

Evaluation of Visible-short wave near infrared (Vis-SWNIR) spectroscopy for measurement of water content and sucrose concentration in porous fibrous material: Case study on sugarcane bagasse

Ali Farahmandi¹, Mojtaba Naderi-Boldaji^{*2}, Maral Ajamian³, Mahdi Ghasemi-Varnamkhasti², Saman Abdanan Mehdizadeh⁴

Received: October 22, 2023

Accepted: January 27, 2024

1- Department of Mechanical Engineering of Biosystems, Faculty of Agriculture, Shahrekord University, Shahrekord, Iran

2- Department of Mechanical Engineering of Biosystems, Faculty of Agriculture, Shahrekord University, Shahrekord, Iran 3- Khuzestan Sugarcane and By-products Development Research and Training Institute, Ahvaz, Iran

4- Department of Agricultural Machinery Engineering and Mechanization, Faculty of Agricultural Engineering and Rural Development, Agricultural Sciences and Natural Resources University of Khuzestan, Ahvaz, Iran

*Corresponding author email: naderi.mojtaba@sku.ac.ir

Abstract

The use of spectrophotometers in the range of visible to short-wave near infrared (Vis-SWNIR) is of interest for researchers as a fast and low-cost method to measure moisture and sugar concentration in food and agricultural products. The aim of this study is to evaluate Vis-SWNIR reflectance spectroscopy for measuring moisture content and sucrose concentration in porous fibrous materials with a case study on sugarcane bagasse. In order to increase the interaction area between the light and sample and to increase the signal-to-noise ratio, a lighting chamber with two 50 W halogen lamps was made and evaluated in comparison with lighting through the spectrophotometer lamp with optical fiber in the wavelength range of 400-1100 nm. In the first step, 48 samples were prepared and measured by adding different amounts of water-sucrose solution to ground wheat straw. Multivariate partial least square regression (PLSR) method was used to develop prediction models for moisture and sucrose concentration of the samples. Validation of PLSR prediction model using halogen lamp lighting method, showed stronger prediction of moisture content ($R^2=0.88$, RMSE=3.3 and RPD=3.07) and sucrose concentration ($R^2=0.78$, RMSE=3.95 and RPD = 2.25) as compared to lighting with optical fiber. Evaluation results on 50 sugarcane bagasse samples for moisture content ($R^2=0.69$, RMSE=0.26 and RPD=1.46) and sucrose concentration ($R^2=0.44$, RMSE=0.27 and RPD=1.01) showed a weaker predictive power, which could be due to the non-uniform texture of bagasse samples compared to straw and the limited range of moisture and sucrose variations. The results of this study showed that the spectral range of Vis-SWNIR can have a promising predictive power on homogeneous fiber samples if the range of variations in water content and sucrose concentration to be significant.

Keywords: Porous fibrous materials, Short-wave near infrared (Vis-SWNIR), Sugarcane bagasse, Sugar concentration

How to cite:

Farahmandi, A., Naderi-Boldaji, M., Ajamian, M., Ghasemi-Varnamkhasti, M., Abdanan Mehdizadeh., S. (2024). *Evaluation of Visible-short wave near infrared (Vis-SWNIR) spectroscopy for measurement of water content and sucrose concentration in porous fibrous material: Case study on sugarcane bagasse*. Journal of Agricultural Mechanization, 9 (2):29-44. <https://doi.org/10.22034/jam.2024.61798.1275>

ارزیابی روش طیف‌سنجی مرئی - نزدیک فروسرخ موج کوتاه (Vis-SWNIR) برای سنجش رطوبت و غلظت ساکاروز در مواد فیبری متخلخل: مطالعه موردی باگاس نیشکر

علی فرحمندی^۱، مجتبی نادری بلداجی^{۲*}، مارال عجمیان^۳، مهدی قاسمی ورنامخواستی^۲، سامان آبدانان مهدی زاده^۴

۱- گروه مهندسی مکانیک بیوسیستم، دانشکده کشاورزی، دانشگاه شهرکرد، شهرکرد، ایران

۲- گروه مهندسی مکانیک بیوسیستم، دانشکده کشاورزی، دانشگاه شهرکرد، شهرکرد، ایران

۳- موسسه تحقیقات و آموزش نیشکر و صنایع جانبی خوزستان، اهواز، ایران

۴- گروه مهندسی ماشینهای کشاورزی و مکانیزاسیون، دانشکده مهندسی زراعی و توسعه روستایی، دانشگاه علوم کشاورزی و منابع

طبیعی خوزستان، اهواز، ایران

*ایمیل نویسنده مسئول: naderi.mojtaba@sku.ac.ir

چکیده

بکارگیری طیف‌سنج‌های با محدوده طول موج مرئی - نزدیک فروسرخ موج کوتاه (Vis-SWNIR) به عنوان روشی سریع و کم‌هزینه به منظور اندازه‌گیری رطوبت و غلظت قند در مواد غذایی و کشاورزی مورد توجه محققین بوده است. هدف از این مطالعه، ارزیابی طیف‌سنجی بازتابی Vis-SWNIR برای اندازه‌گیری رطوبت و غلظت ساکاروز در مواد فیبری متخلخل با مطالعه موردی بر روی باگاس نیشکر می‌باشد. به منظور افزایش مساحت در تعامل بین نور و ماده و افزایش نسبت سیگنال به نویز، یک محفظه نورپردازی با دو لامپ هالوژن ۵۰ وات در مقایسه با نورپردازی از طریق لامپ دستگاه طیف‌سنج با فیبر نوری در محدوده طول موج ۱۱۰۰-۴۰۰ نانومتر ساخته و استفاده شد. در گام اول تعداد ۴۸ نمونه با افزودن رطوبت و ساکاروز محلول به کاه گندم آسیاب شده تهیه و اندازه‌گیری شد. از روش رگرسیونی چند متغیره حداقل مربعات جزئی (PLSR)، برای توسعه مدل‌های پیش‌بینی متغیرهای رطوبت و غلظت ساکاروز نمونه‌ها استفاده شد. اعتبارسنجی مدل پیش‌بینی PLSR با استفاده از روش نورپردازی لامپ هالوژن، پیش‌بینی قوی‌تری از درصد رطوبت ($R^2=0/88$ و $RMSE=3/3$ و $RPD=3/07$) و ساکاروز ($R^2=0/78$ و $RMSE=3/95$ و $RPD=2/25$) نمونه‌های کاه در مقایسه با نورپردازی با فیبر نوری نشان داد که بیانگر قدرت پیشگویی بسیار خوبی می‌باشد. نتایج ارزیابی سامانه بر روی ۵۰ نمونه باگاس نیشکر برای درصد رطوبت ($R^2=0/69$ و $RMSE=0/26$ و $RPD=1/46$) و ساکاروز ($R^2=0/44$ و $RMSE=0/27$ و $RPD=1/01$) قدرت پیشگویی ضعیف‌تری نشان داد که می‌تواند به دلیل نایک‌نواخت بودن بافت نمونه‌های باگاس در مقایسه با کاه و دامنه تغییرات محدودتر رطوبت و ساکاروز در نمونه‌های باگاس باشد. نتایج این مطالعه نشان داد که محدوده طیف Vis-SWNIR می‌تواند بر روی نمونه‌های همگن فیبری در صورتی که محدوده تغییرات خصوصیات قابل توجه باشد قدرت پیشگویی مطلوبی داشته باشد.

واژگان کلیدی: باگاس نیشکر، طیف‌سنجی مرئی - نزدیک فروسرخ موج کوتاه، غلظت ساکاروز، مواد فیبری متخلخل

۱- مقدمه

شکر به عنوان یکی از ارزان ترین و پرنرژترین ماده غذایی همواره در رژیم غذایی انسان مورد توجه بوده و بخش عمده‌ای از کالری مورد نیاز روزانه بدن را تامین می‌کند. تولید شکر امروزه در بسیاری از کشورها جایگاه مهمی در سیاست‌های اجتماعی، بازرگانی و اقتصاد کلان دارد و به عنوان یک کالای اساسی در سبد مصرفی خانواده‌ها و صنایع کشورها مطرح است (Shushtri et al., 2008). نیشکر با نام علمی *Saccharum officinarum* از مهم‌ترین گیاهان قندی به شمار می‌آید که بیشتر قند آن از نوع ساکاروز است و فرآورده‌های حاصل از آن اقلام عمده تجاری در سطوح جهانی محسوب می‌شوند (Soleimani et al., 2014). در ایران، خوزستان با سطح زیر کشت حدود ۹۰ هزار هکتار با عملکرد متوسط ۹۰ تن نی در هکتار و تولید سالانه تقریباً ۸۰۰ هزار تن شکر از مستعدترین مناطق نیشکرخیز ایران و جهان می‌باشد (Shushtri et al., 2008). ساقه نی (بدون خاشاک) حاوی ۷۶٪-۷۳٪ آب، ۲۷٪-۲۴٪ مواد جامد شامل ۱۶٪-۱۰٪ مواد جامد محلول و ۱۶٪-۱۱٪ فیبر است. اجزای تشکیل دهنده عصاره نی عبارتند از انواع قندها (۹۲٪-۷۵٪ از مواد جامد محلول) که بخش عمده آن ساکاروز است (Meade & Chen, 1977). پس از آن که قند از عصاره موجود در ساقه نیشکر در کارخانه استخراج گردید، باقی مانده مواد فیبری- سلولزی ساقه آن به نام باگاس (تفاله)، یکی از فرآورده‌های فرعی و با اهمیت نیشکر می‌باشد. از باگاس که ترکیب آن شبیه به الیاف چوب می‌باشد، در ساخت پانل یا تخته‌های عایق‌بندی و نئوپان استفاده می‌شود. استفاده دیگر باگاس در تولید کاغذ است که با استفاده از خمیر کاغذ می‌توان انواع دستمال کاغذی، کاغذ، پاکت کاغذی و مقوا تولید کرد (Blackburn et al., 1950). تخمین زده می‌شود که ۱ تا ۵ درصد ساکاروز از طریق باگاس به عنوان ضایعات قندی هدر می‌رود که در صورت جلوگیری از آن، بازده تولید شکر به طور قابل توجهی افزایش می‌یابد (Tewari et al., 2007).

در حال حاضر اندازه‌گیری محتوای ساکاروز فقط با استفاده از تجهیزات و روش‌های پیشرفته و زمان‌بر آزمایشگاهی در کارخانه‌ها انجام می‌شود. از روش‌های بسیار دقیق برای اندازه‌گیری میزان قند در نیشکر می‌توان به روش‌های تجزیه دستگاهی کروماتوگرافی مایع با کارایی بالا (HPLC) و کروماتوگرافی گازی (GC-MASS) اشاره نمود. در روش‌های کروماتوگرافی، نمونه‌ها برای انجام آزمایش باید با شیوه‌هایی پر زحمت تهیه و آماده شوند و مدت زمان انجام آزمایش و رسیدن به نتیجه آن تا حدی طولانی است. همچنین هزینه انجام این

روش‌های اندازه‌گیری به مراتب بالاست. در کارخانه‌های قند بیشتر از روش‌های مبتنی بر پلاریمتری بهره گرفته می‌شود. رویکرد متداول برای اندازه‌گیری ساکاروز در کارخانه‌های قند نمونه‌برداری‌های چند ساعتی از باگاس، تهیه نمونه عصاره و اندازه‌گیری محتوای ساکاروز با روش پلاریمتری است. برای تهیه نمونه عصاره از مواد شیمیایی سمی مانند استات سرب نیز استفاده می‌شود که اثرات زیست محیطی نامطلوبی دارد. از جمله روش‌های حسگری که تاکنون مورد توجه و استفاده صنایع شکر در اندازه‌گیری غلظت قند قرار گرفته فناوری طیف‌سنجی مرئی- نزدیک فروسرخ^۳ (Vis-NIR) است. طیف‌سنجی^۴، مطالعه تجربی طیف‌های الکترومغناطیس جذبی یا عبوری توسط یک ماده است. طیف‌سنجی NIR به تحلیل برهم‌کنش تابش NIR با ماده می‌پردازد که برای این منظور اغلب از طیف‌های جذبی استفاده می‌شود. با استفاده از طیف‌سنجی NIR می‌توان اطلاعات مفیدی در مورد ترکیب شیمیایی ماده ارائه داد. هنگامی که طول موج گسیل شده به سمت ماده برابر با طول موج ارتعاشات طبیعی مولکول‌های آن ماده باشد، پدیده تشدید رخ می‌دهد که باعث جذب انرژی در طول موج‌های NIR می‌شود. طیف‌سنجی NIR برای تعیین ترکیبات شیمیایی شامل گروه‌های O-H، C-H و N-H (Bagherpour & Mohammadi, 2016) و برای گروه‌های C-C، C-O، C-N و N-O در مواد آلی مناسب است. اورتون‌ها و ارتعاشات ترکیبی گروه اول در ناحیه NIR غالب است (۲۵۰۰-۷۰۰ نانومتر)، در حالی که ارتعاشات گروه دوم در ناحیه مادون قرمز میانی^۵ (MIR) (۲۵۰۰-۲۵۰) جذب می‌شود. انتقال‌های الکترونی در ناحیه مرئی (۷۰۰-۴۰۰ نانومتر) و در ناحیه ماوراء بنفش (۴۰۰-۲۵۰ نانومتر) جذب می‌شوند (Cortés et al., 2019).

از روش طیف‌سنجی Vis-NIR در مطالعات متنوعی برای اندازه‌گیری کیفیت مواد غذایی و محصولات کشاورزی از جمله تعیین میزان بریکس^۶ خربزه (Li et al., 2019)، سیب (Fan et al., 2019; Hadiwijaya et al., 2020; Lan et al., 2021; Xia et al., 2020)، کدو (Kim et al., 2004)، تخمین پروتئین دانه‌های گندم (Forozani et al., 2019)، ارزیابی کیفیت شیر (Iweka et al., 2020) و روغن زیتون (Abu-Khalaf et al., 2020) مورد استفاده قرار گرفته است. استفاده از طیف‌سنجی Vis-NIR زمینه‌ای را برای توسعه یک روش جدید برای امکان‌سنجی اندازه‌گیری غلظت ساکاروز در باگاس نیشکر ایجاد می‌کند. Phuphaphud et al. (2020) در پژوهشی برای اندازه‌گیری میزان قند در ساقه نیشکر از طیف‌سنجی Vis-NIR استفاده کردند. طول

¹ High performance liquid Chromatography

² Gas- Mass Chromatography

³ Visible- Near infrared

⁴ Spectroscopy

⁵ Mid-infrared

⁶ Brix

حاصل از این مطالعه برای طیف‌سنجی NIR به صورت برخط برای نمونه‌های نیشکر الیافی شده مطلوب بود. Aghaei Saadi et al. (2021) با استفاده از روش طیف‌سنجی Vis-NIR بازتابی به پیش-بینی غیرمخرب مقدار قند موجود در ریشه‌های چغندر قند به صورت تماسی پرداختند. این مطالعه در محدوده طیفی ۲۵۰۰-۳۵۰ نانومتر در بخش‌های طوقه، ریشه و دم چغندر قند انجام شد ابتدا طیف‌گیری از روی پوست در ۳ ناحیه انجام شد و سپس نمونه‌ها به صورت عمودی برش داده شدند و طیف‌سنجی با ۴ تکرار انجام شد. نتایج این مطالعه قدرت عالی پیشگویی طیف‌های حاصل برای غلظت ساکاروز چغندر قند نشان داد. بر اساس نتایج پژوهش می‌توان از طیف‌سنجی Vis-NIR بازتابی برای تشخیص و سنجش عیار چغندر قند در هنگام تحویل محصول به کارخانه‌ها استفاده شود.

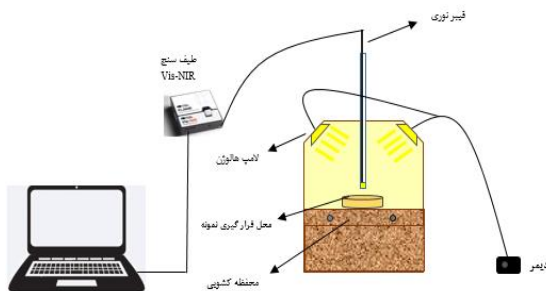
یکی از موارد بسیار مهم در فرایند استحصال قند در کارخانه‌های تولید شکر (ساکاروز)، ارزیابی ضایعات قندی موجود در باگاس (نقاله نیشکر) است. برای این منظور نیاز است در انتهای فرایند در جایی که باگاس بجا می‌ماند، محتوای ساکاروز اندازه‌گیری شود تا بر این اساس بتوان بازدهی استحصال ساکاروز را سنجش نمود و نسبت به اصلاح و بهینه‌سازی فرایند استحصال تمهیدات لازم را اتخاذ نمود. محدوده کامل طول موج فرورسرخ نزدیک از ۷۰۰ تا ۲۵۰۰ نانومتر است که دسترسی به این فناوری در حال حاضر در ایران محدود و پرهزینه است. با این حال فناوری طیف‌سنج‌های با محدوده طول موج کوتاه نزدیک فرورسرخ (تا ۱۱۰۰ نانومتر) با دقت‌ها و قدرت تفکیک طیفی نسبتاً مطلوب قابل دسترس است که نیاز به ارزیابی آنها برای قابلیت اندازه‌گیری قند در مواد غذایی و کشاورزی ضروری است. بر اساس مطالعاتی که در این محدوده طول موج انجام شده و بر اساس امکان جذب اوورتون‌های ۲ و ۳ کششی پیوندها O-H و C-H در طول موج-های واقع در این ناحیه (Simeone et al., 2003; Golic et al., 2021; Chen et al., 2017) این پتانسیل در این محدوده طیفی برای سنجش محتوای قند می‌تواند بسته به دقت طیف‌سنج‌های موجود و شرایط بافت نمونه وجود داشته باشد. لذا این مطالعه با هدف ارزیابی این محدوده طول موج با استفاده از یک نمونه دستگاه طیف‌سنج ساخت ایران برای سنجش میزان رطوبت و غلظت قند در مواد با ساختار فیبری متخلخل مانند باگاس نیشکر انجام شد. برای این منظور ابتدا نمونه‌هایی با خرد کردن کاه گندم و اضافه نمودن محلول آب-قند مورد ارزیابی قرار گرفت. در نهایت با برداشت نمونه‌های باگاس از خط تولید شکر در خوزستان توانایی این روش طیف‌سنجی برای سنجش غلظت قند باقیمانده در باگاس نیشکر مورد ارزیابی قرار گرفت. شایان ذکر است که ارزیابی طیف‌سنج‌های با طول موج کوتاه فرورسرخ نزدیک (تا ۱۱۰۰ نانومتر) بر روی مواد فیبری متخلخل به ویژه باگاس

موج بکارگرفته شده در این پژوهش در محدوده ۱۰۳۰-۵۷۰ نانومتر بود. نتایج این مطالعه نشان داد که طیف‌سنجی Vis-NIR می‌تواند به عنوان یک روش غیرمخرب برای پیش‌بینی شاخص تجاری نیشکر^۱ (CCS) مورد استفاده قرار گیرد که ابزاری مفید برای نظارت بر تغییر در مقادیر CCS ساقه‌های نیشکر در برنامه‌های کاشت خواهد بود. در پژوهشی دیگر ارزیابی خصوصیات کیفی نیشکر شامل غلظت قند و محتوای رطوبت بدون نیاز به استخراج عصاره از ساقه با استفاده از روش طیف‌سنجی^۲ Vis-SWNIR در محدوده طیفی ۴۰۰-۱۱۰۰ نانومتر مورد مطالعه قرار گرفت. نتایج حاصل نشان دهنده دقت خوب روش طیف‌سنجی Vis-SWNIR در اندازه‌گیری مشخصه‌های رطوبت و بریکس نیشکر بود (Naderi-Boldaji et al., 2023). کیفیت نیشکر در مزرعه هنگام ارزیابی برای رسیدگی و تعیین زمان برداشت، اطلاعات مهمی برای کشاورزان در بر دارد. در پژوهشی (Nawi et al., 2013) با استفاده از طیف‌سنجی Vis-SWNIR به عنوان یک جایگزین کم-هزینه برای پیش‌بینی و طبقه‌بندی میزان قند نیشکر بر اساس طیف-سنجی از ساقه آن پرداختند. از هر نمونه در چهار نقطه در محدوده ۳۲۵-۱۰۷۵ نانومتر طیف‌سنجی به عمل آمد. این نتایج نشان داد که روش طیف‌سنجی بازتابی Vis-SWNIR می‌تواند برای پیش‌بینی درجه بریکس نیشکر از ساقه در مزرعه استفاده شود. در پژوهشی (Madsen et al., 2003) با استفاده از یک طیف‌سنج NIR برای ارزیابی کیفیت نیشکر الیافی شده اقدام کردند. در این روش ابتدا نمونه‌های نی بر روی نوار نقاله به خردکن منتقل شدند و سپس نمونه‌های الیافی‌شده به کمک یک دستگاه تراز کننده بر روی یک سطح یکنواخت به مقدار ۱۰ کیلوگرم انتقال پیدا کردند. در مرحله بعد هنگامی که سطح نمونه‌های الیافی‌شده یکنواخت شدند، حسگر NIR باز شده و شروع به جمع آوری داده با ۶۰ تکرار می‌کند. طیف‌سنجی در محدوده ۲۵۰۰-۱۱۰۰ نانومتر انجام شد که نتایج مطلوبی برای پیش‌بینی درجه بریکس و غلظت ساکاروز حاصل شد. Pan et al. (2015) با استفاده از طیف‌سنجی Vis-NIR، به پیش‌بینی درجه بریکس و محتوای ساکاروز چغندر قند پرداختند. در این پژوهش از دو طیف‌سنج در محدوده‌های طول‌موج ۴۰۰-۱۱۰۰ نانومتر و ۱۶۰۰-۹۰۰ نانومتر برای چغندر برش خورده و کامل استفاده شد. در مرکز کاوشگر یک آشکارساز نوری قرار داده شد که ناحیه‌ای به قطر ۱۱ میلی‌متر را پوشش می‌داد تا نوری که از طریق بافت نمونه عبور کرده را دریافت کند. از هر دو محدوده طیفی، پیش‌بینی‌های بسیار خوبی برای درجه بریکس و محتوای ساکاروز حاصل شد. O'shea et al. (2010) با توسعه یک سیستم برخط NIR به منظور سنجش درجه بریکس و غلظت ساکاروز در نمونه‌های نیشکر الیافی‌شده و باگاس اقدام کردند. در این سیستم نمونه‌ها بر روی نوار نقاله قرار گرفتند و طیف-سنجی NIR به صورت ثابت و از بالای نوار نقاله انجام شد. نتایج

¹ Commercial Cane Sugar

²Visible- Short wave near infrared

فیبر نوری از سطح نمونه، در تمامی اندازه‌گیری‌ها ثابت (بر اساس آزمایش‌های انجام شده در این پژوهش ۹ میلی‌متر) بود و فیبر هیچ تماس مستقیمی با نمونه نداشت. برای شروع طیفسنجی نیاز بود که طیف مرجع طیفسنج تعریف شود. با استفاده از تنظیمات موجود در نرم افزار دستگاه، برای هر نمونه با استفاده از صفحه استاندارد سفید رنگ با درصد بازتاب ۹۹ درصد طیف بازتابی مرجع اخذ شد و سپس طیف بازتابی حاصل از هر نمونه بر طیف بازتابی مرجع اخذ شده از صفحه استاندارد تقسیم شد تا طیف بازتابی بر حسب درصد بازتاب برای هر نمونه به دست آید. از هر نمونه در دو حالت نورپردازی طیف برداری شد: ۱- تابش با لامپ‌های هالوژن نصب شده در محفظه نورپردازی و ۲- با استفاده از منبع نوری دستگاه طیفسنج و فیبر نوری. در هر دو حالت نور بازتاب شده از نمونه توسط فیبر نوری به دستگاه طیفسنج منتقل شد.



شکل ۲- طرحواره سامانه نورپردازی و طیفسنجی

Fig. 2. Schematics of lighting and spectroscopy system

۲-۲- ارزیابی سامانه طیفسنجی برای سنجش رطوبت و غلظت ساکاروز با نمونه کاه

به منظور ارزیابی و مقایسه روش طیفسنجی با دو نوع روش تابش نور به نمونه، در ابتدا نمونه‌هایی با استفاده از کاه آسیاب شده مورد آزمایش قرار گرفتند. با توجه به ساختار متخلخل نمونه‌های کاه نیاز به ایجاد سطحی صاف و یکنواخت بود تا میزان خطا در طیفسنجی به حداقل برسد. به همین منظور برای رسیدن به یک ساختار همگن، نمونه‌های کاه خشک به مدت ۲ دقیقه با استفاده از آسیاب صنعتی (Silver Crest, SL2022, Germany) آسیاب شدند. در مجموع ۳۸ نمونه کاه هر کدام به جرم ۱۵ گرم با استفاده از ترازو (SANBEI, KS-986-602, Hong Kong) تهیه شد (شکل ۳). نمونه‌های تهیه شده به مدت ۲۴ ساعت درون دستگاه خشک کن قرار گرفتند تا کاملاً خشک شوند. به منظور ارزیابی سامانه طیفسنجی برای اندازه‌گیری میزان رطوبت و غلظت ساکاروز، با اسپری کردن محلول آب- ساکاروز با بریکس‌های مختلف و با میزان متفاوت به نمونه‌ها، سطوح مختلف رطوبت (در محدوده ۳/۴۴-۶۵/۹۳٪ بر پایه وزن تر) و غلظت ساکاروز (حاصل وزن ساکاروز به وزن مرطوب نمونه در محدوده ۰-۳۲/۵٪)

نیسکر و بررسی نحوه اندازه‌گیری با این روش کمتر گزارش شده است که جزء نوآوری‌های این مطالعه است.

۲- مواد و روش‌ها

۲-۱- مشخصات دستگاه طیفسنج NIR و سامانه

اندازه‌گیری طیفی

طیفسنجی NIR نمونه‌ها به روش بازتابی پراکنشی و با استفاده از یک دستگاه طیفسنج مدل V900 ساخت شرکت فناوریان فیزیک نور ایران انجام شد (شکل ۱). این طیفسنج دارای آشکارساز CCD، در محدوده طول موج ۴۰۰-۱۱۰۰ نانومتر است. این طیفسنج دارای وضوح ۳۶۴۸ پیکسل با ابعاد هر پیکسل ۸ در ۲۰۰ میکرومتر می‌باشد که می‌تواند طیفی با قدرت تفکیک طول موج ۵ نانومتر را ایجاد کند. همچنین این دستگاه مجهز به یک کاوشگر فیبر نوری شامل ۶ فیبر نوری ۲۰۰ میکرونی مجهز به درگاه خروجی SAM است. منبع نور طیفسنج از نوع هالوژن تنگستن ۱۰ وات و دوتریم ۳۰ وات بوده که قابلیت پخش پرتو در ناحیه مرئی و امواج فرسرخ را دارد. ۵ فیبر وظیفه انتقال نور از منبع نوری به نمونه و یک فیبر وظیفه هدایت پرتو برآمده از نمونه به دستگاه طیفسنج را بر عهده دارد. طیف به دست آمده از طریق درگاه USB به رایانه منتقل و ذخیره می‌شود.



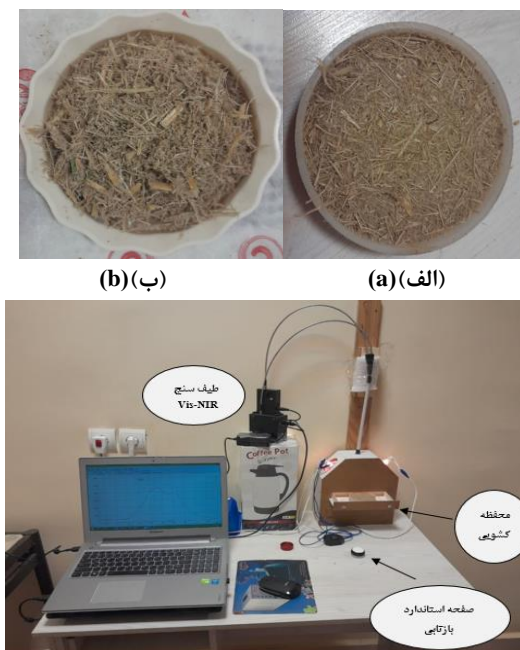
شکل ۱- دستگاه طیفسنج V900 و ملحقات آن (شرکت فیزیک

فناوران نور، ایران)

Fig. 1. Spectrometer V900 and its accessories (Light Physics Technology Co., Iran)

در این پژوهش برای طیفسنجی NIR و جهت مقایسه، یک محفظه نورپردازی از جنس MDF ساخته شد تا علاوه بر بالا بردن شدت نور و مساحت در تعامل بین ماده و نور، نسبت سیگنال به نویز افزایش پیدا کند (شکل ۲). برای قرارگیری نمونه یک محفظه کشویی درون محفظه نورپردازی تعبیه شد. از دو لامپ هالوژن ۵۰ وات در محفظه نورپردازی استفاده شد. جهت قرارگیری لامپ‌ها به صورتی بود که راستای نصب لامپ با پروب فیبر نوری زاویه ۴۵ درجه می‌ساخت تا اندازه‌گیری پرتوهای بازتابی از نمونه را ممکن سازد. با استفاده از یک دیمر، شدت نور لامپ‌های هالوژن قابل تنظیم است. نمونه درون محفظه دایره‌ای شکل از جنس تفلون به ارتفاع ۲ سانتی‌متر و به قطر ۸ سانتی‌متر ریخته شده و درون محفظه کشویی قرار داده شد. فاصله

و یکنواخت بود تا میزان خطا در طیف‌سنجی به حداقل برسد. به همین منظور برای رسیدن به یک ساختار یکنواخت‌تر، نمونه‌های باگاس به مدت ۳۰ ثانیه با استفاده از آسیاب صنعتی آسیاب شدند. ۶ نمونه ۱۰ گرمی از باگاس با استفاده از ترازو تهیه و برای جلوگیری از هر گونه تغییر در خصوصیات نمونه‌ها در طی روز اندازه‌گیری، نمونه‌ها درون یخچال قرار گرفتند و هر نمونه یک ساعت قبل از اندازه‌گیری از یخچال خارج شد تا به دمای محیط برسد. با ریختن نمونه درون محفظه دایره‌ای به شکل یکنواخت و ایجاد سطحی همگن، از هر نمونه ۱۰ گرمی ۲ بار و در مجموع ۱۲ تکرار به عمل آمد. سپس با خارج کردن نمونه از محفظه و خشک نمودن فضای درون محفظه، اندازه‌گیری بر روی نمونه بعدی انجام شد. شکل ۴ تصویری از نمونه‌های باگاس و سامانه طیف‌سنجی در حین آزمون را نشان می‌دهد.



(ج) (C)

شکل ۴-الف - نمونه باگاس قبل از آسیاب ب- نمونه باگاس بعد از آسیاب و ج- سامانه عملیاتی طیف‌سنجی نمونه‌های کاه و باگاس و وسایل مورد استفاده

Fig. 4. a. Bagasse sample before milling. b. bagasse sample after milling and c. operating system for spectrometry of straw and bagasse samples and the equipment used

۱-۳-۲- روش‌های اندازه‌گیری خصوصیات مرجع نمونه‌ها اندازه‌گیری غلظت ساکاروز باگاس با روش پلاریمتری و رطوبت

۳۰۰ گرم نمونه باگاس توزین و داخل دستگاه جداکننده لیاف (JEFFCO, WD02, Australia) قرار داده شد. به ازای هر ۱۰۰ گرم باگاس، ۱ لیتر آب به نمونه اضافه شد. بعد از گذشت ۲۰ دقیقه، شربت

تهیه شد. برای جلوگیری از هر گونه تغییر در خصوصیات نمونه‌ها در طی روز اندازه‌گیری، نمونه‌ها به مدت ۲۴ ساعت درون یخچال قرار گرفتند و هر نمونه یک ساعت قبل از اندازه‌گیری از یخچال خارج شد تا به دمای محیط برسد.



(الف) (a) (ب) (b)

شکل ۳- کاه آسیاب شده. الف- نمونه خشک. ب- نمونه مرطوب

Fig. 3. Ground straw a. Dry sample b. Wet sample

نمونه‌ها با استفاده از هر دو روش نورپردازی (با و بدون استفاده از لامپ هالوژن ۵۰ وات) در محدوده طیفی ۱۱۰۰-۴۰۰ نانومتر مورد سنجش قرار گرفتند. در پایان آزمایش تمامی نمونه‌ها به مدت ۲۴ ساعت درون آن قرار گرفتند تا میزان رطوبت آن‌ها به طور دقیق محاسبه شود. پس از ارزیابی و مقایسه دو روش نورپردازی با نمونه‌های فوق الذکر و تعیین روش بهتر، تعداد ۱۰ نمونه دیگر با تغییرات رطوبت و غلظت ساکاروز تصادفی جهت اعتبارسنجی مدل‌های پیش-بینی تهیه و مورد سنجش قرار گرفت.

۲-۳- مکان انجام آزمایش و روش تهیه نمونه‌های باگاس نیشکر

نمونه‌های باگاس مربوط به این پژوهش از کارخانه قند سلمان فارسی و محدوده کشت و صنعت این کارخانه در استان خوزستان تهیه شد. در این واحد کشت و صنعت نمونه‌های مختلفی از ارقام نیشکر زود رس (CP57-614)، میان رس (CP69-1062) و دیر رس (CP48-103 و IRC99-02) که زمان برداشت آنها نیز در طول فصل برداشت متفاوت است، تهیه شدند. روزانه بطور میانگین ۱۰۰۰۰ تن نیشکر در این واحد کشت و صنعت و در طی روزهای فعال برداشت، تحویل کارخانه می‌گردد. گاهی برداشت به دلیل بارندگی تا چند هفته متوقف می‌شود و کارخانه تولید شکر ندارد. نمونه‌های باگاس روزانه از خط فراوری کارخانه قند سلمان فارسی به محل طیف‌سنجی NIR در موسسه تحقیقات و آموزش نیشکر و صنایع جانبی انتقال یافتند. این کار در طول فصل برداشت به جز روزهایی که به دلیل بارندگی، برداشت و کار کارخانه متوقف می‌شد، انجام شد. در مجموع امکان اندازه‌گیری ۵۰ نمونه از آغاز فصل برداشت در اواخر مهرماه ۱۴۰۱ تا پایان فصل برداشت در پایان فروردین ۱۴۰۲ حاصل شد. برای انجام آزمایش، با توجه به ساختار متخلخل نمونه‌های باگاس نیاز به ایجاد سطحی صاف

برای پیش پردازش طیف‌ها، تحلیل‌های آماری و توسعه مدل‌های پیش‌بینی از نرم‌افزار Unscrambler X10 استفاده شد. طیف‌های حاصل از نمونه‌های باگاس و کاه به ترتیب با ۱۲ و ۴ تکرار برای هر نمونه میانگین گرفته شد و طیف میانگین بعنوان طیف مربوط به آن نمونه مورد تحلیل قرار گرفت. پس از میانگین‌گیری طیف‌های بازتابی حاصل از نمونه‌ها، به منظور کاهش اثرات نویز، پراکندگی و تداخل طیف‌های به وجود آمده حاصل از ناهمواری‌های سطحی نمونه، پیش پردازش طیفی انجام شد. به منظور آماده سازی و پیش پردازش طیف‌ها از روش‌های مختلف نرمال سازی (متغیر نرمال استاندارد^۱ (SNV) و تصحیح پراکنش افزایشنده^۲ (MSC))، هموارسازی ساویتسکی-گولای^۳ (SG) و میانگین متحرک^۴ (MA) و افزایش قدرت تفکیک طیفی (مشقت اول^۵ (D1) و ترکیبی از این روش‌ها شامل، MA+SNV، SG+MSC، SG+SNV و SG+D1 برای هر دو سیستم نورپردازی استفاده شد. برای توسعه مدل‌های پیشگو از روش رگرسیونی چند متغیره حداقل مربعات جزئی^۶ (PLSR) استفاده شد. از تعداد نمونه‌های سنجش شده، حدود ۸۰ درصد نمونه‌ها برای مجموعه آموزش و اعتبارسنجی درونی مدل با روش اعتبارسنجی متقاطع یگانه^۷ و از بقیه نمونه‌ها شامل ۱۰ نمونه برای اعتبارسنجی بیرونی استفاده شد. در روش اعتبارسنجی متقاطع یگانه، یک مشاهده از مجموعه داده‌های آموزشی کنار گذاشته شده و بر اساس سایر مشاهدات، پارامترها برآورد می‌شوند. این الگوریتم برای دیگر نمونه‌ها تکرار می‌شود. در نهایت دقت مدل‌های پیش‌گو با استفاده از پارامترهای آماری مانند ضریب تعیین^۸ (R²) (رابطه ۳)، ریشه میانگین مربعات خطا^۹ (RMSE) (رابطه ۴) و انحراف پیشگوی باقیمانده^{۱۰} (RPD) (رابطه ۵) ارزیابی شدند. RPD به عنوان یک پارامتر نرمال در ارزیابی مدل‌های رگرسیونی محسوب می‌شود، با تقسیم انحراف استاندارد^{۱۱} (SD) (رابطه ۶) مقادیر مرجع بر RMSEP برای زیر مجموعه اعتبارسنجی تعریف می‌شود. در صورتی که مقدار RPD کمتر از یک باشد، توانایی پیش‌بینی مدل بسیار ضعیف است، بین ۱-۱/۵ ضعیف، بین ۲-۱/۵ خوب و RPD از ۲ تا ۲/۵ قدرت پیش‌بینی بسیار خوب و بالاتر از ۲/۵ را می‌توان عالی تفسیر نمود (Williams & Norris, 2001).

ایجاد شده در دستگاه به آزمایشگاه منتقل شد. کمترین مقدار استات سرب قلیایی خشک مورد نیاز: به ۲۰۰ میلی‌لیتر شربت اضافه شد و پس از به هم زدن، با کاغذ صافی درجه ۵۹۵ (۴/۷ میکرومتر) صاف شد. چند قطره اول شربت که با استات سرب مخلوط شده، دور ریخته شد زیرا این قطرات معمولاً کدر هستند و باعث ایجاد خطا در قرائت عدد دستگاه پلاریمتر می‌شوند. شربت حاصل درون دستگاه پلاریمتر (Schmidt, Z103, Germany) ریخته شد و درصد قند برای نمونه‌های باگاس مطابق با روش‌های استاندارد تدوین شده در آزمایشگاه کنترل کیفی کارخانه‌های قند انجام گرفت (De Whalley, 2013). برای اندازه‌گیری رطوبت، ۱۰۰۰ گرم باگاس توزین و به مدت ۳۰ دقیقه درون دستگاه خشک کن (TIANLI, Rotary, China) با دمای ۱۰۵ درجه سلسیوس قرار گرفت. پس از آن وزن خشک نمونه اندازه‌گیری و درصد رطوبت بر پایه‌تر (W%) با استفاده از رابطه ۱ محاسبه شد (Meade & Chen, 1977).

$$W = 100 \times \frac{m_1 - m_2}{m_1 - m_0} \quad (1)$$

که در آن، m_0 وزن ظرف (گرم)، m_1 مجموع وزن نمونه مرطوب و ظرف (گرم) و m_2 مجموع وزن نمونه خشک و ظرف (گرم) است.

۲-۳-۲- اندازه‌گیری رطوبت و درصد ساکاروز کاه

تمامی نمونه‌های کاه پس از پایان طیف‌سنجی توزین و سپس به مدت ۲۴ ساعت درون دستگاه آون (MEMMERT-CAT, UF450/UN450, Germany) قرار گرفتند و درصد رطوبت بر پایه‌تر (W%) با استفاده از رابطه ۱ محاسبه شد. با توجه به جرم خشک ۱۵ گرم نمونه‌های کاه تهیه شده و مقدار جرم رطوبت که پس از قرار دادن نمونه‌ها در آون محاسبه شد، مقدار جرم ساکاروز نمونه‌ها محاسبه و درصد ساکاروز (S%) با استفاده از رابطه ۲ محاسبه شد:

$$S = 100 \times \frac{m_3}{15 + m_3 + m_4} \quad (2)$$

که در آن، m_3 جرم ساکاروز (گرم) و m_4 جرم رطوبت (گرم) است.

۲-۴- تحلیل آماری

$$R^2 = \left[\frac{\sum_{i=1}^N (\hat{y}_i - \bar{y})(y_i - \bar{y})}{\sum_{i=1}^N (\hat{y}_i - \bar{y})^2 \sum_{i=1}^N (y_i - \bar{y})^2} \right]^2 \quad (3)$$

¹ Standard Normal Variate

² Multiplicative Scatter Correction

³ Savitzky-Golay

⁴ Moving Average

⁵ Derivative

⁶ Partial least squares regression

⁷ Leave one out validation

⁸ Coefficient Of Determination

⁹ Root Mean Square Error

¹⁰ Residual predictive deviation

¹¹ standard deviation

محدوده طیفی ۱۱۰۰-۴۰۰ نانومتر نشان داده شده است. در هر دو سیستم نورپردازی، در محدوده طیفی ۶۹۰-۶۳۰ نانومتر یک پیک جذبی قوی اتفاق افتاده است. همان طور که مشاهده می‌شود، از طیف-های بازتابی خام نمونه‌های کاه مرطوب با استفاده از سامانه طیف-سنجی با لامپ هالوژن در مقایسه با لامپ دستگاه در ۶۷۰ نانومتر وضوح طیفی بهتر و پیک جذبی قوی‌تری حاصل شده است که نشان دهنده عملکرد بهتر روش نورپردازی با لامپ هالوژن است. تغییر در جذب در ناحیه مرئی (۷۰۰-۳۸۰ نانومتر) قاعدتا به دلیل رنگ نمونه است (Zhang et al., 2019). با افزایش میزان رطوبت در نمونه‌های کاه و به سبب تغییرات رنگ و تیره شدن نمونه‌ها، ارتباط قوی بین میزان رطوبت و پیک جذبی اتفاق افتاده است. رنگ زرد در محدوده طیفی ۶۰۰-۵۸۰ نانومتر و رنگ نارنجی در محدوده طیفی ۶۵۰-۶۰۰ نانومتر دارای پیک جذبی هستند (Rady & Guyer, 2015). مطالعه Zhang et al. (2020) نشان داد که پیک جذبی در ۷۰۰ نانومتر با اورتون چهارم باند C-H همبستگی دارد و برای پیش‌بینی مواد جامد محلول (Brix) میوه مفید است.

$$RMSE_p = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^N (y_1 - \hat{y}_1)^2}{N}} \quad (4)$$

$$RPD = \frac{SD}{RMSE_p} \quad (5)$$

$$SD = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^N (y_1 - \bar{y})^2}{N-1}} \quad (6)$$

که در آن، y_1 مقادیر اندازه‌گیری شده (مرجع)، \hat{y}_1 مقادیر اندازه‌گیری شده پیش‌بینی، \bar{y} میانگین مقادیر اندازه‌گیری شده، \bar{y} میانگین مقادیر پیش‌بینی شده و N نیز تعداد داده است.

۳- نتایج و بحث

آمار توصیفی (شامل میانگین، بیشینه، کمینه، دامنه تغییرات و انحراف معیار) نمونه‌های کاه در جدول ۱ نشان داده شده است. محدوده تغییرات محتوای رطوبت و غلظت ساکاروز در نمونه‌های کاه به ترتیب ۳/۶۵-۴۴/۹۳ و ۰-۳۲/۵٪ می‌باشد که بیانگر دامنه تغییرات گسترده آن‌ها است. با تهیه نمونه‌ها در چنین دامنه وسیعی می‌توان ارزیابی مناسبی از پتانسیل روش طیف‌سنجی Vis-SWNIR داشت.

۳-۱- مشخصات و تفسیر طیف‌ها

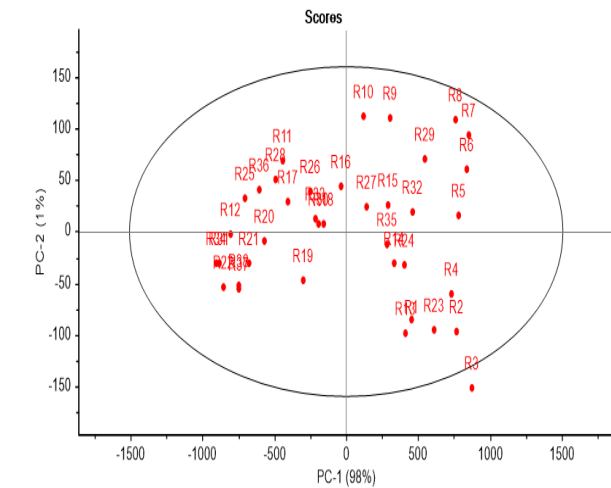
در شکل ۵ طیف‌های خام حاصل از نمونه‌های کاه با استفاده از سامانه طیف‌سنجی با نورپردازی با فیبر نوری و لامپ هالوژن در

جدول ۱- آمار توصیفی مشخصات رطوبت و غلظت ساکاروز نمونه‌های کاه

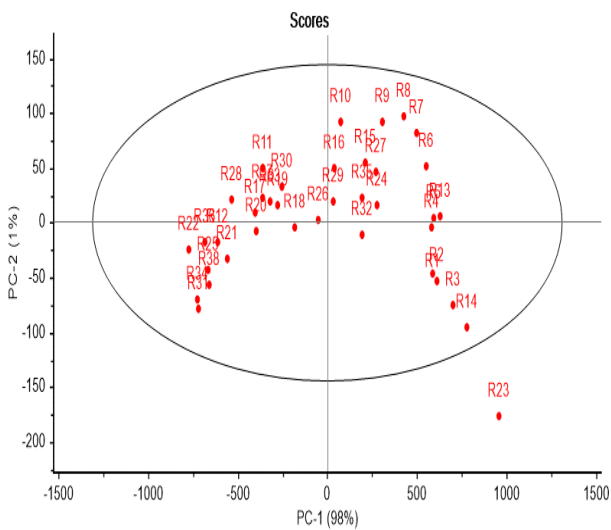
Table 1. Descriptive statistics of moisture characteristics and sucrose concentration of straw samples

دامنه تغییر	انحراف معیار	کمینه	بیشینه	میانگین	مشخصه
Range	Standard deviation	Minimum	Maximum	Average	Characteristic
62.49	15.71	3.44	65.93	32.38	رطوبت (%) Moisture
32.5	9.43	0	32.5	15.01	ساکاروز (%) Sucrose

در نظر گرفت. لذا ۳۷ طیف باقیمانده جهت توسعه مدل‌های رگرسیونی مورد تحلیل قرار گرفت.



(الف) (a)

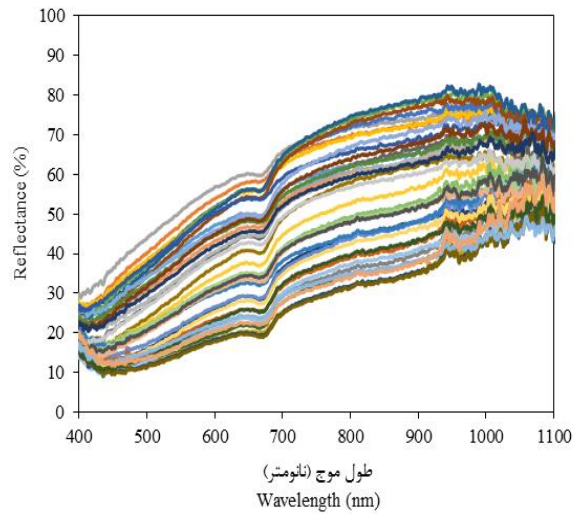


(ب) (b)

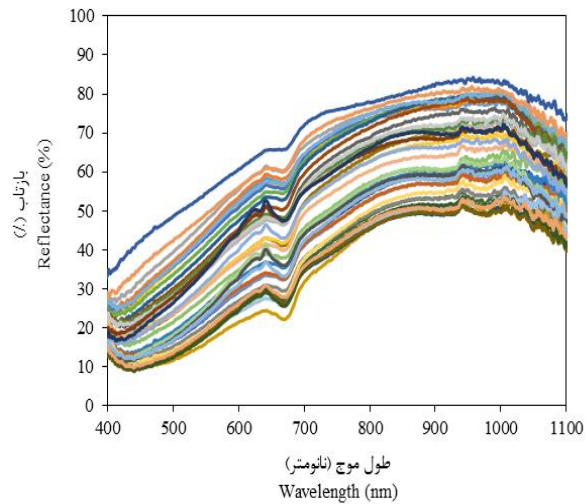
شکل ۶- تحلیل مولفه‌های اصلی طیف‌های NIR نمونه کاه برای کشف

طیف‌های نامتشابه الف: فیبر نوری و ب: لامپ هالوژن

Fig. 6. Principal component analysis of the NIR spectra of the straw sample to discover outlier a. Optical fiber and b. Halogen lamp



(الف) (a)



(ب) (b)

شکل ۵- طیف‌های بازتابی خام نمونه‌های کاه با استفاده از سامانه

طیف‌سنجی الف- فیبر نوری و ب- لامپ هالوژن

Fig. 5. Raw reflection spectra of straw samples using spectroscopy system a. Optical fiber and b. Halogen lamp

۲-۳- کشف طیف‌های نامتشابه

شکل ۶ نتیجه تحلیل مولفه‌های اصلی بر روی ۳۸ طیف NIR

نمونه‌های کاه نورپردازی شده با فیبر نوری و لامپ هالوژن را با برازش بیضی T^2 Hotelling با سطح اطمینان ۹۵٪ نشان می‌دهد. دو مولفه اصلی برای نمونه‌های کاه ۹۹٪ از واریانس طیف‌ها را توجیه نموده‌اند. مشخص است که یک طیف به عنوان طیف نامتشابه^۱ برای هر مجموعه داده قابل حذف می‌باشد که علت نامتشابه بودن آن را می‌توان عواملی چون ناپیکناختی سطح نمونه و یا تغییرات احتمالی در ارتفاع نمونه‌ها

¹ Outlier

۳-۳- نتایج توسعه مدل‌های پیش‌بینی رطوبت و

ساکاروز نمونه‌های کاه

در مجموع ۱۰ روش پیش‌پردازش طیفی شامل SNV، MSC، SG، MA، D1، MA+MSC، MA+SNV، SG+MSC، SG+SNV و SG+D1 برای هر دو سیستم نور پردازش در نظر گرفته شد. نتایج به دست آمده برای پیش‌بینی رطوبت سامانه طیف-سنجی با فیبر نوری و لامپ هالوژن در جدول ۲ نشان داده شده است. نتایج به دست آمده نشان می‌دهد که مدل‌سازی محتوای رطوبت برای

سامانه طیف‌سنجی با استفاده از فیبر نوری و پیش‌پردازش طیفی SG+MSC بهترین نتیجه را داشته است ($R^2=0.92$, $RPD=3.52$). همچنین برای سامانه طیف‌سنجی با استفاده از لامپ هالوژن از داده‌های خام بهترین نتیجه حاصل شد ($R^2=0.93$, $RPD=4.01$) که نسبت به سامانه نورپردازی با فیبر نوری نتیجه قوی‌تری است. علت این نتیجه را می‌توان در افزایش سطح تعامل نور-نمونه و شدت نور تابش شده بر نمونه توجیه نمود. این نتیجه در خصوص پیش‌بینی غلظت ساکاروز نمونه‌ها نیز حاصل شد که نتایج آن در جدول ۳ نشان داده شده است.

جدول ۲- نتایج پیش‌پردازش طیفی برای پیش‌بینی رطوبت نمونه‌های کاه با سامانه طیف‌سنجی با فیبر نوری و لامپ هالوژن

Table 2. Spectral preprocessing results for predicting the moisture content of straw samples with spectroscopic system with light fiber and halogen lamp

فیبر نوری Light fiber			لامپ هالوژن Halogen lamps							
اعتبارسنجی متقاطع یگانه Leave-one-out validation			آموزش Training		اعتبارسنجی متقاطع یگانه Leave-one-out validation			آموزش Training		
R^2	RMSE	RPD	R^2	RMSE	R^2	RMSE	RPD	R^2	RMSE	Preprocessing
ضریب تعیین	ریشه میانگین مربعات خطا	انحراف باقیمانده پیشگو	ضریب تعیین	ریشه میانگین مربعات خطا	ضریب تعیین	ریشه میانگین مربعات خطا	انحراف باقیمانده پیشگو	ضریب تعیین	ریشه میانگین مربعات خطا	پیش پردازش
0.87	5.48	2.82	0.89	5.05	0.93	3.89	4.01	0.99	1.31	بدون پیش پردازش
0.91	4.45	3.47	0.98	2.04	0.92	4.24	3.68	0.98	1.81	SNV
0.92	4.40	3.51	0.98	1.97	0.92	4.07	3.84	0.98	1.80	MSC
0.87	5.48	2.82	0.89	5.02	0.93	3.89	4.01	0.99	1.34	SG
0.87	5.48	2.82	0.89	5.02	0.93	3.89	4.01	0.99	1.35	MA
0.34	12.67	1.22	0.9	4.82	0.78	7.08	2.20	0.99	1.14	D1
0.92	4.39	3.52	0.98	2.03	0.92	4.06	3.84	0.98	1.82	MA+MSC
0.91	4.45	3.47	0.98	2.11	0.92	4.23	3.69	0.98	1.83	MA+SNV
0.92	4.39	3.52	0.98	2	0.92	4.07	3.84	0.98	1.81	SG+MSC
0.91	4.44	3.48	0.98	2.08	0.92	4.24	3.68	0.98	1.82	SG+SNV
0.34	12.66	1.22	0.89	4.84	0.78	7.06	2.21	0.99	1.14	SG+D1

طول موج ۲۵۰۰-۱۱۰۰ نانومتر در این پژوهش در مقایسه با محدوده طول موج ۴۰۰-۱۱۰۰ نانومتر در مطالعه حاضر، نتایج بهتری حاصل شد. استفاده از محدوده طیفی با طول موج بالاتر نیازمند بکارگیری طیف‌سنج‌های گران‌قیمت می‌باشد. (O'shea et al. (2010) به طور مشابه درجه بریکس و محتوای ساکاروز نمونه‌های نیشکر ییافی شده و باگاس را با استفاده از یک سیستم برخط NIR مورد ارزیابی قرار دادند. نتایج اعتبارسنجی مدل با استفاده از روش PLS برای نمونه‌های نیشکر ییافی‌شده برای هر دو شاخص بریکس و محتوای ساکاروز دارای R^2 برابر با ۰/۹۷ و RMSE برابر با ۰/۳۲ و ۰/۳۰ بود. برای نمونه‌های باگاس برای هر دو شاخص بریکس و محتوای ساکاروز به ترتیب R^2 برابر با ۰/۶۴ و ۰/۳۱ و RMSE برابر با ۱/۰۴ و ۰/۲۴ به دست آمد که در مقایسه با نتایج مطالعه حاضر بر روی نمونه باگاس، ضعیف‌تر می‌باشد. شکل ۷، نتایج برآورد (اعتبارسنجی بیرونی) مدل‌های PLSR را برای رطوبت و غلظت ساکاروز نمونه‌های کاه با استفاده از سامانه نورپردازی لامپ هالوژن را نشان می‌دهد. انحراف باقیمانده پیشگو (RPD) برای رطوبت و ساکاروز به ترتیب ۳/۰۷ و ۲/۲۵ به دست آمده که به ترتیب بیانگر مدل‌های عالی و بسیار خوب برای پیش‌بینی این شاخص‌هاست.

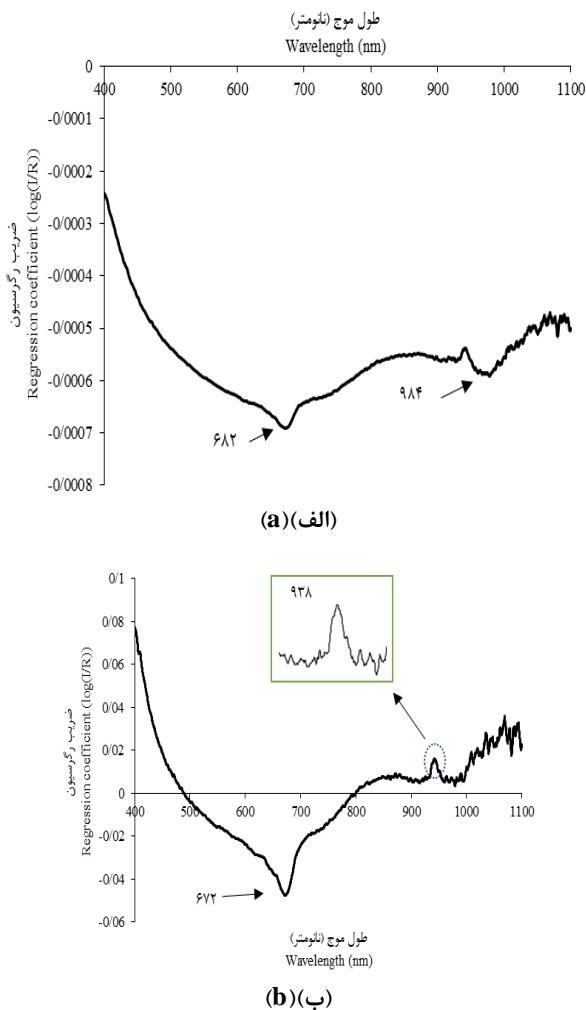
نتایج به دست آمده برای پیش‌بینی غلظت ساکاروز نمونه‌های کاه در جدول ۳ نشان داده شده است. نتایج نشان می‌دهد که مدل‌سازی غلظت ساکاروز برای سامانه طیف‌سنجی با لامپ هالوژن با استفاده از پیش‌پردازش MA+SNV بهترین نتیجه را داشته است ($R^2=0/78$, $RPD=2/04$) (Phuphaphud et al. (2020) با استفاده از طیف‌سنج قابل حمل Vis-SWNIR استفاده از مدل‌سازی PLS قابلیت خوبی در اندازه‌گیری محتوای ساکاروز ساقه‌های نیشکر در حال رشد نشان داد که مقادیر R^2 و RMSE برای CCS به ترتیب ۰/۷۸ و ۰/۹۹ بود. در پژوهشی مشابه (Nawi et al. (2013) با استفاده از طیف‌سنجی Vis-SWNIR به پیش‌بینی میزان قند نیشکر بر اساس طیف‌سنجی بازتابی پرداختند. با استفاده از روش PLS، مدل کالیبراسیون توسعه داده شده برای Brix نمونه‌ها دارای R^2 برابر با ۰/۹۱ و RMSE برابر با ۰/۷۲۱ بود. در پژوهشی دیگر توسط (Naderi-Boldaji et al. (2023) ارزیابی خصوصیات کیفی نیشکر شامل بریکس و محتوای رطوبت بدون نیاز به استخراج عصاره از ساقه با استفاده از روش طیف‌سنجی Vis-SWNIR مورد مطالعه قرار گرفت. نتایج اعتبارسنجی درونی مدل رگرسیونی PLS دارای R^2 برابر با ۰/۷۷ و ۰/۷۳ و RMSE برابر با ۱/۱۳ و ۱/۵ به ترتیب برای بریکس و محتوای رطوبت نمونه‌ها نیشکر بود. در مطالعه (Madsen et al. (2003) نتایج پیش‌بینی مدل با استفاده از روش PLS برای درجه بریکس و محتوای ساکاروز به ترتیب دارای R^2 برابر با ۰/۹۶ و ۰/۹۷ و RMSE برابر با ۰/۳۲ و ۰/۴۲ بود. با توجه به محدوده

جدول ۳- نتایج پیش‌پردازش طیفی برای پیش‌بینی ساکاروز نمونه‌های کاه با سامانه طیف‌سنجی با لامپ هالوژن

Table 3. Spectral preprocessing results for predicting sucrose of straw samples with spectroscopic system with halogen lamps

اعتبارسنجی متقاطع یگانه Leave-one-out validation			آموزش Training		
R^2	RMSE	RPD	R^2	RMSE	Preprocessing
ضریب تعیین	ریشه میانگین مربعات خطا	انحراف باقیمانده پیشگو	ضریب تعیین	ریشه میانگین مربعات خطا	پیش‌پردازش
0.69	5.18	1.79	0.93	2.29	بدون پیش‌پردازش
0.74	4.76	1.95	0.98	1.13	SNV
0.65	5.55	1.67	0.91	2.72	MSC
0.68	5.17	1.80	0.93	2.31	SG
0.68	5.17	1.80	0.93	2.33	MA
0.39	7.15	1.30	0.79	4.20	D1
0.65	5.54	1.68	0.9	2.79	MA+MSC
0.78	4.56	2.04	0.98	1.21	MA+SNV
0.65	5.54	1.68	0.9	2.76	SG+MSC
0.75	4.72	1.97	0.98	1.18	SG+SNV
0.39	7.14	1.30	0.78	4.21	SG+D1

2007). در پژوهشی دیگر توسط Wang et al. (2017)، طول موج ۹۳۸ نانومتر نقش مهمی در پیش‌بینی محتوای جامد محلول (Brix) و سفتی گلابی داشت.



شکل ۸- ضرایب رگرسیونی متغیرهای طیفی در پیش‌بینی الف. رطوبت و ب. غلظت ساکاروز نمونه‌های کاه

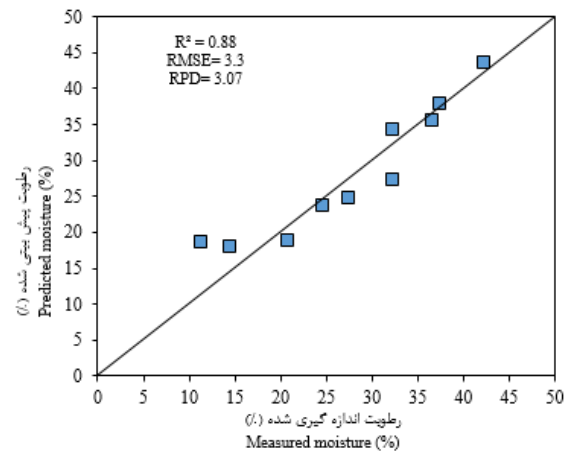
Fig. 8. Regression coefficients of spectral variables in prediction of a. moisture content and b. Sucrose concentration of straw samples

با توجه به نتایج به دست آمده، سامانه طیف‌سنج Vis-NIR در محدوده طیفی ۴۰۰-۱۱۰۰ نانومتر با استفاده از نورپردازی با لامپ هالوژن قابلیت بسیار خوبی در پیش‌بینی رطوبت و ساکاروز نشان داد. لذا از همین سامانه نورپردازی برای سنجش نمونه‌های باگاس استفاده شد.

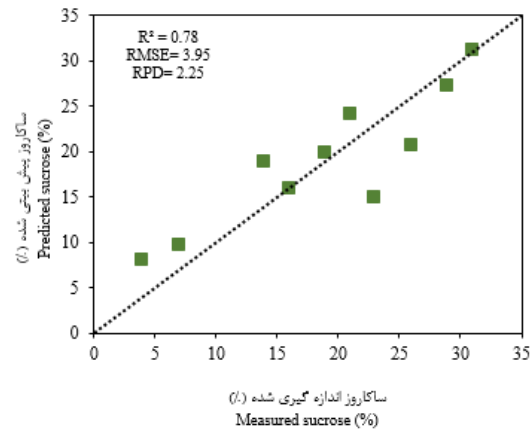
۴-۳- نتایج پیش‌بینی رطوبت و غلظت ساکاروز

نمونه‌های باگاس

آمار توصیفی نمونه‌های باگاس در جدول ۴ نشان داده شده است. مقادیر محتوای رطوبت و غلظت ساکاروز در نمونه‌های باگاس به ترتیب



(الف) (a)



(ب) (b)

شکل ۷- نتایج اعتبارسنجی بیرونی مدل‌های PLSR برای الف- رطوبت و ب- ساکاروز نمونه‌های کاه با استفاده از سامانه نورپردازی لامپ هالوژن

Fig. 7. The results of external validation of PLSR models for a. moisture and b. sucrose of straw samples using halogen lamp lighting system

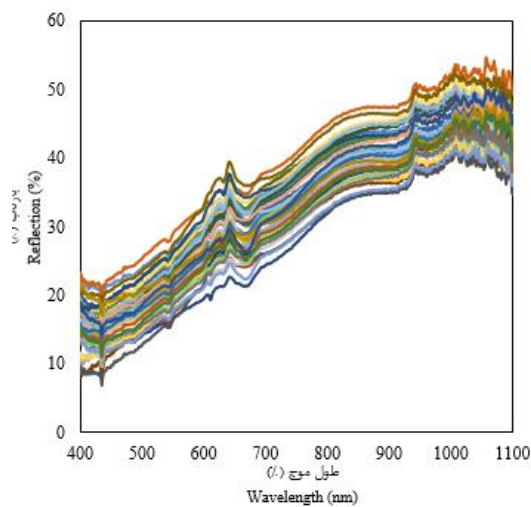
با توجه به نتایج به دست آمده، ضرایب رگرسیونی متغیرهای طیفی مربوط به پیش‌بینی رطوبت و ساکاروز با سامانه نورپردازی لامپ هالوژن در شکل ۸ نشان داده شده است. دو پیک جذب در ۶۸۲ و ۹۸۴ نانومتر مشاهده می‌شود. همان‌طور که اشاره شد، در محدوده طیفی ۷۰۰-۳۵۰ نانومتر، تغییرات طیف‌های جذب عمده‌تاً به دلیل همبستگی قوی با تغییرات رنگ نمونه است. در ۹۸۴ نانومتر دومین پیک جذب برای رطوبت کاه قابل مشاهده است. با توجه به مطالعات انجام شده توسط Golic et al. (2003)، پیک جذب ۹۸۴ نانومتر با اورتون دوم کششی باند O-H همبستگی دارد برای طیف‌های تحت تغییر ساکاروز، دومین پیک جذب در ۹۳۸ نانومتر مشاهده می‌شود. پیک جذب ۹۳۸ نانومتر با اورتون‌های سوم و چهارم کششی باند C-H همبستگی دارد (Workman and Weyer,)

در محدوده ۵۱/۹-۵۴/۱٪ و ۱/۸-۳/۱۱٪ می‌باشند. این محدوده تغییرات نسبت به نمونه‌های کاه بسیار محدودتر می‌باشد.

جدول ۴- آمار توصیفی نمونه‌های باگاس

Table 4. Descriptive statistics of bagasse samples

دامنه تغییر	انحراف معیار	کمینه	بیشینه	میانگین	مشخصه
Range	Standard deviation	Minimum	Maximum	Average	Characteristic
0.95	0.47	51.9	54.1	53.15	رطوبت (%) Moisture
1.31	0.36	1.8	3.11	2.24	غلظت ساکاروز (%) Sucrose concentration



شکل ۹- طیف‌های خام بازتابی نمونه‌های باگاس با استفاده از سامانه طیف‌سنجی با نورپردازی لامپ هالوژن

Fig. 9. Raw reflectance spectra of bagasse samples using spectroscopy system with halogen lamp lighting

در شکل ۹ طیف‌های خام اولیه نمونه‌های باگاس با استفاده از سامانه طیف‌سنجی در محدوده طیفی ۴۰۰-۱۱۰۰ نانومتر نشان داده شده است. طیف‌ها حاصل میانگین ۱۲ تکرار برای هر نمونه می‌باشد. در محدوده طیفی ۴۰۰-۶۸۰ نانومتر دو پیک جذب مشهود در طول موج‌های ۴۳۴ و ۶۷۰ نانومتر اتفاق افتاده است. همان طور که اشاره شد، تغییر در جذب در ناحیه مرئی (۷۸۰-۳۸۰ نانومتر) قاعدتا به دلیل رنگ نمونه است (Zhang et al., 2019). دو پیک جذب در طول موج‌های ۹۱۰ و ۹۶۰ نانومتر قابل مشاهده هستند که به ترتیب مربوط به اورتون‌های سوم و دوم پیوندهای کششی C-H و O-H می‌باشد (Golic et al., 2003; Posom et al., 2020; Phuphaphud et al., 2020; Maraphum et al., 2020).

نتایج آموزش و اعتبارسنجی درونی برای پیش‌بینی رطوبت و غلظت ساکاروز نمونه‌های باگاس در جدول ۵ نشان داده شده است. با توجه به تکرار طیفی بالا، نتایج حاصل از پیش‌پردازش‌های طیفی بسیار نزدیک به هم بوده و بهترین نتایج مربوط به طیف‌های خام برای هر دو شاخص رطوبت ($R^2=0/68$, $RPD=1/80$) و ساکاروز ($R^2=0/42$, $RPD=1/33$) به دست آمد. مدل حاصل برای رطوبت را می‌توان یک مدل خوب ولی برای ساکاروز را یک مدل ضعیف تفسیر نمود.

جدول ۵. نتایج آموزش و اعتبارسنجی درونی مدل‌های پیش‌بینی رطوبت و غلظت ساکاروز نمونه‌های باگاس

Table 5. The results of training and internal validation of moisture and sucrose concentration prediction models of bagasse sampl

اعتبارسنجی متقاطع یگانه Leave-one-out validation			آموزش Training		مشخصه Characteristic
R^2	RMSE	RPD	R^2	RMSE	
ضریب تعیین	ریشه میانگین مربعات خطا	انحراف باقیمانده پیشگو	ضریب تعیین	ریشه میانگین مربعات خطا	
0.68	0.28	1.80	0.74	0.25	رطوبت (%) Moisture
0.42	0.23	1.33	0.98	0.03	غلظت ساکاروز (%) Sucrose concentration

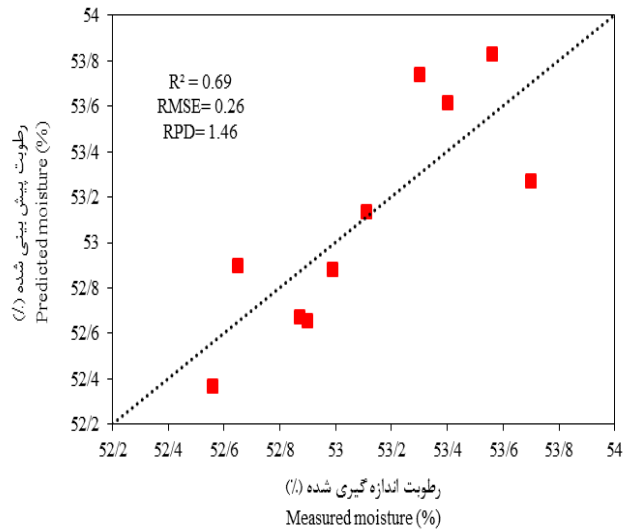
۵- نتیجه گیری نهایی

در این مطالعه توانایی روش طیف‌سنجی در محدوده طول موج مرئی- نزدیک فروسرخ موج کوتاه (Vis-SWNIR) به عنوان روشی سریع و کم هزینه برای پیش‌بینی رطوبت و غلظت ساکاروز در مواد فیبری متخلخل با مطالعه موردی بر روی باگاس نیشکر مورد ارزیابی قرار گرفت. نتایج این روش با استفاده از ساخت یک محفظه نورپردازی با دو لامپ هالوژن ۵۰ وات در مقایسه با نورپردازی از طریق لامپ دستگاه طیف‌سنج با فیبر نوری در محدوده طول موج ۱۱۰۰-۴۰۰ نانومتر مقایسه شد. بر اساس نتایج به دست آمده، جذب اورتون‌های ۲ و ۳ پیوندهای کششی O-H و C-H می‌تواند این پتانسیل را در این محدوده طیفی برای سنجش رطوبت و غلظت ساکاروز با استفاده از یک نمونه دستگاه طیف‌سنج ساخت ایران فراهم نماید. نتایج این مطالعه نشان داد که محدوده طیفی Vis-SWNIR می‌تواند بر روی نمونه‌های همگن فیبری در صورتی که محدوده تغییرات خصوصیات قابل توجه باشد قدرت پیشگویی مطلوبی به خصوص برای رطوبت نمونه‌ها داشته باشد. دستیابی به نتایج قوی‌تر مستلزم بکارگیری طیف-سنج‌های با محدوده طیفی کامل ناحیه NIR می‌باشد تا بتوان جذب-های اورتون اول ساکاروز را که در طول موج حدود ۱۹۰۰ نانومتر اتفاق می‌افتد را سنجش نمود. با توجه به این که یکی از موارد بسیار مهم در فرایند استحصال قند در کارخانه‌های تولید شکر (ساکاروز)، ارزیابی ضایعات قندی موجود در باگاس (تفاله نیشکر) است، می‌توان روش طیف‌سنجی را به عنوان روشی سریع و ساده جایگزین روش‌های پیچیده و زمان‌بر آزمایشگاهی شود. آزمون این محدوده طیفی بر روی نمونه‌های مایع می‌تواند پیشنهادی جهت دستیابی به دقت سنجش بیشتر در مطالعات آینده باشد.

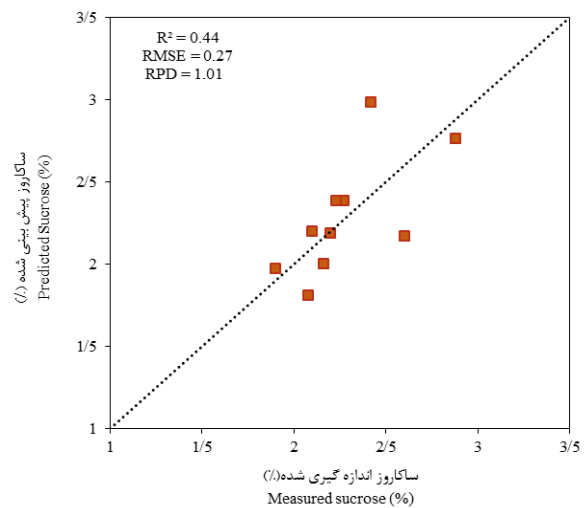
تقدیر و تشکر

از حمایت و پشتیبانی موسسه تحقیقات و آموزش توسعه نیشکر و صنایع جانبی خوزستان در اجرای این مطالعه تشکر و قدردانی می‌گردد.

شکل ۱۰، نتایج برآورد (اعتبارسنجی بیرونی) مدل‌های PLSR را برای رطوبت و غلظت ساکاروز نمونه‌های باگاس نشان می‌دهد. ضریب تعیین (R^2) برای رطوبت و پل به ترتیب ۰/۶۹ و ۰/۴۴ به دست آمد. با توجه به کم بودن محدوده تغییرات خصوصیات رطوبت و غلظت ساکاروز نمونه‌های باگاس، نتایج پیش‌بینی حاصل در مقایسه با نمونه‌های کاه، قدرت پیشگویی کمتری داشت.



(الف) (a)



(ب) (b)

شکل ۱۰- نتایج اعتبارسنجی بیرونی مدل‌های PLSR برای

نمونه‌های باگاس الف- رطوبت و ب- ساکاروز

Fig. 10. The results of external validation of PLSR models for bagasse samples a. moisture content and b. sucrose

منابع

- temperature. *Applied spectroscopy*, 57(2): 139-145. <https://doi.org/10.1366/000370203321535033>.
- Hadiwijaya, Y., Putri, I. E., and Munawar, A. A. (2021). *Multi-product calibration model for soluble solids and water content quantification in Cucurbitaceae family, using visible/near-infrared spectroscopy*. *Heliyon*, 7(8). <https://doi.org/10.1016/j.heliyon.2021.e07677>.
- Iweka, P., Kawamura, S., Mitani, T., Kawaguchi, T., and Koseki, S. (2020). *Online milk quality assessment during milking using near-infrared spectroscopic sensing system*. *Environmental Control in Biology*, 58(1): 1-6. <https://doi.org/10.2525/ecb.58.1>.
- Kim, G. Y., Lee, K. J., Choi, K. H., Son, J. R., Choi, D. S., and Kang, S. W. (2004). *Defect and ripeness inspection of citrus using NIR transmission spectrum*. *Key engineering materials*, 270: 1008-1013. <https://doi.org/10.4028/www.scientific.net/KEM.270273.100>.
- Lan, W., Bureau, S., Chen, S., Leca, A., Renard, C. M., and Jaillais, B. (2021). *Visible, near-and mid-infrared spectroscopy coupled with an innovative chemometric strategy to control apple puree quality*. *Food Control*, 120: 107546. <https://doi.org/10.1016/j.foodcont.2020.107546>.
- Li, J., Wang, Q., Xu, L., Tian, X., Xia, Y. and Fan, S. (2019). *Comparison and optimization of models for determination of sugar content in pear by portable Vis-NIR spectroscopy coupled with wavelength selection algorithm*. *Food Analytical Methods*, 12(1): 12-22. <https://doi.org/10.1007/s12161-018-1326-7>.
- Madsen, L. R., White, B. E., Rein, P. W., Madsen, L. R., White, B. E., and Rein, P. W. (2003). *Evaluation of a near infrared spectrometer for the direct analysis of sugar cane*. *Journal American Society of Sugarcane Technologists*, 23(80), e92.
- Maraphum, K., Saengprachatanarug, K., Wongpichet, S., Phuphaphud, A., and Posom, J. (2020). *In-field measurement of starch content of cassava tubers using handheld vis-near infrared spectroscopy implemented for breeding programmes*. *Computers and Electronics in Agriculture*, 175: 105607. <https://doi.org/10.1016/j.compag.2020.105607>.
- Meade, G. P., and Chen, J. C. P. (1977). *Cane sugar handbook: a manual for cane sugar manufacturers and their chemists*. John Wiley and Sons.
- Naderi-Boldaji, M., Tohidi, M., and Ghasemi-Varnamkhasti, M. (2023). *Evaluation of dielectric spectroscopy in fusion with Vis-SWNIR spectroscopy for measurement of sugar concentration on sugarcane stalk samples*. *Journal of Agricultural Machinery*. (In Persian). <https://doi.org/10.22067/JAM.2023.80620.1144>.
- Nawi, N. M., Chen, G., Jensen, T., and Mehdizadeh, S. A. (2013). *Prediction and classification of sugar content of sugarcane based on skin scanning using visible and shortwave near infrared*. *Biosystems Engineering*, 115(2): 154-161. <https://doi.org/10.1016/j.biosystemseng.2013.03.005>.
- O'Shea, M. G., Staunton, S. P., and Burleigh, M. (2010). *Implementation of on-line near infrared (NIR)*
- Abu-Khalaf, N., and Hmidat, M. (2020). *Visible/Near Infrared (VIS/NIR) spectroscopy as an optical sensor for evaluating olive oil quality*. *Computers and Electronics in Agriculture*, 173: 105445. <https://doi.org/10.1016/j.compag.2020.105445>.
- Aghaei Saadi, M., Minaei, S., Jamshidi, B. and Abdullahian Nougabi, M. (2021). *Non-destructive measurement of sugar beet grade by combining near infrared spectroscopy (NIR) with chemometric methods*. *Biosystem Engineering of Iran*, 1(49): 9-18. (In Persian). <https://doi.org/10.22059/IJBSE.2017.208413.664785>.
- Aparatana, K., Ishikawa, D., Maraphum, K., Saengprachatanarug, K., Agarie, H., Shikanai, T., and Taira, E. (2022). *Non-destructive Laboratory Analysis of the Detection of Unhealthy Sugarcane Stalks Using a Portable Vis-NIR Spectrometer*. *Engineering in Agriculture, Environment and Food*, 15(2): 72-80. <https://doi.org/10.37221/eaef.15.2.72>.
- Bagherpour, H., Mohammadi, M. (2016). *Determining the humidity and Brix degree of carrots using near-infrared spectroscopy*. *Biosystem Engineering Journal of Iran*, 1(48): 1-7. (In Persian). <https://doi.org/10.22059/IJBSE.2017.61555>.
- Blackburn, F. (1950). *Sugar cane (translated by Mohammad Reza Rahdar)*. Shahid Chamran University of Ahvaz: 660pp. (In Persian).
- Chen, W., Li, H., Zhang, F., Xiao, W., Zhang, R., Chen, Z., and Du, Y. (2021). *Handheld short-wavelength NIR spectroscopy for rapid determination of sugars and carbohydrate in fresh juice with sampling error profile analysis*. *Infrared Physics & Technology*, 115: 103732. <https://doi.org/10.1016/j.infrared.2021.103732>.
- Cortés, V., Blasco, J., Aleixos, N., Cubero, S., and Talens, P. (2019). *Monitoring strategies for quality control of agricultural products using visible and near-infrared spectroscopy: A review*. *Trends in Food Science & Technology*, 85: 138-148. <https://doi.org/10.1016/j.tifs.2019.01.015>.
- De Whalley, H. C. S. (Ed.). (2013). *ICUMSA methods of sugar analysis: official and tentative methods recommended by the International Commission for Uniform Methods of sugar analysis (ICUMSA)*. Elsevier.
- Fan, S., Li, J., Xia, Y., Tian, X., Guo, Z., and Huang, W. (2019). *Long-term evaluation of soluble solids content of apples with biological variability by using near-infrared spectroscopy and calibration transfer method*. *Postharvest Biology and Technology*, 151: 79-87. <https://doi.org/10.1016/j.postharvbio.2019.02.001>.
- Forozani, B., Bagherpour, H. and Zabli, Kh. (2019). *Detection of protein content and moisture content of wheat grains using non-destructive near-infrared (NIR) method*. 11th National Congress of Biosystem Mechanical Engineering and Mechanization. Iran. Hamedan. (In Persian). <https://doi.org/10.52547/fsct.17.99.45>.
- Golic, M., Walsh, K., and Lawson, P. (2003). *Short-wavelength near-infrared spectra of sucrose, glucose, and fructose with respect to sugar concentration and*

- Systems. 201: 104017.
<https://doi.org/10.1016/j.chemolab.2020.104017>.
- Zhang, H., Duan, Z., Li, Y., Zhao, G., Zhu, S., Fu, W., and Hu, J. (2019). *Vis/NIR reflectance spectroscopy for hybrid rice variety identification and chlorophyll content evaluation for different nitrogen fertilizer levels*. Royal Society open science. 6(10): 191132.
<https://doi.org/10.1098/rsos.191132>.
- Zhang, H., Zhan, B., Pan, F., and Luo, W. (2020). *Determination of soluble solids content in oranges using visible and near infrared full transmittance hyperspectral imaging with comparative analysis of models*. Postharvest Biology and Technology. 163: 111148.
<https://doi.org/10.1016/j.postharvbio.2020.111148>.
- technologies for the analysis of cane, bagasse and raw sugar in sugar factories to improve performance*.
- Pan, L., Zhu, Q., Lu, R., and McGrath, J. M. (2015). *Determination of sucrose content in sugar beet by portable visible and near-infrared spectroscopy*. Food chemistry, 167, 264-271.
<https://doi.org/10.1016/j.foodchem.2014.06.117>.
- Phuphaphud, A., Saengprachatanarug, K., Posom, J., Maraphum, K. and Taira, E. (2020). *Nondestructive and rapid measurement of sugar content in growing cane stalks for breeding programs using visible-near infrared spectroscopy*. Biosystems Engineering. 197: 76-90.
<https://doi.org/10.1016/j.biosystemseng.2020.06.012>.
- Posom, J., Klaphachan, J., Rattanasopa, K., Sirisomboon, P., Saengprachatanarug, K., and Wongpichet, S. (2020). *Predicting marian plum fruit quality without environmental condition impact by handheld visible-near-infrared spectroscopy*. ACS omega. 5(43): 27909-27921. <https://doi.org/10.1021/acsomega.0c03203>.
- Rady, A., and Guyer, D. (2015). *Utilization of visible/near-infrared spectroscopic and wavelength selection methods in sugar prediction and potatoes classification*. Journal of Food Measurement and Characterization. 9: 20-34.
<https://doi.org/10.1007/s11694-014-9207-2>.
- Shushtri, M. Ahmadian, S. Asafia, Q. (2008). *Sugarcane in Iran*. Ayij: 337pp. (In Persian).
- Simeone, M. L. F., Parrella, R. A., Schaffert, R. E., Damasceno, C. M., Leal, M. C., and Pasquini, C. (2017). *Near infrared spectroscopy determination of sucrose, glucose and fructose in sweet sorghum juice*. Microchemical Journal. 134: 125-130.
<https://doi.org/10.1016/j.microc.2017.05.020>.
- Soleimani Sodehi, M. (2014). *The roadmap for the transformation of the supply chain of the Iranian sugar industry*. Commercial Print and Publications: 210 pp. (In Persian).
- Tewari, J. C. and Malik, K. (2007). *In situ laboratory analysis of sucrose in sugarcane bagasse using attenuated total reflectance spectroscopy and chemometrics*. Food Science and Technology. 42: 200-207.
<https://doi.org/10.1111/j.1365-2621.2006.01209.x>.
- Wang, J., Wang, J., Chen, Z., and Han, D. (2017). *Development of multi-cultivar models for predicting the soluble solid content and firmness of European pear (Pyrus communis L.) using portable vis-NIR spectroscopy*. Postharvest Biology and Technology. 129: 143-151.
<https://doi.org/10.1016/j.postharvbio.2017.03.012>.
- Williams, P. C., and Norris, K. (2001). *Variables affecting near-infrared spectroscopic analysis*. Near-infrared technology in the agricultural and food industries. 2: 171-198.
- Workman Jr, J., and Weyer, L. (2007). *Practical guide to interpretive near-infrared spectroscopy*. CRC press.
<https://doi.org/10.1201/9781420018318>.
- Xia, Y., Fan, S., Li, J., Tian, X., Huang, W., and Chen, L. (2020). *Optimization and comparison of models for prediction of soluble solids content in apple by online Vis/NIR transmission coupled with diameter correction method*. Chemometrics and Intelligent Laboratory