



مجله علوم و صنایع غذایی ایران

سایت مجله: www.fsct.modares.ac.ir

مقاله علمی-پژوهشی

مقایسه وضعیت‌های بازتابشی و تقابلی طیف‌سنجی فروسرخ نزدیک در امکان‌سنجی تشخیص غیرمخرب تازگی پودر گیاه دارویی سیر (Garlic)

رضا محمدی گل^{۱*}، محمود کریمی^۲ و رضا شاه‌حسینی^۳

۱- نویسنده مسئول، گروه مهندسی مکانیک بیوسیستم، دانشکده کشاورزی، دانشگاه اراک، اراک، ایران.

۲- گروه مهندسی مکانیک بیوسیستم، دانشکده کشاورزی، دانشگاه اراک، اراک، ایران.

۳- عضو هیئت علمی، گروه گیاهان دارویی، دانشگاه اراک، اراک، ایران.

اطلاعات مقاله

چکیده

تاریخ‌های مقاله :

تاریخ دریافت: ۱۴۰۳/۹/۱۵

تاریخ پذیرش: ۱۴۰۳/۱۱/۲۷

کلمات کلیدی:

گیاه دارویی،

پودر سیر،

تازگی،

طیف‌سنجی،

بازتابی،

تقابلی

پودر گیاه دارویی سیر از حیث تجاری اهمیت زیادی دارد و به عنوان افزودنی در صنایع غذایی و دارویی کاربرد فراوانی دارد. روش‌های طیف‌سنجی به‌عنوان یک روش غیرمخرب در حوزه سنجش کیفیت محصولات غذایی، تولیدات و فرآورده‌های گیاهان دارویی مورد استفاده قرار می‌گیرد. در پژوهش حاضر کارایی و پتانسیل دو وضعیت پرکاربرد بازتابشی و تقابلی در طیف‌سنجی فروسرخ نزدیک در محدوده ۹۳۶ تا ۱۶۶۰ نانومتر برای امکان‌سنجی تشخیص تازگی پودر سیر مقایسه شدند. در هریک از وضعیت‌های طیف‌برداری، تعداد ۱۲۰ طیف در ۲ تکرار از نمونه‌های پودر سیر اخذ شد. ۲۵ درصد از طیف‌ها قبل از مدل‌سازی به‌طور تصادفی برای اعتبارسنجی در نظر گرفته شدند و تدوین مدل‌ها با طیف‌های باقیمانده به انجام رسید. برای حذف نوفه‌های احتمالی تأثیر پیش‌پردازش‌های رایج روی عملکرد طبقه‌بندی شبکه‌های مصنوعی عصبی (ANN^۱)، ماشین بردار پشتیبان (SVM^۲) و الگوریتم k-نزدیک‌ترین همسایه (KNN^۳) بررسی شد. از روش آنالیز مؤلفه‌های اصلی (PCA^۴) برای کاهش متغیرهای طیفی استفاده شد و چهار مؤلفه اصلی اول به عنوان ورودی طبقه‌بندی در نظر گرفته شدند. در وضعیت طیف‌برداری تقابلی، طبقه‌بندی‌های SVM و KNN با دقت تفکیک ۱۰۰ درصد، طیف‌های اخذشده از پودرها در سه بازه زمانی ۳ روز، ۳ ماه و ۱۲ ماه را جداسازی نمودند. طبقه‌بندی ANN در وضعیت بازتابی به‌جز طیف‌های خام (بدون پیش‌پردازش) در همه پیش‌پردازش‌های مورد بررسی، دقت ۱۰۰ درصد در تفکیک طیف‌های ذکرشده حاصل شد. طیف‌سنجی فروسرخ نزدیک در باند ۹۳۶-۱۶۶۰ نانومتر به کمک شیمی‌سنجی برای تشخیص سریع تازگی پودر سیر پتانسیل لازم را دارد. وضعیت طیف‌برداری تقابلی با در نظر گرفتن سهولت کاربرد در صنعت و آزمایشگاه نسبت به وضعیت بازتابی برتری دارد.

DOI:10.22034/FSCT.22.162.265.

* مسئول مکاتبات:

r-mohammadigol@araku.ac.ir

1 . Artificial Neural Network

2 . Support Vector Machine

3 . k-Nearest Neighbors

4. Principle Components Analysis

۱-مقدمه

شوند [۱۴]. در وضعیت بازتابشی مقدار نور منعکس‌شده از سطح ماده کمی شده و طیف آن ترسیم می‌شود، اما در وضعیت تقابلی ساختار داخلی و ویژگی‌های جذب ماده بر نور برگشتی دخیل هستند. انتخاب بهترین روش طیف‌برداری بستگی به به ویژگی مواد مورد مطالعه دارد. در این رابطه، حالت عبوری یا عبوری-بازتابی بهترین انتخاب برای نمونه‌های مایع است و حالت بازتابش اصولاً برای پودرها استفاده می‌شود [۱۵، ۱۶]. ريو و همکاران (۲۰۲۲)، در نمونه‌های پودری خود طول موج ۱۹۲۴ نانومتر را مربوط به پیوندهای ملکول آب^۸ گزارش کردند [۱۷]. برای تصحیح اثر سایز ذرات در پراکندگی طیف‌های اخذشده اعمال برخی از روش‌های پیش‌پردازش مثل MSC^۹ پیشنهاد شده است [۱۸].

وضعیت‌های بازتابشی و تقابلی طیف‌برداری فروسرخ نزدیک/مرئی در تحقیق هم‌تراکن و همکاران (۲۰۲۱)، در پیش‌بینی شاخص‌های کیفی خرمالو مقایسه شدند. مدل PLS^{۱۰} تدوین‌شده از داده‌های وضعیت تقابلی در تخمین شاخص‌های ASC^{۱۱} و سفتی بافت موفق و در پیش‌بینی شاخص SSC^{۱۲} ناکارآمد بوده است. مدل‌سازی داده‌های وضعیت بازتابشی در تخمین تمام صفات عملکردی رضایت‌بخش نبوده است [۱۹].

سوکناناراک و همکاران (۲۰۱۴)، استفاده از طیف‌سنجی فروسرخ نزدیک در سنجش تازگی تخم‌مرغ را بررسی

گیاه دارویی سیر با نام علمی *Allium sativum* L. و از خانواده Liliaceae از گونه‌های دارویی سودمند است که در صنایع دارویی، غذایی، آرایشی و بهداشتی کاربرد وسیعی دارد [۱، ۲]. سوخ^۱ اصلی‌ترین اندام دارویی این گونه است که به صورت تازه، خشک، عصاره، روغن، اسلایس، گرانول و پودر استفاده می‌شود [۳]. پودر سیر از اصلی‌ترین فرآورده‌های این گیاه به شمار می‌آید که از حیث تجاری اهمیت زیادی دارد و در صنایع غذایی و دارویی استفاده فراوانی دارد [۴]. این گیاه سودمند در مناطق زیادی از جهان پراکنش و رویش دارد و در رده مهم‌ترین و پرمصرف‌ترین گیاهان دارویی محسوب می‌شود [۵]. سیر دارای ترکیبات متعددی نظیر انواع کربوهیدرات، نشاسته، پروتئین، ویتامین‌ها، مواد معدنی و موسیلاژ [۱، ۶] و همچنین حاوی ترکیبات گوناگون ارگانوسولفور و آمینواسیدی است [۷]. ترکیبات ذکرشده علت خواص ضد باکتریایی، ضد اکسایشی، ضد سرطانی، تقویت‌کننده ایمنی^۲ و بسیاری اثرات درمانی دیگر هستند که متأثر از فاکتورهای مختلف در فرآیند تولید و فرآوری از جمله زمان تهیه و نگهداری عصاره و پودر هستند [۸، ۹، ۱۰، ۱۱، ۱۲، ۱۳].

در طیف‌سنجی فروسرخ نزدیک (NIR^۳) انواع وضعیت‌های طیف‌برداری شامل بازتابش^۴، عبوری^۵، عبوری-بازتابی^۶ و تقابلی^۷ که در آنها منبع نور و گیرنده نسبت به یکدیگر تغییر موقعیت می‌یابند، مشاهده می

7. Stretch O-H + O-H deformation

9. Multiplicative Scatter Correction

10. Partial Least Squares

11. Ascorbic Acid

12. Soluble Solids Content

1. Bulb

2. Immunomodulatory

3. Near Infra-Red (NIR)

4. Reflectance

5. Transmittance

6. Transeflectance

7. Intractance

کاربردی قابل حمل معمولاً این حالت به کار می‌رود. با توجه به اینکه مطالعاتی مبنی بر مقایسه روش اخذ طیف از نمونه‌های پودری به صورت بازتابشی (وابسته به ویژگی سطح ماده) با دو فیبر کاملاً مجزا یا تقابلی (وابسته به ساختار داخلی ماده) با فیبرهای یکی شده انجام نشده، لذا پژوهش حاضر به منظور مقایسه دو وضعیت طیف‌برداری بازتابشی و تقابلی در امکان‌سنجی تشخیص غیرمخرب تازگی پودر گیاه دارویی سیر در باند فروسرخ موج کوتاه (۹۳۶-۱۶۶۰ نانومتر) صورت پذیرفت.

۲- مواد و روش‌ها

۲.۱. آماده‌سازی نمونه‌ها

برای انجام این پژوهش، تهیه نمونه‌های مورد نیاز از سیر تولیدشده در شرایط اقلیمی استان مرکزی (سیر سفید توده بومی اراک) در نظر گرفته شد. سوخ‌های یکسان، سالم و عاری از آثار بیماری و آفات تهیه شدند. در هر مرحله پس از پوست‌گیری و جداکردن سیرچه‌ها از یکدیگر، اسلایس‌هایی با ضخامت ۲-۳ میلی‌متر تهیه شدند. پس از خشک‌کردن در شرایط سایه و به دور از نور مستقیم، توسط آسیاب آزمایشگاهی، پودرها در سه بازه زمانی و بعد از ۳ روز، ۳ ماه و ۱۲ ماه مورد ارزیابی قرار گرفتند.

۲.۲. طیف‌برداری

طیف‌های بازتابی با تابش نور در زاویه ۴۵ درجه اخذ شدند [۲۴]. از اسپکترومتر مدل Flame-NIR محصول شرکت Ocean optics با دامنه ۹۳۶-۱۶۶۰ نانومتر استفاده شد (جدول ۱). قبل از شروع طیف‌برداری ابتدا

نمودند و داده‌های حاصل از حلت‌های بازتابشی و تقابلی را مدل‌سازی کردند. نتایج ارزیابی آنها برتری حالت تقابلی بر بازتابشی را نشان داد. همچنین عنوان نمودند در صنعت، برای دسته‌بندی تخم مرغ، حالت تقابلی نسبت به بازتابشی مناسب‌تر است [۲۰].

دیزیکوسکی و همکاران (۲۰۲۳)، تشخیص و سنجش غیرمخرب و سریع تقلب‌های پودر سیر، نشاسته ذرت و آرد ذرت را به وسیله مدل‌سازی طیف‌های بازتابی NIR بررسی نمودند. در این مطالعه درصد اختلاط‌های متنوعی ایجاد و طیف‌برداری در بازه 4000cm^{-1} تا 10000cm^{-1} انجام شد. نتایج تبیین کرد طیف‌سنجی NIR برای پیش‌بینی مقدار تقلب در پودر سیر قابل استفاده بوده و طبق شاخص‌های ارزیابی مدل، روش PLSR^1 نسبت به مدل PCR^2 برتری دارد [۲۱]. لوهومی و همکاران (۲۰۱۵)، امکان تشخیص وجود نشاسته ذرت در پودر سیر را با طیف‌سنجی FTIR^3 و مدل رگرسیونی PLSR بررسی کردند. طیف‌های بازتابی در دامنه 4000cm^{-1} تا 6500cm^{-1} استفاده شد. آنها اظهار داشتند تشخیص غیرمخرب نشاسته ذرت در پودر سیر امکان‌پذیر است [۲۲]. ونگ و همکاران (۲۰۱۹)، پتانسیل روش طیف‌سنجی NIR ، MIR^4 و شیمی‌سنجی را در تشخیص پودر توت‌فرنگی از میوه تازه یا از میوه انباری (۲، ۴، ۱۵، ۲۰ و ۲۷ روز) تهیه‌شده را بررسی و از مدل‌های PLSR و LS-SVM^5 استفاده کردند. در نتایج این مطالعه تفکیک ۱۰۰ درصدی حاصل شد و برآیند آن، حاکی از موفقیت کامل این روش در تشخیص سریع موضوع مذکور بوده است [۲۳]. استفاده از فیبرهای نوری و علی‌الخصوص نوع تقابلی (Y-شکل) در طیف‌برداری، توسعه یافته و در طیف‌سنج‌های نوری

4. Mid Infra-Red

5. Least-Squares Support Vector Machines

1. Partial Least Squares Regression

2. Principle Components Regression

3. Fourier-Transform Infrared Spectroscopy

($A = \log 1/R$) طیف‌های جذبی از روی طیف‌های بازتابی توسط نرم‌افزار ترسیم شدند.

منبع نور به مدت بیشتر از ۳۰ دقیقه روشن نگه داشته شد تا عدم یکنواختی ناشی از گرم‌نبودن منبع نور حذف شود. پس از این مرحله با توجه به روابط موجود جدول ۱. ویژگی‌های طیف‌سنج مورد استفاده

Table 1. Specifications of the spectrometer used

	Ocean optics	شرکت سازنده Manufacturer
	NIR- Flame	مدل Model
	88.9×63.5×31.9	ابعاد (mm) Dimension
	265	وزن (gr) Weight
	Hamamatsu G8160-03	آشکارساز Detector
	128	تعداد پیکسل Pixel number
	936-1660	محدوده کاری (nm) Range
	6000 to 1	نسبت سیگنال به نوفه S/N
	10	تفکیک طول موج (nm) Resolution

بودری هنگام برداشت طیف، یک پراب استوانه‌ای آلومینیومی ساخته و به‌کار گرفته شد.

۳.۲. شیمی‌سنجی^۱

طیف‌های خام NIR به علت تنوع اندازه ذرات، موارد مربوط به منبع نور، گیرنده و سایر عوامل ناخواسته نوفه قابل توجهی دربر دارند. بنابراین برای استخراج اطلاعات شیمیایی از داده‌های طیفی، روش‌های پیش‌پردازش گوناگون روی آنها اعمال می‌شوند [۲۵]. اما هیچگونه راهنمای مشخصی در انتخاب روش‌های

از دو عدد فیبر نوری QP400-2-VIS-NIR در حالت بازتابی و از فیبر ترکیبی R400-7-VIS-NIR در حالت تقابلی برای انتقال و دریافت نور (تولیدات شرکت Ocean optics) استفاده شد. در وضعیت بازتابی فیبرها توسط نگهدارنده در موقعیت ثابت نسبت به هم با زاویه ۴۵ درجه و فیبر رفت و برگشتی وضعیت تقابلی نیز در زاویه ۴۵ قرار داده شدند. هر طیف از میانگین ۴ اسکن تنظیم شد. در مجموع ۲۴۰ طیف برداشت شد. پیش از طیف‌سنجی و پس از اخذ هر ۱۰ طیف، نور پس‌زمینه و سفید مرجع (سولفات باریم) برداشت و بازذخیره شدند. برای تثبیت زاویه و فاصله فیبرها تا سطح نمونه‌های

۵.۲. طبقه‌بندها^۳

مدل‌های طبقه‌بندی در تحقیقات متنوع به کار گرفته شده‌اند [۳۰، ۳۱، ۳۲، ۳۳]. در این آزمایش پتانسیل طبقه‌بندهای ANN، SVM و KNN در تفکیک پودرها ارزیابی شده است. اعتبارسنجی مدل‌های ایجادشده ضرورت دارد؛ لذا حدود ۲۵ درصد از طیف‌ها قبل از مدل‌سازی توسط نرم‌افزار به‌طور تصادفی برای اعتبارسنجی در نظر گرفته شدند و کالیبراسیون مدل‌ها با طیف‌های باقیمانده به انجام رسید. شاخص درصد دقت تفکیک درست^۴ نمونه‌های اعتبارسنجی (رابطه ۱) برای ارزیابی طبقه‌بندها به کار گرفته شد.

$$\text{Accuracy}\% = (\text{TC}/\text{N}) \times 100 \quad (1)$$

در این رابطه TC تعداد نمونه‌های درست طبقه‌بندی‌شده و N تعداد کل نمونه‌های ماتریس اغتشاش دسته نمونه اعتبارسنجی است. نرم‌افزار Ocean view 1.6.3 در طیف‌برداری و نرم‌افزار Unscrambler X10.4 در اعمال پیش‌پردازش‌ها استفاده شدند. آنالیز مؤلفه‌های اصلی و مدل‌سازی در نرم‌افزار IBM modeler 18 انجام شدند.

طیف‌برداری و بین خود وضعیت‌ها زیاد بوده، اما مقدار جذب در برخی طول موج‌ها متفاوت هستند. نکته قابل توجه این است که یکنواختی طیف‌های برداشت‌شده در وضعیت تقابلی بیشتر بوده و نوفه‌های ظاهری به مقدار قابل توجهی به‌خصوص در پیک‌ها کمتر شده است. از جمله علل یکنواختی بیشتر را احتمالاً می‌توان به تأثیر

پیش‌پردازش وجود ندارد [۲۱]. در پژوهش حاضر برخی از روش‌های رایج پیش‌پردازش مورد استفاده قرار گرفت [۱۸]. پیش‌پردازش‌های SNV^۱ و MSC برای حذف اثرات ناشی از تفاوت اندازه ذرات و تغییر فاصله منبع نور تا سطح نمونه به کار می‌روند [۲۶، ۲۷] و با مشتق‌گیری (D) از طیف‌ها نقاط پیک تقویت شده و البته نوفه‌ها هم ارتقاء می‌یابند؛ لذا معمولاً بعد از گرفتن مشتق، هموارسازی انجام می‌شود [۲۸]. روش هموارسازی ساویتزکی-گولای (SG^۲) از روش‌های رایج است که بعد از مشتق‌گیری به کار می‌رود. در این مطالعه اثر مشتق اول و دوم بر داده‌های طیفی بررسی شد. همچنین هموارسازی با روش SG (با تعداد نقاط همسایگی ۴ و چندجمله‌ای درجه ۲) صورت پذیرفت.

۴.۲. آنالیز مؤلفه‌های اصلی (PCA)

با این روش متغیرهای جدیدی ایجاد می‌شود که هر یک ترکیبی خطی از متغیرهای مستقل اصلی متعدد هستند. متغیرهای جدید کاهش یافته، مؤلفه‌های اصلی هستند و مؤلفه اصلی اول بیشترین تغییرات را پوشش می‌دهد و مؤلفه اصلی دوم اطلاعاتی را که در مؤلفه اول وجود ندارد پوشش داده و این روند در مؤلفه‌های بعدی نیز تکرار می‌شود [۲۹]. مؤلفه‌های اصلی اول تا چهارم، ورودی طبقه‌بندها را تشکیل دادند.

۳- نتایج و بحث

در شکل ۱ تمام طیف‌های جذبی نمونه‌های پودری سه نوع پودر با تازگی متفاوت در محدوده ۹۳۶ تا ۱۶۶۰ نانومتر در وضعیت‌های تقابلی و بازتابشی مشاهده می‌شود. شباهت بین طیف‌های اخذشده در هر وضعیت

3. Classifiers

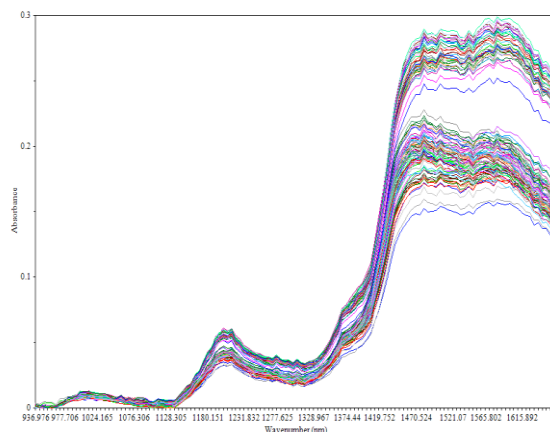
4. Accuracy

1. Standard Normal Variate

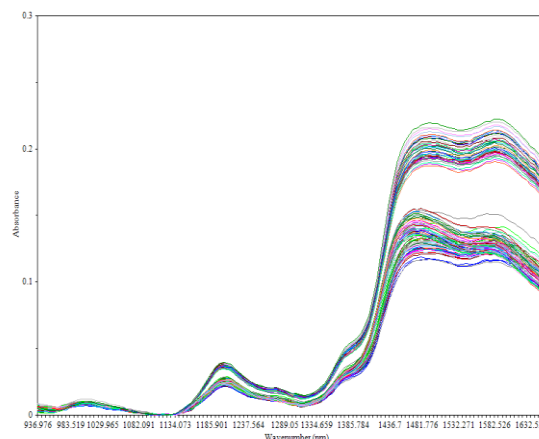
2. Savitzky-Golay

طیف‌های ارائه‌شده در مطالعه دیزیکوسکی و همکاران (۲۰۲۳) تطابق بسیار خوبی دارند [۲۱].

کمتر عواملی همچون تغییر در فاصله نمونه با فیبر و همچنین اثر کمتر ناهمواری‌های سطحی نمونه‌ها در وضعیت تقابلی دانست. شکل طیف‌های اخذشده با



ب (B)



الف (A)

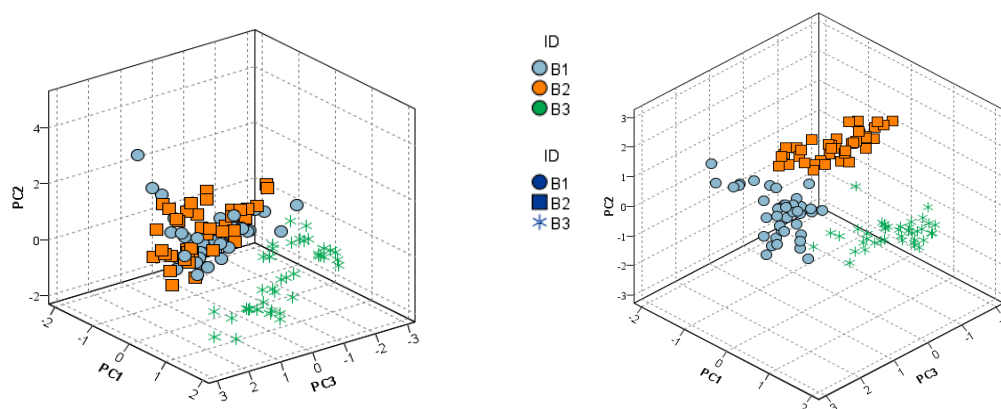
شکل ۱. کل طیف‌های اخذشده (و تبدیل‌یافته به جذب) در وضعیت‌های الف: تقابلی و ب: بازتابی

Fig 1. All acquired spectra (converted to absorption) on A: Intractance and B: Reflectance

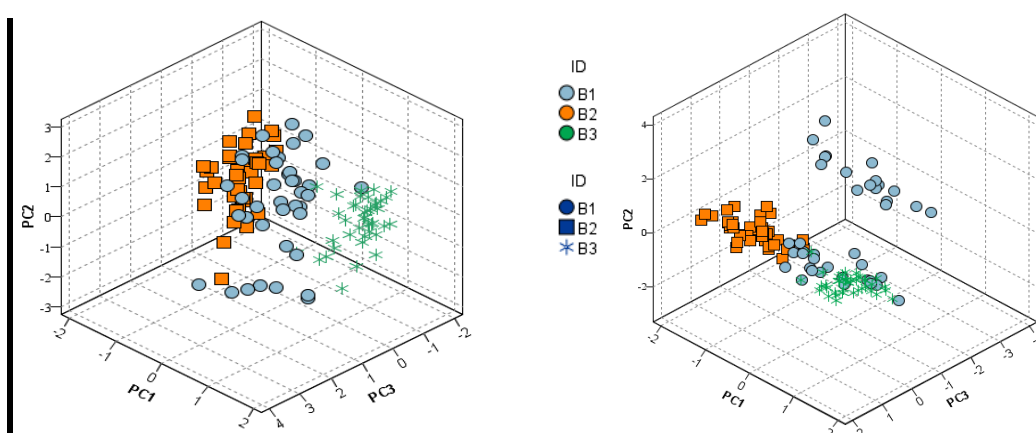
O-H هستند [۳۴]. پیک ایجادشده در طول موج ۱۴۲۰ نانومتر ناشی از اورتون اول پیوند O-H آب گزارش شده است [۳۵].

به‌منظور مقایسه تأثیر روش‌های پیش‌پردازش در جدایش‌پذیری طیف نمونه‌ها از یکدیگر، پراکندگی نمونه‌ها در مختصات مؤلفه‌های اصلی اول، دوم و سوم ارائه شده‌اند (شکل ۲). استفاده از روش PCA و بررسی پراکندگی در مختصات مؤلفه‌های اصلی در مطالعات متعدد ملاحظه می‌شود [۲۹، ۳۰، ۳۶].

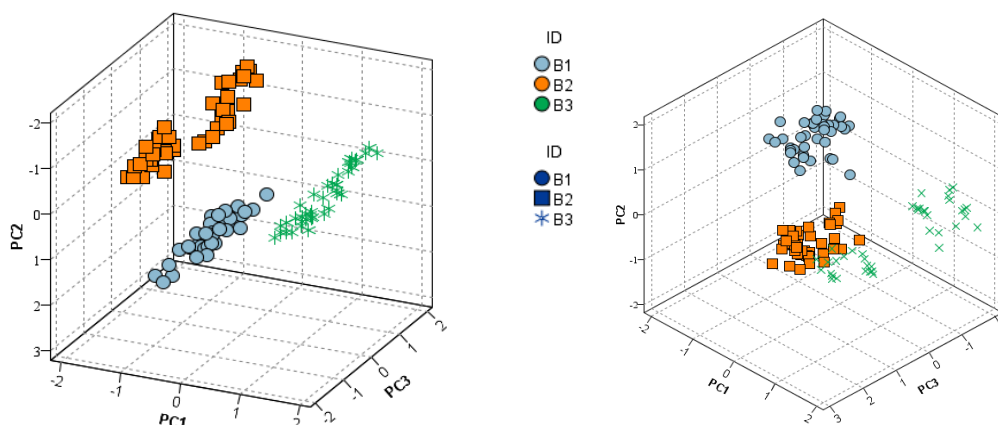
در برخی مطالعات، در نمونه‌های پودری طول موج ۱۹۲۴ نانومتر در ارتباط با پیوندهای ملکول آب مطرح شده است [۱۷]. این موضوع در پژوهش حاضر با توجه به باند طیفی بررسی‌شده (۹۳۶-۱۶۶۰ نانومتر) از حیث تأثیر رطوبت در نمونه‌های مورد استفاده وضعیتی مثبت قلمداد می‌شود. در سیر مولکول‌های حاوی سولفور، فلاونوئیدها، آمینواسیدها، پلی‌فنل‌ها، ترکیبات محلول در آب و چربی‌ها در مقادیر کم وجود دارند. لذا تفسیر طیف‌ها به علت همپوشانی احتمالی ترکیبات مذکور دشوار و پیچیده است. باندهای جذبی مؤثر که در طیف‌های برداشت‌شده مشاهده می‌شود (شکل ۱) عبارتند از: باندهای ۱۲۹۰-۱۱۲۰ نانومتر که علت آن اورتون دوم پیوند C-H است. باند ۱۵۲۰-۱۳۲۰ نانومتر که ناشی از اورتون اول پیوند N-H و اورتون اول پیوند



الف: بدون پیش پردازش - طیف های خام - (راست: تقابلی، چپ: بازتابشی)
No preprocessing - Raw spectra- (Right: Intractance, Left: Reflectance)



ب: پیش پردازش SNV (راست: تقابلی، چپ: بازتابشی)
SNV preprocessing (Right: Intractance, Left: Reflectance)



ج: پیش‌پردازش D1+SG (راست: تقابلی، چپ: بازتابی)
D1+SG preprocessing (Right: Intracance, Left: Reflectance)

شکل ۲. اثر پیش‌پردازش‌های مختلف بر پراکندگی طیف‌ها در مختصات PC1، PC2 و PC3

Fig 2. The effect of the different preprocessing on the spectra scattering at PC1, PC2 and PC3 coordinate

۱.۳. مدل‌سازی

SVM و KNN با دقت تفکیک ۱۰۰ درصد در تمامی پیش‌پردازش‌های بررسی‌شده طیف‌ها را جداسازی نمودند. همچنین طبقه‌بند ANN در وضعیت بازتابی به غیر از طیف‌های خام در همه پیش‌پردازش‌های مورد بررسی، دقت تفکیک ۱۰۰ درصد را نشان داد.

نتایج مربوط به کالبراسیون مدل‌ها و اعتبارسنجی در جدول‌های ۲ و ۳ ارائه شده است. دسته داده‌های آموزش و تست در تمامی طبقه‌بندها با یکدیگر برابر می‌باشد. در وضعیت طیف‌برداری تقابلی، طبقه‌بندهای

جدول ۲. درصد دقت تفکیک طبقه‌بندها در دسته نمونه‌های آموزش و تست مدل بر پایه روش‌های مختلف پیش‌پردازش (وضعیت تقابلی)

Table 2. The overall accuracy (%) by classifiers in the training and testing data sets based on different pre-processing methods (Intracance)

KNN (%)		SVM (%)		ANN (%)		پیش‌پردازش طیفی
Train	Test	Train	Test	Train	Test	Spectral Preprocessing
100	100	100	100	100	96.30	No Preprocessing

100	100	100	100	100	100	MSC
100	100	100	100	98.92	100	SNV
100	100	100	100	100	100	D1+SG
100	100	100	100	100	100	D2+SG

جدول ۳. درصد دقت تفکیک طبقه‌بندها در دسته نمونه‌های آموزش و تست مدل بر پایه روش‌های مختلف پیش‌پردازش (وضعیت بازتابی)

Table 3. The overall accuracy (%) by classifiers in the training and testing data sets based on different pre-processing methods (Reflectance)

KNN (%)		SVM (%)		ANN (%)		پیش‌پردازش طیفی
Train	Test	Train	Test	Train	Test	Spectral Preprocessing
98.92	96.30	98.92	92.59	98.92	96.30	No Preprocessing
95.70	96.30	95.70	96.30	98.92	100	MSC
95.70	96.30	95.70	96.30	98.92	100	SNV
100	100	100	100	100	100	D1+SG
100	100	100	100	100	100	D2+SG

۴- نتیجه‌گیری

بندی دیده نشد. دقت تفکیک حاصله، نشان‌دهنده پتانسیل طیف‌سنجی فروسرخ نزدیک در محدوده ذکرشده برای تشخیص تازگی پودر سیر است. با توجه به نتایج کسب‌شده و همچنین سهولت کاربرد پراب ترکیبی رفت و برگشتی نور، حالت طیف‌برداری تقابلی برتری دارد. انجام پژوهش مشابه در باندهای دیگر طیف نور، لحاظ‌نمودن ارقام سیر، سایز ذرات پودر و همچنین مقایسه دو حالت تقابلی و بازتابی در سنجش کیفیت سایر مواد غذایی و فرآورده‌های گیاهان دارویی، به عنوان مطالعات آتی پیشنهاد می‌گردد.

طیف‌های فروسرخ نزدیک موج کوتاه محدوده ۹۳۶-۱۶۶۰ نانومتر اخذشده از نمونه‌های پودر سیر تعداد پیک‌های کمی نشان دادند که علت آن را می‌توان احتمالاً در همپوشانی در جذب نور اورتون‌ها و پیوندهای مواد متنوع موجود در پودر سیر دانست. طیف‌های اخذشده در حالت تقابلی نوفه کمتری در مقایسه با حالت بازتابی داشته و لذا بین پیش‌پردازش‌های D1+SG، MSC، SNV و D2+SG تفاوت کارایی چندانی در دقت مدل‌های طبقه

۵- منابع

- [1] Morales-Gonzalez JA, Madrigal-Bujaidar E, Sanchez-Gutierrez M, Izquierdo-Vega JA, Valadez-Vega MC, Alvarez-Gonzalez I, et al. (2019). Garlic (*Allium sativum* L.): A brief review of its antigenotoxic effects. *Foods*. 8(8): 343. doi.org/10.3390/foods8080343
- [2] Tudu CK, Dutta T, Ghorai M, Biswas P, Samanta D, Oleksak P, et al. (2022). Traditional uses, phytochemistry, pharmacology and toxicology of garlic (*Allium sativum*), a storehouse of diverse phytochemicals: A review of research from the last decade focusing on health and nutritional implications. *Frontiers in Nutrition*. 9: 929554. doi.org/10.3389/fnut.2022.929554
- [3] Suleria HR, Butt MS, Khalid N, Sultan S, Raza A. (2015). Aleem M, et al. Garlic (*Allium sativum*): diet based therapy of 21st century—a review. *Asian Pacific Journal of Tropical Disease*. 5(4): 271-278. doi.org/10.1016/S2222-1808(14)60782-9
- [4] Sunanta P, Kontogiorgos V, Pankasemsuk T, Jantanasakulwong K, Rachtanapun P, Seesuriyachan P, Sommano SR. (2023). The nutritional value, bioactive availability and functional properties of garlic and its related products during processing. *Frontiers in Nutrition*, 10: 1-13. doi.org/10.3389/fnut.2023.1142784
- [5] Kamenetsky R. (2007). Garlic: Botany and horticulture. In: *Horticulture reviews*, Ed. Janick J. John Wiley and Sons Publishing, New Jersey, U.S.A. 33: 123-138. doi.org/10.1002/9780470168011.ch2
- [6] El-Saber Batiha G, Magdy Beshbishy AG, Wasef L, Elewa YH, Al-Sagan A, Abd El-Hack ME, et al. (2020). Chemical constituents and pharmacological activities of garlic (*Allium sativum* L.): A review. *Nutrients*. 12(3): 872. doi.org/10.3390/nu12030872
- [7] Martins N, Petropoulos S., Ferreira IC. (2016). Chemical composition and bioactive compounds of garlic (*Allium sativum* L.) as affected by pre-and post-harvest conditions: A review. *Food chemistry*. 211: 41-50. doi.org/10.1016/j.foodchem.2016.05.029
- [8] Gonzalez RE, Burba, JL, Camargo AB. (2013). A physiological indicator to estimate allicin content in garlic during storage. *Journal of Food Biochemistry*. 37(4): 449-455. doi.org/10.1111/j.1745-4514.2011.00647.x
- [9] Naheed Z, Cheng Z, Wu C, Wen Y, Ding H. (2017). Total polyphenols, total flavonoids, allicin and antioxidant capacities in garlic scape cultivars during controlled atmosphere storage. *Postharvest Biology and Technology*. 131: 39-45. doi.org/10.1016/j.postharvbio.2017.05.002
- [10] Hughes J, Collin HA, Tregova A, Tomsett AB, Cosstick R, Jones MG. (2006). Effect of low storage temperature on some of the flavor precursors in Garlic (*Allium Sativum*). *Plant Foods for Human Nutrition*. 61: 78-82. doi.org/10.1007/s11130-006-0018-4
- [11] Salehi B, Zucca P, Orhan IE, Azzini E, Adetunji CO, Mohammed SA, et al. (2019). Allicin and health: A comprehensive review. *Trends in Food Science and Technology*. 86: 502-516. doi.org/10.1016/j.tifs.2019.03.003
- [12] Zhu D, Sadat A, Joye IJ, Vega C, Rogers MA. (2024). Scientific gastronomy: On the mechanism by which garlic juice and allicin (thio-2-propene-1-sulfinic acid S-allyl ester) stabilize meringues. *Food Chemistry*. 431: 137121. doi.org/10.1016/j.foodchem.2023.137121
- [13] Ravindra J, Yathisha UG, Nanjappa DP, Kalladka K, Dhakal R, Chakraborty A. (2023). Allicin extracted from *Allium sativum* shows potent anti-

- cancer and antioxidant properties in zebrafish. *Biomedicine and Pharmacotherapy*. 169: 115854. doi.org/10.1016/j.biopha.2023.115854
- [14] Cortes V, Blasco J, Aleixos N, Cubero S, Talens P. (2019). Monitoring strategies for quality control of agricultural products using visible and near-infrared spectroscopy: A review. *Trends in Food Science and Technology*. 85:138-148. doi.org/10.1016/j.tifs.2019.01.015
- [15] Sanchez-Paternina A, Roman-Ospino AD, Martinez M, Mercado J, Alonso C, Romañach, RJ. (2016). Near infrared spectroscopic transmittance measurements for pharmaceutical powder mixtures. *Journal of Pharmaceutical and Biomedical Analysis*. 123: 120-127. doi.org/10.1016/j.jpba.2016.02.006
- [16] OMahony N, Murphy T, Panduru K, Riordan D, Walsh J. (2018). Machine learning algorithms for estimating powder blend composition using near infrared spectroscopy. Paper presented at the 2018 2nd International Symposium on Small-scale Intelligent Manufacturing Systems (SIMS). doi.org/10.1109/SIMS.2018.8355297
- [17] Riu J, Vega A, Boque R, Giussani B. (2022). Exploring the analytical complexities in insect powder analysis using miniaturized NIR spectroscopy. *Foods*. 11(21): 3524. doi.org/10.3390/foods11213524
- [18] Nicolai BM, Beullen, K, Bobelyn E, Peirs A, Saey W, Theron KI, et al. (2007). Nondestructive measurement of fruit and vegetable quality by means of NIR spectroscopy: A review. *Postharvest Biology and Technology*. 46(2): 99-118. doi.org/10.1016/j.postharvbio.2007.06.024
- [19] Hemrattrakun P, Nakano K, Boonyakiat D, Ohashi S, Maniwaru P, Theanjumol P, et al. (2021). Comparison of reflectance and interactance modes of visible and near-infrared spectroscopy for predicting persimmon fruit quality. *Food Analytical Methods*. 14: 117-126. doi.org/10.1007/s12161-020-01853-w
- [20] Suktanarak S, Teerachaichayut S, Jannok P, Supprung P. (2014). Interactance and reflectance near infrared spectroscopy for freshness evaluation of hen eggs. Paper presented at the III Asia Pacific Symposium on Postharvest Research, Education and Extension: APS2014 1213. doi.org/10.17660/ActaHortic.2018.1213.97
- [21] Daszykowski M, Kula M, Stanimirova I. (2023). Quantification and detection of ground garlic adulteration using fourier-transform near-infrared reflectance spectra. *Foods*. 12(18): 3377. doi.org/10.3390/foods12183377
- [22] Lohumi S, Lee S, Cho BK. (2015). Optimal variable selection for Fourier transform infrared spectroscopic analysis of starch-adulterated garlic powder. *Sensors and Actuators B: Chemical*. 216: 622-628. doi.org/10.1016/j.snb.2015.04.060
- [23] Wang D, Wei W, Lai Y, Yang X, Li S, Jia L, et al. (2019). Comparing the potential of near-and mid-infrared spectroscopy in determining the freshness of strawberry powder from freshly available and stored strawberry. *Journal of Analytical Methods in Chemistry*. 2360631. doi.org/10.1155/2019/2360631
- [24] Rodriguez SD, Rolandelli G, Buera, MP. (2019). Detection of quinoa flour adulteration by means of FT-MIR spectroscopy combined with chemometric methods. *Food Chemistry*. 274: 392-401. doi.org/10.1016/j.foodchem.2018.08.140
- [25] Kar S, Tudu B, Jana A, Bandyopadhyay R. (2019). FT-NIR spectroscopy coupled with multivariate analysis for detection of starch adulteration in turmeric powder. *Food Additives and Contaminants Part A*. 36(6): 863-875. doi.org/10.1080/19440049.2019.1600746
- [26] Jamshidi B, Minaei S, Mohajerani E, Ghassemian H. (2012). Reflectance Vis/NIR spectroscopy for nondestructive taste characterization of Valencia oranges. *Computers and Electronics in Agriculture*. 85: 64-69. doi.org/10.1016/j.compag.2012.03.008
- [27] Teye E, Amuah CL, McGrath T, Elliott C. (2019). Innovative and rapid analysis for rice authenticity using hand-held NIR spectrometry and chemometrics. *Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy*. 217: 147-154. doi.org/10.1016/j.saa.2019.03.085
- [28] Ishikawa ST, Gulick VC. (2013). An automated mineral classifier using Raman spectra. *Computers and Geosciences*. 54: 259-268. doi.org/10.1016/j.cageo.2013.01.011
- [29] Callao MP, Ruisanchez I. (2018). An overview of multivariate qualitative methods for food fraud detection. *Food Control*. 86: 283-293. doi.org/10.1016/j.foodcont.2017.11.034
- [30] Amuah CL, Teye E, Lamptey FP, Nyandey K, Opoku-Ansah J, Adueming PW. (2019). Feasibility study of the use of handheld NIR spectrometer for simultaneous authentication and quantification of quality parameters in intact pineapple fruits. *Journal of Spectroscopy*. 2: 1-9. doi.org/10.1155/2019/5975461
- [31] Kafle GK, Khot LR, Jarolmasjed S, Yongsheng S, Lewis K. (2016). Robustness of near infrared spectroscopy based spectral features for non-destructive bitter pit detection in honeycrisp apples. *Postharvest Biology and Technology*. 120: 188-192. doi.org/10.1016/j.postharvbio.2016.06.013
- [32] Shafiee S, Minaei S. Combined data mining/NIR spectroscopy for purity assessment of lime juice. (2018). *Infrared Physics and Technology*. 91: 193-199. doi.org/10.1016/j.infrared.2018.04.012
- [33] Kaiyan L, Chang L, Huiping S, Junhui W, Jiek C. (2021). Review on the Application of Machine Vision Algorithms in Fruit Grading Systems. Paper presented at the Emerging Trends in Intelligent and Interactive Systems and Applications: Proceedings of the 5th International Conference on Intelligent,

- Interactive Systems and Applications. 271-280. doi.org/10.1007/978-3-030-63784-2_34
- [34] Acri G, Testagrossa B, Vermiglio G. (2016). FT-NIR analysis of different garlic cultivars. *Journal of Food Measurement and Characterization*. 10: 127-136. doi.org/10.1007/s11694-015-9286-8
- [35] Wadood SA, Guo B, Zhang X, Wei Y. (2019). Geographical origin discrimination of wheat kernel and white flour using near-infrared reflectance spectroscopy fingerprinting coupled with chemometrics. *International Journal of Food Science and Technology*. 54(6): 2045-2054. doi.org/10.1111/ijfs.14105
- [36] Horn B, Esslinger S, Pfister M, Fauth-Hasek C, Riedl J. (2018). Non-targeted detection of paprika adulteration using mid-infrared spectroscopy and one-class classification—Is it data preprocessing that makes the performance. *Food Chemistry*. 257: 112-119. doi.org/10.1016/j.foodchem.2018.03.007



Scientific Research

Comparison of reflectance and interactance modes of near-infrared spectroscopy for non-destructive detection of garlic powder freshness

Reza Mohammadigol^{*1}, Mahmood Karimi¹, Reza Shahhoseini²

1-Department of Biosystem Mechanics Engineering, Faculty of Agriculture, Arak University, Arak, Iran.

2-Department of Medicinal Plants, Arak University, Arak, Iran

ARTICLE INFO	ABSTRACT
Article History: Received:2024/12/5 Accepted:2025/2/15 Keywords: Medicinal plant, Garlic powder, Freshness, Spectroscopy, Reflectance, Intractance. DOI: 10.22034/FSCT.22.162.265. *Corresponding Author E- r-mohammadigol@araku.ac.ir	Garlic medicinal plant powder is significant from a commercial perspective and is widely used as an additive in the food and pharmaceutical industries. Spectroscopic techniques serve as non-destructive methods for assessing the quality of food products, medicinal plants, and related products. In the present study, the efficiency and potential of two widely used modes, reflectance and intractance, in near-infrared spectroscopy in the range of 936 to 1660 nm were compared to assess the feasibility of distinguishing fresh garlic powder. In each spectroscopy mode, 120 spectra in 2 replicates were obtained from garlic powder samples, resulting in a total of 240 spectra. Prior to modeling, 25% of the spectra were randomly selected for validation, while the remaining spectra were used to compile the models. To mitigate potential noise, the impact of common pre-processing methods on the performance of the artificial neural network (ANN), support vector machine (SVM), and k-nearest neighbors (KNN) classifiers was investigated. The principal components analysis (PCA) technique was employed to reduce the dimensionality of the spectral variables, and the first four principal components were used as classifiers inputs. In the intractance spectroscopy condition, the SVM and KNN classifiers separated spectra obtained from powders at 3 days, 3 months, and 12 months with 100% accuracy. The ANN classifier achieved 100% accuracy in distinguishing the mentioned spectra in all preprocessing conditions under investigation, except for the raw spectra (without preprocessing). Near-infrared spectroscopy in the 936-1660 nm range, combined with chemometrics, is effective for quickly detecting the freshness of garlic powder. Considering its ease of application in both industrial and laboratory settings, intractance spectroscopy mode is superior to reflectance mode.