

Research Article

Vol. ?, No. ?, ?, p. ?-? (in Press)

Rapid and Non-destructive Estimation of Apple Tree NPK Contents based on Leaf Spectral Analysis

R. Azadnia¹, A. Rajabipour^{2*}, B. Jamshidi³, M. Omid²

1- PhD Student, 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- Associate Professor, Smart Agricultural Research Department, Agricultural Engineering Research Institute, Agricultural Research Education and Extension Organization, Karaj, Iran

(*- Corresponding Author Email: arajabi@ut.ac.ir)

Received: 17 September 2022
Revised: 02 November 2022
Accepted: 13 November 2022
Available Online: 13 November 2022

How to cite this article:

Azadnia, R., Rajabipour, A., Jamshidi, B., & Omid, M. (?). Rapid and Non-destructive Estimation of Apple Tree NPK Contents based on Leaf Spectral Analysis. *Journal of Agricultural Machinery*, (in Persian with English abstract). (in Press). <https://doi.org/10.22067/jam.2022.78770.1125>

Introduction

Apple is one of the most frequently consumed fruits in the world. It is a source of minerals, fiber, various biological compounds such as vitamin C, and phenolic compounds (natural antioxidants). The amount of nutrients plays a significant role in the growth, reproduction, and performance of agricultural products and plants. Chemical inputs can be accurately managed by predicting these elements. Thus, timely and accurate monitoring and managing the status of crop nutrition is crucial for adjusting fertilization, increasing the yield, and improving the quality. This approach minimizes the application of chemical fertilizers and reduces the risk of environmental degradation. In crop plants, leaf samples are typically analyzed to diagnose nutrient deficiencies and imbalances, as well as to evaluate the effectiveness of the current nutrient management system. Therefore, the main aim of this study is to estimate the level of Nitrogen (N), Phosphorus (P), and Potassium (K) elements in the leaves of the apple tree using the non-destructive method of Visible/Near-infrared (Vis/NIR) spectroscopy at the wavelength range of 500 to 1000 nm coupled with chemometrics analysis.

Materials and Methods

This research investigated the potential of the Vis/NIR spectroscopy coupled with chemometrics analysis for predicting NPK nutrient levels of apple trees. In this study, 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) was 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 the leaf samples was done in interactance mode. Ten random points were selected on each leaf to capture reflectance spectra and the averaged spectrum was used to determine the reflectance (R). The data was then transformed into absorbance ($\log 1/R$) for chemometrics analysis. Following the spectroscopy measurements, the NPK contents were measured using reference methods. Afterward, Partial Least Square (PLS) multivariate calibration models were developed based on the reference measurements and spectral information using different pre-processing techniques. To remove the unwanted effects, various pre-processing methods were utilized to obtain an accurate calibration model. To evaluate the proposed models, the Root Mean Square Error of calibration and prediction sets (RMSEC and RMSEP), as well as the correlation coefficient of calibration and prediction sets (r_c and r_p), and Residual Predictive Deviation (RPD) were calculated.

Results and Discussion



©2022 The author(s). This is an open access article distributed under [Creative Commons Attribution 4.0 International License \(CC BY 4.0\)](https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/).

<https://doi.org/10.22067/jam.2022.78770.1125>

The statistical metrics were calculated for the evaluation of PLS models and the results indicated that the PLS models could efficiently predict the NPK contents with satisfactory accuracy. The model with the best performance for nitrogen prediction was based on the standard normal variate pre-processing method in combination with the second derivative (SNV+D2) and resulted in $r_c=0.988$, $RMSEC=0.028\%$, $r_p=0.978$, $RMSEP=0.034\%$, and RPD of 7.47. The best model for P content prediction resulted in $r_c=0.967$, $RMSEC=0.0051\%$, $r_p=0.958$, $RMSEP=0.0057\%$, and RPD of 5.96. Additionally, the PLS model based on MSC+D2 pre-processing method resulted 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 predicting K content. Moreover, the weakest performing model was related to the estimation of P content without pre-processing with $r_c=0.774$, $RMSEC=0.013\%$, $r_p=0.685$, $RMSEP=0.018\%$, and RPD value of 1.87. Based on the obtained results, the proposed PLS models coupled with suitable pre-processing methods were able to predict the nutrient 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 field can significantly save time and lower laboratory expenses. Therefore, due to the accuracy of the Vis/NIR spectroscopy technique and according to the obtained results, this method can be used to actualize a portable system based on Vis/NIR spectroscopy to estimate the nutrient elements needed by the apple trees in the orchards and to increase the productivity of the orchards.

Keywords: Nutrients, Partial Least Squares, Pre-processing, Spectroscopy, Visible/Near-infrared

مقاله پژوهشی

جلد ۴، شماره ۴، آماده انتشار، ص ۴-۳

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

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

تاریخ دریافت: ۱۴۰۱/۰۶/۲۶

تاریخ پذیرش: ۱۴۰۱/۰۸/۲۲

چکیده

میزان عناصر مغذی نقش به‌سزایی 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 برهم‌کنش انجام گرفت. برای حذف اثرات ناخواسته از روش‌های مختلف پیش‌پردازش استفاده شد تا مدل واسنجی دقیق حاصل شود. در این راستا، مدل واسنجی چندمتغیره حداقل مربعات جزئی (PLS) بر پایه اندازه‌گیری‌های مرجع و اطلاعات طیفی با روش‌های مختلف پیش‌پردازش مورد بررسی قرار گرفت. بهترین مدل ارائه‌شده مبتنی بر روش پیش‌پردازش توزیع نرمال استاندارد در ترکیب با مشتق دوم (SNV+D2) با مقادیر $r_c=0/988$ ، $r_p=0/978$ ، $RMSEC=0/028$ ، $RMSEP=0/034$ ، $RPD=7/47$ متعلق به پیش‌بینی نیتروژن بود. بهترین مدل برای ارزیابی میزان پتاسیم و فسفر نیز براساس روش پیش‌پردازش تصحیح پراکنش افزایشنده در ترکیب با مشتق دوم (MSC+D2) به‌ترتیب $r_p=0/976$ ، $RMSEP=0/021$ ، $RPD=7/10$ و $r_p=0/958$ ، $RMSEP=0/057$ ، $RPD=5/96$ به‌دست آمد. نتایج به‌دست‌آمده حاصل از این پژوهش نشان می‌دهد که طیف‌سنجی Vis/NIR می‌تواند به‌عنوان یک ابزار غیرمخرب، سریع و قابل‌اعتماد برای پیش‌بینی مقدار عناصر مغذی درخت سیب استفاده و از مصرف بیش از حد نهاده‌های شیمیایی و پیامدهای ناشی از آن جلوگیری شود.

واژه‌های کلیدی: پیش‌پردازش، حداقل مربعات جزئی، طیف‌سنجی، عناصر مغذی، مرئی / فروسرخ نزدیک

مقدمه

درختان هستند که به‌طور چشمگیری روی رشد، عملکرد و فاکتورهای کیفی اثر می‌گذارند. اطلاع به‌موقع از میزان مواد مغذی محصولات اهمیت ویژه‌ای دارد تا نیازهای غذایی به‌اندازه 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 زیست‌محیطی کاهش یابد (Erel, Dag, Ben-Gal, Schwartz, & Yermiyahu, 2008).

برگ درخت یکی از عوامل ارزیابی میزان عناصر مغذی آن است، چراکه برگ گیاهان متابولیسم فعالی دارند و منبع اصلی ذخیره مواد

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, Zeiger, Møller, & Murphy, 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

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

۳- دانشیار، بخش تحقیقات هوشمندسازی کشاورزی، موسسه تحقیقات فنی و مهندسی کشاورزی، سازمان تحقیقات، آموزش و ترویج کشاورزی، کرج، ایران

(Email: arajabi@ut.ac.ir)

*- نویسنده مسئول:

مرجع توسعه دادند. همچنین، روش‌های طبقه‌بندی مختلف خطی، درجه دوم و ماهالانویس براساس روش PCA-DA^۶ 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 به‌منظور غربالگری خیارها بر پایه بیشینه مجاز سطح نیترات در محصول استفاده شود (Jamshidi & Yazdanfar, 2022).

فرهادی و همکاران (Farhadi, Afkari-Sayyah, Jamshidi, & Gorji, 2020) با استفاده از طیف‌سنجی Vis/NIR 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 PLS 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 با استفاده از طیف‌سنجی Vis/NIR همراه با روش‌های تجزیه و تحلیل شیمی‌سنجی^۵ بار میکروبی نمونه‌های کاهو در محدود طیفی ۳۵۰ تا ۱۱۰۰ نانومتر بررسی شد. در این تحقیق از پنج الگوریتم SVM^۶، SIMCA^۷، PLS-DA^۸، PCA^۹ و HCA^{۱۰} برای تشخیص نمونه‌های کاهوی آلوده به میکروب استفاده شد. نتایج نشان داد که بهترین مدل ارائه‌شده با استفاده از الگوریتم نظارت‌شده PLS-DA همراه با روش پیش‌پردازش SNV+D2 به‌دست آمد. ضریب همبستگی بین داده‌های طیفی Vis/NIR و داده‌های مرجع ۰/۹۸۹ r_c به‌دست آمد، که توانایی این تکنیک در تشخیص آلودگی نمونه‌های کاهو را نشان می‌دهد (Rahi, Mobli, Jamshidi, & Azizi, & Sharifi, 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 به‌دست‌آمده از مدل CARS-PCA-PLS استفاده شد. نتایج به‌دست‌آمده 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 فرسرخ نزدیک میزان نیتروژن و کلروفیل برگ را اندازه‌گیری کردند. محققان برای ارزیابی

مغذی و کربوهیدرات برای درختان هستند (Embleton, Jones, & Reuther, 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، پرهزینه، 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 فرسرخ نزدیک (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, Hofmann, & Tauscher, 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).

عباسی و همکاران (Abasi, Minaei, Jamshidi, Fathi, & Khoshtaghaza, 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 حداقل مربعات جزئی^۲ (PLS) استفاده کردند. نتایج به‌دست آمده نشان داد که استفاده از روش تبدیل موجک^۳ 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 آلوده 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

6- Support Vector Machine
7- Soft Independent Modeling of Class Analogy
8- Partial Least Square-Discriminant Analysis
9- Hierarchical Cluster Analysis

1- Near-infrared Spectroscopy
2- Partial Least Squares
3- Wavelet Transform
4- Principal Component Analysis-Discriminant Analysis
5- Chemometrics Analysis

عناصر NPK برگ درخت سیب با استفاده تلفیق طیفسنجی NIR و روش‌های شیمی‌سنجی انجام شد.

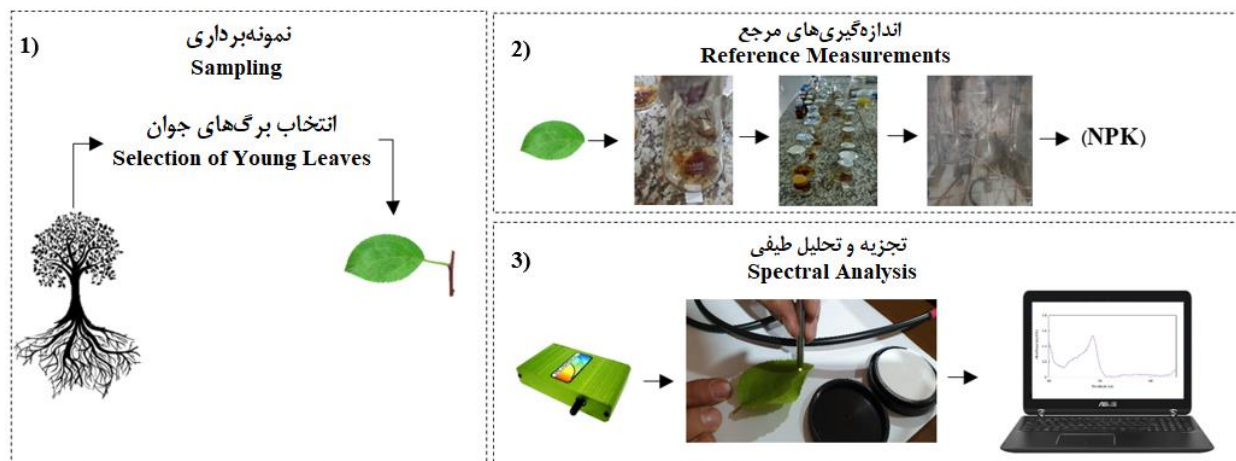
مواد و روش‌ها

جمع‌آوری نمونه‌ها و طیفسنجی

در این مطالعه، ۸۰ نمونه برگ درخت سیب از میان درختان سیب رد چیف^۱، فوجی^۳ و گرنی اسمیت^۴ به‌صورت تصادفی از باغات آذربایجان غربی جمع‌آوری و طیفسنجی شدند. از یک طیفسنج Green-Wave (Stellar Net Inc., USA) با نسبت سیگنال به نویز ۱:۴۰۰، مجهز به آشکارساز حساس (۱۰۲۴ عنصر) و کاوشگر فیبر نوری برای طیفسنجی در طول موج ۳۵۰ تا ۱۱۰۰ نانومتر استفاده شد. طیف‌گیری از نمونه‌ها در حالت برهم‌کنش^۵ 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 به‌صورت تصادفی انتخاب و طیف‌گیری شدند. طیف میانگین به‌عنوان بازتاب (R) برای تجزیه و تحلیل استفاده شد. در نهایت، تمام داده‌ها به جذب (Log1/R) تبدیل شدند.

میزان نیتروژن از مدل PLS مبتنی بر تبدیل فوریه^۱ استفاده کردند. نتایج به‌دست‌آمده نشان داد که روش ارائه‌شده توانست به‌منظور مدیریت صحیح استفاده از نهاده‌های شیمیایی میزان نیتروژن را با دقت بالای ۰/۹۸ ارزیابی کند (Tamburini, Ferrari, Marchetti, Pedrini, & Ferro, 2015).

مطابق با مطالعات انجام‌شده، 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 محیط‌زیست، ضروری است تا با استفاده از یک روش سریع و غیرمخرب میزان عناصر نیتروژن، فسفر و پتاسیم بهینه برای درخت در طول دوره رشد ارزیابی شود. پژوهش حاضر با هدف تعیین میزان



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

Fig.1. Workflow of measuring NPK nutrients in apple tree leaves using Vis/NIR spectroscopy

استفاده شد. ابتدا نمونه‌های موردنظر توسط اسید سولفوریک هضم و نیتروژن موجود به سولفات آمونیوم تبدیل شد. ازت سولفات آمونیوم به

اندازه‌گیری مرجع

به‌منظور برآورد درصد نیتروژن نمونه‌های برگ از روش کج‌لدال

4- Granny Smith
5- Interactance

1- Fourier Transform
2- Red Chief
3- Fuji

اپتی‌کال جفت القایی^۱ (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.

صورت آمونیاک آزاد و توسط اسید بوریک به بورات آمونیوم تبدیل و با استفاده از اسید سولفوریک ۰/۱ آن را تیتر شد. 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-

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
نیتروژن Nitrogen (%)	0.254	1.03	1.43	0.66	0.212	0.89	1.5	0.54
فسفر Phosphorus (%)	0.034	0.086	0.133	0.022	0.027	0.08	0.14	0.026
پتاسیم Potassium (%)	0.147	0.45	0.73	0.22	0.12	0.53	0.79	0.203

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 مشتق‌گیری 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.

مدل‌سازی PLS

به منظور ایجاد ارتباط خطی بین ویژگی‌های کیفی اندازه‌گیری شده و داده‌های طیفی از روش مدل‌سازی رگرسیون چندمتغیره خطی حداقل مربعات جزئی (PLS) استفاده شد. حداقل مربعات جزئی به عنوان یک روش تحت نظارت خطی، برای ایجاد یک مدل پیش‌بینی برای اندازه‌گیری‌های کمی کاربرد دارد (Daszykowski, Kaczmarek, Vander Heyden, & Walczak, 2007; Kumar, Bansal, Sarma, & Rawal, 2014). همپوشانی، تداخل و حذف اطلاعات به طور چشمگیری با استفاده از مدل‌سازی PLS کاهش می‌یابد (Lafhal, Vanloot, Bombarda, Kister, & Dupuy, 2016). مزیت استفاده از این روش شیمی‌سنجی نسبت به سایر روش‌ها سادگی، سرعت و عملکرد خوب آن است (Malegori *et al.*

پیش‌پردازش داده‌ها

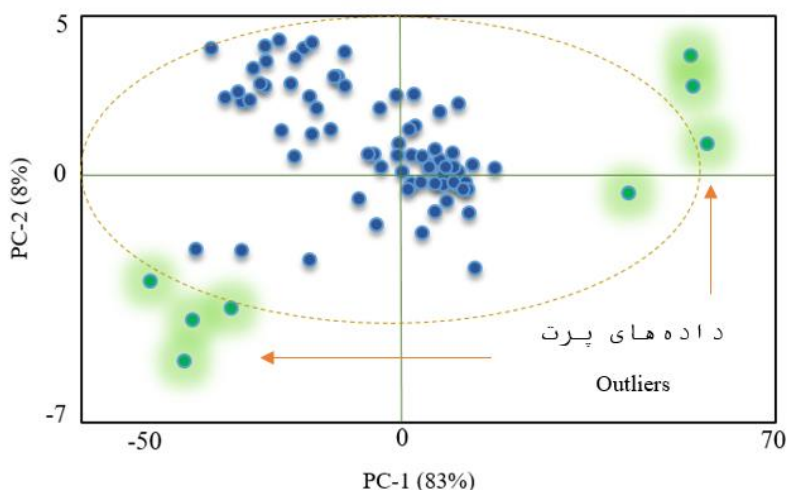
اطلاعات و داده‌های غیرمفید تاثیر منفی روی طیف‌سنجی می‌گذارد و مدل رگرسیونی نامناسبی بین طیف‌ها و پارامترهای شیمیایی ایجاد می‌کند. این اطلاعات غیرمفید در اثر عواملی مانند متغیر بودن فاصله آشکارساز نمونه، اندازه نمونه و نویزهای حاصل از خود دستگاه و محیط ایجاد می‌شود. برای حذف این عوامل از روش‌های پیش‌پردازش تصحیح پراکنش افزایش یافته^۲ (MSC) و توزیع نرمال استاندارد^۳ (SNV) استفاده می‌شود (Fu, Ying, Lu, Xu, & Yu, 2007). برای هموارسازی و حذف نویزهای تصادفی موجود در طیف‌ها از فیلتر میانگین‌گیر متحرک^۴ (MA) با عرض پنجره ۳ و هم چنین هموارسازی ساویتزکی-گولای^۵ (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) برپایه 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, Mohajerani, Jamshidi, Minaei, & Sharifi, 2016). در واقع با افزایش درجه مشتق‌گیری پیک‌های جذبی پهن‌تر می‌شوند و به همین دلیل است که D2 نسبت به D1 از قدرت تفکیک

3- Standard Normal variate
4- Moving Average
5- Savitzky-Golay

1- Inductive Coupled Plasma-Optical Emission Spectrometry
2- Multiplicative Scatter Correction

شد. در این تحقیق ابتدا داده‌های پرت با استفاده از روش تجزیه مولفه‌های اصلی (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.

(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



شکل ۲- تشخیص داده‌های پرت با استفاده از روش تجزیه مولفه‌های اصلی
Fig.2. Detection of outlier data using PCA method

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 برحسب درصد به دست آمد. به این صورت که میزان N، P و K برحسب درصد در محدوده‌های ۱/۵-۰/۵۴، ۰/۱۴-۰/۲۶ و ۰/۲۰۳/۷۹-۰/۰۲۲/۷۳ برای دسته واسنجی و ۱/۴۳-۰/۶۶، ۰/۱۳۳-۰/۰۲۲ و ۰/۰۲۲/۷۳-۰/۰۲۲/۷۳ 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

ارزیابی مدل

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) اعتبارسنجی شدند (Nicolai, Theron, & Lammertyn, 2007). همچنین، توانایی مدل PLS با مقادیر نسبت انحراف پیش‌بینی^۵ (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, Martín, Escuredo, Fischer, & Míguez, 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.

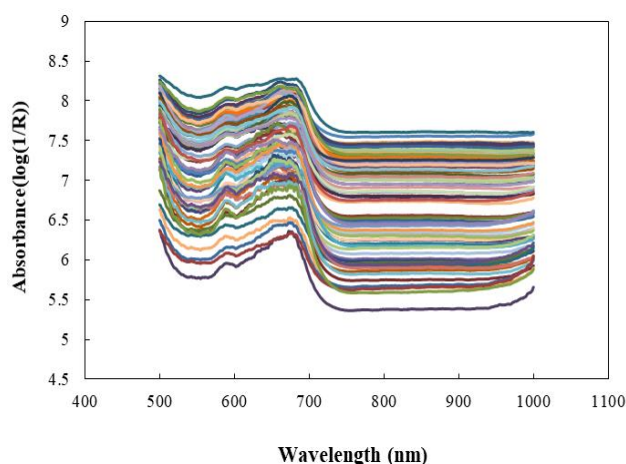
نتایج و بحث

داده‌های مرجع

4- Correlation Coefficient of Prediction
 5- Residual Predictive Deviation

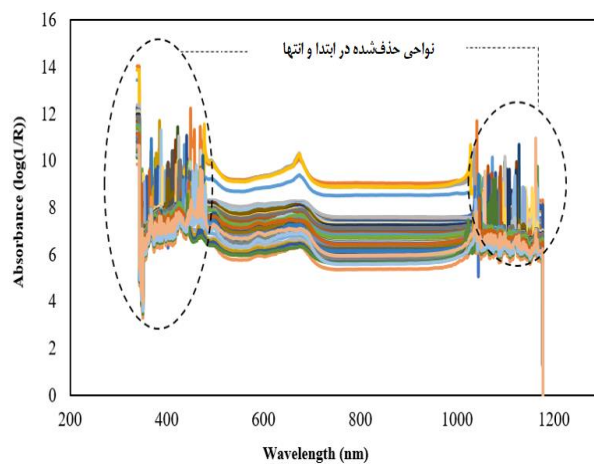
1- Root Mean Square Error of Calibration
 2- Root Mean Square Error of Prediction
 3- Correlation Coefficient of Calibration

ضعیفی دیده می‌شود که می‌تواند مربوط به کاهش گلوکز در این ناحیه باشد (Fernández-Navales, López, Sánchez, García, & Morales, 2008; Osborne, Fearn, & Hindle, 1993). اما در ناحیه فرسرخ نزدیک در اطراف طول موج ۹۹۰ نانومتر به بعد نیز یک افزایش تدریجی وجود دارد که این امر احتمالاً می‌تواند به دلیل وجود اورتون‌های دوم پیوند O-H و N-H باشد. در واقع این پیک بیشتر ناشی از جذب آب و کربوهیدرات‌ها است (Chen, Zhang, Miao, & Asakura, 2010; Kawano, Watanabe, & Iwamoto, 1992). وجود این تغییرات در برگ‌های درختان سیب منجر به تغییرات در مقدار جذب نور می‌شود.



ب) (ب)

مطالعه ساختاری براساس شناسایی اورتون‌ها و جذب‌های ترکیبی گروه‌های عاملی (N-H و O-H, C-H) انجام می‌شود. مطابق با شکل ۳ یک پیک مربوط به کلروفیل a در محدوده ۵۹۰ نانومتر مشاهده می‌شود. همان‌طور که 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



الف) (الف)

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

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 $RMSEP$ و r_p 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 طوری که مدل PLS پیشنهادی توانست براساس روش پیش‌پردازش SNV+D2 با مقادیر $RMSEP=0/034$ و $r_p=0/978$ 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 برپایه 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.

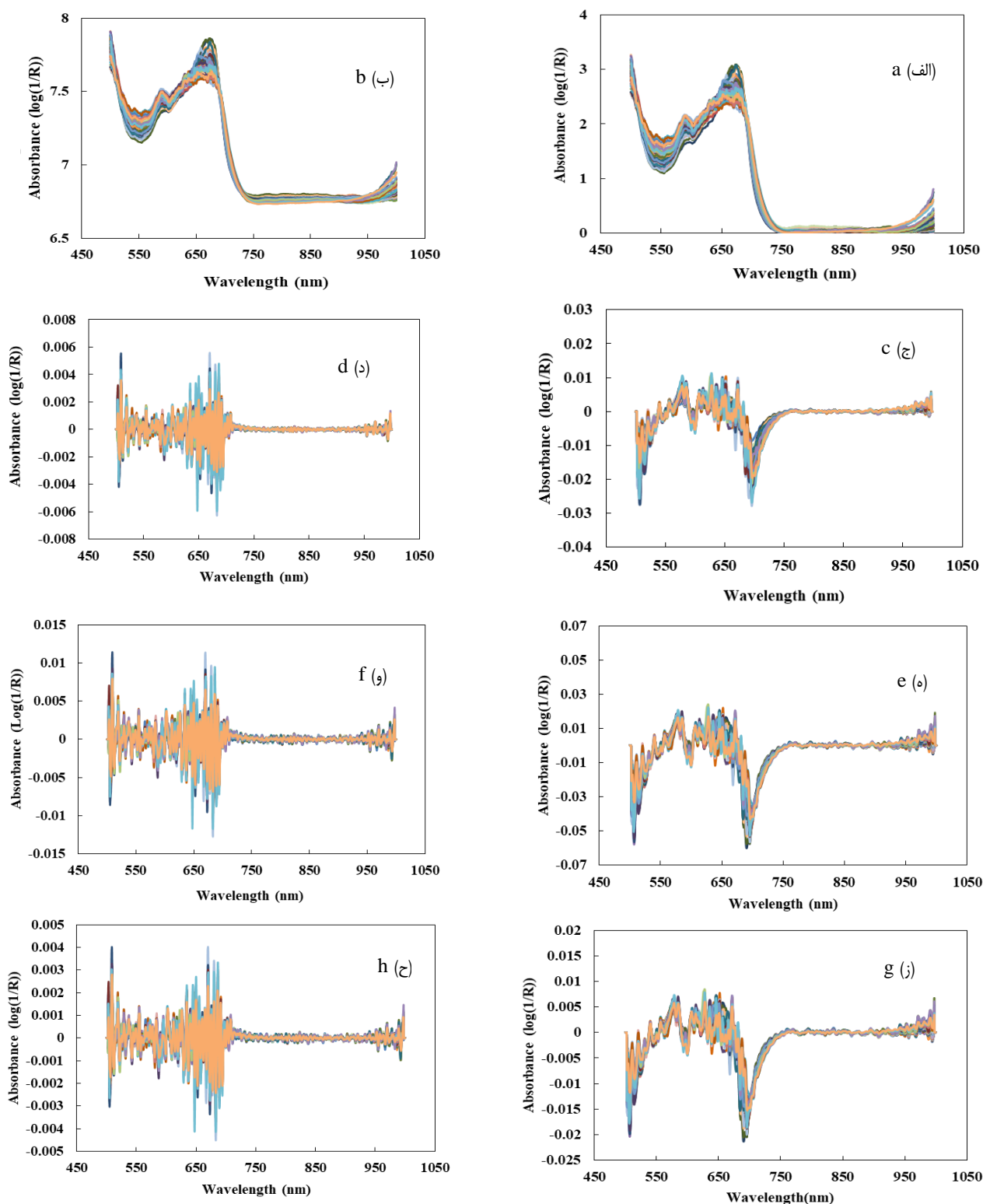
پیش‌پردازش طیف‌ها

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 SNV و MSC 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.

نتایج مدل‌سازی

مدل PLS برای ارزیابی مقدار نیتروژن

مطابق با جدول ۲ مقادیر $RMSEP$ و r_p 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



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، (و) SNV+D2، (ز) MSC+D1، (ح) 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, and h) MSC+D2

جدول ۲- نتایج واسنجی و پیش‌بینی مدل‌های PLS 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

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

مدل PLS برای ارزیابی مقدار فسفر

در جدول ۳ مقادیر RMSEP و r_p برای داده‌های بدون پیش‌پردازش به ترتیب ۰/۰۱۸ درصد و ۰/۶۸۵ است. این مقادیر برای روش‌های پیش‌پردازش SNV به ترتیب ۰/۰۱۵ درصد و ۰/۷۱۲ و برای روش MSC به ترتیب ۰/۰۱۳ درصد و ۰/۷۸۳ به دست آمد که نسبت به داده‌های طیفی بدون پیش‌پردازش نتایج بهتری بود. مطابق با جدول ۳ مدل PLS بر پایه مشتق اول و دوم نتایج بهتری نسبت به روش‌های پیش‌پردازش SNV و MSC داشت. مدل PLS برپایه روش پیش‌پردازش D2 با $r_p=0/948$ عملکرد بهتری نسبت به D1 داشت. مدل‌های خطی پیشنهاد شده با ترکیب روش‌های پیش‌پردازشی

SNV و MSC با مشتق اول و دوم نتایج قابل قبولی داشت. دو مدل PLS ارائه شده براساس 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 برپایه 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 PLS 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

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

مدل PLS برای ارزیابی مقدار پتاسیم

مطابق با جدول ۴ مقادیر RMSEP و r_p برای مدل PLS برپایه

برگ درخت سیب مناسب نیست.

مدل PLS پیشنهادی توانست براساس روش پیش‌پردازش MSC+D2 با مقادیر $RMSEP=0/021$ و $r_p=0/976$ بهترین عملکرد را در بین روش‌های پیش‌پردازشی برای ارزیابی میزان پتاسیم داشته باشد. مقادیر RPD به‌دست آمده برای ارزیابی میزان پتاسیم در این پژوهش بین $7.10 < RPD < 2.19$ بود. همان‌طور که اشاره شد کمترین مقدار RPD برای مدل PLS بر پایه مشتق اول به‌دست آمد. از سوی دیگر، بزرگ‌ترین RPD برای مدل PLS بر پایه روش پیش‌پردازش MSC+D2 با مقدار $7/10$ به‌دست آمد.

داده‌های بدون پیش‌پردازش به‌ترتیب $0/063$ درصد و $0/746$ به‌دست آمد. مقادیر $RMSEP$ و r_p برای مدل PLS بر اساس دو روش پیش‌پردازش SNV و MSC به‌ترتیب $0/061$ درصد و $0/768$ و $0/058$ درصد و $0/794$ به‌دست آمد. با توجه به این که مقادیر r_p دو روش پیش‌پردازش اشاره‌شده 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 6 به‌دست آمد که توانایی عالی این مدل را برای ارزیابی میزان پتاسیم نشان داد. بالعکس مدل مقدار RPD به‌دست‌آمده برای مدل ارائه‌شده خطی بر پایه D1 نشان داد که این مدل برای ارزیابی میزان پتاسیم

جدول ۴- نتایج واسنجی و پیش‌بینی مدل‌های PLS 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

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

عناصر N، K و P برحسب بهترین مدل رگرسیون توسعه‌داده‌شده را نشان می‌دهد. نتایج پیش‌بینی میزان عنصر نیتروژن نسبت به دو عنصر فسفر و پتاسیم بهتر بود. این امر می‌تواند به دلیل غلظت بالای عنصر نیتروژن نسبت به دو عنصر دیگر در سطح برگ باشد.

نتایج به‌دست‌آمده از این پژوهش در پیش‌بینی میزان عناصر NPK برگ درختان سیب بهتر از نتایج پژوهشی است که به‌منظور ارزیابی میزان عناصر NPK برگ‌های نیشکر توسط مدل PLS انجام شد (Wang et al., 2019). در مطالعه‌ای دیگر، (Menesatti et al., 2010) میزان عناصر مغذی برگ درختان پرتقال را به‌صورت غیرمخرب با تلفیق طیف‌سنجی و روش‌های شیمی‌سنجی تشخیص دادند. نتایج حاصل از مدل‌سازی نشان داد که مدل ارائه‌شده توسط آن‌ها توانست میزان عناصر نیتروژن، فسفر و پتاسیم را به‌ترتیب با $0/82$ ، $0/18$ و $0/98$ 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 به‌دست‌آمده نشان داد که مدل ارائه‌شده توسط

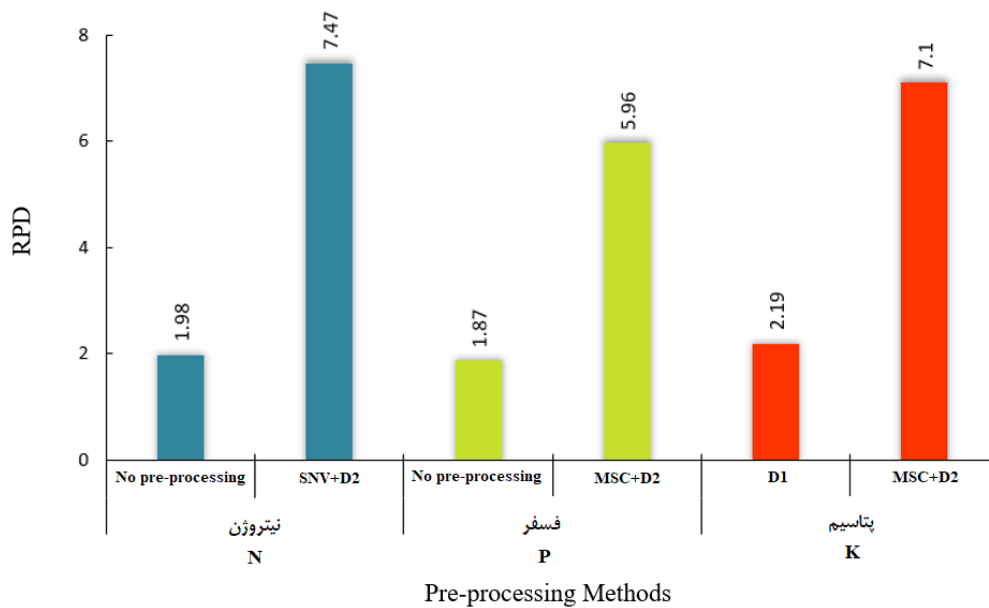
شکل ۵ مقادیر مربوط به پارامتر RPD برای مدل‌های PLS ارائه‌شده را نشان می‌دهد. با مقایسه مقادیر RPD برای هر سه عنصر مشخص شد که مدل PLS مبتنی بر روش پیش‌پردازش SNV+D2 برای ارزیابی نیتروژن بهترین عملکرد را در بین سایر مدل‌ها داشت. همچنین مدل ارائه‌شده بر پایه داده‌های بدون پیش‌پردازش برای ارزیابی فسفر با کمترین مقدار RPD نشان داد که این مدل برای ارزیابی میزان فسفر برگ درختان سیب مناسب نیست. همچنین نتایج به‌دست‌آمده 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.

با مقایسه نتایج به‌دست‌آمده مشخص شد که در بین مدل‌های PLS ارائه‌شده برای ارزیابی میزان عناصر NPK برگ درختان سیب، مدل PLS بر پایه روش‌های پیش‌پردازش SNV+D2 و MSC+D2 که به‌ترتیب برای ارزیابی میزان نیتروژن و پتاسیم ارائه شدند نسبت به سایر مدل‌ها بهترین عملکرد را داشتند. شکل ۶ نتایج پیش‌بینی میزان

می‌شود. نمونه‌برداری در زمان مناسب طول دوره رشد و استفاده از برگ‌های تازه و جوان برای ارزیابی می‌تواند در پیش‌بینی میزان عناصر تأثیرگذار باشد.

با مشاهده نتایج به‌دست‌آمده می‌توان به این نتیجه رسید که روش غیرمخرب ارائه‌شده 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 به‌صورت دقیق و صحیح مدیریت شود.

آن‌ها قادر بود میزان نیتروژن، فسفر و پتاسیم را به‌ترتیب با $0/85$ ، $0/43$ و $0/84$ پیش‌بینی نماید (Özyiğit & Bilgen, 2013). با مقایسه نتایج مشخص شد که مدل PLS ارائه‌شده 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 اشاره‌شده، کم بودن میزان غلظت فسفر در برگ گزارش شده است. از این رو، توجه به زمان نمونه‌برداری از اهمیت بالایی در بحث مدل‌سازی محسوب



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

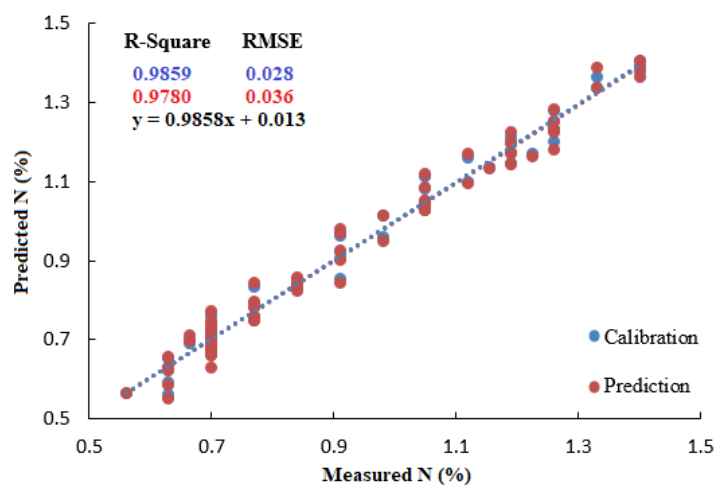
Fig.5. Comparison of the RPD value of the presented models to estimate the amount of NPK nutrients in the leaves of apple trees

پیش‌بینی عناصر تغذیه‌ای NPK بود. مقادیر این پارامتر برای نیتروژن بین $7/47-1/98$ ، برای فسفر $5/96-1/87$ و برای پتاسیم $7/1-2/19$ به‌دست آمد.

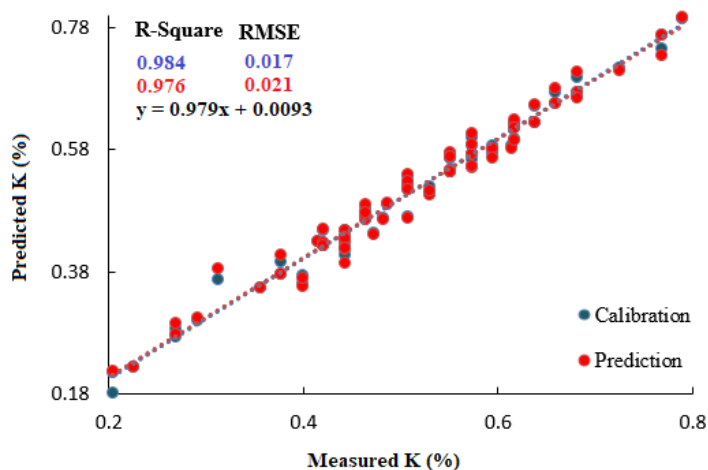
در سال‌های اخیر طیف‌سنجی میدانی به‌دلیل استفاده آسان و سریع، قابلیت حمل و ارزان بودن، نظر پژوهشگران زیادی را به خود جلب کرده است. لذا پیاده‌سازی یک سامانه قابل حمل به‌منظور ارزیابی میزان عناصر مغذی باغات می‌تواند به‌طور چشمگیری از هدر رفتن زمان و هزینه‌های بالای آزمایشگاهی جلوگیری کند و با مدیریت صحیح و کنترل به‌موقع، عملکرد باغات را افزایش دهد. بنابراین با توجه به توانایی تکنیک طیف‌سنجی Vis/NIR و مطابق با نتایج به‌دست‌آمده می‌توان از این روش برای پیاده‌سازی یک سامانه قابل حمل مزرعه‌ای مبتنی بر طیف‌سنجی Vis/NIR به‌منظور ارزیابی عناصر مغذی موردنیاز درختان سیب در باغات استفاده کرد و عملکرد باغات را افزایش داد.

نتیجه‌گیری

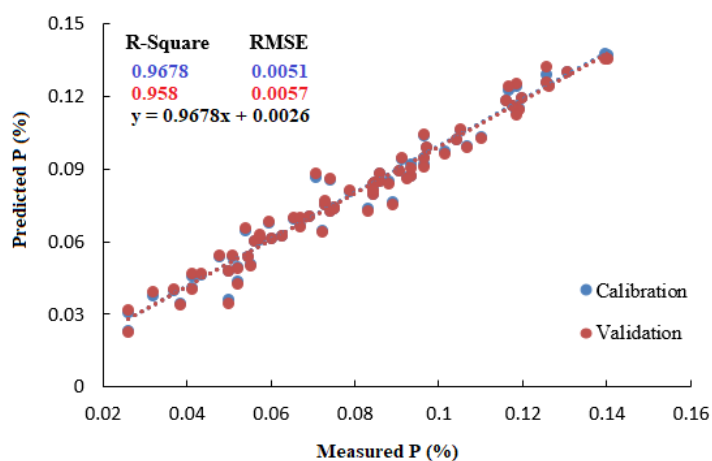
طیف‌سنجی Vis/NIR به‌عنوان یک روش سریع، غیر شیمیایی و غیرمخرب به‌صورت گسترده‌ای به‌منظور کیفیت‌سنجی محصولات کشاورزی مورد استفاده قرار می‌گیرد. نتایج حاصل از این پژوهش نشان داد که تلفیق طیف‌سنجی و روش‌های شیمی‌سنجی می‌تواند به‌عنوان یک روش غیرمخرب و دقیق برای ارزیابی میزان عناصر NPK محصولات کشاورزی استفاده شود. اعتبارسنجی مدل‌های توسعه‌یافته بر پایه ترکیب انواع روش‌های پیش‌پردازش 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 ($r_c=0/988$ ، $r_p=0/978$ ، $RMSEC=0/028$ ، $RMSEP=0/034$). همچنین مقادیر RPD نشان‌دهنده عملکرد عالی مدل‌های ارائه‌شده برای



(a) الف



(b) ب



(c) 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 the PLS model to estimate the amount of a) nitrogen using the SNV+D2 method, b) potassium using the MSC+D2 method, and c) phosphorous using the MSC+D2 method

References

1. 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>
2. 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. <https://doi.org/10.3923/ajps.2017.200.210>
3. 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>
4. 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>
5. 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>
6. 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.
7. 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>
8. 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>
9. Fernández-Novales, 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>
10. 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.
11. 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>
12. 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>
13. 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>
14. 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>
15. 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>
16. 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>
17. 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>
18. Miles, N. (2010). Challenges and opportunities in leaf nutrient data interpretation. In *Proceedings of The South African Sugar Technologists' Association*, 83, 205-215.
19. 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.
20. 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>

21. 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>
22. Osborne, B. G., Fearn, T., & Hindle, P. H. (1993). *Practical NIR spectroscopy with applications in food and beverage analysis*. Longman scientific and technical.
23. 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.
24. 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>
25. 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>
26. Taiz, L., Zeiger, E., Møller, I. M., & Murphy, A. (2015). *Plant physiology and development* (No. Ed. 6). Sinauer Associates Incorporated.
27. 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>
28. 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.