

## بازشناسی الگوی اسپکتروسکوپی فروسرخ نزدیک برای تفکیک غیرمخرب پرتقال‌ها براساس شاخص مزه

بهاره جمشیدی<sup>۱</sup> - سعید مینایی<sup>۲\*</sup> - عزالدین مهاجرانی<sup>۳</sup> - حسن قاسمیان<sup>۴</sup>

تاریخ دریافت: ۹۲/۸/۲۵

تاریخ پذیرش: ۹۲/۱۰/۱۴

### چکیده

در سال‌های اخیر، کاربرد اسپکتروسکوپی فروسرخ نزدیک (NIR) به‌عنوان یک روش غیر مخرب در ترکیب با روش‌های شیمی‌سنجی به‌منظور ارزیابی کیفیت محصولات کشاورزی و غذایی به‌طور گسترده‌ای مورد توجه قرار گرفته است. در روش‌های شیمی‌سنجی، آنالیزهای کیفی موضوعات مهمی هستند که می‌توانند به مسئله بازشناسی الگو نسبت داده شوند. در این پژوهش، توانایی روش‌های بازشناسی الگو در ترکیب با اسپکتروسکوپی NIR بازتابی به‌منظور تفکیک غیر مخرب مزه پرتقال‌ها بررسی شد. برای این منظور، روش‌های بازشناسی الگوی نظارت نشده و نظارت شده، خوشه‌بندی سلسله‌مراتبی (HCA) و مدل‌سازی مستقل نرم شباهت‌های طبقه (SIMCA)، به‌ترتیب برای امکان‌سنجی تفکیک واریته‌های پرتقال و طبقه‌بندی (براساس مزه آن‌ها) بر پایه اطلاعات طیفی محدوده ۱۶۵۰ - ۹۳۰ nm استفاده شدند. آنالیزهای کیفی نشان داد که طیف‌های NIR واریته‌های پرتقال به‌درستی با بازشناسی الگوی نظارت نشده HCA خوشه‌بندی شدند. همچنین، بازشناسی الگوی نظارت شده SIMCA برای طیف‌های NIR پرتقال‌ها نتایج عالی طبقه‌بندی واریته براساس شاخص BrimA را در سطح احتمال ۵٪ در بر داشت (دقت طبقه‌بندی ۹۸/۵۷٪). همچنین، طول موج‌های ۱۰۴۷/۵ nm، ۱۵۰۲ nm و ۱۴۷۵ nm سهم بیشتری نسبت به سایر طول موج‌ها در تفکیک دو طبقه بر عهده داشتند. نمونه‌های دارای مقدارهای یکسان شاخص BrimA نیز به‌درستی و با دقت طبقه‌بندی بالا (۹۵/۴۵٪) در سطح احتمال ۵٪ طبقه‌بندی شدند. قدرت تفکیک طول موج‌های ۱۴۷۵ nm، ۱۵۸۳ nm و ۱۴۳۶/۷۵ nm برای دستیابی به این طبقه‌بندی بسیار بیشتر از سایر طول موج‌ها بود. بنابراین، اسپکتروسکوپی NIR بازتابی در ترکیب با روش‌های بازشناسی الگو می‌تواند برای تشخیص سایر پارامترهای مرتبط با مزه نیز به‌کار رود.

**واژه‌های کلیدی:** اسپکتروسکوپی فروسرخ نزدیک، بازشناسی الگو، طبقه‌بندی، غیرمخرب، مزه

### مقدمه

از بیش از دو دهه گذشته، اسپکتروسکوپی فروسرخ نزدیک<sup>۵</sup> (NIR) به‌عنوان یک روش تحلیلی و عملی غیرمخرب در گستره پهناوری از علم و صنعت به‌کار گرفته شده و پیشرفت‌های اخیر تکنولوژی در طراحی سخت‌افزار و روش‌های جمع‌آوری، پردازش و تحلیل داده، توانمندی آن را دوچندان نموده است. کاربرد این روش در آنالیزهای غذایی به‌ویژه به‌منظور ارزیابی کیفیت درونی میوه‌ها و سبزی‌ها نیز بسیار مورد توجه پژوهشگران و صنعتگران قرار گرفته

است (Jamshidi *et al.*, 2011b, 2012a, 2013).

طیف NIR یک ترکیب می‌تواند اطلاعات مهمی در مورد ساختار مولکولی و طبیعت شیمیایی ماده ارائه کند؛ با این حال همیشه استخراج داده‌ها به‌طور مستقیم از طیف ممکن نیست. همچنین، طیف‌های NIR ممکن است به‌دلیل اثر پراکندگی، ناهمگن بودن بافت، نویز دستگاهی، اثرهای محیطی و غیره پیچیده‌تر شوند. بنابراین، روش‌های آماری چند متغیره<sup>۶</sup> (شیمی‌سنجی<sup>۷</sup>) برای استخراج اطلاعات مفید از یک طیف NIR نیاز هستند (Nicolai *et al.*, 2007).

در سال‌های اخیر، تلفیق روش غیرمخرب اسپکتروسکوپی NIR با روش‌های چند متغیره به‌طور گسترده‌ای در آنالیزهای کمی و تعیین ویژگی‌های درونی میوه‌ها و سبزی‌ها به‌کار گرفته شده است (Flores *et al.*, 2009; Jamshidi *et al.*, 2012c; Moghimi *et al.*,

۱- دانش‌آموخته دکتری تخصصی، دانشگاه تربیت مدرس و استادیار فعلی مؤسسه تحقیقات فنی و مهندسی کشاورزی

۲- استاد، دانشکده کشاورزی، دانشگاه تربیت مدرس

۳- استاد، پژوهشکده لیزر و پلاسما، دانشگاه شهید بهشتی

۴- استاد، دانشکده مهندسی برق و کامپیوتر، دانشگاه تربیت مدرس

\*- نویسنده مسئول: (Email: minae@modares.ac.ir)

6- Near-infrared

7- Multivariate

8- Chemometrics

$\log \frac{1}{R}$  از یک فیلتر میانگین‌گیر متحرک<sup>۲</sup> با عرض پنجره ۵ استفاده شد. نرمال سازی طیف‌ها نیز برای حذف اثرات جمعی و افزایش طیفی ناشی از پخش غیر یکنواخت نور، اندازه نمونه، و تغییر فاصله نوری به روش تصحیح پخش افزایشده<sup>۳</sup> یا خطی سازی طیف هر نمونه به طیف میانگین نمونه‌ها انجام شد (Fu et al., 2007).

پس از انجام اندازه‌گیری‌های طیفی، نمونه‌های پرتقال آب‌گیری و میزان مواد جامد حل‌شده<sup>۴</sup> آن‌ها (معرف مزه شیرین پرتقال) با یک دستگاه رفرکتومتر مدل DR-A1 و مقدار اسیدیته قابل‌تیترا<sup>۵</sup> آن‌ها برحسب اسید سیتریک (معرف مزه ترش پرتقال) به روش تیتراسیون با سود ۰/۱ نرمال اندازه‌گیری شدند. سپس، شاخص برتر مزه ترکیبی پرتقال (BrimA) مبتنی بر پارامترهای SSC و TA (که معرف مزه واقعی میوه است) از رابطه (۱) به‌دست آمد (Jordan et al., 2001).

$$\text{BrimA} = \text{SSC} - k \times (\text{TA}) \quad (1)$$

در رابطه (۱)، k ثابت حساسیت زبان<sup>۶</sup> است. مقدار این ثابت برابر ۴ در نظر گرفته شد که بیشترین همبستگی بین BrimA و امتیاز هیدونیک داورهای چشایی را برای پرتقال سبب می‌شود (Obenland et al., 2009).

آنالیزهای کیفی به‌منظور تفکیک و طبقه‌بندی واریته‌های پرتقال ابتدا براساس مزه (شاخص BrimA) و سپس براساس سایر پارامترهای مربوط به مزه، بر پایه ترکیب روش‌های بازشناسی الگو با داده‌های به‌دست آمده از آزمون‌های اسپکتروسکوپی انجام شد. در این راستا، نخست از یک روش بازشناسی الگوی نظارت نشده، آنالیز خوشه سلسله مراتبی<sup>۷</sup>، برای بررسی امکان خوشه‌بندی واریته‌ها بر پایه ویژگی‌های طیفی آن‌ها استفاده شد. به این ترتیب که، پس از حذف داده‌های پرت (برای هر واریته) و اعمال پیش پردازش ترکیبی MA+MSC بر روی طیف‌های NIR، خوشه‌بندی براساس نزدیک‌ترین همسایگی یا کوتاه‌ترین فاصله اقلیدسی<sup>۸</sup> انجام گرفت. برای این منظور، ابتدا فرض شد هر نمونه به‌تنهایی یک خوشه است؛ سپس نمونه‌ها به‌طور متوالی به هم پیوستند تا مطابق با فاصله بین آن‌ها، خوشه‌ها تشکیل شوند. به‌عبارت دیگر، ابتدا نزدیک‌ترین دو نمونه برای تشکیل یک خوشه به هم پیوستند و در مراحل سلسله مراتبی بعدی، بقیه نمونه‌ها خوشه‌بندی شدند تا یک تک‌گروه تشکیل شده از همه نمونه‌های آنالیز شده، شکل بگیرد. در ادامه آنالیزهای کیفی، از یک روش بازشناسی الگوی نظارت شده،

2010; Penchaiya et al., 2009; Pissard et al., 2013; Subedi and Walsh, 2011). از سوی دیگر، آنالیزهای کیفی که می‌توانند به مسئله بازشناسی الگو نسبت داده شوند نیز به اندازه آنالیزهای کمی در اسپکتروسکوپی NIR میوه‌ها و سبزی‌ها دارای اهمیت هستند (Cen and He, 2007). تاکنون، کاربرد این آنالیزها بر پایه اسپکتروسکوپی NIR به‌منظور تشخیص کیفی، تفکیک و طبقه‌بندی میوه‌ها براساس یک یا چند ویژگی خاص از قبیل واریته (Cao et al., 2010; Jamshidi et al., 2012b; Luo et al., 2013; Suphamitmongkol et al., 2011); آسیب‌دیدگی (Luo et al., 2013); شدت رنگ (Camps and Christen, 2009); مرحله رسیدگی (Mireei et al., 2010); و کیفیت پس از انبارداری (Manley et al., 2007) مورد توجه قرار گرفته است.

یک پژوهش مروری به بررسی تحقیقات انجام شده تاکنون در زمینه کاربرد اسپکتروسکوپی NIR در آنالیزهای کمی و کیفی مرکبات پرداخته است (Magwaza et al., 2012). با این حال و با توجه به این که کاربرد روش مذکور در آنالیزهای کمی و کیفی میوه‌های با پوست ناصاف و ضخیم مانند مرکبات به مراتب مشکل‌تر و پیچیده‌تر از کاربرد آن در میوه‌های با پوست صاف و نازک است (Jamshidi et al., 2011a, 2014)، پژوهش‌های بیشتر در این زمینه به‌منظور دستیابی به نتایج قابل اعتماد با به‌کارگیری روش‌های مختلف شیمی سنجی نیاز است. از سوی دیگر، مزه یکی از ویژگی‌های مهم میوه‌ها و سبزی‌ها است که تأثیر بسیاری در تعیین کیفیت، بازارپسندی و جلب رضایت مشتری چه برای تازه خوری و چه در صنعت فرآوری دارد. از این رو در این پژوهش، از ترکیب روش‌های بازشناسی الگوی نظارت شده و نظارت نشده با اسپکتروسکوپی NIR در محدوده طیفی ۹۳۰-۱۶۵۰ nm برای اولین بار به‌منظور بررسی امکان تفکیک و طبقه‌بندی غیرمخرب واریته‌های پرتقال (والنسیا و تامسون) براساس شاخص مزه مبتنی بر شیرینی و ترشی میوه (BrimA)، همچنین سایر پارامترهای مربوط به مزه استفاده شد.

## مواد و روش‌ها

اسپکتروسکوپی NIR بازتابی از ۳۰۰ نمونه پرتقال شامل دو واریته والنسیا و تامسون (۱۵۰ عدد از هر واریته) با استفاده از چیدمان مناسب طراحی‌شده (Jamshidi et al., 2012c) و با یک اسپکترومتر مدل EPP2000-NIR دارای قدرت تفکیک ۲/۵ nm و مجهز به آشکارساز آرایه فتودیود<sup>۱</sup> (PDA) انجام و طیف‌ها در محدوده طیفی ۹۳۰-۱۶۵۰ nm ذخیره شدند.

به‌منظور حذف اطلاعات ناخواسته پس زمینه و نویزهای تصادفی موجود در طیف‌ها، پس از تبدیل آن‌ها به طیف‌های جذبی

- 2- Moving average (MA)
- 3- Multiplicative scatter correction (MSC)
- 4- Soluble solids content (SSC)
- 5- Titratable acidity (TA)
- 6- Tongue's sensitivity constant
- 7- Hierarchical cluster analysis (HCA)
- 8- Euclidean distance

- 1- Photodiode array

بهینه مؤلفه‌های اصلی (PCs) برای هر طبقه نیز براساس سازش متوازن بین نیاز به تشریح واریانس در داده‌های اصلی و نیاز به عدم بیش برآزش مدل مشخص شد. در نهایت، توانایی مدل طبقه‌بندی SIMCA برای تفکیک نمونه‌های دسته آزمون (در قالب دقت طبقه‌بندی درست و اعتبار طبقه‌بندی)، همچنین توانایی طول موج‌های مختلف در تفکیک پرتقال‌های دارای مزه یکسان براساس شاخص BrimA بررسی شد. برای اجرای آنالیزها از نرم افزار Unscrambler X 10.1 (CAMO Software AS, Norway) استفاده شد.

## نتایج و بحث

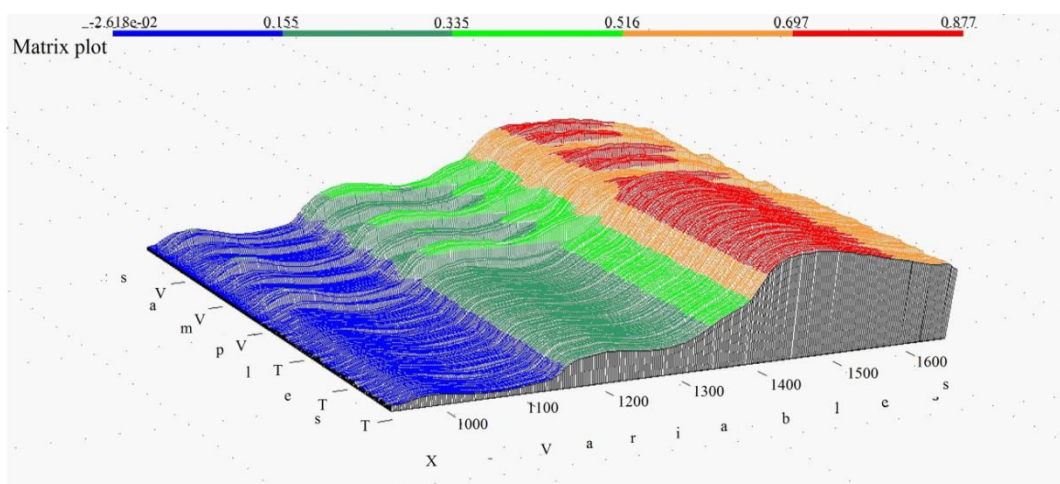
شکل ۱ طرح ماتریسی طیف‌های جذبی NIR (در محدوده طیفی ۱۶۵۰-۹۳۰ nm) همه نمونه‌های پرتقال شامل والنسیا (V) و تامسون (T) و میانگین طیف‌های جذبی دو واریته را نسبت به یکدیگر نشان می‌دهد.

مطابق شکل، طیف‌های هر دو واریته شامل چند پیک جذبی در فرکانس‌های خاص به دلیل ارتعاش‌های کششی اورتون‌های<sup>۷</sup> گروه‌های عاملی O-H، C-H و (یا) N-H متناسب با غلظت بعضی ترکیبات شیمیایی درونی میوه شامل این گروه‌های عاملی مانند قند و اسید بودند (Jamshidi et al., 2013). این نتیجه با یافته‌های سایر پژوهشگران همخوانی داشت (Cayuela and Weiland, 2010; Magwaza et al., 2012; Suphamitmongkol et al., 2013).

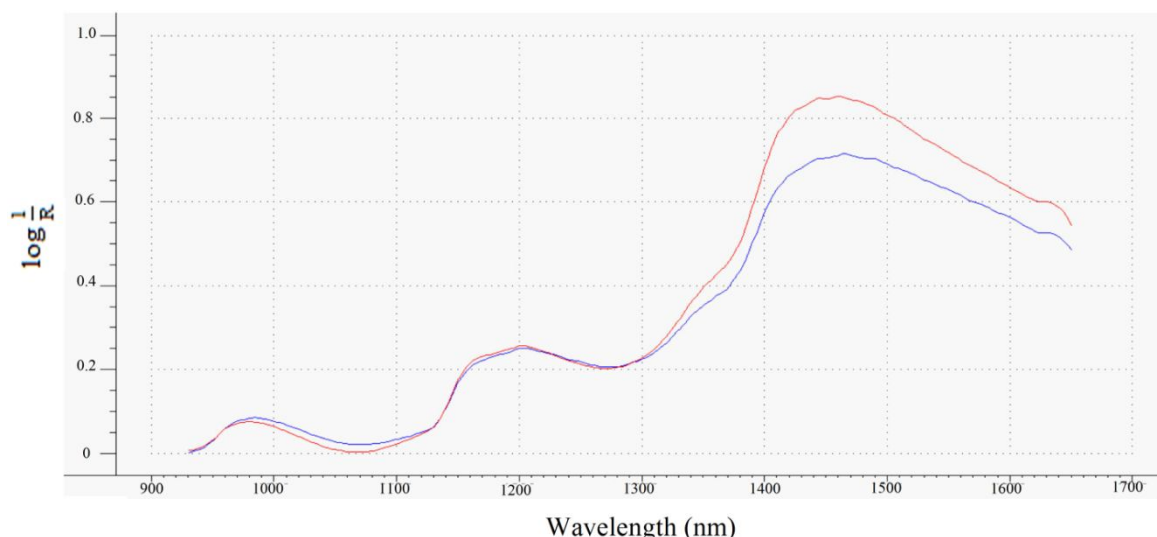
شکل ۲ ساختار درختی سلسله مراتبی به دست آمده از HCA نمونه‌های پرتقال را بر پایه طیف‌های NIR (در محدوده طیفی ۱۶۵۰-۹۳۰ nm) که براساس نزدیک‌ترین همسایگی یا کوتاه‌ترین فاصله اقلیدسی شکل گرفته‌اند، نشان می‌دهد. مطابق شکل، دو خوشه کاملاً مجزای A و B به ترتیب مربوط به واریته‌های والنسیا و تامسون، به خوبی قابل تشخیص و تفکیک هستند. همچنین طبق این ساختار، هر واریته پرتقال به خوشه‌های متراکم‌تری که از نمونه‌های همان واریته شکل گرفته‌اند، سوق می‌یابد. به این ترتیب، بر پایه اسپکتروسکوپی غیر مخرب NIR و روش بازشناسی الگو نظارت نشده HCA، توانایی تشخیص و تفکیک واریته‌های پرتقال با ویژگی‌های متفاوت مزه (والنسیا و تامسون) به خوبی امکان‌پذیر است. از سوی دیگر، الگوی خوشه‌بندی آشکار قابل مشاهده در ساختار درختی سلسله مراتبی نمونه‌ها، امکان تدوین مدل‌های طبقه‌بندی بر پایه طیف‌های NIR برای پیش‌گویی واریته نمونه‌های ناشناخته را تأیید می‌کند.

مدل سازی مستقل نرم شباهت‌های طبقه<sup>۱</sup>، برای طبقه‌بندی واریته‌های پرتقال ابتدا براساس مزه (شاخص BrimA) استفاده شد. طبق این روش، یک نمونه زمانی به یک طبقه اختصاص داده شد که به اندازه کافی با دیگر اعضای آن طبقه شباهت داشت. برای این منظور پس از حذف داده‌های پرت، نمونه‌های هر طبقه (واریته) به دسته‌های آموزش (۷۵٪ نمونه‌ها) و آزمون (۲۵٪ باقی‌مانده) تقسیم شدند. مدل سازی دسته آموزش یا واسنجی هر طبقه (واریته) بعد از اِعمال پیش پردازش ترکیبی MA+MSC با روش حداقل مربعات جزئی<sup>۲</sup> برای متغیر وابسته BrimA انجام شد. سپس، مدل‌های PLS تدوین شده برای هر طبقه با روش اعتبارسنجی متقاطع حذف تک نمونه<sup>۳</sup> ارزیابی شدند. پس از اعتبارسنجی مدل‌های واسنجی هر طبقه، تعداد بهینه متغیرهای نهان<sup>۴</sup> برای هر طبقه بر پایه داشتن کمترین ریشه میانگین مربعات خطای اعتبارسنجی متقاطع<sup>۵</sup> مشخص و در نهایت، توانایی مدل طبقه‌بندی SIMCA برای تفکیک نمونه‌های دسته آزمون، در قالب دقت طبقه‌بندی درست (صحت) و اعتبار طبقه‌بندی بررسی شد. به این ترتیب که، فاصله هر نمونه ناشناخته از هر مدل تعیین و نمونه به طبقه‌ای تعلق یافت که فاصله آن از مدل طبقه، زیر مقدار بحرانی آن باشد (Varmuza and Filzmoser, 2009). همچنین، توانایی طول موج‌های مختلف محدوده طیفی ۱۶۵۰-۹۳۰ nm در تفکیک پرتقال‌ها براساس مزه (شاخص BrimA) با بررسی انحراف استاندارد طول موج‌ها هنگام برآزش نمونه‌ها از مدل یک طبقه روی مدل طبقه دیگر، ارزیابی شد. در مرحله بعد، طبقه‌بندی SIMCA تنها برای نمونه‌های والنسیا و تامسون دارای مزه یکسان بر پایه شاخص BrimA ( $4 < \text{BrimA} < 6$ ) انجام شد. ایده اصلی در این مرحله این بود که اگر امکان طبقه‌بندی واریته‌های مختلف پرتقال (والنسیا و تامسون) با مزه یکسان براساس شاخص BrimA و بر پایه طیف‌های NIR بازنمایی آن‌ها وجود داشته باشد، روش اسپکتروسکوپی NIR قادر به تشخیص غیرمخرب دیگر پارامترهای مربوط به مزه پرتقال (مانند اسیدهای آمینه) نیز است. بنابراین پس از حذف داده‌های پرت، تقسیم بندی نمونه‌ها به دسته‌های آموزش و آزمون برای هر طبقه (در مجموعه جدید نمونه‌ها)، و پیش پردازش ترکیبی MA+MSC طیف‌ها انجام شد. مدل سازی نمونه‌های آموزش هر طبقه به صورت مجزا و بر پایه آنالیز مؤلفه‌های اصلی<sup>۶</sup> انجام و تعداد

- 1- Soft independent modeling of class analogies (SIMCA)
- 2- Partial least squares (PLS)
- 3- Leave-one-out cross validation
- 4- Latent variables (LVs)
- 5- Root mean square error of cross validation (RMSECV)
- 6- Principal component analysis (PCA)



(a)



(b)

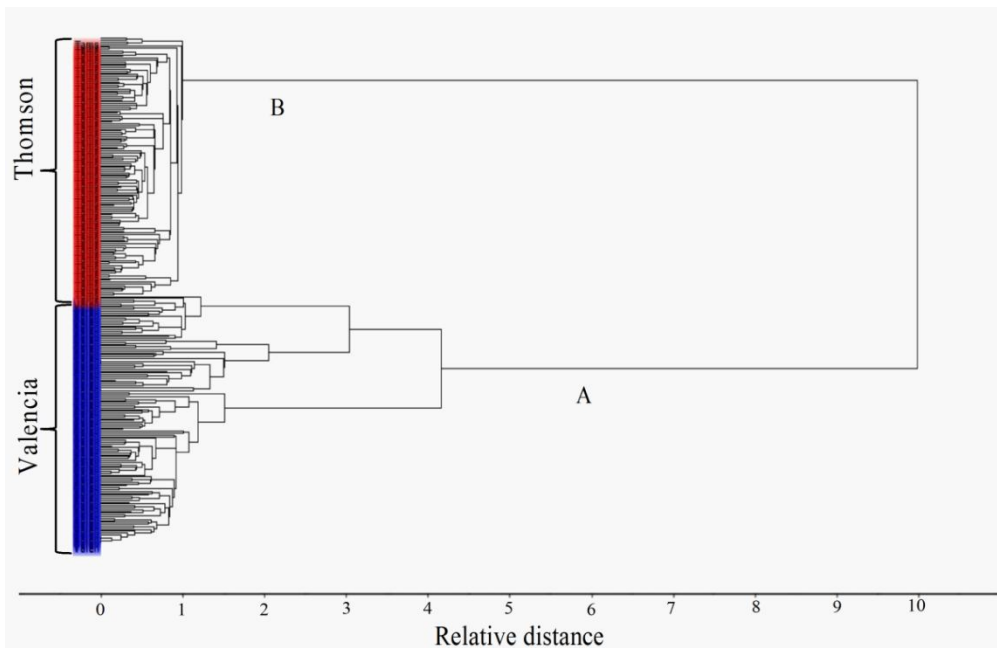
شکل ۱- (a) طرح ماتریسی، (b) میانگین طیف‌های جذب NIR واریته‌های پرتقال

Fig.1. (a) Matrix plot, (b) The mean of absorbance NIR spectra of orange varieties

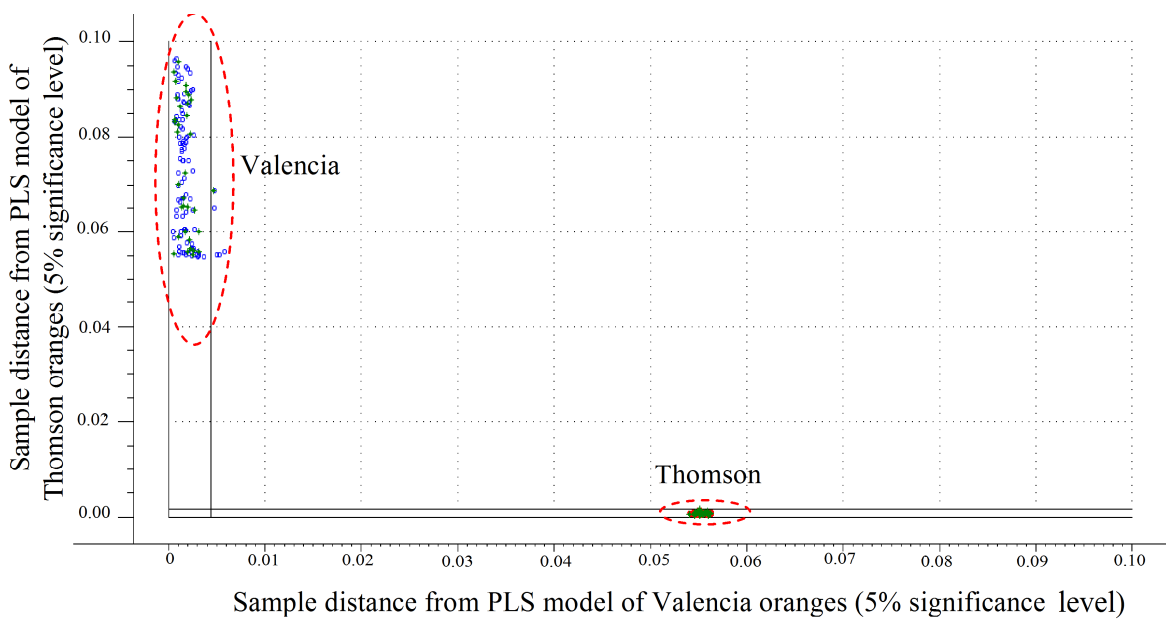
ترتیب، طبقه‌بندی نظارت شده SIMCA بر پایه طیف‌های NIR نمونه‌ها، توانایی بسیار خوبی برای تفکیک واریته‌های پرتقال براساس شاخص Brima نشان داد.

جدول ۱ نتایج طبقه‌بندی SIMCA را برای تفکیک واریته‌های پرتقال براساس مزه (شاخص Brima) مبتنی بر مدل‌های PLS تدوین شده برای هر واریته نشان می‌دهد که شامل تعداد LVS بهینه، RMSECV، ضریب همبستگی اعتبارسنجی متقاطع ( $r_{cv}$ ) در مدل‌های تدوین شده، دقت طبقه‌بندی درست نمونه‌ها (صحت طبقه‌بندی)، تعداد نمونه‌هایی که به طبقه اشتباه تعلق گرفته‌اند (False negative) و تعداد نمونه‌هایی که به‌طور هم‌زمان به دو طبقه تعلق داده شده‌اند (False positive) می‌شود.

شکل ۳ فاصله نمونه‌های پرتقال را از مدل‌های PLS تدوین شده برای واریته‌های والنسیا و تامسون در طبقه بندی SIMCA، بر پایه طیف‌های NIR نشان می‌دهد. همان‌گونه که در شکل دیده می‌شود، دو طبقه والنسیا و تامسون به‌طور کاملاً مجزا از یکدیگر قرار گرفتند و نمونه‌های هر واریته به اندازه کافی از مدل PLS مربوط به واریته دیگر فاصله داشتند. همچنین، نمونه‌های ناشناخته طبقه‌بندی شده به روش SIMCA بر پایه مدل‌های PLS تدوین شده براساس شاخص مزه ترکیبی Brima هر واریته، به‌خوبی به طبقه مربوط به خود تعلق گرفتند و یا (در صورت عدم تعلق به طبقه خود) به مدل PLS مربوط به طبقه خود نزدیک بودند. از سوی دیگر، هیچ نمونه‌ای به طبقه اشتباه یا به‌طور هم‌زمان به دو طبقه تعلق نگرفت که نشان می‌دهد طبقه‌بندی انجام شده از اعتبار ۱۰۰٪ برخوردار است. به این



شکل ۲- ساختار درختی سلسله مراتبی به دست آمده از HCA نمونه‌های پرتقال بر پایه طیف‌های NIR  
**Fig.2.** Hierarchical dendrogram obtained from HCA of orange samples based on NIR spectra



شکل ۳- فاصله نمونه‌ها از مدل‌های PLS مربوط به واریته‌های پرتقال در طبقه‌بندی SIMCA بر پایه طیف‌های NIR  
**Fig.3.** Sample distances from PLS models of orange varieties in SIMCA classification based on NIR spectra

نمونه‌ای به طبقه اشتباه یا هم‌زمان به دو طبقه اختصاص داده شود (اعتبار طبقه‌بندی ۱۰۰٪). همچنین، دقت طبقه‌بندی کل نمونه‌های ناشناخته ۹۸/۵۷٪ بود.

از این رو، طبقه‌بندی SIMCA بر پایه طیف‌های NIR توانایی تفکیک پرتقال‌ها (براساس مزه) را با دقت‌های طبقه‌بندی ۹۷/۰۶٪ برای واریته والنسیا و ۱۰۰٪ برای واریته تامسون داشت، بدون این که

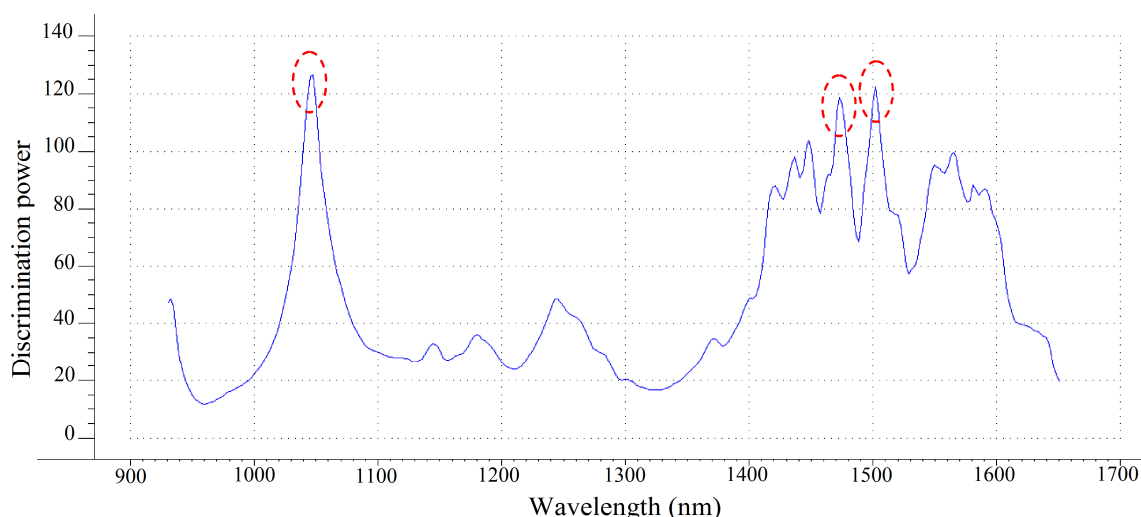
**جدول ۱-** نتایج طبقه‌بندی SIMCA برای تفکیک پرتقال‌ها براساس مزه مبتنی بر مدل‌های PLS تدوین شده برای هر طبقه

**Table 1-** SIMCA classification results for discrimination of oranges according to their taste based on developed PLS models of each class

واریته Variety	LVs	RMSECV	$r_{cv}$	دقت طبقه‌بندی (%) Classification accuracy (%)	False negative	False positive
والنسیا Valencia	5	0.44	0.86	97.06	0	0
تامسون Thomson	8	0.71	0.75	100	0	0

شکل ۴ سهم طول موج‌های مختلف را در تفکیک دو طبقه پرتقال براساس مزه (شاخص BrimA) نشان می‌دهد. مطابق شکل، تمامی طول موج‌ها در تفکیک دو طبقه مؤثر ولی قدرت تفکیک طول موج‌های ۱۰۴۷/۵ nm، ۱۵۰۲ nm و ۱۴۷۵ nm به‌منظور دستیابی به طبقه‌بندی خوب به‌دست آمده بسیار بیشتر بود. به این ترتیب و براساس چگونگی توزیع اورتون‌های پیوندهای اصلی ( Cen and He, )

شکل ۴- قدرت تفکیک طول موج‌های مختلف در طبقه‌بندی پرتقال‌ها براساس شاخص مزه BrimA

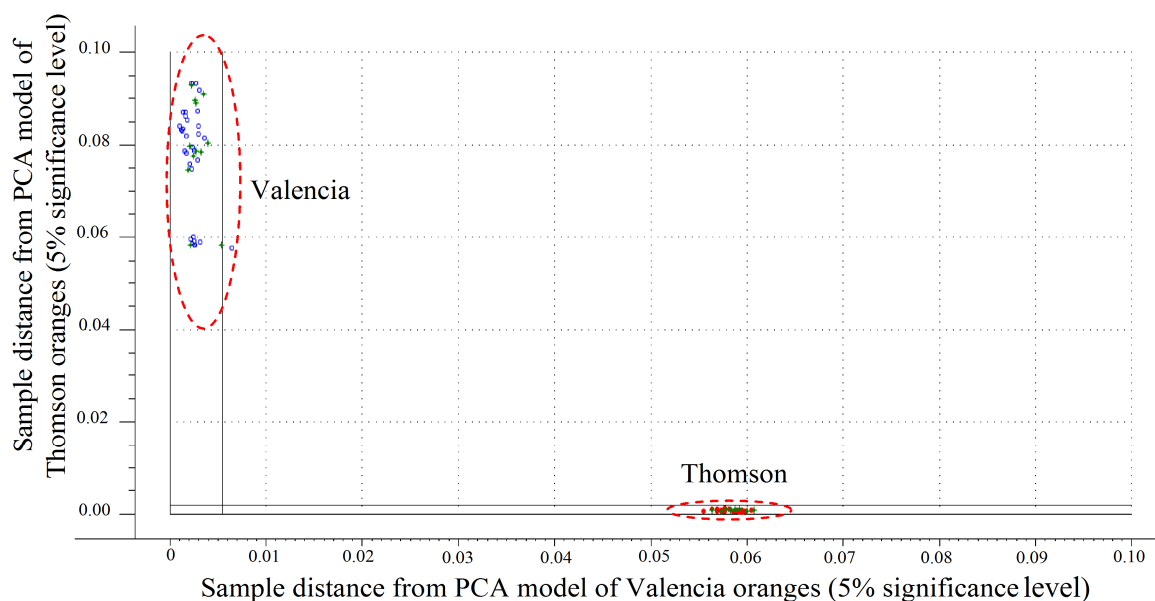


**شکل ۴-** قدرت تفکیک طول موج‌های مختلف در طبقه‌بندی پرتقال‌ها براساس شاخص مزه BrimA

**Fig.4.** Discrimination power of different wavelengths in classification of oranges according to taste index of BrimA

شکل ۵ فاصله نمونه‌های پرتقال را در طبقه‌بندی SIMCA از مدل‌های PCA تدوین شده برای دو واریته (که براساس شاخص BrimA دارای مزه یکسان هستند) بر پایه طیف‌های NIR نشان می‌دهد. دو طبقه والنسیا و تامسون با این که دارای مزه تقریباً یکسان (از نظر شاخص BrimA) بودند، به‌طور کاملاً مجزا از یکدیگر قرار گرفتند. به گونه‌ای که، نمونه‌های هر واریته به اندازه کافی از مدل PCA مربوط به واریته دیگر فاصله داشتند. از سوی دیگر، نمونه‌های ناشناخته طبقه‌بندی شده به روش SIMCA بر پایه مدل‌های PCA

تدوین شده برای هر واریته به‌خوبی به طبقه مربوط به خود تعلق گرفتند و یا (در صورت عدم تعلق به طبقه خود) به مدل PCA مربوط به طبقه خود نزدیک بودند. همچنین، هیچ نمونه‌ای به طبقه اشتباه یا به‌طور هم‌زمان به دو طبقه تعلق نگرفت (اعتبار طبقه‌بندی ۱۰۰٪). بنابراین، طبقه‌بندی نظارت شده SIMCA بر پایه طیف‌های NIR نمونه‌ها، توانایی بسیار خوبی برای تفکیک واریته‌های پرتقال که از نظر شاخص BrimA دارای مزه تقریباً یکسان بودند، نشان داد.



**شکل ۵- فاصله نمونه‌ها از مدل‌های PCA مربوط به واریته‌های پرتقال دارای مزه یکسان در طبقه‌بندی SIMCA**  
**Fig.5. Sample distances from PCA models of orange varieties having the same taste in SIMCA classification**

تفکیک دو طبقه پرتقال که دارای مزه یکسان بودند، در شکل ۷ نشان داده شده است. طبق شکل، تمامی طول موج‌ها در تفکیک دو طبقه نقش مؤثر داشتند ولی قدرت تفکیک طول موج‌های ۱۴۷۵ nm، ۱۵۸۳nm و ۱۴۳۶/۷۵ nm برای دستیابی به طبقه‌بندی خوب بسیار بیشتر بود. به این ترتیب و براساس چگونگی توزیع اورتون‌های پیوندهای اصلی (Cen and He, 2007; Magwaza *et al.*, 2012)؛ تفکیک پرتقال‌های دارای مزه یکسان (از نظر شاخص Brima می‌تواند بیشتر ناشی از اورتون‌های اول O-H و (یا) NH<sub>2</sub> (در اطراف طول موج‌های ۱۴۷۵ nm و ۱۴۳۶/۷۵ nm) و اورتون‌های اول C-H، CH<sub>2</sub> و (یا) CH<sub>3</sub> (در نزدیکی طول موج ۱۵۸۳nm) باشد.

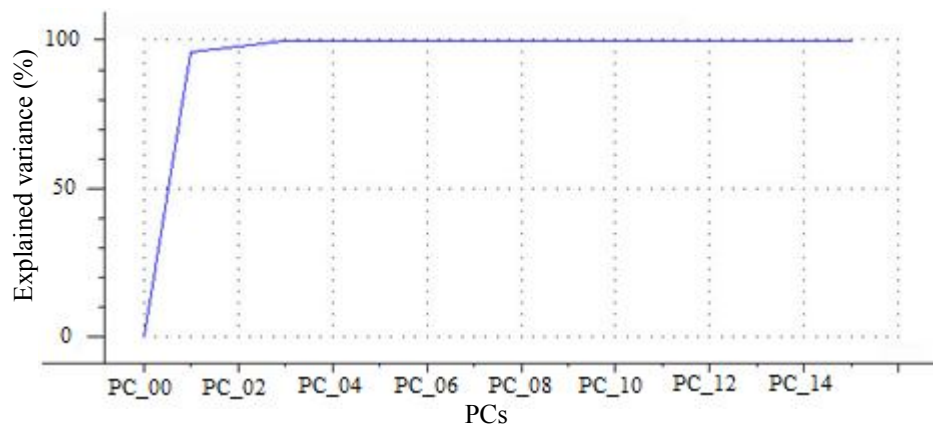
نتایج طبقه‌بندی SIMCA برای تفکیک واریته‌های پرتقال دارای مزه یکسان بر پایه طیف‌های NIR و مدل‌های PCA تدوین شده برای هر واریته، در جدول ۲ (شامل تعداد PCs بهینه در مدل‌های تدوین شده برای هر واریته (شکل ۶)، دقت طبقه‌بندی درست نمونه‌ها، نمونه‌های False positive و False negative) نشان داده شده است.

به این ترتیب، طبقه‌بندی SIMCA بر پایه طیف‌های NIR توانایی طبقه‌بندی پرتقال‌های دارای مزه یکسان را با دقت‌های طبقه‌بندی ۹۱/۶۷٪ برای واریته والنسیا و ۱۰۰٪ برای واریته تامسون داشت بدون این که نمونه‌ای به طبقه اشتباه یا هم‌زمان به دو طبقه اختصاص داده شود. در این حالت نیز، دقت طبقه‌بندی کل نمونه‌های ناشناخته ۹۵/۴۵٪ بود. سهم طول موج‌های مختلف در

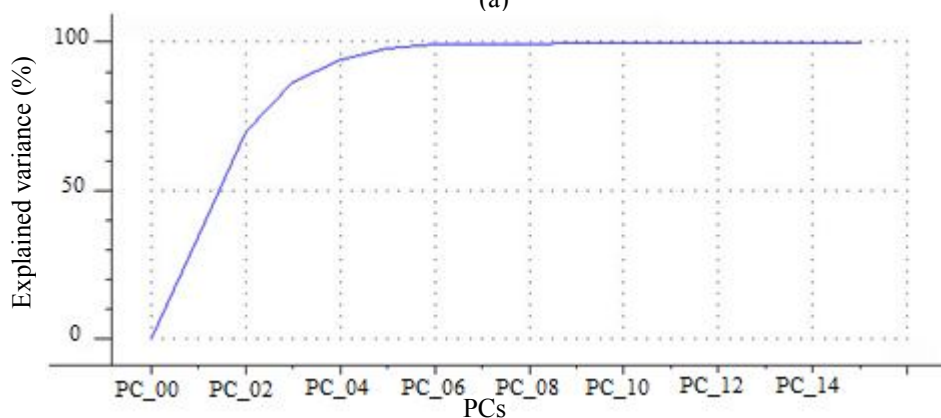
**جدول ۲- نتایج طبقه‌بندی SIMCA برای تفکیک واریته‌های پرتقال دارای مزه یکسان بر پایه طیف‌های NIR**

**Table 2- SIMCA classification results for discrimination of oranges having the same taste based on NIR spectra**

واریته Variety	PCs	دقت طبقه‌بندی (%) Classification accuracy (%)	False negative	False positive
والنسیا Valencia	3	91.67	0	0
تامسون Thomson	6	100	0	0

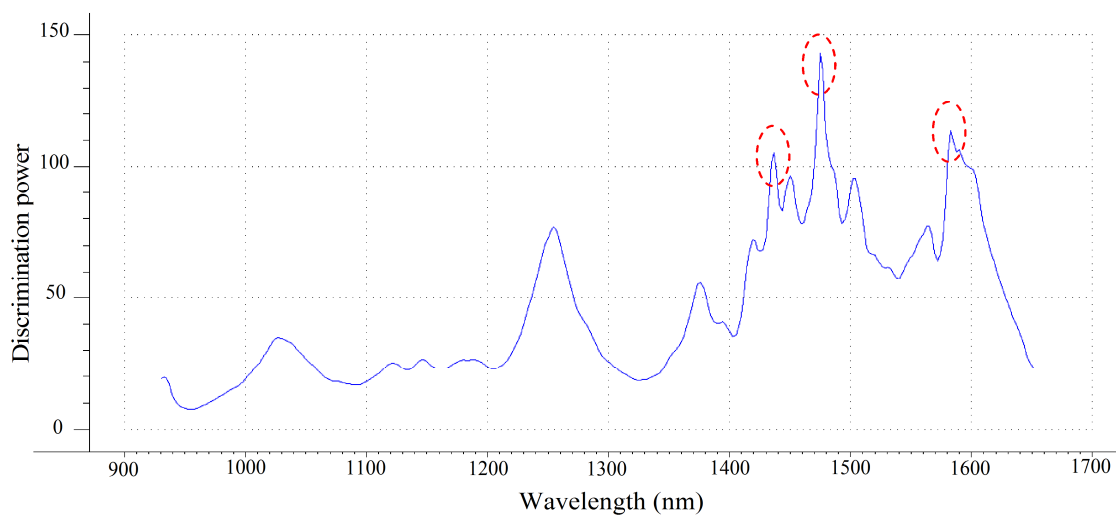


(a)



(b)

شکل ۶- واریانس توصیف شده داده‌ها در PCs مختلف برای: (a) پرتقال‌های والنسیا، (b) تامسون  
**Fig.6.** Explained variance of data in different PCs for; (a) Valencia, (b) Thomson oranges



شکل ۷- قدرت تفکیک طول موج‌های مختلف در طبقه‌بندی پرتقال‌های دارای مزه یکسان  
**Fig.7.** Discrimination power of different wavelengths in classification of oranges having the same taste



## نتیجه‌گیری

جداسازی واریته‌های پرتقال را براساس مزه (شاخص BrimA) با دقت طبقه‌بندی عالی ۹۸/۵۷٪ داشت. به گونه‌ای که، طول موج‌های ۱۰۴۷/۵ nm، ۱۵۰۲ nm و ۱۴۷۵ nm بیشترین سهم را در تفکیک دو طبقه بر عهده داشتند. از سوی دیگر، امکان تفکیک نمونه‌های پرتقال از واریته‌های مختلف که دارای مزه یکسان بودند نیز با طبقه‌بندی SIMCA و بر پایه طیف‌های NIR با دقت عالی ۹۵/۴۵٪ وجود داشت و قدرت تفکیک طول موج‌های ۱۴۷۵ nm، ۱۵۸۳ nm و ۱۴۳۶/۷۵ nm برای دستیابی به این طبقه‌بندی بسیار بیشتر بود. بنابراین، می‌توان از ترکیب روش‌های بازشناسی الگو با اسپکتروسکوپی غیرمخرب NIR برای تشخیص دیگر پارامترهای مربوط به مزه پرتقال مانند اسیدهای آمینه نیز استفاده کرد.

در این پژوهش، از ترکیب روش‌های بازشناسی الگوی نظارت شده (HCA) و نظارت نشده (SIMCA) با اسپکتروسکوپی NIR در محدوده طیفی ۹۳۰-۱۶۵۰ nm برای بررسی امکان تفکیک و طبقه‌بندی غیرمخرب پرتقال‌های والنسیا و تامسون بر پایه شاخص مزه ترکیبی (BrimA)، همچنین سایر پارامترهای مربوط به مزه (در نمونه‌های با مزه یکسان) استفاده شد. آنالیزهای کیفی برای تفکیک غیرمخرب پرتقال‌ها نشان داد که از اطلاعات طیفی نمونه‌ها در محدوده طیفی ۹۳۰-۱۶۵۰ nm (NIR) و روش بازشناسی الگو نظارت نشده HCA، می‌توان به خوبی برای تفکیک واریته‌های پرتقال با ویژگی‌های متفاوت مزه استفاده کرد. همچنین، طبقه‌بندی نظارت شده SIMCA بر پایه طیف‌های NIR توانایی تفکیک و

## منابع

1. Camps, C., and D. Christen. 2009. Non-destructive assessment of apricot fruit quality by portable visible-near infrared spectroscopy. *LWT-Food Science and Technology* 42: 1125-1131.
2. Cao, F., D. Wu, and Y. He. 2010. Soluble solids content and pH prediction and varieties discrimination of grapes based on visible-near infrared spectroscopy. *Computers and Electronics in Agriculture* 71: 15-18.
3. Cayuela, J. A., and C. Weiland. 2010. Intact orange quality prediction with two portable NIR spectrometers. *Postharvest Biology and Technology* 58 (2): 113-120.
4. Cen, H., and Y. He. 2007. Theory and application of near infrared reflectance spectroscopy in determination of food quality. *Trends in Food Science and Technology* 18: 72-83.
5. Flores, K., M. Sánchez, D. Pérez-Marín, J. Guerrero, and A. Garrido-Varo. 2009. Feasibility in NIRS instruments for predicting internal quality in intact tomato. *Journal of Food Engineering* 91: 311-318.
6. Fu, X., Y. Ying, H. Lu, H. Xu, and H. Yu. 2007. FT-NIR diffuse reflectance spectroscopy for kiwifruit firmness detection. *Sensing and Instrumentation for Food Quality and Safety* 1: 29-35.
7. Jamshidi, B., S. Minaei, E. Mohajerani, and H. Ghassemian. 2011a. Analysis of citrus peel for non-destructive determination of fruit composition by reflectance Vis/NIR spectroscopy. XXXIV CIOSTA CIGR V Conference on Efficient and Safe Production Processes in Sustainable Agriculture and Forestry. Vienna, Austria.
8. Jamshidi, B., S. Minaei, E. Mohajerani, H. Ghassemian, and H. Afkhami Ardakani. 2011b. Reflectance spectra analysis of citrus by Vis/NIR spectroscopy for non-destructive determining of inner chemical compositions. 17<sup>th</sup> Iranian Conference on Optics and Photonics, and 3<sup>rd</sup> Iranian Conference on Photonics Engineering. Kerman, Iran. (In Farsi).
9. Jamshidi, B., S. Minaei, E. Mohajerani, and H. Ghassemian. 2012a. Multivariate analysis of reflectance Vis/NIR spectra based on wavelet transform for non-destructive and detection of orange color and pH simultaneously. 7<sup>th</sup> National Congress on Agricultural Machinery Engineering and Mechanization. Shiraz, Iran. (In Farsi).
10. Jamshidi, B., S. Minaei, E. Mohajerani, and H. Ghassemian. 2012b. Vis/NIR spectroscopy for non-destructive classification of orange varieties. 7<sup>th</sup> National Congress on Agricultural Machinery Engineering and Mechanization. Shiraz, Iran. (In Farsi).
11. Jamshidi, B., S. Minaei, E. Mohajerani, and H. Ghassemian. 2012c. Reflectance Vis/NIR spectroscopy for nondestructive taste characterization of valencia oranges. *Computers and Electronics in Agriculture* 85: 64-69.
12. Jamshidi, B., S. Minaei, E. Mohajerani, and H. Ghassemian. 2013. Linear multivariate model based on

- NIR spectroscopy for non-destructive internal quality prediction of orange. 19<sup>th</sup> Iranian Conference on Optics and Photonics, and 5<sup>th</sup> Iranian Conference on Photonics Engineering. Zahedan, Iran. (In Farsi).
13. Jamshidi, B., S. Minaei, E. Mohajerani, and H. Ghassemian. 2014. Prediction of soluble solids in oranges using visible/near-infrared spectroscopy: Effect of peel. *International Journal of Food Properties* 17: 1460-1468.
  14. Jordan, R., R. Seelye, and A. McGlone. 2001. A sensory-based alternative to brix/acid ratio. *Food Technology* 55 (6): 36-44.
  15. Luo, W., S. Huan, H. Fu, G. Wen, H. Cheng, J. Zhou, H. Wu, G. Shen, and R. Yu. 2011. Preliminary study on the application of near infrared spectroscopy and pattern recognition methods to classify different types of apple samples. *Food Chemistry* 128 (2): 555-561.
  16. Luo, X., T. Takahashi, and S. Zhang. 2013. Wavelength selection in visible and near infrared spectra for detection of bruises on apples. *Advanced Science Letters* 19 (9): 2654-2657.
  17. Magwaza, L., U. Opara, H. Nieuwoudt, P. Cronje, W. Saeys, and B. Nicolaï. 2012. NIR spectroscopy applications for internal and external quality analysis of citrus fruit-A review. *Food and Bioprocess Technology* 5 (2): 425-444.
  18. Manley, M., J. Elizabeth, M. Lindie, L. Ester, and K. Martin. 2007. Prediction of soluble solids content and post-storage internal quality of Bulida apricots using near infrared spectroscopy. *Journal of Near Infrared Spectroscopy* 15: 179-188.
  19. Mireei, S. A., S. S. Mohtasebi, R. Massudi, S. Rafiee, and A. S. Arabanian. 2010. Feasibility of near infrared spectroscopy for analysis of date fruits. *International Agrophysics* 24: 351-356.
  20. Moghimi, A., M. H. Aghkhani, A. Sazgarnia, and M. Sarmad. 2010. Vis/NIR spectroscopy and chemometrics for the prediction of soluble solids content and acidity (pH) of kiwifruit. *Biosystems Engineering* 106 (3): 295-302.
  21. Nicolaï, B. M., K. Beullens, E. Bobelyn, A. Peirs, W. Saeys, K. I. Theron, and J. Lammertyn. 2007. Nondestructive measurement of fruit and vegetable quality by means of NIR spectroscopy: A review. *Postharvest Biology and Technology* 46: 99-118.
  22. Obenland, D., S. Collin, B. Mackey, J. Sievert, K. Fjeld, and M. L. Arpaia. 2009. Determinants of flavor acceptability during the maturation of navel oranges. *Postharvest Biology and Technology* 52: 156-163.
  23. Penchaiya, P., E. Bobelyn, B. E. Verlinden, B. M. Nicolaï, and W. Saeys. 2009. Non-destructive measurement of firmness and soluble solids content in bell pepper using NIR spectroscopy. *Journal of Food Engineering* 94: 267-273.
  24. Pissard, A., J. A. Fernández-Pierna, V. Baeten, G. Sinnaeve, G. Lognay, A. Mouteau, P. Dupont, A. Rondia, and M. Lateur. 2013. Non-destructive measurement of vitamin C, total polyphenol and sugar content in apples using near-infrared spectroscopy. *Journal of the Science of Food and Agriculture* 93 (2): 238-244.
  25. Subedi, P. P., and K. B. Walsh. 2011. Assessment of sugar and starch in intact banana and mango fruit by SWNIR spectroscopy. *Postharvest Biology and Technology* 62 (3): 238-245.
  26. Suphamitmongkol, W., G. Nie, R. Liu, S. Kasemsumran, and Y. Shi. 2013. An alternative approach for the classification of orange varieties based on near infrared spectroscopy. *Computers and Electronics in Agriculture* 91: 87-93.
  27. Varmuza, K., and P. Filzmoser. 2009. *Introduction to Multivariate Statistical Analysis in Chemometrics*. CRC Press. Boca Raton.