

استخراج موثرترین طول موج‌های طیف آبمیوه توت سیاه (*Morus alba Varnigra L.*) با استفاده از مدل‌های مختلف رگرسیون حداقل مربعات جزئی (PLS)

مریم سلطانی کاظمی^۱، سامان آبدانان مهدی‌زاده^{۲*}، مختار حیدری^۳ و سید مجتبی فارغ^۴

۱- دانشجوی کارشناسی ارشد دانشکده مهندسی زراعی و عمران روستایی، گروه مکانیک بیوسیستم، دانشگاه کشاورزی و منابع طبیعی رامین خوزستان

۲- استادیار دانشکده مهندسی زراعی و عمران روستایی، گروه مکانیک بیوسیستم، دانشگاه کشاورزی و منابع طبیعی رامین خوزستان

۳- دانشیار دانشکده کشاورزی، گروه باغبانی، دانشگاه کشاورزی و منابع طبیعی رامین خوزستان

۴- استادیار دانشکده مهندسی زراعی و عمران روستایی، گروه ماشین‌های کشاورزی و مکانیزاسیون، دانشگاه کشاورزی و منابع طبیعی رامین خوزستان
(تاریخ دریافت: ۹۴/۱۱/۱۶ تاریخ پذیرش: ۹۵/۰۶/۰۲)

چکیده

در سالهای اخیر کاربرد طیف‌سنجی UV/NIR به عنوان یک روش غیرمخرب با روش‌های شیمی‌سنجی به منظور ارزیابی کیفیت محصولات کشاورزی به طور گسترده‌ای مورد توجه قرار گرفته است. توت سیاه یکی از میوه‌های بومی ایران است که در زمینه تعیین شاخص‌های کیفی آن به روش غیر مخرب اطلاعات محدودی وجود دارد. در پژوهش حاضر به منظور انتخاب نواحی طول موج موثر در طیف‌سنجی UV/NIR (۱۱۰۰-۳۰۰ nm)، از دو روش *iPLS* و *BiPLS* جهت تشخیص پارامترهای کیفی مانند میزان مواد جامد محلول (TSS)، اسیدیته، ویتامین‌ث و آنتوسیانین در آبمیوه توت سیاه مورد استفاده شد. لازم به ذکر است که قبل از انجام محاسبات مذکور، در مرحله نخست برای هر سه مدل پیشگو (*BiPLS*، *PLS* و *BiPLS*) تعداد مولفه اصلی مربوط به هر پارامتر آبمیوه (TSS، اسیدیته، ویتامین‌ث و آنتوسیانین) با استفاده از روش *Cross-Validation* استخراج شد. با توجه به نتایج حاصل از مقایسه این سه مدل مشخص شد که در تشخیص و اندازه‌گیری پارامترهای داخلی TSS ($RMSEC=0.076$)، اسیدیته ($RMSEV=0.03$ ، $r_v=0.96$ و $r_c=0.96$)، ویتامین‌ث ($RMSEV=0.0008$ ، $r_v=0.93$ و $RMSEC=0.053$ ، $r_c=0.87$) و آنتوسیانین ($RMSEV=0.0007$ ، $r_v=0.97$ و $RMSEC=0.0006$)، ویتامین‌ث ($RMSEV=0.013$ ، $r_v=0.98$ و $RMSEC=0.014$ ، $r_c=0.96$)، ویتامین‌ث ($RMSEV=0.0006$ ، $r_v=0.95$ و $RMSEC=0.0007$) با *BiPLS* از ۱۵ فاکتور از ۲۰ فاصله انتخاب شده بهترین عملکرد را داشته است.

کلید واژگان: آب میوه توت سیاه، طیف‌سنجی UV/NIR، ترکیبات بیوشیمیایی، انتخاب طول موج

*مسئول مکاتبات: saman.abdanan@gmail.com

۱- مقدمه

توت سیاه با نام علمی *Morus alba Varnigra* L. متعلق به خانواده توت (Moraceae) می‌باشد [۱]. در ایران دوگونه شاه توت (*M. nigra* L.) و توت سفید (*M. alba*) با رقم‌های مختلف آن مانند *M. alba* Var. *nigra* وجود دارند. منشاء توت سفید کشور چین و منشاء توت سیاه ایران می‌باشد و به همین دلیل است که توت سیاه را توت ایرانی^۱ نیز می‌نامند [۲]. میوه توت سیاه در اغلب کشورهای که این درخت رشد می‌کند به صورت تازه خوری یا فرآورده‌های جانبی مانند آب‌میوه مورد استفاده قرار می‌گیرد؛ از میوه توت برای تهیه ژله، مربا و انواع نوشیدنی استفاده می‌شود.

میوه توت سیاه دارای مقادیر قابل توجه آنتوسیانین (دارای خواص آنتی‌اکسیدانتی) بوده که خواص ضد سرطان، حفاظت در برابر اشعه، ضد التهاب و حفاظت از کبد دارد. میوه توت در درمان بیماری‌های اسهال خونی، استفراغ، کاهش قند خون در بیماران دیابتی و به عنوان ملین کاربرد دارد. از دیگر مصارف درخت توت، استفاده از برگ‌های آن در تغذیه کرم ابریشم در صنعت تولید ابریشم می‌باشد [۳]. طیف‌سنجی Vis/NIR از روش‌های تعیین کیفیت محصولات و فرآورده‌های غذایی می‌باشد. در این روش پارامترهای کیفی این محصولات به صورت غیرمخرب پیشگویی و اندازه‌گیری می‌گردند. از مزایای این روش می‌توان به ارائه همزمان، سریع، دقیق و غیرمخرب اجزای اصلی کیفی بسیاری از محصولات کشاورزی و غذایی اشاره نمود [۴]. کاربرد این روش در آنالیزهای غذایی بویژه به منظور ارزیابی کیفیت درونی میوه‌ها و سبزی‌ها و دیگر مواد غذایی نیز مورد توجه پژوهشگران و صنعتگران قرار گرفته است [۵ و ۶]. البته این روش در مقایسه با روش‌های مخرب هزینه کمتری دارد زیرا برای انجام آزمایش غیر از مصرف برق به دیگر مواد مانند معرف یا واکنشگرهای شیمیایی احتیاج نیست و می‌توان با تدوین یک مدل کالیبراسیون تعداد زیادی نمونه را مورد آنالیز قرار داد. بعلاوه در روش‌های مختلف طیف‌سنجی هیچ احتیاجی به آماده‌سازی نمونه‌ها قبل از انجام آزمایش نبوده و با توجه به زمان کوتاه آنالیز، سریع و دقیق بودن بسیار مورد توجه می‌باشد [۷]. از روش طیف‌سنجی NIR به منظور تشخیص کیفی، تفکیک و طبقه‌بندی میوه‌ها براساس یک یا چند ویژگی خاص از قبیل رقم [۸]، آسیب

دیدگی [۹]، شدت رنگ [۱۰]، مرحله رسیدگی [۱۱] و کیفیت پس از انبارداری [۱۲] استفاده شده است. همچنین پژوهش‌های متعددی روی اندازه‌گیری کیفیت داخلی آب‌میوه (میزان مواد جامد محلول، اسیدیته، آنتوسیانین، ویتامین‌ث) توسط طیف‌سنجی Vis/NIR صورت گرفته است، که از آن جمله می‌توان به تحقیقی که توسط لیو و همکاران [۱۳] انجام گرفت، اشاره کرد. طی این پژوهش، این محققین مقدار pH و SSC موجود در شراب برنج را با استفاده از طیف‌سنجی در ناحیه Vis/NIR مورد ارزیابی قرار دادند. در این پژوهش آنها از مدل PLS برای پیشگویی داده‌های حاصل از طیف استفاده نمودند. نتایج حاصل از این بررسی‌ها نشان داد که SSC به ترتیب با ضریب همبستگی و میانگین حداقل مربعات جزئی ۰/۹۵ و ۰/۱۷ و همچنین pH به ترتیب با ضریب همبستگی و میانگین حداقل مربعات جزئی ۰/۹۴ و ۰/۰۲ قابل پیشگویی بود. همچنین در پژوهشی مشابه که توسط شاو و هو [۱۴] به منظور استخراج مقدار پارامترهای داخلی pH و SSC موجود در آب‌میوه بایبری با استفاده از طیف‌سنجی Vis/NIR انجام شد، میزان pH و SSC به ترتیب با ضریب همبستگی و خطای استاندارد ۰/۹۲ و ۰/۱۹، ۰/۸۵ و ۰/۴۰ توسط مدل کالیبراسیونی چند متغیره PLS تشخیص داده شدند. به‌علاوه، مطالعات متعدد دیگری روی سیب [۱۵] و کیوی [۱۶] به منظور استخراج پارامترهای SSC و pH صورت گرفته است. با توجه به بررسی‌های نگارندگان، درمورد تعیین کیفیت و ترکیبات تشکیل دهنده آب‌میوه توت سیاه مطالعات محدودی انجام شده است. در نتیجه هدف از این پژوهش بررسی چگونگی ارتباط میان طیف عبوری در محدوده (۱۱۰۰-۳۰۰ nm) و پارامترهای مخرب و نیز پیشگویی ارزش تغذیه‌ای (میزان مواد جامد محلول، اسیدیته، آنتوسیانین و ویتامین‌ث) در آب‌میوه توت سیاه می‌باشد. همچنین به دلیل حجم بالای داده‌های طیفی، از سه روش PLS، BiPLS و iPLS به منظور استخراج نواحی طول موج موثر به منظور تشخیص سریع و دقیق‌تر پارامترهای داخلی آب‌میوه توت سیاه استفاده شد. در ضمن بهترین مدل از میان سه مدل PLS، BiPLS و iPLS با توجه به قدرت پیشگویی آنها در خصوص پارامترهای کیفی انتخاب گردید.

۲- مواد و روش‌ها

۲-۱- جمع آوری نمونه

پژوهش حاضر به منظور بررسی پارامترهای کیفی آب‌میوه توت سیاه توسط آزمون‌های مخرب و غیرمخرب انجام پذیرفت. نمونه‌های میوه در مرحله بلوغ (براساس رنگ میوه) از درختان توت سیاه رشد یافته در دانشگاه کشاورزی و منابع طبیعی رامین خوزستان (ملاثانی، ۳۵ کیلومتری شرقی اهواز) برداشت شد. به دلیل حساسیت به آسیب‌های مکانیکی و پوسیدگی قارچی میوه‌ها در کیسه‌های پلاستیکی در یخچال با دمای 4°C درجه سلسیوس نگهداری شدند. در هر مرحله به منظور انجام اندازه‌گیری‌های مخرب و غیرمخرب، آب‌میوه توت سیاه توسط آب‌میوه‌گیر خانگی گرفته شد.

۲-۲- طیف‌سنجی UV-IR

از دستگاه طیف‌سنج UV-IR (مدل SPEKOL® 2000 و ساخت کشور ایالات متحده آمریکا) برای اندازه‌گیری‌های طیفی UV-IR استفاده گردید. این دستگاه، شامل دو پرتو نور سنج طیفی برای اندازه‌گیری سطح انتقال، تمرکز و انرژی از نمونه مایع است. دستگاه طوری طراحی شده است که محدوده طیفی ۱۹۰ تا ۱۱۰۰ نانومتر را اندازه‌گیری و رزولوشن طیف در طول اندازه‌گیری بر روی ۲ نانومتر تنظیم شد. شایان ذکر است که طیف در ناحیه ۱۹۰ تا ۳۰۰ دارای نانومتر نویز شدید بود که این مساله در دقت مدل پیشگو اثر داشت. لذا این بخش از طیف حذف گردید.

۲-۲-۱- جمع آوری طیف‌ها و پیش پردازش آنها

طیف UV-IR اخذ شده علاوه بر اطلاعات نمونه، حامل اطلاعات ناخواسته از قبیل نویز و نور است. لذا برای رسیدن به مدل طیفی دقیق و قابل اعتماد، پیش پردازش داده‌های طیفی قبل از مدل‌سازی و استخراج اطلاعات ضرورت دارد. روش‌های پیش پردازش بسیار متنوع هستند که معمولاً هر یک از آنها برای منظور خاصی ابداع شده‌اند و با توجه به شرایط متفاوت نمونه‌ها، روش‌ها و ابزار آزمایشگاهی ارائه یک روش پیش پردازش مشخص امکان ندارد. از این رو معمولاً در تحقیقات طیف‌سنجی روش‌های رایج برتر مورد ارزیابی قرار گرفته و بهترین روش مورد استفاده قرار می‌گیرد [۱۷]. در این تحقیق تاثیر روش توزیع نرمال استاندارد (SNV) و تصحیح پراکنش افزاینده (MSC) در تفکیک و تمایز طیف‌های اخذ

شده مورد استفاده قرار گرفتند [۱۸]. طیف‌ها بعد از تصحیح با MSC و SNV، به منظور استخراج اطلاعات اصلی به نرم افزار نوشته‌شده در فضای MatLab منتقل شدند.

۲-۲-۲- روش PLS

اغلب تحقیقات مرتبط با طیف‌سنجی به دلیل این‌که تعداد متغیرهای طیفی زیاد است، قبل از فرآیند مدل‌سازی یا طبقه‌بندی، استخراج مؤلفه‌های اصلی (توسط الگوریتم کاهش داده) با استفاده از روش‌های PCA و PLS انجام شده است [۱۹]. در این راستا، تحلیل مؤلفه‌های اصلی یکی از انواع روش‌های تحلیل داده‌های چندمتغیره است که هدف اصلی آن تقلیل بعد مسئله مورد مطالعه است. در این پژوهش بدین منظور از روش‌های انتخاب طول موج موثر توسط مدل‌های PLS، PLS و BiPLS استفاده گردید.

در هنگام بروز مشکل هم‌خطی بین متغیرهای مستقل (باند طیفی)، رگرسیون حداقل مربعات جزئی (PLS) یکی از روش‌های آماری چند متغیره است که بسیار سودمند واقع می‌شود. در این روش داده‌های طیفی همبسته با ابعاد بالا به فاکتورهای غیرهمبسته به نام متغیر پنهان کاهش می‌یابند [۲۰]. فاکتورهای پنهانی اطلاعات مهمی که در کل طیف برای پیش بینی وجود دارد را در بردارند.

۲-۲-۲-۱- روش iPLS

مدل iPLS که در این پژوهش استفاده شد، توسط نورگارد و همکاران [۲۱] توسعه یافته است. اصل الگوریتم به این صورت است که، طیف‌ها به نواحی مساوی کوچکتر تقسیم شده و مدل رگرسیونی PLS برای هر فاصله فرعی با استفاده از تعداد متغیرهای نهفته یکسان توسعه می‌یابد. سپس، میانگین خطا برای هر فاصله فرعی و همچنین مدل طیفی کلی محاسبه گردیده و مناطق با کمترین درصد خطا انتخاب می‌شوند. منطقه بهینه‌سازی شده به منظور بهترین عملکرد در پیشگویی را می‌توان بوسیله کاهش و یا افزایش تعداد فواصل مشخص نمود.

۲-۲-۲-۲- روش BiPLS

این مدل توسط لردی و نورگاد [۲۲] توسعه یافته است. در این روش به منظور توسعه مدل PLS، مجموعه داده به تعدادی داده با فواصل یکسان تقسیم شده که جست‌جو به منظور کمترین

1. Partial Least Square
2. Interval Partial Least-Squares
3. Backward Interval Partial Least-Squares

۳-۲-۳-۲-۳-۲ آزمون‌های مخرب (اندازه‌گیری

شاخص‌های کیفی آب‌میوه)

۳-۲-۱-۱-۳-۲ اسیدیته قابل تیتراسیون^۳

برای اندازه‌گیری اسیدیته قابل تیتراسیون آب‌میوه از روش تیتراسیون با هیدروکسید سدیم ۰/۱ نرمال و معرف فنول فتالین استفاده شد [۲۴]. ۵ میلی لیتر از آب میوه و ۵ میلی لیتر آب مقطر درون بشر ریخته شد و پس از اضافه نمودن ۳ قطره معرف فنل فتالین (یک درصد) تیتراسیون با هیدروکسید سدیم (۰/۱ نرمال) تا ظهور رنگ بنفش روشن ادامه یافت. میزان سود مصرفی در رابطه (۴) قرار داده شد و میزان اسیدیته کل قابل تیتراسیون براساس درصد محاسبه گردید.

$$A = (S \cdot N \cdot F / C) \times 100 \quad 4$$

A = مقدار اسید در عصاره میوه (درصد)؛ F = فاکتور سود (ضریب نرمال)؛ S = مقدار سود مصرفی (میلی‌لیتر)؛ N = نرمالیه سود و C = مقدار عصاره میوه (میلی‌لیتر)

۳-۲-۲-۳-۲ کل مواد جامد محلول^۴ (TSS)

جهت تعیین میزان مواد جامد محلول آب‌میوه، از دستگاه رفرکتومتر^۵ دستی (مدل - MT03 ساخت ژاپن) استفاده شد، بدین صورت که عصاره صاف شده آب‌میوه با استفاده از قطره چکان روی منشور دستگاه رفرکتومتر چکانده و میزان مواد جامد محلول کل براساس درصد بریکس^۶ قرائت شد (هر واحد بریکس برابر با گرم قند موجود در ۱۰۰ گرم عصاره میوه می‌باشد).

۳-۳-۲-۳-۲ آنتوسیانین کل آب‌میوه^۷ (AC)

برای اندازه‌گیری آنتوسیانین کل از روش پیشنهادی هولکرافت و همکاران [۲۵] استفاده شد. آب‌میوه تازه به نسبت (۱:۵) با آب مقطر رقیق شد، و میزان جذب در طول موج‌های ۵۱۰ نانومتر (موج مربوط به آنتوسیانین) با استفاده از دستگاه اسپکتروفتومتر مدل UV-2100 Spectrophotometer (ساخت آمریکا) قرائت شد. میزان آنتوسیانین براساس واحد جذب^۸ در میلی‌متر آب‌میوه رقیق نشده بیان گردید (رابطه ۵).

$$AC = Au(510) \times D.F \quad 5$$

خطا در مدل پیشگو برای هر فاصله از سمت چپ محاسبه صورت می‌پذیرد. در این روش مناطق طیفی به عنوان بلوکی از اطلاعات در نظر گرفته می‌شوند (در پژوهش حاضر N=20 ناحیه طیفی در نظر گرفته شد) به منظور حفظ یا حذف این بلوک‌ها، میانگین مربعات خطا از فاصله‌های N-1 در سمت چپ تا N فاصله با مدل iPLS محاسبه می‌شوند. حذف پسر و در این روشتا زمانی ادامه می‌یابند که نتایج کمترین میانگین مربعات خطا را داشته باشند. همچنین اولین فاصله از سمت چپ زمانی در مدل وارد می‌شود که مدل کمترین مقدار RMSEV را بدهد. به منظور توقف در روش، BiPLS دو روش وجود دارد. در روش اول BiPLS بر روی تمامی نواحی طیفی اعمال می‌گردد و RMSEV در تمامی این نواحی حساب می‌شود، سپس نواحی با کمترین RMSEV انتخاب و وارد مدل پیشگو می‌شوند. روش دوم استفاده از یک آستانه از پیش تعریف شده به منظور توقف الگوریتم می‌باشد. در این پژوهش با توجه به دقت بالاتر روش اول از این روش استفاده گردید.

۳-۲-۲-۳-۲-۲ درستی و صحت مدل‌ها

در این پژوهش پس از حذف داده‌های پرت و انجام عملیات پیش پردازش ترکیبی MSC+SNV داده‌های طیف آب‌میوه توت سیاه به دسته‌های کالیبراسیونی (۷۰) و اعتبارسنجی (۳۸) تقسیم شدند. همچنین به منظور ارزیابی دقت این مدل‌ها از شاخص‌های ضریب اعتبارسنجی (r_v)، ریشه میانگین مربعات خطای اعتبارسنجی^۱ (RMSEV)، ضریب کالیبراسیونی (r_c) و ریشه میانگین مربعات خطای کالیبراسیون^۲ (RMSEC) استفاده گردید (رابطه ۱-۳). یک مدل خوب باید بر پایه داشتن کمترین RMSEV و RMSEC و داشتن بیشترین r_v و r_c باشد [۲۳].

که n تعداد طیف‌ها، Y_{act} مقادیر واقعی، Y_{cal} مقدار محاسبه شده و Y_{pre} مقدار پیش بینی شده می‌باشند.

$$RMSEC = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=0}^n (y_{cal} - y_{act})^2} \quad 1$$

$$RMSECV = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (y_{pred} - y_{act})^2} \quad 2$$

$$Bias = \frac{1}{n} \sqrt{\sum_{i=0}^n (y_{pred} - y_{act})^2} \quad 3$$

3. Titratable Acidity
4. Total Soluble Solids
5. Refractometer
6. Brix
7. Anthocyanine Content
8. Absorbance unit

1. Root Mean Square Error of Validation
2. Root Mean Square Error of Calibration

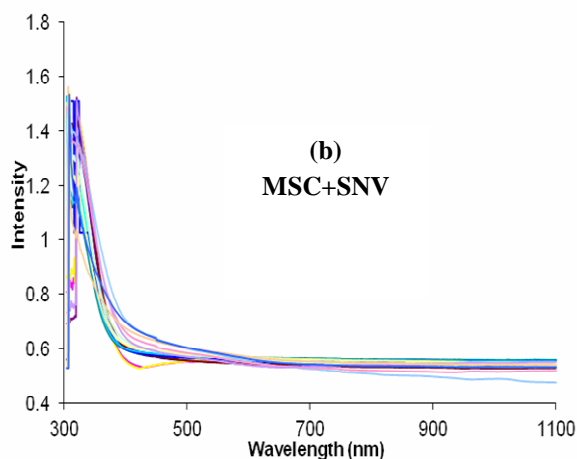


Fig 1 (a) the mean of absorbance Vis/NIR spectra of mulberry juice (b) Combination preprocessing MSC+ SNV

مطابق شکل ۱ (a) و (b)، طیف‌های آب‌میوه توت سیاه شامل چند پیک جذبی در فرکانس‌های خاص (۳۰۰-۴۵۰ nm) به دلیل ارتعاش‌های کششی اورتون‌های^۲ گروه‌های عاملی O-H، C-H و N-H متناسب با غلظت ترکیبات شیمیایی درونی میوه شامل این گروه‌های عاملی مانند قند و اسیددیده بودند [۲۷]. این نتیجه با یافته‌های سایر پژوهشگران در مورد آب میوه پرتقال [۲۸] و میوه نارنگی [۲۹] مشابهت داشت.

۲-۴ تعیین تعداد مولفه‌های اصلی با روش

Cross-Validation

از روش‌های متداول در تعیین صحت مدل‌های اعمالی و کارآمدترین تعداد مولفه‌های اصلی می‌توان به روش Cross-Validation، hold-out و bootstarp اشاره کرد [۳۰]. از این روش‌ها به وفور در شیمی‌سنجی استفاده می‌شود. با این تفاوت که روش Cross-Validation (شامل روش Monte-Carlo است) در مقایسه با روش bootstarp دارای یاریانس تئوری بالاتری است. این در حالی است که زمان محاسبات در روش Cross-Validation طولانی‌تر است [۳۱]. با توجه به توضیحات فوق به استخراج مولفه‌های اصلی پرداخته شد. از روش Cross-Validation و زیر مجموعه Monte-Carlo برای کارآمدترین تعداد مولفه‌های اصلی کمک گرفته می‌شود. تعداد مولفه‌های اصلی با توجه به کمترین خطای پیش‌بینی میانگین مربعات (MSEP) انتخاب گردید. جدول ۱ نتایج سه روش پیشگو PLS، BiPLS و iPLS را برای هر پارامتر نشان داده

=D.F =Au 510 میزان جذب در طول موج ۵۱۰ نانومتر؛

ضریب رقیق سازی

۲-۳-۴- ویتامین ث^۱

اندازه‌گیری ویتامین ث به روش تیتراسیون با سولفات مس بر اساس روش پیشنهادی برکات و همکاران [۲۶] انجام گردید. در این روش به ۵ میلی‌لیتر از آب‌میوه مقدار ۱۰ میلی‌لیتر یدورپتاسیم ۰.۵٪ اضافه گردید و سپس ۳ قطره محلول نشاسته ۱٪ اضافه شد، سپس تیتراسیون با سولفات مس ۱٪ مولار تا ظهور اولین علائم رنگ قرمز جگری ثابت، ادامه یافت. حجم سولفات مس مصرفی یادداشت شد. مقدار ویتامین ث براساس رابطه زیر محاسبه گردید (رابطه ۶).

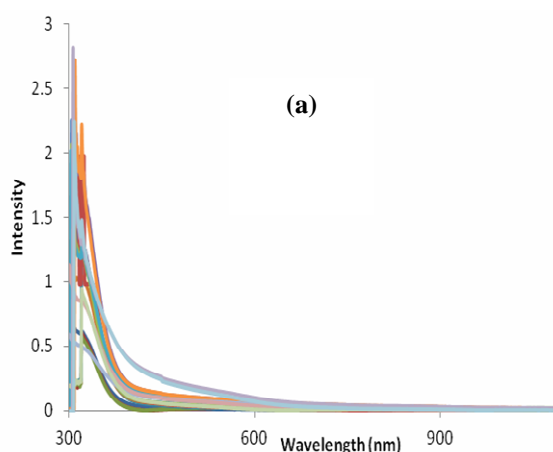
$$۶ \quad \text{ویتامین ث} = ۰.۸۸ \times \text{حجم سولفات مس مصرفی}$$

(۰.۸۸) ضریبی است که براساس مقدار اسکوربیک لازم برای خنثی کردن یک میلی‌لیتر سولفات مس ۱٪ مولار محاسبه شده است). مقدار ویتامین ث براساس میلی‌گرم در ۱۰۰ گرم وزن میوه و یا میلی‌گرم در ۱۰۰ میلی‌لیتر آب‌میوه محاسبه می‌گردد.

۴- نتایج و بحث

۴-۱ خصوصیات طیف UV-IR

شکل ۱ (a) و (b) به ترتیب نمودار ۲۰ طیف جذبی خام UV-IR (محدوده طیفی ۳۰۰-۱۱۰۰ nm) و پیش پردازش ترکیبی SNV + MSC نمونه‌های آب‌میوه توت سیاه را نشان می‌دهد.



آنتوسیانین را به ترتیب با (RMSEC=1.2, $r_c=0.93$, Bias=0.15) و (RMSEV=1.3, $r_v=0.94$, Bias=0.2) و (RMSEV=0.52, $r_v=0.98$, $r_c=0.96$, Bias=0.02) و (RMSEC=0.48, $r_c=0.86$, Bias=0.57) و (RMSEC=0.02, $r_c=0.89$, Bias=0.083) و (RMSEV=0.57, $r_v=0.89$, Bias=0.083) و (RMSEV=0.017, $r_v=0.95$, $r_c=0.96$, Bias=0.22) و (RMSEC=1.1522, $r_c=0.831$) و (RMSEC=1.0422, $r_v=0.811$) همکاران [۳۲] با استفاده از این مدل (PLS) مقدار مواد جامد محلول موجود در سیب را پیشگویی نمودند، نتایج حاصل این پژوهش، مقدار این پارامتر را با $r_c=0.831$ و $r_v=0.811$ اندازه‌گیری کرد. چن و همکاران [۲۸] روش کالیبراسیونی Cross-validation را به منظور تعیین تعداد مولفه‌های اصلی در داده‌های طیف‌سنجی Vis-NIRS بر روی آب پرتقال را اعمال نمودند. سپس با روش آنالیز چندمتغیره PLS میزان pH موجود در آب پرتقال با ضریب همبستگی ۰/۹۳ را تخمین زدند. همچنین پتانسیل روش طیف‌سنجی مرئی/مادون‌قرمز نزدیک در تعیین خصوصیات کیفی دانه انار، واریته اشرف، مانند درصد کل مواد جامد محلول، اسیدیته و pH در چهار مرحله مختلف بلوغ مورد ارزیابی قرار گرفت. توانایی مدل‌های PLS برای پیش‌بینی میزان درصد کل مواد جامد محلول، اسیدیته قابل تیتراسیون و pH مورد ارزیابی قرار گرفت. مقایسه مقادیر پیش‌بینی شده این خواص از طیف‌سنجی با مقادیر واقعی آن‌ها توانایی پیشگویی مدل‌هایی با ضرایب همبستگی بالا، به ترتیب ۰/۹۶، ۰/۹۲ و ۰/۹۲ و مقادیر خطای پایین، به ترتیب ۰/۰۹، درجه بریکس، ۰/۱۹ و ۰/۰۸ برای درصد کل مواد جامد محلول، اسیدیته قابل تیتراسیون و pH را با استفاده از طیف‌سنجی مرئی/مادون‌قرمز نزدیک نتیجه داد [۳۳].

همچنین در پژوهش دیگر که توسط لیو و همکاران [۳۴] انجام شد. آنها با استفاده از مدل PLS، میزان SSC موجود در پرتقال را با $r_v=0.90$ و $RMSEV=0.68$ پیش‌بینی نمودند. نتایج حاصل از این دو پژوهش در مقایسه با پژوهش حاضر نشان داد که، توانایی این مدل برای اندازه‌گیری TSS آب‌میوه توت سیاه بیشتر می‌باشد. از میان نتایج استخراج شده مدل PLS اسیدیته را با عملکرد بهتری پیش‌بینی کرد. به عنوان مثال نمودار ۳ پیش‌بینی و اندازه‌گیری TSS را نشان می‌دهد.

است. در مدل BiPLS، روش Monte-Carlo برای TSS، اسیدیته، ویتامین‌ث و آنتوسیانین به ترتیب تعداد مولفه اصلی ۶، ۷، ۱۵ و ۶ را که دارای میانگین مربعات خطای کمتری بودند مورد استفاده قرار گرفتند. همچنین در مدل iPLS برای TSS، اسیدیته، ویتامین‌ث و آنتوسیانین به ترتیب تعداد مولفه اصلی ۶، ۹، ۱۴ و ۹ با داشتن کمترین MSEP برای توسعه مدل پیشگو استفاده شدند. در مدل PLS نیز برای TSS، اسیدیته، ویتامین‌ث و آنتوسیانین کمتر خطا در مدل پیشگو به ترتیب تعداد مولفه اصلی ۶، ۸، ۲۰ و ۱۲ مشاهده گردید. به عنوان نمونه نمودار مربوط به پارامتر TSS در روش PLS نشان داده شد (شکل ۲). مطابق شکل، تعداد مولفه اصلی ۶ خطای پیشگویی کمتری در مقایسه با دیگر مولفه‌های اصلی دارد، که مقدار خطای آن ۱/۲۶ پیش‌بینی گردید. از این رو تعداد مولفه اصلی ۶ برای مدل پیشگو انتخاب می‌شوند.

Table 1 Results of Monte-Carlo for PLS, BiPLS and iPLS models

Parameters	PLS	BiPLS	iPLS
TSS	6	6	6
Acidity	8	7	9
Ascorbic Acid	20	15	14
Antocyanin	12	6	9

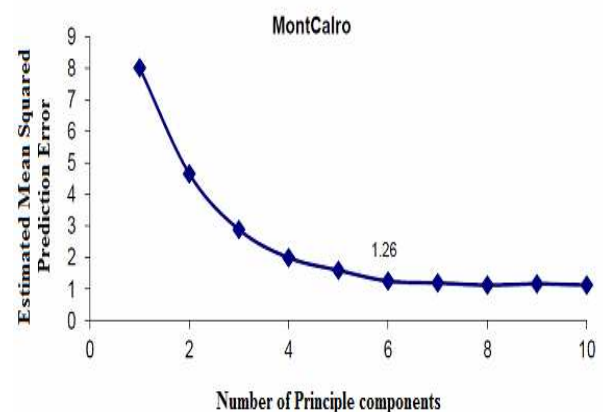


Fig 2 Number of principle component in terms of MSE for the TSS

۳-۴ مقایسه مدل‌های پیشگویی PLS، BiPLS و

iPLS و

۱-۳-۴ مدل PLS

مدل PLS نسبت به تمام محدوده طیفی محاسبه گردید. با توجه به جدول ۲ این مدل TSS، اسیدیته، ویتامین‌ث و

Table 2 Partial least-squares (PLS) calibration models for prediction of the mulberry juice biochemical parameters

Selection methods	Selected wavelength range (nm)	Parameters	Number of factors	Calibration set		Validation set	
				r_c	RMSEC	r_v	RMSEV
PLS	300-1100	TSS	6	0.93	1.26	0.94	1.31
		Acidity	8	0.96	0.20	0.98	0.014
		Ascorbic Acid	20	0.86	0.48	0.89	0.52
		Antocyanin	12	0.96	0.018	0.95	0.0014

-۶۹۷، ۶۱۷-۶۵۷، ۵۷۶-۶۱۶، ۵۳۵-۵۷۵، ۴۹۴-۵۳۴، ۴۵۳-۴۹۳، ۶۵۸-۷۳۷، ۶۹۸-۷۳۷، ۷۳۸-۷۷۷، ۷۷۸-۸۱۷، ۸۱۸-۸۵۷، ۸۵۸-۹۳۷، ۸۹۸-۹۳۷، ۹۳۸-۹۹۷، ۹۹۸-۱۰۱۷، ۱۰۱۸-۱۰۵۷ و ۱۰۵۸-۱۰۹۷ هستند، و همچنین حداقل خطای متناسب با بهترین فاصله‌های ذکر شده مربوط به مدل فوق به ترتیب ۰/۰۵۹۴۹۵، ۰/۰۵۹۶۰۲، ۰/۰۵۹۵۶۲، ۰/۰۵۹۸۵۶، ۰/۰۵۹۷۶۳، ۰/۰۵۷۸۷۳، ۰/۰۵۹۹۱۹۴، ۰/۰۵۹۳۲۱، ۰/۰۵۹۴۱۸، ۰/۰۵۹۰۷۷، ۰/۰۵۷۹۸۹، ۰/۰۵۹۹۰۷۶، ۰/۰۵۹۹۱۵۵ و ۰/۰۵۹۰۵۸، ۰/۰۵۹۱۶۵، ۰/۰۵۹۱۱۷، ۰/۰۵۹۱۰۶، ۰/۰۵۹۰۵۸ و ۰/۰۵۹۱۵۲ می‌باشند (جدول ۳). معیار انتخاب بهترین فاصله براساس میانگین حداقل مربعات جزئی می‌باشند، که هر چه مقدار آن کمتر باشد مدل پیشگویی بهتری در این فواصل خواهد داشت. با توجه به مقادیر خطای مربوط به هر فاصله که توسط مدل BiPLS پیشگویی شده بود، در فاصله‌های ۱۰ و ۱۳ که دارای کمترین خطا به ترتیب ۰/۰۵۷۹۸۹ و ۰/۰۵۷۸۷۳ می‌باشند، بهترین پیشگویی ممکن حاصل گردید.

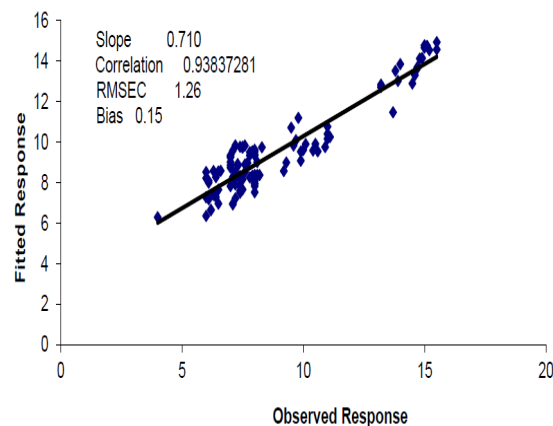


Fig 3 Fitted versus observed values for prediction models of TSS for PLS model

۴-۳-۲- روش BiPLS

مطابق شکل ۴ بهترین فاصله‌ها که توسط این مدل انتخاب شدند، ۲، ۳، ۴، ۵، ۶، ۷، ۸، ۹، ۱۰، ۱۱، ۱۲، ۱۳، ۱۴، ۱۵، ۱۶، ۱۷، ۱۸، ۱۹ و ۲۰ می‌باشند، که به ترتیب مربوط به طول موج‌های در محدوده ۳۷۰-۳۳۰، ۴۱۱-۳۷۱، ۴۵۲-۴۹۳، ۴۱۲

Table 3 Selection the most efficient interval regions by BiPLS and iPLS

iPLS				BiPLS			
Number intervals in model	Selected interval	RMSEV	Number of variables	Number intervals in model	Selected interval	RMSEV	Number of variables
1	40	0.0641	41	20	1	0.061193	809
2	40	0.0623	41	19	2	0.059763	768
3	40	0.1681	41	18	5	0.059602	727
4	40	0.2301	41	17	3	0.059586	686
5	40	0.1261	41	16	4	0.059562	645
6	40	0.0639	41	15	6	0.059495	604
7	40	0.0684	41	14	7	0.059418	563
8	40	0.2779	41	13	8	0.059321	522
9	40	0.0579	41	12	9	0.059194	481
10	39	0.0591	41	11	20	0.05915	440
11	39	0.0586	41	10	19	0.05908	400
12	39	0.0735	41	9	12	0.059076	360
13	39	0.0583	41	8	15	0.059058	320
14	39	0.0596	41	7	14	0.059077	280
15	39	0.0575	41	6	16	0.059106	240
16	39	0.0591	41	5	11	0.059155	200
17	39	0.0729	41	4	18	0.059165	160
18	39	0.0636	41	3	17	0.059117	120
19	39	0.0588	41	2	13	0.057989	40
20	39	0.0598	41	1	10	0.057873	80

این در حالی است که نتایج پژوهش حاضر برای پیشگویی TSS موجود در آب‌میوه توت سیاه در مقایسه با پژوهش صورت گرفته توسط ین و همکاران (۲۰۰۵)، عملکرد بهتری از خود نشان داد.

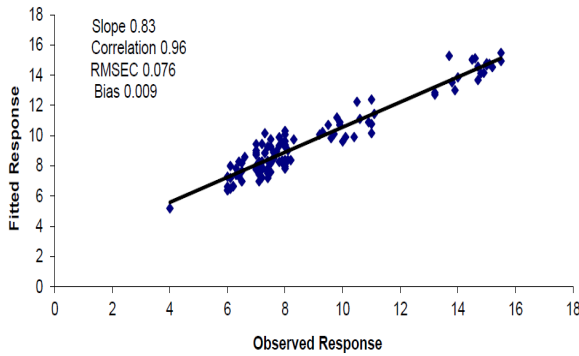


Fig 5 Fitted versus observed values for prediction models of TSS for BiPLS model

با توجه به نتایج حاصل از جدول ۴ اسیدیت، ویتامین ث و آنتوسیانین به ترتیب با ($r_c=0.96$, $RMSEC=0.014$, $Bias=0.0017$ و $RMSEV=0.013$, $r_v=0.98$, $Bias=0.002$), ($r_c=0.87$, $RMSEC=0.053$, $Bias=0.062$ و $RMSEV=0.0008$), ($r_c=0.93$, $Bias=0.14$ و $RMSEV=0.0007$), ($r_c=0.95$, $Bias=8.41729e-05$ و $RMSEV=0.0006$), ($r_c=0.96$, $Bias=0.009$ و $RMSEC=0.076$) و ($r_c=0.96$, $Bias=0.005$ و $RMSEV=0.03$) پیشگویی شدند. با توجه به نتایج فوق از بین ۴ پارامتری که توسط این مدل (BiPLS) پیش‌بینی شدند، اسیدیت را در مقایسه با دیگر پارامترهای بهتر پیشگویی کرد. به عنوان مثال نمودار ۵ حاصل از پیش‌بینی و اندازه‌گیری TSS را نشان می‌دهد.

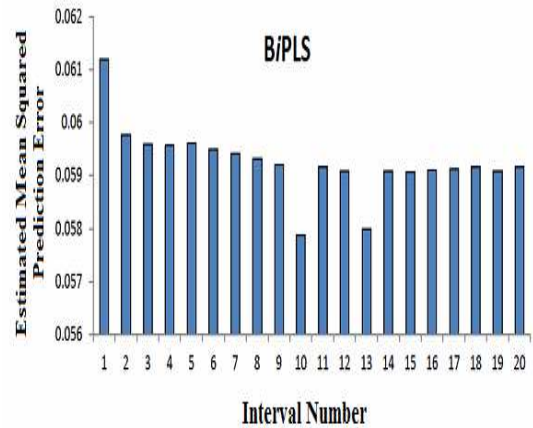


Fig 4 Estimated mean square error of prediction (RMSE) for 20 interval using the model BiPLS

یک مدل زمانی پیش‌بینی بهتری دارد که برای متغیرهای انتخاب شده میزان خطای کمتری در رابطه با مدل کامل ارائه دهد. ترکیبات بهینه از ۱۵ فاکتور انتخاب شده از میان ۲۰ فاصله که توسط مدل BiPLS انتخاب شدند، نتایج رضایت بخشی در تعیین پارامترهای ذکر شده (میزان مواد جامد محلول، اسیدیت، ویتامین ث و آنتوسیانین) به همراه داشت. نتایج حاصل از این مدل برای میزان مواد جامد محلول، با خطای میانگین حداقل مربعات جزئی، ضریب همبستگی و بایاس برای مجموعه مدل کالیبراسیونی و مدل معتبرسازی به ترتیب ($r_c=0.96$, $Bias=0.009$, $RMSEC=0.076$) و ($r_c=0.96$, $Bias=0.005$, $RMSEV=0.03$) پیشگویی شدند. ین و همکاران (۲۰۰۵)، با استفاده از این مدل (BiPLS) مقدار مواد جامد محلول موجود در سیب را پیشگویی نمود، نتایج حاصل این پژوهش مقدار این پارامتر را با $r_c=0.95$, $RMSEC=0.39$ و

Table 4 Selection of the most important wavelengths using backward interval partial least-squares (BiPLS) calibration models for prediction of the mulberry juice biochemical parameters

Selection methods	Selected wavelength range (nm)	Parameters	Number of factors	Calibration set		Validation set	
				r_c	RMSEC	r_v	RMSEV
BiPLS	330-370, 371-411, 452-493, 412-453, 494-534, 535-575, 576-616,	TSS	15	0.96	0.076	0.96	0.031
	617-657, 658-697, 698-737, 738-777, 778-817, 818-857, 858-897,	Acidity	7	0.95	0.014	0.98	0.013
	898-973, 938-997, 998-1017, 1018-1057, 1058-1097	Ascorbic Acid	15	0.87	0.05	0.93	0.0008
		Antocyanin	6	0.97	0.0007	0.95	0.0006

بهترین فاصله‌هایی که توسط مدل ذکر شده انتخاب شدند؛ ۱، ۲، ۶، ۹، ۱۰، ۱۱، ۱۲، ۱۳، ۱۴، ۱۵، ۱۶، ۱۷، ۱۸، ۱۹ و ۲۰ می‌باشند، که به ترتیب مربوط به طول موج‌های در محدوده

۴-۳-۳-۳ روش iPLS

مدل دیگری که به منظور پیشگویی پارامترهای داخلی آب‌میوه توت سیاه استفاده شد، مدل iPLS می‌باشد. طبق نمودار ۶.

و (RMSEC=0.076, $r_c=0.95$, Bias=0.009) و (RMSEV=0.013, $r_v=0.96$, Bias=0.021) توسط این مدل پیشگویی شد. در پژوهشی که توسط یین و همکاران [۳۵] انجام شد. آنها با استفاده از این مدل مقدار TSS موجود در سیب را به ترتیب با $r_c=0.88$, RMSEC=0.93 و $r_v=0.858$, RMSEV=1.008، پیشگویی کردند. همچنین در پژوهشی که توسط لویی و همکاران (۲۰۱۰)، بر روی ماندترین صورت گرفت. آنها مقدار TSS را با $r_v=0.92$, RMSEV=0.65، اندازه‌گیری کردند.

همچنین اسیدیت، ویتامین ث و آنتوسیانین به ترتیب (RMSEC=0.014, $r_c=0.96$, Bias=0.0017) و (RMSEV=0.014, $r_v=0.97$, Bias=0.007) و (RMSEC=0.053, $r_c=0.87$, Bias=0.063) و (RMSEV=0.062) و (RMSEC=0.0007, $r_c=0.97$, Bias=0.01) و (RMSEV=0.00065, $r_v=0.94$, Bias=0.00012) و (RMSEC=0.0007, $r_c=0.91$, Bias=0.01) و (RMSEV=0.00065, $r_v=0.94$, Bias=0.00012) پیشگویی شدند (جدول ۵). از بین نتایج حاصل از سه پارامتر ذکر شده (اسیدیت، ویتامین ث و آنتوسیانین) توسط مدل iPLS، این مدل در پیشگویی اسیدیت عملکردی بهتری از خود نشان داد. به عنوان مثال نمودار حاصل از پیش‌بینی و اندازه‌گیری TSS در شکل ۷ نشان داده شده است.

۶۱۷-۶۵۷، ۵۳۵-۵۷۵، ۴۹۴-۵۳۴، ۳۳۰-۳۷۰، ۲۸۹-۳۲۹، ۸۱۸-۸۵۷، ۷۷۸-۸۱۷، ۷۳۸-۷۷۷، ۶۹۸-۷۳۷، ۶۵۸-۶۹۷، ۱۰۱۸-۱۰۵۷، ۹۹۸-۱۰۱۷، ۹۳۸-۹۹۷، ۸۹۸-۹۳۷، ۸۵۸-۸۹۷ و ۱۰۵۸-۱۰۹۷ نانومتر هستند، و همچنین متناسب با بهترین فاصله‌های ذکر شده مربوط به نمودار فوق میانگین حداقل خطا به ترتیب ۰/۰۶۴۱، ۰/۰۶۲۳، ۰/۰۶۳۹، ۰/۰۶۸۴، ۰/۰۵۷۸، ۰/۰۵۹۱، ۰/۰۵۸۶، ۰/۰۷۳۵، ۰/۰۵۸۳، ۰/۰۵۹۶، ۰/۰۵۷۵، ۰/۰۵۹۱، ۰/۰۷۲۹، ۰/۰۶۳۶، ۰/۰۵۸۸، ۰/۰۵۹۸ می‌باشند (جدول ۴). با توجه به نتایج حاصل و همچنین متناسب با کمترین مقدار خطاهای پیش‌بینی شده، مدل در فواصل ۹، ۱۰، ۱۱، ۱۳، ۱۴ و ۱۵ بهترین پیشگویی را داشت.

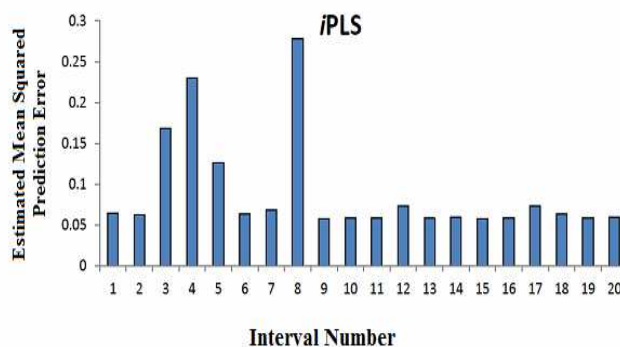


Fig 6 Estimated mean square error of prediction (RMSE) for 20 interval using the model iPLS

مدل iPLS برای پیش‌بینی پارامترهای داخلی آب‌میوه توت سیاه استفاده شد. میزان مواد جامد محلول، با خطای میانگین حداقل مربعات جزئی، ضریب رگرسیونی و بایاس برای مجموعه مدل کالیبراسیونی و مدل معتبرسازی به ترتیب

Table 5 Selection of the most important wavelengths using interval partial least-squares (iPLS) calibration models for prediction of the mulberry juice biochemical parameters

Selection methods	Selected wavelength range (nm)	Parameters	Number of factors	Calibration set		Validation set	
				r_c	RMSEC	r_v	RMSEV
iPLS	330-370, 371-411, 452-493, 412-453, 494-534, 535-575, 576-616,	TSS	6	0.95	0.076	0.96	0.013
	617-657, 658-697, 698-737, 738-777, 778-817, 818-857, 858-897,	Acidity	9	0.96	0.014	0.97	0.04
	898-973, 938-997, 998-1017,	Ascorbic Acid	14	0.87	0.053	0.91	0.062
	1018-1057, 1058-1097	Antocyanin	9	0.97	0.0007	0.94	0.00065

- از میان سه روش PLS، iPLS و BiPLS مدل iPLS در تشخیص TSS، اسیدیته، ویتامین ث و آنتوسیانین با ۱۵ فاکتور از ۲۰ فاصله انتخاب شده بهترین عملکرد را داشت.

۶- منابع

- [1] Lim, T. K. 2012. Edible Medicinal and Non-Medicinal Plants, Volume 3, Fruits, pp 430-438.
- [2] Barbour, J. R., Read, R. A., and Barnes. R. L. 2008. The Woody Plant Seed Manual, United States department of Agriculture, USA, pp. 1236.
- [3] Vijayan, K., Tikader, A. and Desilva, J. A.T. 2011. Application of Tissue culture Techniques for propagation and crop improvement in mulberry (*Morus spp.*). Tree and Forestry Science and Biotechnology, 5: 1-13.
- [4] Nicolai, B. M., Beullens, K., Bobelyn, E., Peirs, A., Saeys, W. and Theron, K. I., et al. 2007. Non-destructive measurement of fruit and vegetable quality by means of NIR spectroscopy: A review. Postharvest Biology and Technology, 46: 99-118.
- [5] AbdananMehdizadeh S., Minaei, S., Hancock, N. H. and KarimiTorshizi M. A. (2014). An intelligent system for egg quality classification based on visible-infrared transmittance spectroscopy. Information Processing in Agriculture, 1, 105-114.
- [6] AbdananMehdizadeh, S., Minaei, S., Hancock, N. and KarimiTorshizi, M. 2014. An intelligent system for egg quality classification based on visible-infrared transmittance spectroscopy. Information Processing in Agriculture, 1: 105-114.
- [7] Ruiz-Altisent, M., Ruiz-Garcia, L., Moreda, G. P., Lu, R., Hernandez-Sanchez, N., Correa, E. C., Diezma, B., Nicolai, B. and Garcia-Ramos, J. 2010. Sensors for product characterization and quality of specialty crops- a review. Computer and Electronics in Agriculture, 74: 176-194.
- [8] Jamshidi, B., Minaei, S., Mohajerani, E. and Ghassemian, 2012. Vis/NIR spectroscopy for non-destructive classification of orange varieties. 17th National Congress on Agriculture Engineering and Mechanization. Shiraz, Iran. (In Farsi).
- [9] Luo, X., Takahashi, T. and Zhang, S. 2013. Wavelength selection in visible and near infrared spectra for detection of bruises on

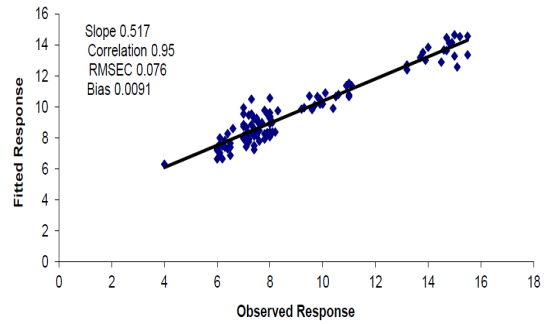


Fig 7 Fitted versus observed values for prediction models of TSS for iPLS model

با مقایسه سه مدل پیشگوی ذکر شده در بالا و با توجه به مقادیر استخراج شده، اختلاف مقادیر پیش‌بینی شده در مدل BiPLS به ترتیب با مدل‌های PLS و iPLS برای TSS (RMSEV=1.279, $r_v=0.02$ و RMSEC=1.184, $r_c=0.03$)، اسیدیته (RMSEV=1.279, $r_v=0$ و RMSEC=0, $r_c=0.01$)، (RMSEV=0.001, $r_v=0.01$ و RMSEC=0.186, $r_c=0.01$)، (RMSEV=0.027, $r_v=0.01$ و RMSEC=0, $r_c=0.01$) ویتامین ث (RMSEV=1.279, و RMSEC=0.43, $r_c=0.01$) و آنتوسیانین (RMSEV=1.279, $r_v=0$ و RMSEC=0, $r_c=0.01$)، $r_v=0.02$ و RMSEV=0.0008, و RMSEC=0.0173, $r_c=0.01$)، (RMSEV=5e-5, $r_v=0.01$ و RMSEC=0, $r_c=0$)، $r_v=0$ می‌باشد. با توجه به نتایج بالا، اختلاف مقادیر پیش‌بینی شده در مدل BiPLS نسبت به مدل‌های PLS و iPLS کمتر بوده در نتیجه عملکرد این روش در پیشگویی ویژگی‌های کیفی بهتر می‌باشد.

۵- جمع‌بندی

- نتایج آزمایش حاضر نشان داد که، طیف سنجی UV/NIR ابزار مناسبی به منظور تشخیص پارامترهای کیفی (اسیدیته، ویتامین ث، مواد جامد محلول و آنتوسیانین) موجود در آب‌میوه توت سیاه می‌باشد.
- به منظور انتخاب طول موج موثر از این دو مدل پیشگو BiPLS و iPLS استفاده شد.
- روش Mont-Carlo به خوبی توانایی تعیین مولفه‌های اصلی برحسب کمترین مربعات خطا برای سه مدل پیشگو PLS، BiPLS و iPLS را دارد.

- [20] Hansen, P. M. and Schjoerring, J. K. 2003. "Reflectance measurement of canopy biomass and nitrogen status in wheat crops using normalized difference vegetation indices and partial least squares regression". Remote Sensing of Environment. Vol.86, No.4, PP. 542-553.
- [21] Norgaard, L., Saudland, A., Wagner, J., Nielsen, J.P., Munck, L. and Engelsen, S. B. 2000. Interval Partial Least Squares Regression (iPLS): a comparative chemometric study with an example from near-infrared spectroscopy, Applied Spectroscopy, 54: 413-419.
- [22] Leardi, R., and Norgaard, L. 2004. Sequential application of backward interval partial least squares and genetic algorithms for the selection of relevant spectral regions. Journal of chemometrics, 18(11): 486-497.
- [23] Bobelyn, E., Serban, A., Nicu, M., Lammertyn, J., Nicolai, B. M., and Saeys, W. 2010. Postharvest quality of apple predicted by NIR spectroscopy: study of the effect of biological variability on spectra and model performance. Postharvest Biology and Technology, 55: 133-143.
- [24] Eksi, A, and Turkmen, I. 2011. Brix degree and sorbitol/xylitol level of authentic pomegranate (*Punicagranatum L.*) juice. Food Chemistry, 127(3): 1404-1407.
- [25] Holecraft, D. M., Gil, M. I. and Keder, A. A. 1998. Effects of carbon dioxide on anthocyanine ammonia, phenylalanine, ammonia lyase and glycosyltransferase in the arils of stored pomegranates. Journal American Society Horticulture Science, 123(1): 136-140.
- [26] Barakat, M. Z., Shehab, S. K., Darwish, N. and El-Zoheiry, A. 1973. A new titrimetric method for the determination of vitamin C. Analytical Biochemistry, 53: 245-251.
- [27] Guthrie, J. A., Walsh, K. B., Reid, D. J., and Liebenberg, C. J. 2005. Assessment of internal quality attributes of mandarin fruit. 1. NIR calibration model development. Australian Journal of Agricultural Research. 56: 405-416.
- [28] Cen, H., He, Y. and Huang, M. 2006. Measurement of Soluble Solids Contents and pH in Orange Juice Using Chemometrics and Vis-NIRS. Agriculture and Food Chemistry, 54 (20): 7437-7443.
- apples. Advanced Science Letters, 19(9): 2654-2657.
- [10] Camps, C. and Christen, D. 2009. Non-destructive assessment of apricot fruit quality by portable visible-near infrared spectroscopy. LWT- Food Science and Technology, 42: 1125-1131
- [11] Mireei, S. A., Mohtasebi, S. S., Massudi, R., Rafiee, S. and Arabanian, A. S. 2010. Feasibility of near infrared spectroscopy for analysis of data fruits. International Agrophysics, 24: 351-356.
- [12] Manley, M., Elizabeth, M., Lindie, L., Ester, and Martin, K. 2007. Prediction of soluble solids content and post-storage internal quality of Bulida apricots using near infrared spectroscopy. Journal of Near Infrared Spectroscopy, 15:179-188.
- [13] Liu, F., He, Y., Wang, L., and Pan, H. 2007. Feasibility of the use of visible and near infrared spectroscopy to assess soluble solid content and pH of rice wines. Journal Food Engineering, 83: 430-435.
- [14] Shao, Y., and He, Y. 2007. Nondestructive measurement of the internal quality of bayberry juice using Vis/NIR spectroscopy. Journal Food Engineering, 79: 1015-1019.
- [15] Vaudelle F., and L'Huillier J. P. 2015. Influence of the size and skin thickness of apple varieties on the retrieval of internal optical properties using Vis/NIR spectroscopy: A Monte Carlo-based study. Computer and Electronics in Agriculture, 116:137-149.
- [16] Moghimi, A., Aghkhani, M. H., Sazgarina, A., and Sarmad, M. 2010. Vis/NIR spectroscopy and chemometrics for the prediction of soluble solid content and acidity PH of kiwifruit. Biosystems Engineering, 106(3): 295-302.
- [17] Fu, X., Ying, H., Xu, and Yu, H. 2007. FT-IR diffuse reflectance spectroscopy for kiwifruit firmness detection. Sensing and Instrumentation for Food Quality and Safety, 1: 29-35.
- [18] Ishikawa, S., and Gulick, V. 2013. An automated mineral classifier using Raman spectra. Computers and Geosciences, 54: 259-268.
- [19] Wu, D., S. Feng, and Y. He. 2007. Infrared spectroscopy technique for the nondestructive measurement of fat content in milk powder. Journal of Dairy Science. 90: 3613-3619.

apples by Fourier-transform near-infrared spectroscopy, *Applied Optics* 44 (25): 5224–5229.

[33] Khodabakhshian, R., Imadi, B., Khojastehpour, M., Glzaryan, M.R. and Sazgarnia, A. 2015. Quick measurement of pomegranate aril quality spectroscopy using visible / near-infrared. *Innovative Food Technologies*, No. 8, pp. 103-114 (In Farsi).

[34] Liu, Y., Sun, X., and Ouyang, A. 2010. Non-destructive measurements of soluble solid content of navel orange fruit by visible-NIR spectrometric technique with PLS and PCA-BPNN. *LWT-Food Science and Technology*, 43: 602–607.

[35] Liu, Y., Sun, X., Zhang, H., and Aiguo, O. 2010. Nondestructive measurement of internal quality of Nanfeng mandarin fruit by charge coupled device near infrared spectroscopy. *Computers and Electronics in Agriculture*, 71(S1): S10–S14.

[29] Golic, M, and Walsh, K. B. 2006. Robustness of calibration models based on near infrared spectroscopy for the in-line grading of stonefruit for total soluble solids contents. *Analytica Chimica Acta*, 555: 286–291.

[30] Xiaobo, Z., Jiewen, Z., Xingyi, H., and Yanxiao, L. 2007. Use of FT-NIR spectrometry in noninvasive measurements of soluble solid contents (SSC) of 'Fuji' apple based on different PLS models. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, 87: 43–51.

[31] Lendasse, A., Wertz, V., and Verleysen, M. 2003. Model Selection with Cross-Validations and Bootstraps – Application to Time Series Prediction with RBFN Models. *Artificial Neural Networks and Neural Information Processing — ICANN/ICONIP 2003*, Istanbul, Turkey, 573-580.

[32] Ying, Y.B., Liu, Y. D. and Tao, Y. 2005. Nondestructive quantification of the soluble solids content and the available acidity of

Extraction of most effective wavelength of mulberry juice (*Morus Alba Var. nigra L.*) spectra using different PLSR models

Soltanikazemi, M. ¹, Abdanan Mehdizadeh, S. ^{2*}, Heydari, M. ³, Faregh, S. M. ⁴

1. MSc student of Mechanics of Biosystems Engineering Department, Faculty of Agricultural Engineering and Rural Development, Ramin University of Agriculture and Natural Resources of Khuzestan.
2. Assistant professor of Biosystems Engineering Department, Faculty of Agricultural Engineering and Rural Development, Ramin Agriculture and Natural Resources University of Khuzestan.
3. Assistant professor of Department of Horticulture, Faculty of Agriculture, Ramin Agriculture and Natural Resources University of Khuzestan, Khuzestan.
4. Associate professor of Agricultural Farm machinery and Mechanization Department, Faculty of Agricultural Engineering and Rural Development, Ramin Agriculture and Natural Resources University of Khuzestan.

(Received: 2016/02/05 Accepted: 2016/08/23)

In recent years, application of UV/NIR spectroscopy as a non-destructive technique combined with chemometric methods has been widely noticed for quality assessment of food and agriculture produces. Mulberry is a native fruit of Iran and there are limited information about its quality indexes. In this paper, backward interval partial least-squares (BiPLS) and interval partial least-squares (iPLS) were utilized as wavelength selection methods in UV/NIR region to determine fruit juice internal qualities (soluble solid content (TSS), Titratable Acidity, Anthocyanine Content and Ascorbic Acid). In order to find the appropriate number of components for each juice parameter Cross-Validation method was used. BiPLS method with 15 factors of 20, compares to PLS and iPLS, had the best performance in prediction of fruit juice parameters SSC (RMSEC = 0.076, $r_c = 0.96$ and RMSEV = 0.03, $r_v = 0.96$), TA (RMSEC = 0.014, $r_c = 0.96$ and RMSEV = 0.013, $r_v = 0.98$), AA (RMSEC = 0.053, $r_c = 0.87$ and RMSEV = 0.0008, $r_v = 0.93$) and AC (RMSEC = 0.0007, $r_c = 0.97$ and RMSEV = 0.0006, $r_v = 0.95$).

Key words: Mulberry fruit juice, UV/NIR spectroscopy, Biochemical components, Wavelength selection

* Correspond Author E-Mail Address: saman.abdanan@gmail.com