

پیش‌بینی مواد جامد قابل حل و اسیدیته قابل تیترا میوه گلابی با استفاده طیف‌سنجی فروسرخ نزدیک

نرگس سعادت‌تی شرفه^{۱*}، ولی رسولی شریانی^۲، ابراهیم تقی‌نژاد^۳، عبدالمجید معین فر^۴

۱. دانشجوی کارشناسی ارشد گروه مهندسی مکانیک بیوسیستم دانشگاه محقق اردبیلی
(nrgsaadati1993@gmail.com)

۲. دانشیار گروه مهندسی مکانیک بیوسیستم دانشگاه محقق اردبیلی (vrasooli@uma.ac.ir)

۳. استادیار گروه مهندسی مکانیک بیوسیستم دانشگاه محقق اردبیلی (nrgsaadati1993@gmail.com)

۴. دانش‌آموخته دکتری گروه مهندسی مکانیک بیوسیستم دانشگاه محقق اردبیلی (majid.mf93@gmail.com)

چکیده

تشخیص خواص کیفی میوه گلابی معمولاً با استفاده از روش‌های مخرب انجام می‌شود که چنین روش‌های معمولاً هزینه بر و وقت گیر هستند، بنابراین یافتن روش‌هایی که بصورت غیر مخرب امکان سنجش خواص کیفی میوه را تعیین کند دارای اهمیت است. هدف از این تحقیق تعیین خواص کیفی میوه گلابی طی دوره انبارمانی با استفاده از طیف‌سنجی فرسرخ است. میوه‌ها در سه محیط با دماهای متفاوت ۰، ۵ و ۱۰ درجه سلسیوس ذخیره شدند. سپس طیف‌های Vis/NIR برای هر نمونه از ۴ نقطه میوه اندازه‌گیری شد. در مرحله بعد ویژگی‌های کیفی میوه گلابی (مواد جامد محلول SSC و اسیدیته قابل تیترا TA) بر اساس روش‌های شیمیایی-آزمایشگاهی و با استفاده از ابزار و دستورالعمل‌های مرجع تعیین شد. بوسیله پیش‌پردازش‌های متنوع تأثیرات عوامل مزاحم به حداقل رسید. در نهایت با استفاده از داده‌های منتج از طیف‌سنجی و آزمایش‌های مرجع بر اساس روش رگرسیون حداقل مربعات (PLS) اقدام به مدل‌سازی گردید. دقت پیش‌بینی مربوط به SSC براساس طیف پیش‌پردازش شده با مشتق اول و با دقت $R^2=0/95$ و $SDR=4/8$ حاصل شد. دقت پیش‌بینی مربوط به TA براساس طیف پیش‌پردازش شده با مشتق دوم و با دقت $R^2=0/96$ و $SDR=6/1$ حاصل شد. نتایج این تحقیق نشان داد که طیف‌سنجی فرسرخ می‌تواند بعنوان روشی کم‌هزینه و سریع جایگزین روش‌های مخرب سنتی برای اندازه‌گیری خواص کیفی میوه باشد.

کلمات کلیدی:

طیف‌سنجی - پیش‌پردازش - فرسرخ نزدیک - گلابی - مواد جامد محلول.

*ترگس سعادت‌تی شرفه

مقدمه

تقاضا برای میوه و سبزیجات با کیفیت که دارای مواد مغذی و ویتامین‌های بیشتری هستند در چند دهه گذشته روبه افزایش بوده است. بنابراین یافتن راه‌کارهایی برای شناسایی و تخمین مواد مغذی و ویتامین‌های محصولات کشاورزی از اهمیت بالایی در سال‌های اخیر برخوردار بوده است. بنابراین درجه‌بندی میوه‌ها بر اساس کیفیت و میزان مواد مغذی و ویتامین‌های آن یکی از الزامات پس از برداشت است که ارزش تجاری میوه‌ها را افزایش می‌دهد [۸]. برای بدست آوردن اطمینان بیشتر در مورد کیفیت محصولات درجه بندی شده، ارزیابی کیفی باید بر اساس نمونه‌های زیادی باشد و از سوی دیگر باید به صورت سریع و غیرمخرب انجام شود تا در وقت و هزینه صرفه جویی شده و دقت افزایش یابد [۳]. در چهار دهه اخیر روش‌های متعددی برای ارزیابی کیفی مواد مغذی و ویتامین‌های میوه به صورت غیرمخرب ابداع شده است که تنها تعداد اندکی از آن‌ها توانسته‌اند شرایط مطلوب از لحاظ فنی و صنعتی را برآورده سازد و توجیه اقتصادی داشته باشند. روش‌های اپتیکی، مکانیکی، شیمیایی و امواج الکترومغناطیسی و صوتی در توسعه آزمون‌های غیرمخرب نقش اساسی داشته‌اند، اما روش‌های به کار رفته توانایی کاوش ویژگی‌های محدودی از میوه‌ها را دارند. بنابراین لازم است شرایط حاکم در این روش‌ها به دقت بررسی شده و در گزارش یا ثبت نتایج آزمایش لحاظ شوند [۱۵]. در میان روش‌های ذکر شده کاربرد امواج الکترومغناطیس به ویژه فناوری طیف‌سنجی مرئی/فروسرخ نزدیک با توجه به دقت بالا و قابلیت تکرارپذیری آن، تجاری‌سازی شده است و ارزش قابل توجهی برای صنایع پس از برداشت میوه داشته است [۶].

طیف‌سنجی NIR برای اولین بار توسط نوریس [۱۱] برای اندازه‌گیری رطوبت دانه در کاربردهای کشاورزی مورد استفاده قرار گرفت. از آن زمان به بعد برای تجزیه و تحلیل سریع میزان رطوبت، پروتئین و چربی در طیف گسترده‌ای از محصولات غذایی و کشاورزی مورد استفاده قرار گرفته است [۵]. برنامه‌های اولیه در باغبانی به محتوای ماده خشک پیاز [۲]، محتوای مواد جامدات محلول (SSC) سیب [۱] و محتوای آب قارچ [۱۲] متمرکز بود، اما از آن زمان تحقیقات بسیاری انجام شده است. از آنجا که انتشار پرتو NIR در بافت میوه و سبزیجات تحت تأثیر ریزساختار آنهاست، به زودی کشف شد که از طیف‌سنجی NIR می‌توان برای اندازه‌گیری خصوصیات مربوط به ریزساختار مانند سختی، آسیب داخلی و حتی ویژگی‌های حسی استفاده کرد [۹]. پیشرفت‌های اخیر که پتانسیل طیف‌سنجی NIR را افزایش می‌دهد، شامل تکنیک‌های تصویربرداری چند و ابر طیفی است که اطلاعات مکانی را ارائه می‌دهد [۱۳] و طیف‌سنجی چندزمنه که اجازه می‌دهد تا فرآیندهای جذب و پراکنش به طور جداگانه اندازه‌گیری شوند [۱۸]. اهمیت روزافزون طیف‌سنجی NIR در فناوری پس از برداشت از افزایش اخیر تعداد مقالات و همچنین از این واقعیت که بسیاری از تولیدکنندگان خطوط درجه‌بندی آنلاین، اکنون سیستم‌های NIR را برای اندازه‌گیری صفات مختلف کیفیت پیاده‌سازی کرده‌اند، آشکار است.

در تحقیقی SSC گلابی با استفاده از طیف تعاملی فروسرخ و بر اساس تکنیک ترکیبی حداقل مربعات جزئی PLS و رگرسیون خطی چندمتغیره MLR مدلسازی شد. در تکنیک ترکیبی ۲۰ متغیر نهان (LVs)

برای مدل‌سازی در نظر گرفته شد که ۱۲ مولفه اول با استفاده از روش PLS و ۸ مولفه بعدی بر اساس روش MLR به پیش بینی SSC پرداختند. نتایج مدل‌سازی نشان داد که مدل‌سازی ترکیبی با حفظ اطلاعات تمامی LVs دقت بیشتری در پیش بینی نسبت به مدل‌های تکی PLS و MLR داشته است [۲۲]. امکان پیش‌بینی SSC گل‌ابی‌های سالم و هسته قهوه‌ای با استفاده از طیف سنجی انتقالی فروسرخ در محدوده طول موج ۹۰۴-۶۰۰ نانومتر بر اساس مدل‌سازی PLS بررسی شد. مدل‌های کالیبره شده با گل‌ابی‌های سالم، هسته قهوه‌ای و ترکیبی به ترتیب بیشترین دقت را ارائه دادند. سپس یک استراتژی ترکیبی برای اندازه‌گیری همزمان هسته قهوه‌ای و SSC ارائه شد. استراتژی جدید که در مرحله اول گل‌ابی سالم را از هسته قهوه‌ای تشخیص می‌دهد و در مرحله بعد SSC را پیش‌بینی می‌کند، دقت بالاتری نسبت به سایر مدل‌ها داشت [۱۴]. امکان استفاده از مدل چند رقمی برای تعیین کمی SSC در سه رقم گل‌ابی بر اساس طیف سنجی فروسرخ در محدوده طول موج‌های ۱۰۰۰-۳۵۰ و ۱۸۰۰-۱۰۰۰ نانومتر بررسی شد. از الگوریتم‌های مختلف انتخاب متغیر برای بهینه‌سازی مدل‌ها استفاده شد. نتایج این تحقیق نشان داد که مدل چند رقمی برای پیش‌بینی SSC با استفاده از همه نمونه‌ها نسبت به مدل‌های رقم فردی برتر بود و نمونه‌گیری مجدد وزن‌دار تطبیقی رقابتی (CARS) بهتر از الگوریتم حذف متغیر غیراطلاعاتی مونت کارلو (MC-UVE) و پیش‌بینی‌های پی‌درپی (SPA) برای انتخاب متغیرهای موثر بود [۷]. در تحقیقی از یک طیف سنج پرتابل فروسرخ در محدوده طیفی ۳۱۰-۱۱۰۰ نانومتر برای پیش‌بینی SSC گل‌ابی در باغ استفاده شد. سه باغ با دو رقم گل‌ابی در این تحقیق مورد بررسی قرار گرفت. طیف جذب فروسرخ بر اساس روش PLS برای مدل‌سازی SSC بکار برده شد. نتایج این تحقیق نشان داد که مدل‌های PLS از دقت بالایی در تعیین SSC رقم‌های فردی برخوردار هستند در حالیکه استفاده از یک مدل جامع برای پیش‌بینی SSC هر دو مدل باعث پایین آمدن دقت مدل می‌شود که این امر می‌تواند به سطح رسیدگی متفاوت گل‌ابی‌های هر رقم نسبت داده شود [۴]. امکان پیش‌بینی SSC گل‌ابی با استفاده از طیف انتقال فروسرخ در محدوده طول موج ۹۰۰-۶۳۰ نانومتر بررسی شد. از رگرسیون حداقل مربعات جزئی (PLS) و ماشین بردار پشتیبان-کمترین مربعات (LS-SVM) برای مدل‌سازی SSC استفاده شد همچنین روش (CARS) برای انتخاب طول موج‌های موثر بکار گرفته شد. در نهایت برای بالا بردن دقت مدل از هم‌جوشی اطلاعات طیفی و تغییرات دما و قطر استفاده شد. نتایج این تحقیق نشان داد که مدل هم‌جوشی دما و قطر همراه اطلاعات طیفی بر اساس روش LS-SVM بهترین دقت پیش‌بینی SSC را حاصل [۱۷].

هدف از این تحقیق امکان‌سنجی شناسایی و پیش‌بینی خواص کیفی میوه گل‌ابی (مواد جامد محلول (SSC) و اسید قابل تیتراسیون (TA)) طی دوره انبارداری و در شرایط دمایی انبارداری متفاوت است.

مواد و روشها

در ابتدا میوه‌های گل‌ابی با ظاهر سالم و دارای اندازه و شکل یکسان خریداری شد، سپس گل‌ابی‌ها در ۹ دسته ۱۵ تایی گروه‌بندی شدند. میوه‌ها در سه محیط با دماهای متفاوت ۰، ۵ و ۱۰ درجه سلسیوس ذخیره شدند، سپس نمونه‌ها در فواصل زمانی ۱۵، ۳۰ و ۴۵ روز از انبار خارج شدند و اندازه‌گیرهای

طیفی و شیمیایی هر نمونه انجام شد. دمای ۰ درجه سلسیوس دمای توصیه شده برای انبارداری میوه گلابی می باشد که در این شرایط میوه قادر است مدت زمان بیشتری ویژگی های کیفی خود را حفظ نماید (۱۶ و ۲۱). در شکل (۱) نمونه ای از گلابی ها در دوره های مختلف انبارمانی و شرایط دمایی متفاوت به تصویر کشیده شده است تا پیش زمینه بصری از تغییرات ظاهری میوه طی دوره انبارمانی وجود داشته باشد.



شکل ۱: تغییرات رنگی پوست میوه گلابی طی دوره انبارمانی و در شرایط متفاوت دمایی. از راست به چپ تغییرات شرایط دمایی و از بالا به پایین تغییرات دوره انبارمانی

طیف های Vis/NIR در مد تقابلی (جدب) برای هر نمونه از ۴ نقطه میوه اندازه گیری شد. به منظور اکتساب طیف از گلابی از یک اسپکترومتر دیومتر مدل PS-100 (Apogee Instruments, INC., Logan, UT, USA) ساخت کشور آمریکا، موجود در آزمایشگاه ابزار دقیق گروه مکانیک بیوسیستم دانشگاه محقق اردبیلی استفاده گردید. این اسپکترومتر دیومتر بسیار کوچک، سبک، قابل حمل، دارای تک فام سازی از نوع پاشنده با قدرت تفکیک ۱ نانومتر و آشکارساز آرایه CCD سیلیکون خطی با ۲۰۴۸ پیکسل است که محدوده طیفی ۲۵۰-۱۱۵۰ نانومتر (Vis/NIR) را به خوبی پوشش میدهد. همچنین، قابلیت اتصال فیبر نوری به اسپکترومتر PS-100 و جابجایی اطلاعات به رایانه با هدف نمایش و ذخیره سازی طیف های اکتسابی در نرم افزار Spectra Wiz، بواسطه پورت USB وجود دارد. در شکل (۲) نحوه اکتساب طیف در مد بازتابی نمایش داده شده است.



شکل ۲: اکتساب طیف در مذبازتایی از میوه گلابی

در مرحله بعد ویژگی‌های کیفی میوه گلابی بر اساس روش‌های شیمیایی-آزمایشگاهی و با استفاده از ابزار و دستورالعمل‌های مرجع تعیین شد. به منظور اندازه‌گیری SSC دستگاه رفاکتومتر چشمی مدل PAL1 با دقت ۰/۱ درجه بریکس (شکل ۳) بکار برده شد. نحوه انجام این آزمایش بگونه‌ای است که چند قطره از عصاره گلابی را روی دستگاه ریخته و عدد مربوطه از روی ستون مدرج خوانده می‌شود. برای اندازه‌گیری TA از روش تحلیل شیمیایی عصاره میوه با استفاده از هیدروکسید سدیم بر اساس استاندارد (GB/T 12293-90) استفاده شد [۱۹].

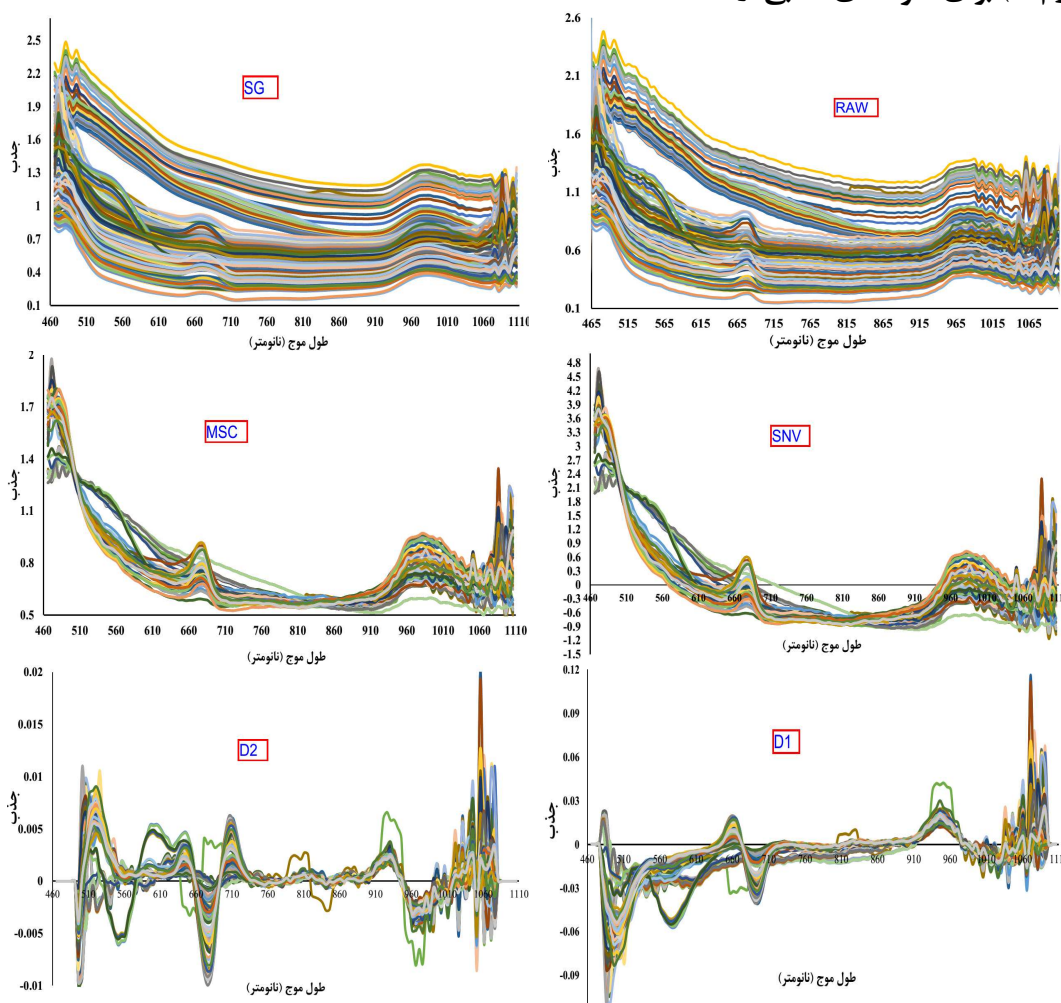


شکل ۳: رفاکتومتر چشمی مدل PAL

بعد از ذخیره‌سازی طیف‌ها و منتقل کردن آن‌ها به نرم‌افزار Excel با میانگین‌گیری از چهار طیف اکتسابی از طرفین میوه یک طیف واحد بدست آمد که به عنوان طیف شاخص آن نمونه در نظر گرفته شد. با توجه به نویز موجود در طول موج‌های ابتدایی و انتهایی طیف‌ها این نواحی حذف می‌شوند و در نهایت محدوده طیفی ۴۳۰-۱۰۳۰ nm برای تجزیه و تحلیل و مدل‌سازی بکار برده شد. به دلیل اینکه داده‌های طیفی متأثر از عواملی مانند اثر پراکنش نور توسط تغییر آشکارساز با نمونه، تغییر در اندازه نمونه، ناهمواری‌های سطحی در نمونه هستند، بوسیله افزایش دمای اسپکترومتر و عوامل متعدد دیگری نویزهای ایجاد خواهد شد. به منظور تعدیل تأثیرات چنین اطلاعات نامفهومی و دستیابی به مدل‌های واسنجی با ثبات، دقیق و با قابلیت اطمینان نیاز به پیش‌پردازش داده‌های طیفی است. در این پژوهش از پیش‌پردازش‌های مختلف هموارسازی (SG) و تصحیح پخش افزاینده (MSC)، نرمال‌سازی (SNV) و افزایش قدرت تفکیک طیفی (مشتق اول D1 و مشتق دوم D2) استفاده شد.

تحلیل نتایج

در شکل‌های (۴) طیف‌های جذبی Vis/NIR پیش‌پردازش شده با روش‌های مختلف هموارسازی (SG)، تصحیح پخش افزایشنده (MSC)، نرمال‌سازی (SNV) و افزایش قدرت تفکیک طیفی (مشتق اول D1 و مشتق دوم D2) برای نمونه‌های گلابی ارائه شده است.



شکل ۴: طیف‌های جذبی Vis/NIR پیش‌پردازش شده با روش‌های مختلف

در جدول (۱ و ۲) معیارهای آماری مورد نظر برای کالیبراسیون و اعتبارسنجی مدل‌های PLS مبتنی بر پیش‌پردازش‌های مختلف طیف‌های Vis/NIR، تخمین گر SSC و TA ارائه شده است. بر اساس اطلاعات ارائه شده در جدول (۱ و ۲) تمامی مدل‌های ایجاد شده در هر دو روش اعتبارسنجی متقابل و مستقل دارای دقت پیش‌بینی بالایی هستند. عملکرد مدل‌های مبتنی بر پیش‌پردازش SG بسیار نزدیک به مدل‌های بدون پیش‌پردازش می‌باشد. همچنین عملکرد مدل‌های مبتنی بر پیش‌پردازش‌های MSC و SNV بسیار نزدیک به یکدیگر است که این روند در نمودار گرافیکی این دو روش پیش‌پردازش هم قابل رویت است. در نهایت مدل‌های مبتنی بر پیش‌پردازش‌های مشتق‌گیری در هر دو روش اعتبارسنجی

دارای عملکرد بالاتری نسبت به سایر مدل‌ها بوده‌اند. قابلیت بالاتر پیش‌پردازش مشتق‌گیری در مقایسه با سایر پیش‌پردازها می‌تواند به این واقعیت نسبت داده شود که سایر پیش‌پردازها امکان حذف و هموارسازی طول موج‌های موثر و پیک‌های موضعی را فراهم می‌کنند در حالی که مشتق‌گیری موجب افزایش پیک‌های موضعی و طول موج‌های قابل تفکیک خواهد شد [۱۰ و ۲۰]. در نهایت برای SSC مدل مبتنی بر پیش‌پردازش مشتق‌گیری اول در هر دو روش اعتبارسنجی دارای عملکرد بالاتری نسبت به سایر مدل‌ها بوده‌است ($SDR = 4/83$, $r_p = 0/95$, $r_{cv} = 0/94$). همچنین برای TA مدل مبتنی بر پیش‌پردازش مشتق‌گیری دوم در هر دو روش اعتبارسنجی دارای عملکرد بالاتری نسبت به سایر مدل‌ها بوده‌است ($SDR = 6/1$, $r_p = 0/96$, $r_{cv} = 0/94$).

جدول ۱: نتایج اعتبارسنجی مدل‌های PLS مبتنی بر روش‌های مختلف پیش‌پردازش طیف‌های Vis/NIR برای تخمین SSC

میوه گلابی

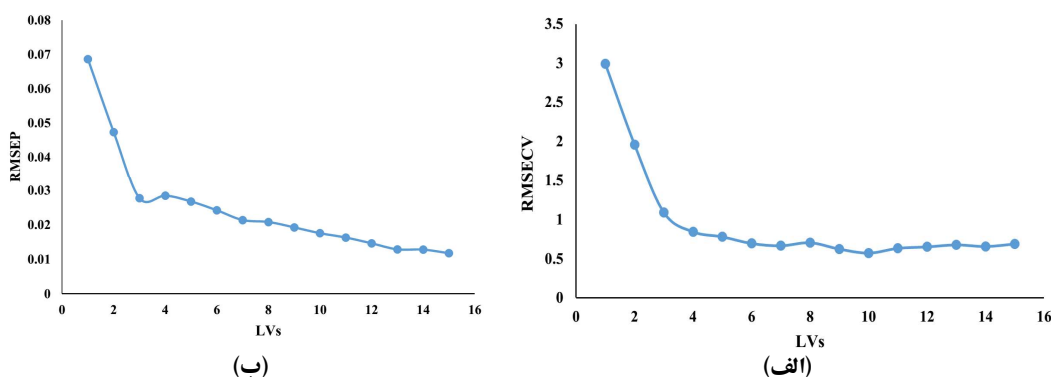
پیش‌پردازش	LVs	r_c	RMSEC	r_{cv}	RMSECV	r_p	RMSECP	SDR
خام	۱	۰/۹۳	۰/۸۴	۰/۹۳	۰/۸۵	۰/۹۶	۰/۷۱	۴/۷
SG	۱	۰/۹۳	۰/۸۴	۰/۹۳	۰/۸۵	۰/۹۶	۰/۷۱	۴/۷
D1	۵	۰/۹۶	۰/۷	۰/۹۴	۰/۸۱	۰/۹۵	۰/۶۹	۴/۸۳
D2	۸	۰/۹۶	۰/۷	۰/۹۳	۰/۸۵	۰/۹۱	۰/۸۷	۳/۸۴
MSC	۴	۰/۹۳	۰/۹	۰/۹۱	۰/۹۸	۰/۹۳	۰/۷۴	۴/۵
SNV	۴	۰/۹۳	۰/۸۷	۰/۹۱	۰/۹۶	۰/۹۴	۰/۷۲	۴/۶

جدول ۲: نتایج اعتبارسنجی مدل‌های PLS مبتنی بر روش‌های مختلف پیش‌پردازش طیف‌های Vis/NIR برای تخمین TA

میوه گلابی

پیش‌پردازش	LVs	r_c	RMSEC	r_{cv}	RMSECV	r_p	RMSECP	SDR
خام	۲	۰/۹۴	۰/۰۱۸	۰/۹۲	۰/۰۱۹	۰/۹۴	۰/۰۱۶	۴/۶
SG	۲	۰/۹۴	۰/۰۱۸	۰/۹۳	۰/۰۱۹	۰/۹۴	۰/۰۱۶	۴/۶
D1	۳	۰/۹۴	۰/۰۱۷	۰/۹۳	۰/۰۱۹	۰/۹۲	۰/۰۱۹	۳/۹
D2	۱۲	۰/۹۶	۰/۰۱۴	۰/۹۴	۰/۰۱۸	۰/۹۶	۰/۰۱۲	۶/۱
MSC	۵	۰/۹۲	۰/۰۲۱	۰/۹۱	۰/۰۲۱	۰/۹۳	۰/۰۱۷	۴/۳
SNV	۴	۰/۹۳	۰/۰۱۹	۰/۹۱	۰/۰۲۱	۰/۹۳	۰/۰۱۷	۴/۳

نمودار تغییرات خطای اندازه‌گیری بر اساس تغییرات تعداد مولفه اصلی LVs در شکل (۵) ارائه شده است. با توجه به شکل (۵) با افزایش تعداد مولفه اصلی فراتر از ۵ برای SSC و فراتر از ۱۲ برای TA دقت مدل تنها به میزان کمی بهبود می‌یابد اما در عوض پیچیدگی آن به علت افزایش تعداد مولفه چند برابر می‌شود بنابراین افزایش تعداد مولفه منطقی بنظر نمی‌رسد.



شکل ۵: تغییرات RMSEP در برابر LVS (الف) در تخمین SSC و (ب) TA با استفاده از پیش پردازش مشتق اول و دوم

نتیجه گیری

استفاده از پیش پردازش مشتق اول (D1) و مشتق دوم (D2) تعداد نقاط دارای پیک را افزایش می‌دهد و باعث افزایش قدرت تفکیک طیفی می‌شود. نتایج مدل سازی SSC و TA با استفاده از طیف پیش پردازش شده با مشتق اول و دوم دقت بالاتری نسبت به طیف پیش پردازش شده با سایر روش‌ها داشت که علت این امر می‌تواند به تعداد بیشتر متغیرهای پنهان (LVs) این پیش پردازش نسبت به سایر پیش پردازش‌ها نسبت داده شود.

مراجع:

- Bellon-Maurel, V. 1992. Application de la spectroscopie proche infrarouge au contrôle en ligne de la qualité des fruits et légumes (Doctoral dissertation, Toulouse, INPT).
- 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): 131-141.
- García-Sánchez, F., Galvez-Sola, L., Martínez-Nicolás, J. J., Muelas-Domingo, R., & Nieves, M. 2017. Using near-infrared spectroscopy in agricultural systems. *Developments in near-infrared spectroscopy*, 1: 97-127.
- Goke, A., Serra, S., & Musacchi, S. (2018). Postharvest dry matter and soluble solids content prediction in d'Anjou and Bartlett pear using near-infrared spectroscopy. *HortScience*, 53(5), 669-680.
- Irudayaraj, J., & Gunasekaran, S. 2001. Optical methods: visible, NIR, and FTIR spectroscopy. *Nondestructive food evaluation techniques to analyze properties and quality*. New York: Marcel Dekker. p, 1-2.
- Kljusurić, J. G., Jurina, T., Valinger, D., Benkovi, M., & Tušek, A. J. 2020. NIR spectroscopy and management of bioactive components, antioxidant activity, and macronutrients in fruits. In *Fruit Crops* (pp. 95-109). Elsevier.
- Li, J., Zhang, H., Zhan, B., Wang, Z., & Jiang, Y. (2019). Determination of SSC in pears by establishing the multi-cultivar models based on visible-NIR spectroscopy. *Infrared Physics & Technology*, 102, 103066.
- Mditshwa, A., Magwaza, L. S., Tesfay, S. Z., & Mbili, N. 2017. Postharvest quality and composition of organically and conventionally produced fruits: A review. *Scientia Horticulturae*, 216: 148-159.

9. Mehinagic, E., Royer, G., Symoneaux, R., Bertrand, D., & Jourjon, F. 2004. Prediction of the sensory quality of apples by physical measurements. *Postharvest biology and technology*, 34(3): 257-269.
10. Nicolai, B. M., Lötze, E., Peirs, A., Scheerlinck, N., & Theron, K. I. 2006. Non-destructive measurement of bitter pit in apple fruit using NIR hyperspectral imaging. *Postharvest biology and technology*, 40(1): 1-6.
11. Norris, K.H. (1964) *Agric. Engng*, St. Joseph, Mich. 45, 370.
12. Roy, S., Anantheswaran, R. C., Shenk, J. S., Westerhaus, M. O., & Beelman, R. B. 1993. Determination of moisture content of mushrooms by Vis—NIR spectroscopy. *Journal of the Science of Food and Agriculture*, 63(3): 355-360.
13. Srivastava, S., & Sadistap, S. 2018. Data processing approaches and strategies for non-destructive fruits quality inspection and authentication: a review. *Journal of Food Measurement and Characterization*, 12(4): 2758-2794.
14. Sun, X., Liu, Y., Li, Y., Wu, M., & Zhu, D. (2016). Simultaneous measurement of brown core and soluble solids content in pear by on-line visible and near infrared spectroscopy. *Postharvest Biology and Technology*, 116, 80-87.
15. Tamburini, E., Costa, S., Rugiero, I., Pedrini, P., & Marchetti, M. G. 2017. Quantification of lycopene, β -carotene, and total soluble solids in intact red-flesh watermelon (*Citrullus lanatus*) using on-line near-infrared spectroscopy. *Sensors*, 17(4): 746-756.
16. Wang, Z., Jiang, Y., Wang, W., Hang, B., & Tong, W. 2014. Effects of out-store temperature after low-temperature storage on quality and physiological index of Suli'pear fruits. *Journal of Fruit Science*, 31(6): 1147-1153.
17. Xia, Y., Fan, S., Tian, X., Huang, W., & Li, J. (2020). Multi-factor fusion models for soluble solid content detection in pear (*Pyrus bretschneideri* 'Ya') using Vis/NIR online half-transmittance technique. *Infrared Physics & Technology*, 110, 103443.
18. Xie, L., Wang, A., Xu, H., Fu, X., & Ying, Y. 2016. Applications of near-infrared systems for quality evaluation of fruits: a review. *Transactions of the ASABE*, 59(2): 399-419.
19. Xie, L., Ye, X., Liu, D., & Ying, Y. 2011. Prediction of titratable acidity, malic acid, and citric acid in bayberry fruit by near-infrared spectroscopy. *Food Research International*, 44(7): 2198-2204.
20. Xu, Y., Zhong, P., Jiang, A., Shen, X., Li, X., Xu, Z., ... & Lei, H. 2020. Raman spectroscopy coupled with chemometrics for food authentication: A review. *TrAC Trends in Analytical Chemistry*, 116017.
21. Yi, X., Zhao, B., Tang, Y., & Xu, Z. 2020. Transcriptome analysis reveals the regulation of metabolic processes during the post-harvest cold storage of pear. *Genomics*, 112(6): 3933-3942.
22. Yuan, L. M., Mao, F., Chen, X., Li, L., & Huang, G. (2020). Non-invasive measurements of 'Yunhe' pears by vis-NIRS technology coupled with deviation fusion modeling approach. *Postharvest Biology and Technology*, 160, 111067.

Detection and prediction of soluble solids content (SSC) and titratable acid (TA) of pear fruit using spectroscopy

Narges saadati-Sharafteh^{1*}, Vali Rasooli Sharabiani¹, Ebrahim Taghinezhadand¹ and
Abdolmajid Moinfar¹

1. Biosystems Engineering Department, University of Mohaghegh Ardabili, Ardabil, Iran

Abstract

In recent years, infrared spectroscopy has gained wide acceptance in various fields due to its advantages over laboratory analytical methods. Its most prominent ability is to record spectra for solid and liquid samples without any pre-treatment and destructive effects. The aim of this study was to determine the quality properties of pear fruit during storage using infrared spectroscopy. The fruits were stored in three environments with different temperatures of 0, 5 and 10 ° C. Vis / NIR spectra were then measured for each sample from 4 fruit points. In the next step, the quality characteristics of pear fruit (SSC and TA) were determined based on chemical-laboratory methods and using reference tools and instructions. Since the acquired spectra have noise, the effects of disturbing factors are minimized by various pre-processing to provide clearer data for modeling the quality characteristics of pears. Finally, using the data obtained from spectroscopy and reference experiments based on the least squares regression (PLS) method was modeled. The results showed that the combination of infrared spectroscopy with chemometrics methods has a high ability to predict the quality properties of pear fruit. SSC prediction accuracy was obtained based on the pre-processed spectrum with the first derivative and with accuracy of $R^2 = 0.95$ and $SDR = 4.8$. The prediction accuracy of TA was obtained based on the pre-processed spectrum with the second derivative and with an accuracy of $R^2 = 0.96$ and $SDR = 6.1$.

Key words: Spectroscopy, Pre-processing, Near-Infrared, Pear, Soluble solids Content

*Corresponding author

E-mail: nrgsaadati1993@gmail.com