. Ş., BELEN, S., ÇAKMAK, M., *et al.*, "İleri Kademe Ekmeklik Buğday Hatlarının Bazı Teknolojik Kalite Özelliklerinin Değerlendirilmesi," *Tarla Bitkileri Merkez Araştırma Enstitüsü Dergisi*, vol. 24, **2015**.
- [117] Zhang, Q., Zhang, Y., He, Z., Pena, R., "Relationship between soft wheat quality traits and cookie quality parameters," *Zuo wu xue bao*, vol. 31, pp. 1125-1131, **2004**.



## ÖZGEÇMİŞ

### Kimlik Bilgileri

**Adı Soyadı** : Esra Zeynep Arslan  
**Doğum Yeri** : Yozgat  
**Medeni Hali** : Bekar  
**E-posta** : [zynp20937@gmail.com](mailto:zynp20937@gmail.com)  
**Adresi** : Aşağıeğlence mah. Temizel sok. no:13/1 Etlik Ankara

### Eğitim

**Lisans:** Gıda Mühendisliği, Haziran 2014

Hacettepe Üniversitesi, Ankara

### Yabancı Dil ve Düzeyi

İngilizce, iyi derece

### İş Deneyimi

**04 Haziran 2012 – 29 Haziran 2012** : Stajyer, Ankara Büyükşehir Belediyesi Halk Ekmek  
ve Un Fabrikası A.Ş., Ankara

**16 Eylül 2013 – 27 Eylül 2013** : Stajyer, Ankara Şeker Fabrikası, Ankara

**01 Kasım 2016-.....** : Gıda Mühendisi- Dış Ticaret, Bastak Gıda Mak  
Med LTD ŞTİ, Ankara

**02 Eylül 2014 - ...** : Araştırmacı, “Sanayici, Çiftçi ve Tüketici İstekleri  
Doğrultusunda Yeni Ekmeklik ve Makarnalık  
Buğday Hat ve Çeşitlerinin Geliştirilmesi” isimli proje

### Deneyim Alanları

Proje asistanlığı, proje yazımı ve takibi, cihaz kalite kontrolleri, ARGE çalışmaları.

### Tezden Üretilmiş Projeler ve Bütçesi

---

### Tezden Üretilmiş Yayınlar

---

## Tezden Üretilmiş Tebliğ ve/veya Poster Sunumu ile Katıldığı Toplantılar

---





HACETTEPE ÜNİVERSİTESİ  
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ  
YÜKSEK LİSANS/DOKTORA TEZ ÇALIŞMASI ORJİNALLİK RAPORU

HACETTEPE ÜNİVERSİTESİ  
FEN BİLİMLER ENSTİTÜSÜ  
GIDA MÜHENDİSLİĞİ ANABİLİM DALI BAŞKANLIĞI'NA

Tarih: 13./06./2018

Tez Başlığı / Konusu: Unun Kalite Parametrelerinin Yakın ve Orta Kızılötesi Spektroskopisi Kullanılarak Tahmin Edilmesi

Yukarıda başlığı/konusu gösterilen tez çalışmamın a) Kapak sayfası, b) Giriş, c) Ana bölümler d) Sonuç kısımlarından oluşan toplam 163 sayfalık kısmına ilişkin, 12/06/2018 tarihinde ~~şahım~~/tez danışmanım tarafından Turnitin adlı intihal tespit programından aşağıda belirtilen filtrelemeler uygulanarak alınmış olan orijinallik raporuna göre, tezimin benzerlik oranı % 2'dir.

Uygulanan filtrelemeler:

- 1- Kaynakça hariç
- 2- Alıntılar hariç/dâhil
- 3- 5 kelimedenden daha az örtüşme içeren metin kısımları hariç

Hacettepe Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Tez Çalışması Orijinallik Raporu Alınması ve Kullanılması Uygulama Esasları'nı inceledim ve bu Uygulama Esasları'nda belirtilen azami benzerlik oranlarına göre tez çalışmamın herhangi bir intihal içermediğini; aksinin tespit edileceği muhtemel durumda doğabilecek her türlü hukuki sorumluluğu kabul ettiğimi ve yukarıda vermiş olduğum bilgilerin doğru olduğunu beyan ederim.

Gereğini saygılarımla arz ederim.

Tarih ve İmza

Adı Soyadı: ESRA ZEYNEP ARSLAN

Öğrenci No: N14129816

Anabilim Dalı: GIDA MÜHENDİSLİĞİ

Programı: GIDA MÜHENDİSLİĞİ

Statüsü:  Y.Lisans  Doktora  Bütünleşik Dr.

13/07/2018

**DANIŞMAN ONAYI**

UYGUNDUR.

Prof. Dr. İsmail Hakkı Boyacı

(Unvan, Ad Soyad, İmza)