

Rapid and non-destructive estimation of apple tree NPK contents based on leaf spectral analysis

Rahim Azadnia¹, Ali Rajabipour^{2*}, Bahareh Jamshidi³, Mahmoud Omid⁴

¹ Ph.D., Biosystems Engineering Department, Faculty of Agricultural Engineering and Technology, University of Tehran, Iran

^{2*} Professor, Biosystems Engineering Department, Faculty of Agricultural Engineering and Technology, University of Tehran, Iran

³ Agricultural Engineering Research Institute, Agricultural Research Education and Extension Organization, Karaj, Iran

⁴ Professor, Biosystems Engineering Department, Faculty of Agricultural Engineering and Technology, University of Tehran, Iran

* Corresponding Author Email: arajabi@ut.ac.ir

Introduction

One of the most frequently consumed fruit in all over the world is apple. An apple fruit includes large source of minerals, fiber and several biologically compounds such as vitamin C, special phenolic compounds (natural antioxidant). The amount of nutrients plays a significant role in the growth, reproduction and performance of agricultural products and plants. By predicting these elements, chemical inputs can be accurately managed. Thus, timely and accurate monitoring and management of crop nutrition status are crucial for recommended fertilization, yield increase, and quality improvement, whilst by reducing the amount of chemical fertilizers applied, the risk of environmental degradation can be reduced. In crop plants, leaf samples are typically analyzed to diagnose nutrient deficiencies and imbalances, as well as to evaluate the effectiveness of current nutrient management programs. Thus, the main aim of this study was to non-destructively estimate the level of Nitrogen (N), Phosphorus (P) and Potassium (K) elements of apple tree leaves using Visible/Near-infrared (Vis/NIR) spectroscopy at wavelength range of 500 to 1000 nm coupled with chemometrics analysis.

Materials and Methods

This research investigated the potential of the Vis/NIR spectroscopy system with chemometrics analysis for predicting NPK nutrients of apple trees. To do so, 80 leaf samples of apple trees were randomly picked and transferred to the laboratory for spectral measurement. The Green-Wave spectrometer (StellarNet Inc, Florida, USA) utilized to collect the spectral data. In the next step, the spectral data were transferred to the laptop using the Spectra Wiz software (StellarNet Inc, Florida, USA). For this purpose, spectroscopy of apple tree leaf samples was done in intranscance mode. Furthermore, ten reflectance spectra were captured randomly on each apple tree leaf at different points. The averaged spectrum was used to determine the reflectance (R). The data was then transformed into absorbance ($\log 1/R$) for chemometrics analysis. The NPK contents were measured using reference methods following spectroscopy measurements. Then Partial Least Square (PLS) multivariate calibration models were developed based on reference measurements and spectral information with different pre-processing techniques. In order to remove the unwanted effects, various pre-processing methods were used to obtain an accurate calibration model. To evaluate the proposed models, Root Mean Square Error of

calibration and prediction sets (RMSEC and RMSEP), as well as correlation coefficient of calibration and prediction sets (r_c and r_p), and Residual Predictive Deviation (RPD) were calculated.

Results and Discussion

The statistical metrics were calculated for evaluation of PLSR model. The results indicated that the PLSR model could efficiently predicted the NPK contents with a satisfactory accuracy. The best developed model based on the standard normal variation pre-processing method in combination with the second derivative (SNV+D2) with the values of $r_c=0.9859$, $RMSEC=0.028\%$, $r_p=0.978$, $RMSEP=0.034\%$ and RPD of 7.47 was related to nitrogen prediction. The best model for prediction of P content resulted in $r_c=0.967$, $RMSEC=0.0051\%$, $r_p=0.958$, $RMSEP=0.0057\%$ and RPD of 5.96. Also the PLSR model based on MSC+D2 preprocessing method resulted in the in $r_c=0.984$, $RMSEC=0.017\%$, $r_p=0.976$, $RMSEP=0.021\%$ and RPD of 7.10, indicating the high potential of PLSR model in prediction of K content. Moreover, the weakest model was related to estimation of P content based on data without pre-processing with $r_c=0.774$, $RMSEC=0.013\%$, $r_p=0.675$, $RMSEP=0.018\%$ and RPD value of 1.87. Based on the obtained results, the proposed PLSR model coupled with preprocessing methods was able to predict the nutrients content with high precision.

Conclusion

Field spectroscopy has recently gained popularity due to its portability, ease of use, and low cost. Consequently, the use of a portable system for estimating nutrient levels in the fields can significantly reduce time wastage and laboratory expenses. Therefore, according to the ability of the Vis/NIR spectroscopy technique and according to the obtained results, this method can be used to implement a field portable system based on Vis/NIR spectroscopy in order to estimate the Nutrient elements needed by apple trees in the orchards and increased the productivity of the orchards.

Keywords

Preprocessing, Partial Least Squares, Spectroscopy, Nutrients, Visible/Near Infrared

ارزیابی سریع و غیرمخرب مقادیر NPK درخت سیب مبتنی بر تجزیه و تحلیل طیفی برگ

رحیم آزادنیا^۱، علی رجبی پور^{۲*}، بهاره جمشیدی^۳، محمود امید^۴

^۱ دانشجوی دکتری، گروه مهندسی مکانیک بیوسیستم، دانشکده مهندسی و تکنولوژی کشاورزی، دانشگاه تهران، تهران، ایران

^۲ استاد، گروه مهندسی مکانیک بیوسیستم، دانشکده مهندسی و تکنولوژی کشاورزی، دانشگاه تهران، تهران، ایران (arajabi@ut.ac.ir)

^۳ دانشیار، موسسه تحقیقات فنی و مهندسی کشاورزی، سازمان تحقیقات، آموزش و ترویج کشاورزی، کرج، ایران

^۴ استاد، گروه مهندسی مکانیک بیوسیستم، دانشکده مهندسی و تکنولوژی کشاورزی، دانشگاه تهران، تهران، ایران

چکیده

میزان عناصر مغذی نقش بسزایی در رشد، تکثیر و عملکرد محصولات کشاورزی و گیاهان دارند. با پیش‌بینی این عناصر می‌توان به‌صورت دقیق نهاده‌های شیمیایی را مدیریت کرد. هدف از این مطالعه ارزیابی غیرمخرب میزان عناصر NPK با استفاده از طیف‌سنجی مرئی/فروسرخ نزدیک (Vis/NIR) در بازه طول موجی ۵۰۰ تا ۱۰۰۰ نانومتر بود. برای این منظور، طیف‌سنجی از نمونه‌های برگ درختان سیب

در مد اندازه‌گیری تقابلی انجام گرفت. برای حذف اثرات ناخواسته از روش‌های مختلف پیش‌پردازش استفاده شد تا مدل واسنجی دقیق حاصل شود. در این راستا، مدل واسنجی چند متغیره حداقل مربعات جزئی (PLS) بر پایه اندازه‌گیری‌های مرجع و اطلاعات طیفی با روش‌های مختلف پیش‌پردازش مورد بررسی قرار گرفت. بهترین مدل ارائه شده مبتنی بر روش پیش‌پردازش توزیع نرمال استاندارد در ترکیب با مشتق دوم (SNV+D2) با مقادیر $r_c=0/988$ ، $RMSEC=0/028$ ، $r_p=0/978$ ، $RMSEP=0/034$ و $RPD=7/47$ متعلق به پیش‌بینی نیتروژن بود. بهترین مدل برای ارزیابی میزان فسفر و پتاسیم نیز براساس روش پیش‌پردازش تصحیح پراکنش افزایشده در ترکیب با مشتق دوم (MSC+D2) به ترتیب $r_p=0/976$ ، $RMSEP=0/021$ ، $RPD=7/15$ و $r_p=0/958$ ، $RMSEP=0/0057$ ، $RPD=5/96$ به دست آمد. نتایج به دست آمده حاصل از این پژوهش نشان می‌دهد که طیف‌سنجی Vis/NIR می‌تواند به عنوان یک ابزار غیرمخرب، سریع و قابل اعتماد برای پیش‌بینی مقدار عناصر مغذی درخت سیب استفاده و از مصرف بیش از حد نهاده‌های شیمیایی و پیامدهای ناشی از آن جلوگیری گردد.

کلمات کلیدی:

پیش‌پردازش، حداقل مربعات جزئی، طیف‌سنجی، عناصر مغذی، مرئی / فرورسرخ نزدیک

مقدمه

عناصر مغذی یکی از عوامل مهم در بهبود کمی و کیفی محصول به‌شمار می‌آید که باعث بهبود رنگ، طعم و شکل میوه، کاهش ریزش میوه، افزایش مقاومت در برابر آفات و بیماری‌ها و ایجاد مقاومت در برابر سرما می‌شود (Taiz et al., 2015). این عناصر اجزای اصلی کلروفیل، آنزیم‌ها و پروتئین‌ها را تشکیل می‌دهند. میزان این عناصر به عواملی چون رشد گیاه، نوع خاک، سن برگ و موقعیت قرارگیری روی درخت و سن درختان بستگی دارد. نیتروژن (N)، فسفر (P) و پتاسیم (K) عناصر مغذی اصلی برگ درختان هستند که به‌طور چشمگیری روی رشد، عملکرد و فاکتورهای کیفی اثر می‌گذارند. اطلاع به موقع از میزان مواد مغذی محصولات اهمیت ویژه‌ای دارد تا نیازهای غذایی به اندازه کافی تعیین و نرخ کوددهی دقیق مشخص شود. چراکه بهینه‌سازی برنامه کوددهی از طرفی سبب به حداکثر رساندن عملکرد میوه با کیفیت شده و از طرف دیگر میزان کودهای شیمیایی مصرفی را به حداقل می‌رساند تا اثرات زیست محیطی کاهش یابد. (Erel et al., 2008).

برگ درخت یکی از عوامل ارزیابی میزان عناصر مغذی آن است، چراکه برگ گیاهان متابولیسم فعالی دارند و منبع اصلی ذخیره مواد مغذی و کربوهیدرات برای درختان هستند (Embleton et al., 1973). بنابراین تجزیه شیمیایی برگ مهم‌ترین ابزار برای ارزیابی وضعیت عناصر غذایی درختان و مدیریت کوددهی آن است. تجزیه و تحلیل برگ درختان سیب معمولاً با هدف تشخیص کمبود و عدم تعادل عناصر غذایی و ارزیابی اثربخشی برنامه‌های مدیریت مواد مغذی فعلی انجام می‌شود (Miles, 2010). اما، روش‌های آزمایشگاهی مرسوم گران، پرمهت، زمان‌بر و نیازمند متخصص و آزمایشگاه هستند.

امروزه استفاده از روش‌های غیرمخرب به‌منظور ارزیابی کیفیت داخلی محصولات کشاورزی نظر پژوهشگران را به خود جلب کرده و حجم زیادی از پژوهش‌ها با استفاده از این روش‌ها صورت می‌گیرد. روش‌های مبتنی بر بینایی ماشین، روش‌های اپتیکی طیف‌سنجی فروسرخ نزدیک¹ (NIR)، طیف‌سنجی رامان، انتشار صوت و روش‌های فراصوتی از جمله روش‌های غیرمخرب هستند که امروزه به‌منظور ارزیابی کیفیت داخلی محصولات کشاورزی مورد استفاده قرار می‌گیرند (Butz et al., 2005).

خواص بیوشیمیایی و بیوفیزیکی به‌طور چشمگیری طیف‌های بازتابی از برگ گیاهان را تحت تاثیر قرار می‌دهد. از این‌رو، استخراج اطلاعات بیوشیمیایی از یک طیف گیاهی پیوسته تولید شده با استفاده از حسگرهای طیفی امکان‌پذیر است. به‌منظور به‌حداقل رساندن چالش‌ها و مشکلات آزمایشگاهی در تعیین محتوای بیوشیمیایی برگ گیاهان می‌توان از روش‌های طیف‌سنجی استفاده کرد (Mobasheri & Rahimzadegan, 2012). طیف‌سنجی یک روش رایج برای تشخیص سریع محتویات مواد مغذی در محصولات است (Rady & Guyer, 2015). در سال‌های اخیر، نتایج رضایت‌بخشی از استفاده از طیف‌سنجی NIR در بخش کشاورزی گزارش شده است (Azadshahraki et al., 2022; Bagheri & Mohamadi-Monavar, 2020).

عباسی و همکاران (Abbasi et al., 2019) با کمک روش طیف‌سنجی NIR برخی از پارامترهای کیفی سیب را مورد ارزیابی قرار دادند. آن‌ها در این مطالعه از تبدیل موجک و روش‌های معمول پیش‌پردازش برای توسعه مدل رگرسیونی PLS² استفاده کردند. نتایج به‌دست آمده نشان داد که استفاده از روش تبدیل موجک³ برای حذف اطلاعات ناخواسته از داده‌های طیفی، قابلیت ارائه یک مدل رگرسیونی خطی دقیق و صحیح را دارد. محققان در مطالعه‌ای یک روش سریع و غیرمخرب به‌منظور شناسایی خیار براساس حداکثر تجمع نیترات را با استفاده از طیف‌سنجی Vis/NIR ارائه دادند. آن‌ها در این تحقیق یک مدل PLS براساس روش‌های مختلف پیش‌پردازش و داده‌های مرجع توسعه دادند. هم‌چنین، روش‌های طبقه‌بندی مختلف خطی، درجه دوم و ماهالانویس براساس روش PCA-DA⁴ برای طبقه‌بندی نمونه‌های خیار سالم از آلوده (دارای نیترات بیش از حد مجاز) توسعه یافت. نتایج به‌دست آمده نشان داد که روش طیف‌سنجی Vis/NIR می‌تواند برای توسعه سامانه‌های قابل حمل به منظور غربالگری خیارها بر پایه بیشینه مجاز سطح نیترات در محصول استفاده شود (Jamshidi & Yazdanfar, 2022).

فرهادی و همکاران (Farhadi et al., 2020) با استفاده از طیف‌سنجی Vis/NIR از تغییرات ترکیبات داخلی سیب‌زمینی در حین ذخیره‌سازی را بررسی کردند. طیف‌سنجی در محدوده طیفی ۴۵۰ تا ۱۰۰۰ نانومتر برای پیش‌بینی نشاسته، میزان قند و رطوبت نمونه‌های سیب‌زمینی انجام گرفت. به‌منظور ایجاد رابطه خطی بین طیف‌های جذبی و اندازه‌گیری‌های مرجع از دو روش PLSR استفاده شد. نتایج به‌دست آمده نشان داد که مدل ارائه‌شده می‌تواند با ضریب همبستگی بالای ۹۰ درصد میزان قند سیب‌زمینی را پیش‌بینی نماید. در مطالعه‌ای دیگر

¹ Near Infrared Spectroscopy

² Partial Least Square

³ Wavelet transform

⁴ Principal Component Analysis-Discriminant Analysis

با استفاده از طیف‌سنجی Vis/NIR همراه با روش‌های تجزیه و تحلیل شیمی‌سنجی^۱ بار میکروبی نمونه‌های کاهو را در محدود طیفی ۳۵۰ تا ۱۱۰۰ نانومتر بررسی شد. در این تحقیق از پنج الگوریتم^۲، SVM^۳، SIMCA^۴، PLS-DA^۵، PCA و HCA^۶ برای تشخیص نمونه‌های کاهوی آلوده به میکروب استفاده شد. نتایج نشان داد که بهترین مدل ارائه‌شده با استفاده از الگوریتم نظارت شده PLS-DA همراه با روش پیش‌پردازش SNV+D2 به‌دست آمد. ضریب همبستگی بین داده‌های طیفی Vis/NIR و داده‌های مرجع $r_c = 0.989$ به‌دست آمد، که توانایی این تکنیک در تشخیص آلودگی نمونه‌های کاهو را نشان می‌دهد (Rahi et al., 2020). وانگ و همکاران (Wang et al., 2019) برای ارزیابی میزان عناصر نیتروژن، فسفر و پتاسیم در برگ‌های نیشکر از طیف‌سنجی Vis/NIR استفاده کردند. به‌منظور به‌دست آوردن طیف‌های بازتابی برگ از یک طیف‌سنج درون مزرعه‌ای استفاده شد. برای ایجاد رابطه بین داده‌های مرجع و طیف‌های به‌دست آمده از مدل CARS-PCA-PLS استفاده شد. نتایج به‌دست آمده نشان داد که مدل‌های ارائه‌شده توانست با دقت ۰/۸۵، ۰/۶۷ و ۰/۹۳ به‌ترتیب میزان نیتروژن، فسفر و پتاسیم را پیش‌بینی کند. هم‌چنین در مطالعه‌ای دیگر محققان به‌منظور تعیین میزان عناصر مغذی درخت سیب با استفاده از طیف‌سنجی فروسرخ نزدیک میزان نیتروژن و کلروفیل برگ را اندازه‌گیری کردند. محققان برای ارزیابی میزان نیتروژن از مدل PLS مبتنی بر انتقال فوریه^۶ استفاده کردند. نتایج به‌دست آمده نشان داد که روش ارائه‌شده توانست به‌منظور مدیریت صحیح استفاده از نهاده‌های شیمیایی میزان نیتروژن را با دقت بالای ۰/۹۸ ارزیابی بزند (Tamburini et al., 2015).

مطابق با مطالعات انجام شده، تلفیق طیف‌سنجی و روش‌های شیمی‌سنجی می‌تواند رابطه بین طیف‌های بازتابی و محتویات عناصر مغذی را به‌صورت مستقیم بیان کند (Amiratul et al., 2017). از طرف دیگر انتخاب و استفاده به‌موقع از نهاده‌های شیمیایی همیشه در اولویت وظایف کشاورزان قرار داشته است. برای آگاهی از میزان استفاده از نهاده‌های شیمیایی، لازم است تا میزان عناصر مغذی موجود در برگ درخت در اختیار باشد. اما روش‌های ارزیابی مواد مغذی به‌صورت مخرب و شیمیایی انجام می‌گیرد و بسیار هزینه‌بر هستند. استفاده از اطلاعات طیفی بازتابی از برگ درختان می‌تواند کمک کند تا به این اطلاعات دستیابی شود. بنابراین به‌منظور اطلاع از میزان عناصر مغذی کافی برای رشد محصولات، جلوگیری از هزینه‌های اضافی و اثرات منفی استفاده بی‌رویه نهاده‌های شیمیایی روی محیط زیست، ضروریست تا با استفاده از یک روش سریع و غیرمخرب میزان عناصر نیتروژن، فسفر و پتاسیم بهینه برای درخت در طول دوره رشد ارزیابی زده شود. پژوهش حاضر با هدف تعیین میزان عناصر NPK برگ درخت سیب با استفاده تلفیق طیف‌سنجی NIR و روش‌های شیمی‌سنجی انجام شد.

مواد و روش

جمع‌آوری نمونه‌ها و طیف‌سنجی

¹ Chemo metrics analysis

² Support Vector Machine

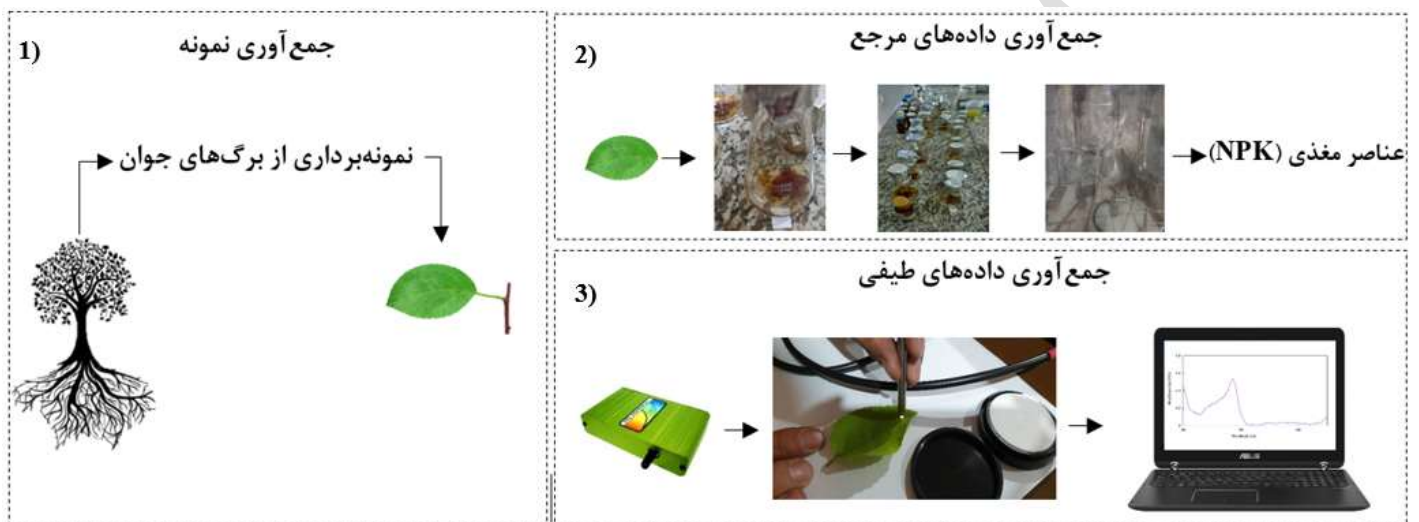
³ Soft Independent Modeling of Class Analogy

⁴ Partial Least Square-Discriminant Analysis

⁵ Hierarchical cluster analysis

⁶ Fourier Transform

در این مطالعه، ۸۰ نمونه برگ درخت سیب از میان درختان سیب رد چیف^۱، فوجی^۲ و گرنی اسمیت^۳ به صورت تصادفی از باغات آذربایجان غربی جمع‌آوری و طیف‌سنجی شدند. از یک طیف‌سنج Green-Wave (Stellar Net Inc., USA) با نسبت سیگنال به نوفه ۴۰۰:۱، مجهز به آشکارساز CCD حساس (۱۰۲۴ عنصر) و کاوشگر فیبر نوری برای طیف‌سنجی در طول موج ۳۵۰ تا ۱۱۰۰ نانومتر استفاده شد. طیف‌گیری از نمونه‌ها در حالت برهم‌کنش^۴ انجام شد (شکل ۱). دستگاه طیف‌سنجی هر ۲۰ دقیقه یک بار توسط یک مرجع سفید از جنس سولفات باریوم استاندارد کالیبره شد. داده‌ها توسط نرم‌افزار Spectra Wiz software جمع‌آوری شدند. از هر برگ سیب، ۱۰ ناحیه به صورت تصادفی انتخاب و طیف‌گیری شدند. طیف میانگین به عنوان بازتاب (R) برای تجزیه و تحلیل استفاده شد. در نهایت، تمام داده‌ها به جذب (Log1/R) تبدیل شدند.



شکل ۱- نحوه اندازه‌گیری عناصر NPK برگ‌های درخت سیب با استفاده از طیف‌سنجی مرئی/فروسرخ نزدیک

Fig. 1. How to measure NPK nutrients in apple tree leaves using visible/near-infrared spectroscopy

اندازه‌گیری مرجع

به منظور برآورد درصد نیتروژن نمونه‌های برگ از روش کج‌دلال استفاده شد. ابتدا نمونه‌های موردنظر توسط اسید سولفوریک هضم و نیتروژن موجود به سولفات آمونیوم تبدیل شد. ازت سولفات آمونیوم به صورت آمونیاک آزاد و توسط اسید بوریک به بورات آمونیوم تبدیل و با استفاده از اسید سولفوریک ۰/۱ آن را تیترو کرد. با محاسبه اسید مصرفی مقدار ازت بر حسب درصد به دست آمد. اما به منظور اندازه‌گیری مقدار فسفر و پتاسیم از دستگاه طیف‌سنج نشر پلاسما-اپتیکیال جفت القایی^۵ (ICPOES; OPTIMA 2000DV, Perkin-Elmer, Italy) استفاده شد. جدول ۱ داده‌های آماری (حداقل، حداکثر، میانگین و انحراف معیار) مربوط به مقادیر NPK اندازه‌گیری شده نمونه‌های برگ در آزمایشگاه را به صورت درصد نمایش می‌دهد.

¹ Red Chief

² Fuji

³ Granny Smith

⁴ Intractance

⁵ Inductive coupled plasma-optical emission spectrometry

جدول ۱- داده‌های آماری مربوط به مقدار NPK نمونه‌های برگ

Table 1- Statistical data related to NPK value of leaf samples

نمونه‌های اعتبارسنجی Validation samples				نمونه‌های واسنجی Calibration samples				
انحراف معیار Standard Deviation	میانگین Mean	حداکثر Max	حداقل Min	انحراف معیار Standard Deviation	میانگین Mean	حداکثر Max	حداقل Min	
0.254	1.03	1.43	0.66	0.212	0.89	1.5	0.54	نیتروژن (%) Nitrogen (%)
0.034	0.086	0.133	0.022	0.027	0.08	0.14	0.026	فسفر (%) Phosphor (%)
0.147	0.45	0.73	0.22	0.12	0.53	0.79	0.203	پتاسیم (%) Potassium (%)

پیش‌پردازش داده‌ها

اطلاعات و داده‌های غیرمفید تاثیر منفی روی طیف‌سنجی می‌گذارد و مدل رگرسیونی نامناسبی بین طیف‌ها و پارامترهای شیمیایی ایجاد می‌کند. این اطلاعات غیرمفید در اثر متغیر بودن عواملی مانند متغیر بودن فاصله آشکارساز نمونه، اندازه نمونه و نویزهای حاصل از خود دستگاه و محیط ایجاد می‌شود. برای حذف این عوامل از روش‌های پیش‌پردازش تصحیح پراکنش افزایشده (MSC)¹ و توزیع نرمال استاندارد² (SNV) استفاده می‌شود (Fu et al., 2007). برای هموارسازی و حذف نویزهای تصادفی موجود در طیف‌ها از فیلتر میانگین گیر متحرک³ (MA) با عرض پنجره ۳ و هم‌چنین هموارساز ساویتزکی-گولای⁴ (SG) با تعداد نقاط همسایگی و درجه چند جمله‌ای به-ترتیب برابر با ۳ و ۲ استفاده شد. هم‌چنین به منظور افزایش قدرت تفکیک طیفی و آشکار کردن پیک‌های ضعیف از مشتق اول و دوم (D1 و D2) بر پایه الگوریتم ساویتزکی-گولای با تعداد نقاط همسایگی و درجه چند جمله‌ای به ترتیب ۳ و ۲ استفاده شد. لازم به ذکر است که انتخاب صحیح پارامترهایی مانند عرض پنجره فیلتر، تعداد نقاط همسایگی و درجه چند جمله‌ای به منظور افزایش نسبت سیگنال به نویز از اهمیت بالایی برخوردار است (Jamshidi et al., 2016). در واقع با افزایش درجه مشتق‌گیری پیک‌های جذبی پهن‌تر می‌شوند و به همین دلیل است که D2 نسبت به D1 از قدرت تفکیک طیفی بهتری برخوردار است. اما مشتق‌گیری با درجه بالا همیشه مفید نیست چراکه با بالا رفتن درجه مشتق‌گیری نسبت سیگنال به نویز کاهش می‌یابد و اطلاعات طیفی از بین می‌روند، لذا معمولاً توصیه نمی‌شود از مشتق-گیری با درجه ۲ به بالا استفاده شود (Jamshidi et al., 2015). در این پژوهش از ترکیب روش‌های مختلف پیش‌پردازش برای ارزیابی میزان نیتروژن برگ درخت سیب به صورت غیرمخرب بهره‌گیری شد. برای پیش‌پردازش و تجزیه و تحلیل داده‌ها از نرم‌افزار Unscrambler X 14 (CAMO software, Norway) استفاده شد.

¹ Multiplicative Scatter Correction

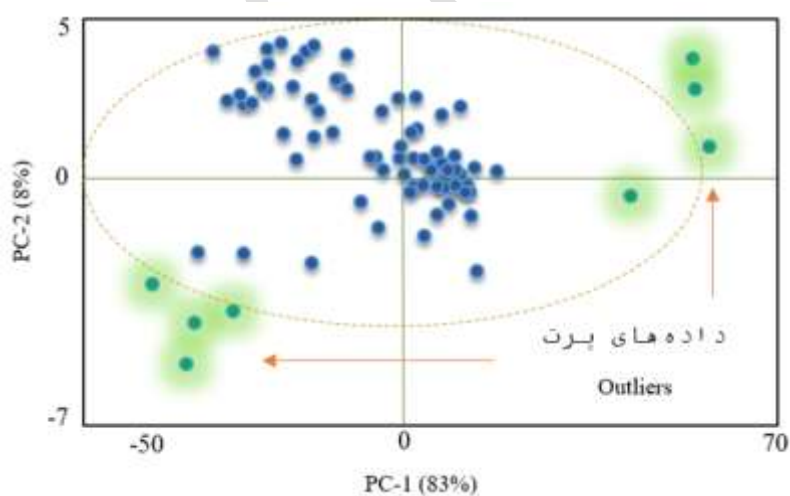
² Standard Normal variate

³ Moving Average

⁴ Savitzky-Golay

مدل سازی PLS

به منظور ایجاد ارتباط خطی بین ویژگی‌های کیفی اندازه‌گیری شده و داده‌های طیفی از روش مدل سازی رگرسیون چند متغیره خطی حداقل مربعات جزئی^۱ (PLS) استفاده شد. حداقل مربعات جزئی به عنوان یک روش تحت نظارت خطی، برای ایجاد یک مدل پیش‌بینی برای اندازه‌گیری‌های کمی کاربرد دارد (Daszykowski et al., 2007; Kumar et al., 2014). همپوشانی، تداخل و حذف اطلاعات به طور چشمگیری با استفاده از مدل سازی PLS کاهش می‌یابد (Lafhal et al., 2016). مزیت استفاده از این روش شیمی‌سنجی نسبت به سایر روش‌ها سادگی، سرعت و عملکرد خوب آن است (Malegori et al., 2017). از این رو، به منظور ایجاد ارتباط خطی بین داده‌های مرجع و طیف‌های اندازه‌گیری شده از روش PLS استفاده شد. طیف‌های اندازه‌گیری شده به عنوان متغیرهای مستقل (X) و داده‌های مرجع به عنوان متغیر وابسته (Y) برای ورودی مدل در نظر گرفته شدند. همچنین از روش اعتبارسنجی متقابل برای ارزیابی مدل PLS استفاده شد. در این تحقیق ابتدا داده‌های پرت با استفاده از روش تجزیه مولفه‌های اصلی^۲ (PCA) مشخص و حذف شدند (شکل ۲). نمونه‌های باقی‌مانده (۷۲ نمونه) به صورت تصادفی به دو دسته واسنجی (۵۴ نمونه) و آزمون (۱۸ نمونه) به ترتیب برای توسعه مدل واسنجی و پیش‌بینی تقسیم شدند.



شکل ۲- تشخیص داده‌های پرت با استفاده از روش تجزیه مولفه‌های اصلی

Fig. 2. Detection of outlier data using principal component analysis method

ارزیابی مدل

¹ Partial Least Squares

² Principal Component Analysis

مدل‌های توسعه داده شده با استفاده از ریشه میانگین مربعات خطای واسنجی^۱ (RMSEC)، ریشه میانگین مربعات خطای پیش‌بینی^۲ (RMSEP)، ضریب هم‌بستگی واسنجی^۳ (r_c) و ضریب هم‌بستگی پیش‌بینی^۴ (r_p) و نسبت انحراف پیش‌بینی^۵ (RPD) اعتبارسنجی شدند (Nicolai et al., 2007). همچنین، توانایی مدل PLS با مقادیر نسبت انحراف پیش‌بینی^۶ (RPD) سنجیده شد. مقدار RPD بر اساس نسبت انحراف معیار داده‌های آزمایشگاهی به خطای پیش‌بینی به دست می‌آید. اگر این مقدار بالای ۲/۵ به دست آید، نشان می‌دهد که مدل پیشنهاد شده عملکرد قابل قبولی دارد (Moncada et al., 2013). لازم به ذکر است که ابتدا و انتهای محدوده طیفی به دلیل داشتن نویز حذف شد. از این رو، محدوده طیفی ۵۰۰ تا ۱۰۰۰ نانومتر برای مدل‌سازی در نظر گرفته شد.

نتایج و بحث

داده‌های مرجع

جدول ۱ داده‌های آماری (حداقل، حداکثر، میانگین و انحراف معیار) مقادیر عناصر مغذی N، P و K را در دو دسته واسنجی و آزمون بعد از حذف داده‌های پرت نشان می‌دهد. مطابق با جدول ۱ میزان عناصر NPK بر حسب درصد به دست آمد. به این صورت که میزان N، P و K بر حسب درصد در محدوده‌های ۱/۴-۰/۵۶، ۰/۱۴-۰/۲۶ و ۰/۷۸-۰/۲۰۳ برای دسته واسنجی و ۱/۴-۰/۶۶، ۰/۱۳۹-۰/۰۲۶ و ۰/۱۲-۰/۲۲ برای گروه آزمون بودند که بیانگر تنوع نمونه‌ها از نظر مقادیر را نشان می‌دهند.

تفسیر طیف‌ها

قبل از هرگونه تجزیه و تحلیل دو بخش از کل طیف به دست آمده، به منظور حذف نویز در محدوده ۵۰۰-۳۴۰ نانومتر و ۱۱۷۰-۱۰۰۰ نانومتر حذف شدند. طیف‌های خام اولیه نمونه‌های برگ درخت سیب در محدوده طیفی ۵۰۰ تا ۱۰۰۰ نانومتر در شکل ۳ نشان داده شده است. طیف‌های NIR به ترکیب‌های آلی تشکیل شده از پیوندهای مولکولی C-H، O-H و N-H که در آب، مواد جامد قابل حل و ساکاروز وجود دارد واکنش نشان می‌دهند. لذا تفسیر طیف‌ها به منظور مطالعه ساختاری براساس شناسایی اورتون‌ها و جذب‌های ترکیبی گروه‌های عاملی (C-H، O-H و N-H) انجام می‌شود.

مطابق با شکل ۳ یک پیک مربوط به کلروفیل a در محدوده ۵۹۰ نانومتر مشاهده می‌شود. رنگ سبز برگ‌های درختان و کلروفیل‌ها می‌توانند در ناحیه مرئی و فروسرخ نزدیک (۴۹۸-۵۶۸ و ۶۸۰-۶۶۰ نانومتر) جذب داشته باشند. مولکول‌های جذب روشنایی فقط قادر هستند

¹ Root Mean Square Error of Calibration

² Root Mean Square Error of Prediction

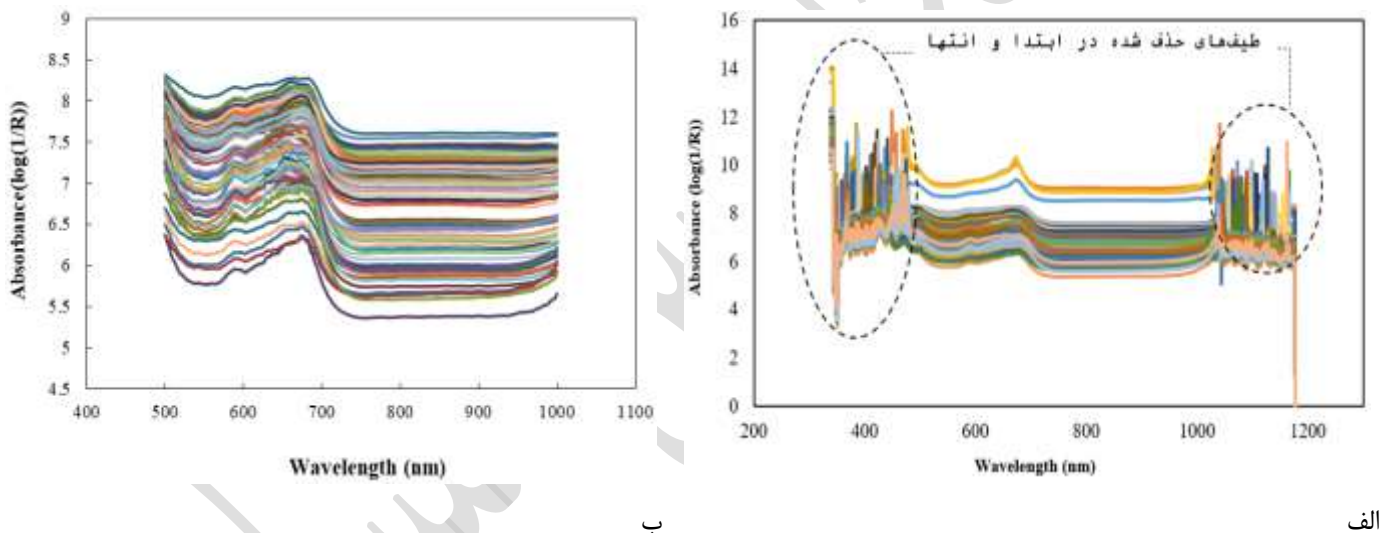
³ Correlation Coefficient of Calibration

⁴ Correlation Coefficient of Prediction

⁵ Ratio Prediction Deviation

⁶ Residual Predictive Deviation

که طول موج‌های خاصی از طیف مرئی را جذب کنند، لذا پیک مربوط بین نواحی ۵۲۰ تا ۵۴۰ نانومتر به‌همین دلیل است (Jamshidi et al., 2015). همان‌طور که در شکل ۳ دیده می‌شود در اطراف طول موج ۶۸۰ نانومتر یک پیک قوی وجود دارد که مربوط به جذب کلروفیل نوع a است. در مطالعه‌ای که توسط (Rahi et al., 2020) انجام شد نشان داد که پیک‌های محدوده ۶۴۰ تا ۷۰۷ نانومتر مربوط به تغییرات جذب کلروفیل در کاهو بود. بعد از پیک ناحیه مرئی یک شیب تند کاهشی در جذب رخ می‌دهد که در مرحله بعد وارد طیف فرسرخ نزدیک می‌شود. در ناحیه ۹۵۰ نانومتر نیز یک پیک نسبتاً ضعیفی دیده می‌شود که می‌تواند مربوط به کاهش گلوکز در این ناحیه باشد (Fernández-Navales et al., 2008; Osborne et al., 1996). اما در ناحیه فرسرخ نزدیک در اطراف طول موج ۹۹۰ نانومتر به بعد نیز یک افزایش تدریجی وجود دارد که این امر احتمالاً می‌تواند به‌دلیل وجود اورتون‌های دوم پیوند O-H و N-H باشد. در واقع این پیک بیشتر ناشی از جذب آب و کربوهیدرات‌ها است (Chen et al., 2010; Kawano et al., 1992). وجود این تغییرات در طول موج‌های مختلف در برگ‌های درختان سیب منجر به تغییرات در مقدار جذب نور می‌شود.



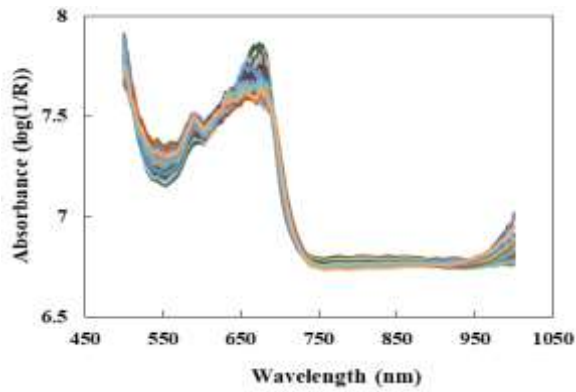
شکل ۳- طیف خام اولیه از نمونه‌های برگ درختان سیب الف) قبل از حذف ابتدا و انتها طیف‌ها و ب) بعد از حذف طیف‌ها

Fig.3. The initial raw spectra of apple tree leaf samples a) before and b) after removing the beginning and end of the spectra

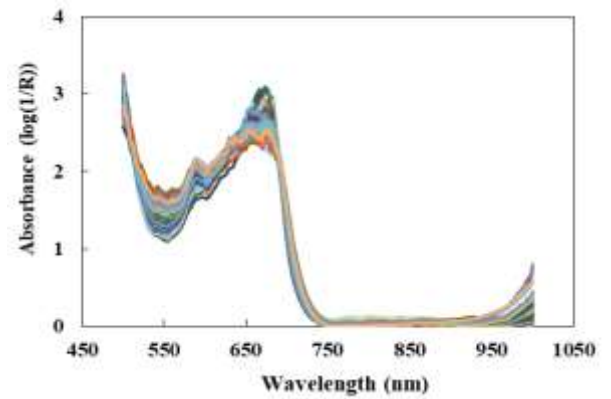
۳-۲- پیش پردازش طیف‌ها

طیف خام نمونه‌های برگ درخت سیب پس از پیش‌پردازش با ۸ روش مختلف شامل SNV، MSC، D1، D2، SNV+D1، SNV+D2، MSC+D1 و MSC+D2 در شکل ۴ نشان داده است. در ابتدا از دو روش پیش‌پردازش MSC و SNV برای حذف اثرات فیزیکی

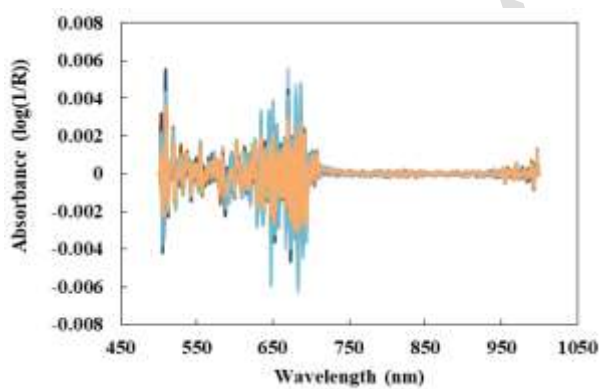
طیف‌ها استفاده شد. با استفاده از روش‌های پیش‌پردازش مشتق اول و دوم برپایه الگوریتم SG وضوح طیف‌ها تقویت شده و پیک‌های جذبی پهن و ضعیف در ناحیه طیفی ۵۰۰-۱۰۰۰ نانومتر نمایان شدند.



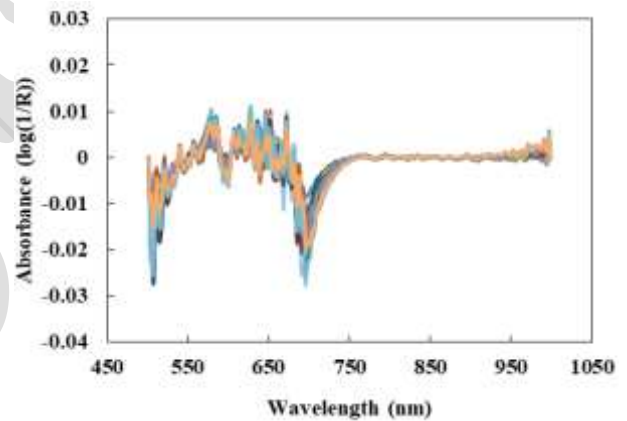
(ب)



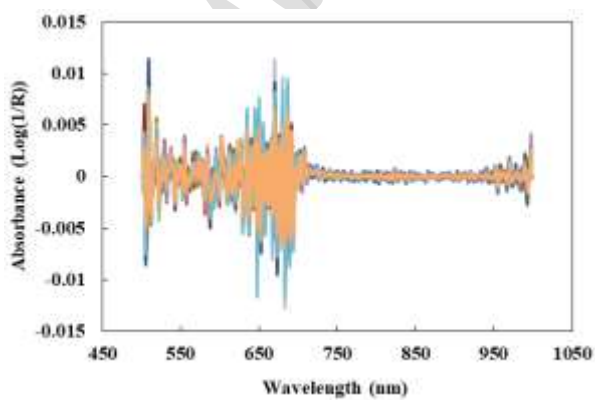
(الف)



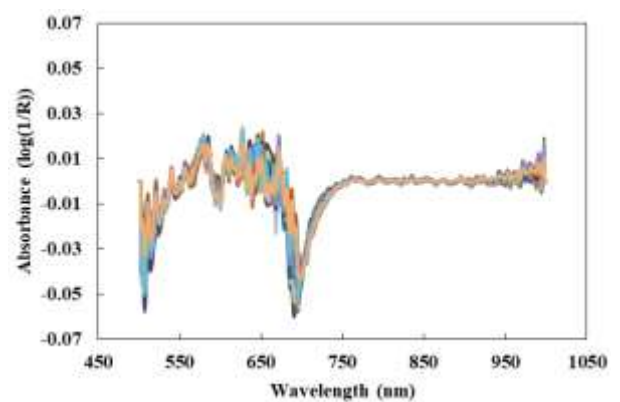
(د)



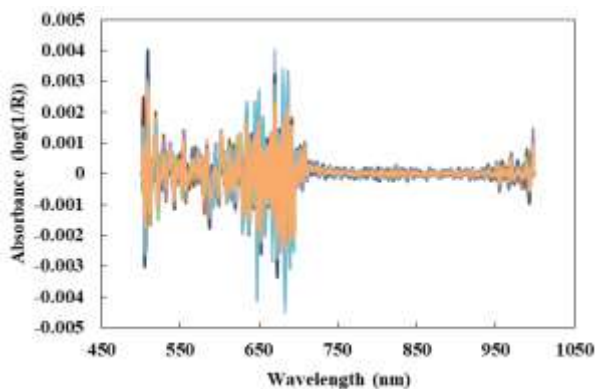
(ج)



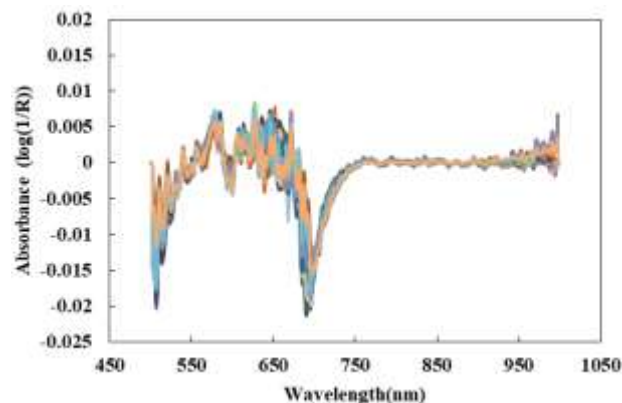
(ح)



(ه)



(ق)



(خ)

شکل ۴- طیف‌های جذبی NIR برگ‌های درخت سیب پردازش شده با روش‌های مختلف پیش‌پردازش الف) SNV، ب) MSC، ج) D1،

د) D2، ه) SNV+D1، ج) SNV+D2، خ) MSC+D1، ق) MSC+D2

Fig. 4. The NIR absorption spectra of apple tree leaves using different pre-processing methods: a) SNV, b) MSC, c) D1, d) D2, e) SNV+D1, f) SNV+D2, g) MSC+D1, h) MSC+D2

نتایج مدل‌سازی

مدل PLS برای ارزیابی مقدار نیتروژن

مطابق با جدول ۲ مقادیر r_p و RMSEP برای داده‌های بدون پیش‌پردازش به ترتیب ۰/۱۲۸ درصد و ۰/۷۱ به دست آمد. با پیش‌پردازش داده‌های طیفی دقت مدل‌های پیش‌بینی افزایش پیدا کرد. مقادیر r_p برای روش‌های پیش‌پردازش SNV به ترتیب ۰/۱۰۱ و ۰/۷۹۵ و برای روش MSC به ترتیب ۰/۰۷۶ و ۰/۸۹ به دست آمد که نسبت به داده‌های طیفی بدون پیش‌پردازش افزایش چشمگیری داشت. با توجه به جدول ۲ نتایج پیش‌بینی مدل PLS بر پایه مشتق اول و دوم نشان داد که مقادیر r_p و RMSEP حاصل از مشتق اول و دوم به ترتیب کمتر و بیشتر از روش‌های SNV و MSC بود. در نهایت با ترکیب روش‌های SNV و MSC با مشتق اول و دوم نتایج بهتری به دست آمد، به طوریکه مدل PLS پیشنهادی توانست براساس روش پیش‌پردازش SNV+D2 با مقادیر $r_p=0/978$ و $RMSEP=0/034$ بهترین عملکرد را داشته باشد. مقادیر به دست آمده برای نسبت انحراف پیش‌بینی در این تحقیق بین $1.98 < RPD < 7.47$ بودند. همانطور که پیش‌بینی شد کمترین مقدار RPD برای داده‌های بدون پیش‌پردازش (۱/۹۸) به دست آمد. از طرف دیگر، بزرگترین RPD برای مدل PLS بر پایه روش پیش‌پردازش SNV+D2 با مقدار ۷/۴۷ به دست آمد که توانایی عالی این مدل ارائه شده برای ارزیابی میزان نیتروژن برگ درختان سیب را نشان می‌دهد.

جدول ۲- نتایج واسنجی و پیش‌بینی مدل‌های PLSR بر پایه ترکیب روش‌های مختلف پیش‌پردازش برای ارزیابی نیتروژن

Table 2- The results of calibration and prediction of PLS models based on the combination of different pre-processing methods for nitrogen estimation

نسبت انحراف پیش‌بینی RPD	هم‌بستگی پیش‌بینی r_p	ضریب مربعات خطا پیش‌بینی RMSEP (%)	ریشه میانگین مربعات خطا پیش‌بینی r_c	ضریب هم‌بستگی واسنجی میانگین خطا واسنجی RMSEC (%)	ریشه مربعات اصلی LVs	پیش‌پردازش Pre-processing
1.98	0.710	0.128	0.808	0.106	14	With no pre-processing
2.51	0.795	0.101	0.878	0.082	11	SNV
3.34	0.890	0.076	0.933	0.060	12	MSC
3.91	0.926	0.064	0.962	0.045	10	D1
6.86	0.974	0.037	0.986	0.028	11	D2
6.2	0.972	0.041	0.983	0.030	9	SNV+D1
7.47	0.978	0.034	0.988	0.028	6	SNV+D2
3.4	0.970	0.044	0.983	0.032	10	MSC+D1
5.7	0.967	0.046	0.976	0.035	8	MSC+D2

مدل PLS برای ارزیابی مقدار فسفر

در جدول ۳ مقادیر RMSEP و r_p برای داده‌های بدون پیش‌پردازش به ترتیب ۰/۱۸ درصد و ۰/۶۸۵ است. این مقادیر برای روش‌های پیش‌پردازش SNV به ترتیب ۰/۱۵ درصد و ۰/۷۱۲ و برای روش MSC به ترتیب ۰/۱۳ درصد و ۰/۷۸۳ به دست آمد که نسبت به داده‌های طیفی بدون پیش‌پردازش نتایج بهتری بود. مطابق با جدول ۲ مدل PLS بر پایه مشتق اول و دوم نتایج بهتری نسبت به روش‌های پیش‌پردازش SNV و MSC داشت. مدل PLS بر پایه روش پیش‌پردازش D2 با $r_p=0/948$ عملکرد بهتری نسبت به D1 داشت.

مدل‌های خطی پیشنهاد شده با ترکیب روش‌های پیش‌پردازی SNV و MSC با مشتق اول و دوم نتایج قابل قبولی داشت. دو مدل PLS ارائه شده بر اساس روش‌های پیش‌پردازش MSC+D2 و SNV+D2 نسبت به سایر مدل‌ها نتایج بهتری داشتند به طوری که با مقایسه مقادیر RPD مشخص شد که روش MSC+D2 با مقدار $RPD=5/96$ بهترین عملکرد را دارد. مقادیر به دست آمده RPD در این تحقیق برای پیش‌بینی فسفر بین $1.87 < RPD < 5/96$ به دست آمد. کمترین مقدار RPD برای داده‌های بدون پیش‌پردازش (۱/۸۷) به دست آمد. بزرگترین مقدار RPD نیز برای مدل PLS بر پایه روش پیش‌پردازش MSC+D2 با مقدار ۵/۹۶ به دست آمد که توانایی عالی این مدل تدوین شده برای ارزیابی میزان فسفر برگ درختان سیب را نشان می‌دهد.

جدول ۳- نتایج واسنجی و پیش‌بینی مدل‌های PLSR بر پایه ترکیب روش‌های مختلف پیش‌پردازش برای ارزیابی فسفر

Table 3- The results of calibration and prediction of PLS models based on the combination of different pre-processing methods for phosphorus estimation

نسبت انحراف پیش‌بینی	هم‌بستگی پیش‌بینی r_p	ضریب ضریب	ریشه میانگین مربعات خطا پیش‌بینی RMSEP (%)	ضریب هم‌بستگی واسنجی r_c	ریشه میانگین مربعات خطا واسنجی RMSEC (%)	مولفه‌های اصلی LVs	پیش‌پردازش Pre-processing
RPD							
1.87	0.685	0.018	0.774	0.013	15	With no pre-processing	
2.24	0.712	0.015	0.821	0.012	13	SNV	
2.83	0.783	0.013	0.862	0.010	11	MSC	
4.23	0.886	0.0081	0.919	0.0074	10	D1	
5.36	0.948	0.0064	0.959	0.0057	12	D2	
4.77	0.937	0.0072	0.962	0.0055	9	SNV+D1	
4.93	0.961	0.0069	0.972	0.0061	10	SNV+D2	
4.86	0.935	0.0070	0.961	0.0050	11	MSC+D1	
5.96	0.958	0.0057	0.967	0.0051	9	MSC+D2	

مدل PLS برای ارزیابی مقدار پتاسیم

مطابق با جدول ۴ مقادیر RMSEP و r_p برای مدل PLS بر پایه داده‌های بدون پیش‌پردازش به ترتیب ۰/۰۶۳ درصد و ۰/۷۴۶ به دست آمد. مقادیر RMSEP و r_p برای مدل PLS بر اساس دو روش پیش‌پردازش SNV و MSC به ترتیب ۰/۰۶۱ درصد و ۰/۷۶۸، و ۰/۰۵۸ درصد و ۰/۷۹۴ به دست آمد. با توجه به اینکه مقادیر r_p دو روش پیش‌پردازش اشاره شده نزدیک به یکدیگر بود اما با مقایسه مقادیر RPD مشخص شد که مدل PLS بر پایه MSC عملکرد بهتری داشت. مقدار عددی RPD برای مدل PLS بر پایه D2 بالای ۶ به دست آمد که توانایی عالی این مدل را برای ارزیابی میزان پتاسیم نشان داد. بالعکس مدل مقدار RPD به دست آمده برای مدل ارائه شده خطی بر پایه D1 نشان داد که این مدل برای ارزیابی میزان پتاسیم برگ درخت سیب مناسب نیست.

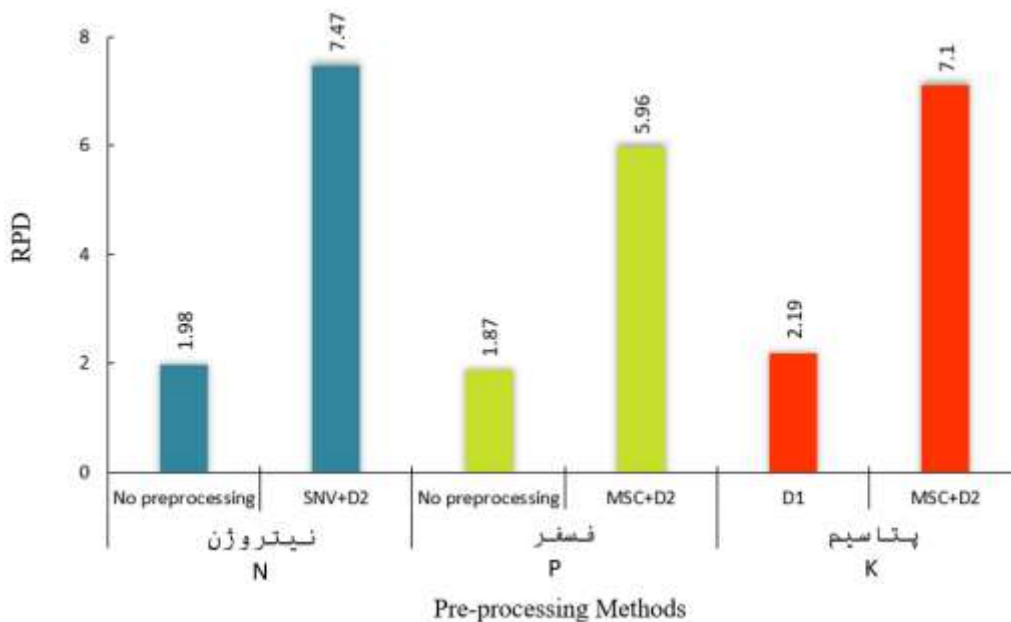
مدل PLS پیشنهادی توانست بر اساس روش پیش‌پردازش MSC+D2 با مقادیر $r_p=0/976$ و $RMSEP=0/021$ بهترین عملکرد را در بین روش‌های پیش‌پردازی برای ارزیابی میزان پتاسیم داشته باشد. مقادیر RPD به دست آمده برای ارزیابی میزان پتاسیم در این پژوهش بین $2.19 < RPD < 7.10$ بود. همانطور که اشاره شد کمترین مقدار RPD برای مدل PLS بر پایه مشتق اول به دست آمد. از سوی دیگر، بزرگترین RPD برای مدل PLS بر پایه روش پیش‌پردازش MSC+D2 با مقدار ۷/۱۰ به دست آمد.

جدول ۴- نتایج واسنجی و پیش‌بینی مدل‌های PLSR بر پایه ترکیب روش‌های مختلف پیش‌پردازش برای ارزیابی پتاسیم

Table 4- The results of calibration and prediction of PLS models based on the combination of different pre-processing methods for potassium estimation

نسبت انحراف پیش‌بینی RPD	هم‌بستگی پیش‌بینی r_p	ضریب مربعیات خطا پیش‌بینی RMSEP (%)	ریشه میانگین مربعیات خطا پیش‌بینی r_c	ضریب هم‌بستگی واسنجی مربعیات خطا واسنجی RMSEC (%)	مولفه- های اصلی LVs	پیش پردازش Pre-processing
2.27	0.746	0.063	0.827	0.054	15	With no pre-processing
2.41	0.768	0.061	0.856	0.043	12	SNV
2.53	0.794	0.058	0.867	0.046	10	MSC
2.19	0.751	0.067	0.837	0.053	12	D1
6.01	0.965	0.029	0.974	0.024	11	D2
5.25	0.951	0.028	0.970	0.022	11	SNV+D1
6.17	0.972	0.024	0.981	0.019	10	SNV+D2
5.44	0.954	0.027	0.972	0.022	10	MSC+D1
7.10	0.976	0.021	0.984	0.017	11	MSC+D2

شکل ۵ مقادیر مربوط به پارامتر RPD برای مدل‌های PLS ارائه شده را نشان می‌دهد. با مقایسه مقادیر RPD برای هر سه عنصر مشخص شد که مدل PLS مبتنی بر روش پیش‌پردازش SNV+D2 برای ارزیابی نیتروژن بهترین عملکرد را در بین سایر مدل‌ها داشت. همچنین مدل ارائه‌شده بر پایه داده‌های بدون پیش‌پردازش برای ارزیابی فسفر با کمترین مقدار RPD نشان داد که این مدل برای ارزیابی میزان فسفر برگ درختان سیب مناسب نیست. همچنین نتایج به‌دست آمده نشان دادند که مدل ارائه‌شده بر پایه روش MSC+D2 که برای ارزیابی میزان فسفر و پتاسیم برگ درختان سیب ارائه‌شده بود به‌ترتیب با داشتن مقادیر $RPD=5/96$ و $RPD=7/1$ عملکرد عالی داشتند.



شکل ۵- مقایسه مقدار RPD مدل‌های ارائه شده برای ارزیابی میزان عناصر NPK برگ درختان سیب

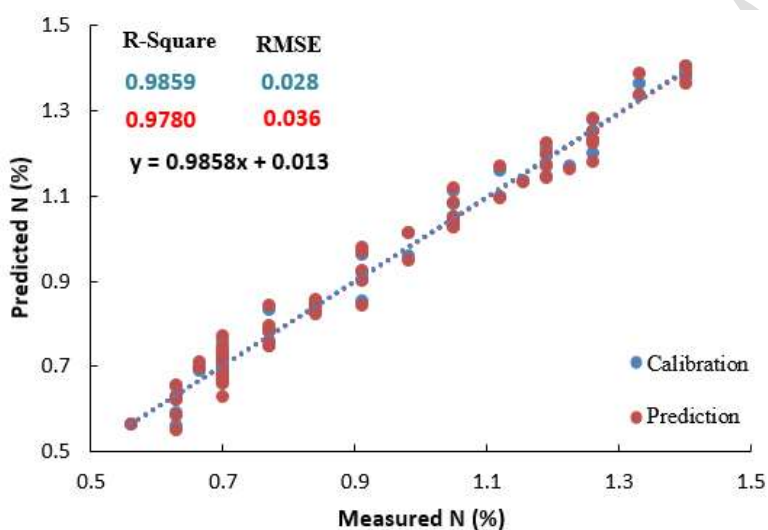
Fig. 5. Comparison of the RPD value of the presented models to estimate the amount of NPK nutrients in the leaves of apple trees

با مقایسه نتایج به دست آمده مشخص شد که در بین مدل‌های PLS ارائه شده برای ارزیابی میزان عناصر NPK برگ درختان سیب، مدل PLS بر پایه روش‌های پیش پردازش SNV+D2 و MSC+D2 که به ترتیب برای ارزیابی میزان نیترژن و پتاسیم ارائه شدند نسبت به سایر مدل‌ها بهترین عملکرد را داشتند. شکل ۶ نتایج پیش‌بینی میزان عناصر N، K و P برحسب بهترین مدل رگرسیون توسعه داده شده را نشان می‌دهد. نتایج پیش‌بینی میزان عنصر نیترژن نسبت به دو عنصر فسفر و پتاسیم بهتر بود. این امر می‌تواند به دلیل غلظت بالای عنصر نیترژن نسبت به دو عنصر دیگر در سطح برگ باشد.

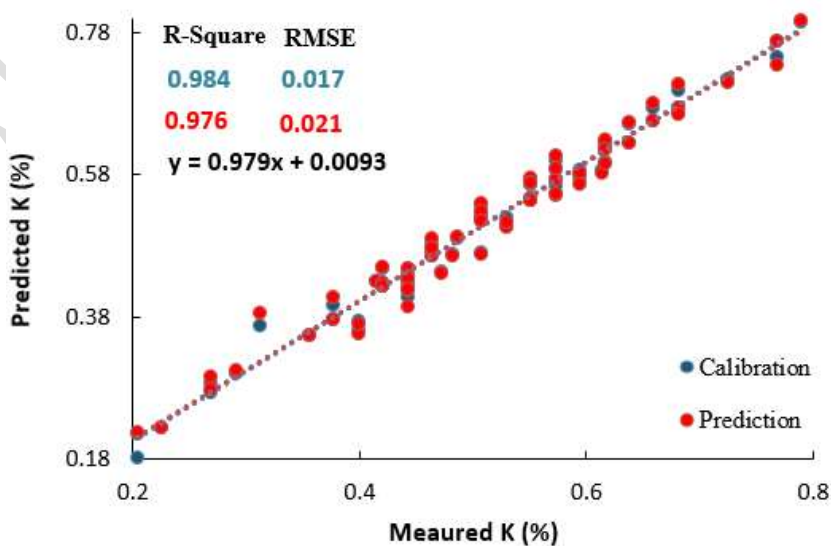
نتایج به دست آمده از این پژوهش در پیش‌بینی میزان عناصر NPK برگ درختان سیب بهتر از نتایج پژوهشی است که به منظور ارزیابی میزان عناصر NPK برگ‌های نیشکر توسط مدل PLS انجام شد (Wang et al., 2019). در مطالعه‌ای دیگر، (Menasatti et al., 2010) میزان عناصر مغذی برگ درختان پرتقال را به صورت غیرمخرب با تلفیق طیف‌سنجی و روش‌های شیمی‌سنجی تشخیص دادند. نتایج حاصل از مدل‌سازی نشان داد که مدل ارائه شده توسط آن‌ها توانست میزان عناصر نیترژن، فسفر و پتاسیم را به ترتیب با ۰٫۸۲، ۰٫۱۸ و ۰٫۹۸ پیش‌بینی نماید. هم‌چنین، محققان در تحقیقی با استفاده از طیف‌های بازتابی از گیاهان مرتع و داده‌های حاصل از تجزیه و تحلیل آزمایشگاهی، میزان عناصر NPK در این گیاهان را ارزیابی کردند. نتایج به دست آمده نشان داد که مدل ارائه شده توسط آن‌ها قادر بود میزان نیترژن، فسفر و پتاسیم را به ترتیب با ۰٫۸۵، ۰٫۴۳ و ۰٫۸۴ پیش‌بینی نماید (Özyiğit and Bilgen, 2013). با مقایسه نتایج مشخص شد که مدل PLS ارائه شده در این پژوهش نتایج بهتری نسبت به مطالعات محققین دیگر داشت و توانست میزان عناصر مغذی NPK را با دقت بیشتری پیش‌بینی کند. علاوه بر این، دقت پایین پیش‌بینی میزان عنصر فسفر در تحقیقات اشاره شده، کم بودن میزان

غلظت فسفر در برگ گزارش شده است. از این رو، توجه به زمان نمونه‌برداری از اهمیت بالایی در بحث مدل‌سازی محسوب می‌شود. نمونه‌برداری در زمان مناسب طول دوره رشد و استفاده از برگ‌های تازه و جوان برای ارزیابی می‌تواند در پیش‌بینی میزان عناصر تاثیرگذار باشد.

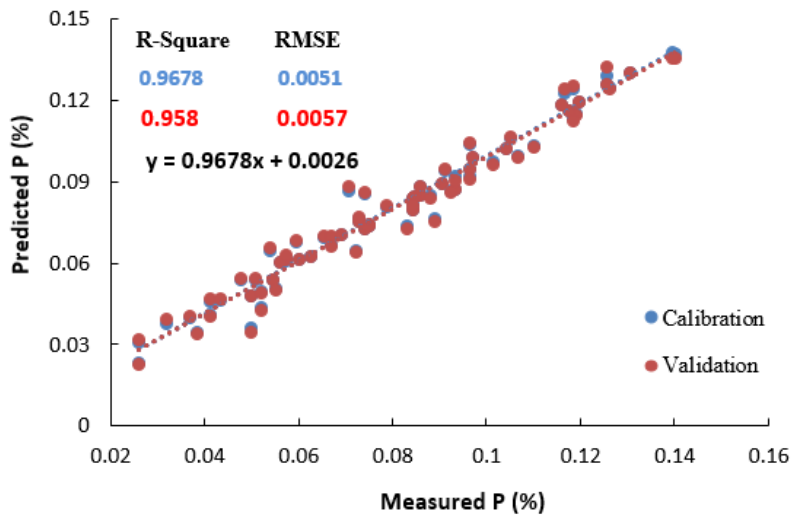
با مشاهده نتایج به‌دست آمده می‌توان به این نتیجه رسید که روش غیرمخرب ارائه شده می‌تواند جایگزین مناسبی برای روش‌های مخرب و زمانبر شیمیایی و آزمایشگاهی باشد و در کمترین زمان میزان عناصر مغذی را پیش‌بینی کند و مصرف نهاده‌های شیمیایی به صورت دقیق و صحیح مدیریت شود.



الف



ب



ج

شکل ۶- نتایج پیش‌بینی مدل PLS برای ارزیابی میزان الف) نیتروژن با روش SNV+D2 ، ب) پتاسیم با روش MSC+D2 و ج) فسفر با روش MSC+D2

Fig.6. Prediction results of PLS model to estimate the amount of a) nitrogen by SNV+D2 method and b) potassium by MSC+D2 method

نتیجه‌گیری

طیف‌سنجی Vis/NIR به‌عنوان یک روش سریع، غیر شیمیایی و غیرمخرب به‌صورت گسترده‌ای به‌منظور کیفیت‌سنجی محصولات کشاورزی مورد استفاده قرار می‌گیرد. نتایج حاصل از این پژوهش نشان داد که تلفیق طیف‌سنجی و روش‌های شیمی‌سنجی می‌تواند به‌عنوان یک روش غیرمخرب و دقیق برای ارزیابی میزان عناصر NPK محصولات کشاورزی استفاده شود. اعتبارسنجی مدل‌های توسعه‌یافته بر پایه ترکیب انواع روش‌های پیش پردازش طیفی نمایان‌گر این بود که این روش‌ها بر نتایج پیش‌بینی اثر مستقیم دارند. نتایج تجزیه و تحلیل کمی نشان داد که در بین مدل‌های توسعه‌یافته بهترین مدل پیش‌بینی مربوط به مدل PLS ارائه‌شده بر پایه روش پیش‌پردازش طیفی SNV+D2 برای ارزیابی میزان نیتروژن بود ($r_c=0/988$ ، $RMSEC=0/028$ ، $r_p=0/978$ ، $RMSEP=0/034$). هم‌چنین مقادیر پارامتر RPD نشان‌دهنده عملکرد عالی مدل‌های ارائه شده برای پیش‌بینی عناصر تغذیه‌ای NPK بود. مقادیر این پارامتر برای نیتروژن بین ۱/۹۸-۷/۴۷، برای فسفر ۱/۸۷-۵/۹۶ و برای پتاسیم ۲/۱۹-۷/۱ به‌دست آمد.

در سال‌های اخیر طیف‌سنجی میدانی به‌دلیل استفاده آسان و سریع، قابلیت حمل و ارزان بودن، نظر پژوهشگران زیادی را به خود جلب کرده است. لذا پیاده‌سازی یک سامانه قابل حمل به‌منظور ارزیابی میزان عناصر مغذی باغات می‌تواند به‌طور چشمگیری از هدر رفتن زمان

و هزینه‌های بالای آزمایشگاهی جلوگیری کند و با مدیریت صحیح و کنترل به‌موقع، عملکرد باغات را افزایش دهد. بنابراین با توجه به توانایی تکنیک طیف‌سنجی Vis/NIR و مطابق با نتایج به‌دست آمده می‌توان از این روش برای پیاده‌سازی یک سامانه قابل حمل مزرعه-ای مبتنی بر طیف‌سنجی Vis/NIR به‌منظور ارزیابی عناصر مغذی موردنیاز درختان سیب در باغات استفاده کرد و عملکرد باغات را افزایش داد.

References

- Abasi, S., Minaei, S., Jamshidi, B., Fathi, D., & Khoshtaghaza, M. H. (2019). Rapid measurement of apple quality parameters using wavelet de-noising transform with Vis/NIR analysis. *Scientia Horticulturae*, 252, 7-13. <https://doi.org/10.1016/j.scienta.2019.02.085>
- Alva, A. K., Fares, A., & Dou, H. (2003). Managing citrus trees to optimize dry mass and nutrient partitioning. *Journal of Plant Nutrition*, 26(8), 1541-1559. <https://doi.org/10.1081/PLN-120022362>
- Amiratul, D. A., Farrah, M. M., Paing, T., Daljit, S., Karam, S., & Martini, M. Y. (2017). Nitrogen effects on growth and spectral characteristics of immature and mature oil palms. *Asian Journal of Plant Sciences*, 16(4), 200-210. DOI: 10.3923/ajps.2017.200.210.
- Azadshahraki, F., Sharifi, K., Jamshidi, B., Karimzadeh, R., & Naderi, H. (2022). Diagnosis of Early Blight Disease in Tomato Plant based on Visible/Near-Infrared Spectroscopy and Principal Components Analysis-Artificial Neural Network Prior to Visual Disease Symptoms. *Infrared Spectroscopy*, 12(1). <https://doi.org/10.22067/jam.2021.67436.1001>
- Bagheri, N., & Mohamadi-Monavar, H. (2020). Early detection of fire blight disease of pome fruit trees using visible-nir spectrometry and dimensionality reduction methods. *Journal of Agricultural Machinery*, 10(1), 37-48. <https://doi.org/10.22067/jam.v10i1.71911>
- Butz, P., Hofmann, C., & Tauscher, B. (2005). Recent developments in noninvasive techniques for fresh fruit and vegetable internal quality analysis. *Journal of food science*, 70(9), R131-R141. <https://doi.org/10.1111/j.1365-2621.2005.tb08328.x>
- Chen, J. Y., Zhang, H., Miao, Y., & Asakura, M. (2010). Nondestructive determination of sugar content in potato tubers using visible and near infrared spectroscopy. *Japan Journal of Food Engineering*, 11(1), 59-64. <https://doi.org/10.11301/jsfe.11.59>
- Daszykowski, M., Kaczmarek, K., Vander Heyden, Y., & Walczak, B. (2007). Robust statistics in data analysis—A review: Basic concepts. *Chemometrics and intelligent laboratory systems*, 85(2), 203-219. <https://doi.org/10.1016/j.chemolab.2006.06.016>
- Embleton, T. W., Jones, W. W., Labanauskas, C. K., & Reuther, W. A. L. T. E. R. (1973). Leaf analysis as a diagnostic tool and guide to fertilization. *The citrus industry*, 3(6), 183-210.
- Erel, R., Dag, A., Ben-Gal, A., Schwartz, A., & Yermiyahu, U. (2008). Flowering and fruit set of olive trees in response to nitrogen, phosphorus, and potassium. *Journal of the*

American Society for Horticultural Science, 133(5), 639-647.
<https://doi.org/10.21273/JASHS.133.5.639>

Farhadi, R., Afkari-Sayyah, A. H., Jamshidi, B., & Gorji, A. M. (2020). Prediction of internal compositions change in potato during storage using visible/near-infrared (Vis/NIR) spectroscopy. *International Journal of Food Engineering*, 16(4). <https://doi.org/10.1515/ijfe-2019-0110>

Fernández-Navales, J., López, M. I., Sánchez, M. T., García, J. A., & Morales, J. (2008). A feasibility study on the use of a miniature fiber optic NIR spectrometer for the prediction of volumic mass and reducing sugars in white wine fermentations. *Journal of Food Engineering*, 89(3), 325-329. <https://doi.org/10.1016/j.jfoodeng.2008.05.011>

Fu, X., Ying, Y., Lu, H., Xu, H., & Yu, H. (2007). FT-NIR diffuse reflectance spectroscopy for kiwifruit firmness detection. *Sensing and Instrumentation for Food Quality and Safety*, 1(1), 29-35.

Jamshidi, B., & Yazdanfar, N. (2022). Development of a spectroscopic approach for non-destructive and rapid screening of cucumbers based on maximum limit of nitrate accumulation. *Journal of Food Composition and Analysis*, 110, 104513. <https://doi.org/10.1016/j.jfca.2022.104513>

Jamshidi, B., Mohajerani, E., Jamshidi, J., Minaei, S., & Sharifi, A. (2015). Non-destructive detection of pesticide residues in cucumber using visible/near-infrared spectroscopy. *Food Additives & Contaminants: Part A*, 32(6), 857-863. <https://doi.org/10.1080/19440049.2015.1031192>

Kawano, S., Watanabe, H., & Iwamoto, M. (1992). Determination of sugar content in intact peaches by near infrared spectroscopy with fiber optics in interactance mode. *Journal of the Japanese Society for Horticultural Science*, 61(2), 445-451. <https://doi.org/10.2503/jjshs.61.445>

Kumar, N., Bansal, A., Sarma, G. S., & Rawal, R. K. (2014). Chemometrics tools used in analytical chemistry: An overview. *Talanta*, 123, 186-199. <https://doi.org/10.1016/j.talanta.2014.02.003>

Lafhal, S., Vanloot, P., Bombarda, I., Kister, J., & Dupuy, N. (2016). Chemometric analysis of French lavender and lavandin essential oils by near infrared spectroscopy. *Industrial Crops and Products*, 80, 156-164. <https://doi.org/10.1016/j.indcrop.2015.11.017>

Malegori, C., Marques, E. J. N., de Freitas, S. T., Pimentel, M. F., Pasquini, C., & Casiraghi, E. (2017). Comparing the analytical performances of Micro-NIR and FT-NIR spectrometers in the evaluation of acerola fruit quality, using PLS and SVM regression algorithms. *Talanta*, 165, 112-116. <https://doi.org/10.1016/j.talanta.2016.12.035>

Menesatti, P., Antonucci, F., Pallottino, F., Roccuzzo, G., Allegra, M., Stagno, F., & Intrigliolo, F. (2010). Estimation of plant nutritional status by Vis-NIR spectrophotometric analysis on orange leaves [*Citrus sinensis* (L) Osbeck cv Tarocco]. *biosystems engineering*, 105(4), 448-454. <https://doi.org/10.1016/j.biosystemseng.2010.01.003>

Miles, N. (2010). Challenges and opportunities in leaf nutrient data interpretation. In *Proc. S. Afr. Sug. Technol. Ass* (Vol. 83, pp. 205-215).

Mobasheri, M. R., & Rahimzadegan, M. (2012). Introduction to protein absorption lines index for relative assessment of green leaves protein content using EO-1 Hyperion datasets.

Moncada, G. W., Martín, M. I. G., Escuredo, O., Fischer, S., & Míguez, M. (2013). Multivariate calibration by near infrared spectroscopy for the determination of the vitamin E and the antioxidant properties of quinoa. *Talanta*, *116*, 65-70. <https://doi.org/10.1016/j.talanta.2013.04.079>

Nicolai, B. M., Theron, K. I., & Lammertyn, J. (2007). Kernel PLS regression on wavelet transformed NIR spectra for prediction of sugar content of apple. *Chemometrics and intelligent laboratory systems*, *85*(2), 243-252. <https://doi.org/10.1016/j.chemolab.2006.07.001>

Osborne, B. G., Fearn, T., & Hindle, P. H. (1993). *Practical NIR spectroscopy with applications in food and beverage analysis*. Longman scientific and technical.

Özyiğit, Y. A. Ş. A. R., & Bilgen, M. E. H. M. E. T. (2013). Use of spectral reflectance values for determining nitrogen, phosphorus, and potassium contents of rangeland plants. *Journal of Agricultural Science and Technology*, *15*(7), 1537-1545.

Rady, A. M., & Guyer, D. E. (2015). Evaluation of sugar content in potatoes using NIR reflectance and wavelength selection techniques. *Postharvest Biology and Technology*, *103*, 17-26. <https://doi.org/10.1016/j.postharvbio.2015.02.012>

Rahi, S., Mobli, H., Jamshidi, B., Azizi, A., & Sharifi, M. (2020). Different supervised and unsupervised classification approaches based on visible/near infrared spectral analysis for discrimination of microbial contaminated lettuce samples: Case study on E. coli ATCC. *Infrared Physics & Technology*, *108*, 103355. <https://doi.org/10.1016/j.infrared.2020.103355>

Taiz, L., Zeiger, E., Møller, I. M., & Murphy, A. (2015). *Plant physiology and development* (No. Ed. 6). Sinauer Associates Incorporated.

Tamburini, E., Ferrari, G., Marchetti, M. G., Pedrini, P., & Ferro, S. (2015). Development of FT-NIR models for the simultaneous estimation of chlorophyll and nitrogen content in fresh apple (*Malus domestica*) leaves. *Sensors*, *15*(2), 2662-2679. <https://doi.org/10.3390/s150202662>

Wang, C., Li, X., Wang, L., Yang, C., Chen, X., Li, M., & Ma, S. (2019). Prediction of N, P, and K Contents in Sugarcane Leaves by VIS-NIR Spectroscopy and Modeling of NPK Interaction Effects. *Transactions of the ASABE*, *62*(6), 1427-1433.