

Suivi de la qualité des tomates en serre par spectroscopie NIR portable et chimiométrie

Cédric CAMPS, Laura DELTHEIL et Céline GILLI, Agroscope, 1964 Conthey

Renseignements: Cédric Camps, e-mail: cedric.camps@agroscope.admin.ch, tél. +41 27 345 35 30, www.agroscope.ch



Introduction

Pour étudier l'impact des pratiques culturales sur le développement et la qualité des tomates, des centaines de fruits doivent être analysés durant toute l'année. Ces analyses sont par ailleurs destructives, ce qui empêche de suivre le développement et la construction de la qualité sur un même fruit. D'un point de vue pratique, une telle quantité d'analyses utilise du temps, de la main-d'œuvre et des consommables de laboratoire. De ce fait, la mise au point d'une méthode per-

mettant de suivre la qualité des fruits sur la plante de manière non destructive serait souhaitable. Une telle approche donnerait la possibilité d'accompagner le développement des mêmes fruits de la nouaison jusqu'à la récolte et l'utilisation de la technique proche infrarouge (NIR) permettrait de ne pas employer de consommables de laboratoire et de réduire considérablement le temps et le coût des analyses.

La spectroscopie proche infrarouge est largement utilisée pour le développement de modèles prédictifs de la qualité de produits agricoles. Diverses études ont

démontré le potentiel de cette technique pour les fruits mais aussi pour les plantes aromatiques et médicinales (Bellon Maurel *et al.* 2002; Camps et Christen 2009; Camps *et al.* 2011; Delwiche *et al.* 2008; Saranwong *et al.* 2003).

Pour les tomates, les travaux sont essentiellement focalisés sur les fruits mûrs ou dans les phases ultimes de maturation. Certains ont déjà montré l'intérêt potentiel de la technique pour la caractérisation de la qualité des tomates (Baranska *et al.* 2006; Camps *et al.* 2012; Clement *et al.* 2008a, 2008b; De Nardo *et al.* 2009; Flores *et al.* 2009; Kusumiyati *et al.* 2008; Pedro et Ferreira 2007).

Récemment, une étude a mis en évidence le potentiel de la technologie NIR portable pour mesurer les traits de qualité permettant le phénotypage de la tomate cerise cv. Micro-Tom (Ecarnot *et al.* 2013).

La tomate se développe en une soixantaine de jours depuis la nouaison du fruit si les conditions environnementales sont favorables (Giovannoni 2004). Les deux premières semaines suivant la nouaison sont dédiées à la multiplication cellulaire. Le grossissement ou l'expansion cellulaire constitue la deuxième phase de construction permettant au fruit de prendre du calibre. Cette phase s'arrêterait environ 30 jours avant la maturité des fruits. Le fruit atteint alors le stade dit mature-vert et son calibre quasi définitif. Au-delà, le fruit entre dans la phase de maturation qui dure 10 à 15 jours. Durant cette période, la chlorophylle est dégradée et le fruit accumule des caroténoïdes, dont les lycopènes qui induisent son rougissement progressif. Cette phase s'accompagne du pic climactérique, avec une respiration accrue et la synthèse d'éthylène, qui amorce le ramollissement du fruit et donc l'évolution de sa texture.

En culture sous serre, certains facteurs abiotiques liés à l'environnement climatique (longueur de jour et température) peuvent agir fortement sur le développement du fruit.

Dans la présente étude, la construction de la qualité a été suivie sur une variété de tomate de production en serre, cultivée dans la pratique. De plus, la variabilité saisonnière et le stade de développement des fruits (avant et pendant la maturation) ont été pris en compte dans la mise en place et l'optimisation des modèles chimiométriques afin de mesurer la qualité des fruits.

Matériel et méthodes

Conditions culturales et échantillonnage

Des tomates (*Solanum lycopersicum*) de la variété Endeavour ont été cultivées en serre verre de type Venlo en conditions climatiques contrôlées. La plan-

Résumé L'objectif de cette étude était d'évaluer l'intérêt de la spectroscopie proche infrarouge portable pour observer l'évolution de la qualité des tomates en serre. La teneur en matières solubles (TMS), l'acidité totale (TA) ainsi que les paramètres de couleur ont été suivis de la nouaison des fruits à la récolte à pleine maturité. Ce suivi a été effectué durant le printemps et en été. Les données spectrales et qualitatives ont été utilisées pour construire des modèles chimiométriques visant à (1) suivre l'évolution des fruits en fonction de leur stade de développement et à (2) prédire la qualité des fruits. Les modèles discriminants ont permis de retracer l'évolution chronologique des fruits et de marquer l'entrée dans la phase de maturation. Les modèles quantitatifs (PLS) ont permis de prédire la TMS, TA et la couleur des fruits avec une précision qui dépendait de la saison et du stade de maturité des fruits.

tation a eu lieu le 14 février 2013 à une densité de 3,5 tiges/m². Les consignes climatiques étaient une humidité maximale (Dx) de 3 g/kg et des températures de 17-19-21 °C (jour-nuit-aération).

Un premier lot de tomates a été suivi en début de saison, de mars à mai. Un second lot de fruits a été analysé en juin et juillet. Des fruits ont été prélevés tous les trois à quatre jours, de la nouaison à la récolte à pleine maturité. Durant le printemps, seize prélèvements ont été effectués, contre dix en été. Le premier lot comportait 144 fruits et le second 90, une différence liée au développement des fruits plus long au printemps qu'en été.

Analyses de qualité

Les tomates ont été broyées à l'aide d'un robot (Electric tomato sauce sieve mod. Testarossa) en récupérant la pulpe dépourvue de peau et de grains pour la suite des analyses. Cette pulpe a été centrifugée pendant deux minutes à 10000 rpm et le surnageant utilisé pour la mesure des matières solubles et de l'acidité totale. La teneur en matières solubles a été mesurée au réfractomètre digital (Reichert r2mini Digital Pocket Refractometer, USA). Les résultats sont exprimés en % Brix. L'acidité totale a été mesurée au titrimètre (Metrohm, 719S, Titrino) sur 5 g de jus avec une solution de NaOH (0,1 mol/l). Les résultats sont exprimés en méq/100 g. La

couleur de fond a été mesurée sur les fruits entiers, avant leur broyage, à l'aide d'un spectrocolorimètre (Minolta C.O., LTD, Chroma-meter CR-400). Les résultats sont exprimés selon trois paramètres: les composantes L^* (lightness), a^* (red to green) et b^* (blue to yellow), le ration a^*/b^* et le calcul de l'indice de couleur de la tomate (TCI) (Clement *et al.* 2008b).

Spectroscopie proche infrarouge et chimiométrie

Les spectres de tomate ont été acquis en mode réflexion, en mettant directement la source lumineuse du spectromètre (NIR PHAZIR 1018, Anatec, Eke, Belgium) sur la surface du fruit. Les spectres enregistrés sont une moyenne de trente scans, la résolution de la mesure est de 8 nm et la longueur d'ondes de 950 à 1800 nm. Avant l'analyse des fruits, un scan de référence est effectué à l'aide d'une pièce de spectralon®. Trois acquisitions spectrales sont effectuées par fruit. Au total, 702 spectres ont été collectés, 432 au printemps et 270 en été. Les spectres ont été soumis à un traitement permettant leur standardisation (SNV) (Barnes *et al.* 1989; Moons et Sinnaeve 2000).

Modèles qualitatifs: analyse factorielle discriminante

La collection de spectres a été soumise à des analyses factorielles discriminantes (AFD). Un spectre donné forme un vecteur x_i de p longueurs d'ondes. Les n spectres ont été rassemblés dans une matrice rectangulaire X de dimension $n \times p$. Compte tenu de la forte colinéarité des absorbances, une version modifiée d'AFD a été appliquée (Bertrand *et al.* 1990). Dans l'AFD, les groupes qualitatifs à discriminer étaient les dates de prélèvement, exprimées en jours précédant la récolte à maturité des fruits.

Les résultats des modèles AFD sont évalués selon le pourcentage de fruits auxquels la bonne date de prélèvement a été attribuée dans le jeu de validation. Les tests de validation ont été effectués par division de la matrice X en un jeu de calibration et un jeu de validation. Le modèle a été mis en place sur le jeu de calibration et les données du jeu de validation ont été classées sur le modèle établi avec le jeu de calibration. Les observations correctement classées ont été comptabilisées et exprimées en pourcentage. La procédure de validation a été répétée en boucle à dix reprises de manière indépendante, en plaçant deux tiers ($2n/3$) des observations dans le jeu de calibration et le tiers restant ($n/3$) dans le jeu de validation.

La corrélation entre les coordonnées discriminantes et les variables d'origine est calculée afin de mettre en lumière l'importance relative de chaque longueur d'onde dans le modèle discriminant.

Modèles quantitatifs: régression PLS

La collection de spectres et les mesures de qualité ont été analysées par régression des moindres carrés partiels (PLS). Les spectres sont rassemblés dans la matrice X décrite précédemment. Les analyses qualitatives de référence (TMS, TA, L^* , a^* or b^*) sont rassemblées dans des vecteurs colonnes $y_{n,1}$. Les modèles ont été élaborés en trois étapes: 1) détermination du nombre optimal de variables latentes (LV) à introduire dans le modèle, 2) calibration et 3) validation du modèle.

La première étape a utilisé deux méthodes reconnues des utilisateurs de spectroscopie proche infrarouge: la maximisation du coefficient de corrélation (R) et la minimisation de l'erreur quadratique (RMSE) dans une procédure d'apprentissage appelée «*leave-on-out*». Ensuite, afin de confirmer ou d'affiner le choix du nombre de LV, la méthode des covariances dite «Cov-Sel» a été utilisée (Roger *et al.* 2011). Pour les étapes 2 et 3, la matrice X et le vecteur y ont été divisés en un jeu de calibration ($2n/3$) et un jeu de validation ($n/3$).

La précision et la qualité des modèles PLS établis sont évaluées par les indicateurs suivants: le coefficient de corrélation (R) entre les valeurs réelles et les valeurs prédites par PLS, l'erreur quadratique du modèle corrigée du biais sur l'estimation des mesures de qualité (RMSEc), le rapport de la déviation sur l'erreur quadratique (RPD) (Williams et Sobering 1993) et le rapport de la distance interquartile sur l'erreur quadratique (RPIQ) (Bellon-Maurel *et al.* 2010). Toutes les analyses chimiométriques ont été effectuées avec le logiciel Matlab R2013 et en partie avec la boîte de travail SAISIR Package version 1.0 (http://www.chimiometrie.fr/saisir_webpage.html).

Résultats et discussion

Suivi de la qualité des fruits

La durée de développement des fruits de printemps est de 55–60 jours, contre 45 jours seulement en été. Le calibre et la masse fraîche du fruit augmentent de manière linéaire jusqu'à 30 jours avant la récolte, où se termine la phase intense de grossissement cellulaire (Giovannoni 2004). Par la suite, le calibre se stabilise et la masse fraîche continue d'évoluer (fig.1). Cette deuxième phase est relativement similaire lors des deux saisons étudiées; c'est donc la phase précédant les 30 derniers jours qui serait plus longue au printemps qu'en été.

La maturation des fruits intervient dans les 10 à 15 derniers jours avant récolte (fig.1). On observe un changement de coloration rapide de l'épiderme, dû à la dégradation des chlorophylles et à la synthèse de

carotènes tels que les lycopènes. Cette coloration se traduit parfaitement dans les paramètres de couleurs (a, TCI et a/b). Cette période est aussi marquée par un pic d'accumulation des sucres et d'acides organiques, bien reflété par les mesures de TMS et de TA (fig.1). Cette accumulation s'annule avant la récolte.

La diminution de TA entre 40 et 30 jours pourrait être due à l'augmentation transitoire des réserves d'amidon qui permet l'accumulation de TMS lors de la maturation. Les facteurs métaboliques influençant l'accumulation de l'amidon et des sucres dans la tomate ne sont pas totalement connus mais des études tendent à montrer que le cycle du malate au sein des mitochondries pourrait influencer significativement l'accumulation d'amidon dans les plastes. Cette quantité accrue lors de la phase d'expansion cellulaire serait responsable de l'accumulation de TMS dans le cytosol en addition de celle de glucose et fructose lors de la maturation (Beckles *et al.* 2012; Centeno *et al.* 2011; Luengwilai et Beckles 2009; Petreikov *et al.* 2009).

Le suivi du développement des fruits et de leurs caractéristiques qualitatives lors de ces deux saisons a donné d'intéressants résultats en termes de dynamique d'accumulation des sucres, des acides et de fa-

çon générale sur le rythme de développement. Cette variabilité était recherchée afin de construire des modèles de prédiction de la qualité des tomates basés sur la mesure NIR.

Modèles qualitatifs: analyse factorielle discriminante

L'AFD a été utilisée afin de modéliser le suivi des fruits au cours du temps sur la seule base de la variabilité des mesures spectrales. Dans un premier temps, le nombre de variables à introduire dans les modèles a été calculé en introduisant un nombre artificiellement élevé de variables (30). Le nombre d'observations correctement classées en fonction du nombre de variables introduites est observé afin de déterminer le nombre optimal de variables (fig.2A,B). Pour le modèle utilisant les données NIR de printemps, le nombre de variables sera donc de 11 et il sera de 8 pour le modèle estival.

Les modèles discriminants permettent une classification correcte des fruits à hauteur de 66 % (printemps) et 80 % (été). Les cartes factorielles selon les deux premières dimensions sont présentées dans la figure 2C et 2D. Pour le modèle de printemps, les ellipses de chaque date de récolte forment un arc paramétré continu depuis 48 jours avant récolte jusqu'à la date de récolte à

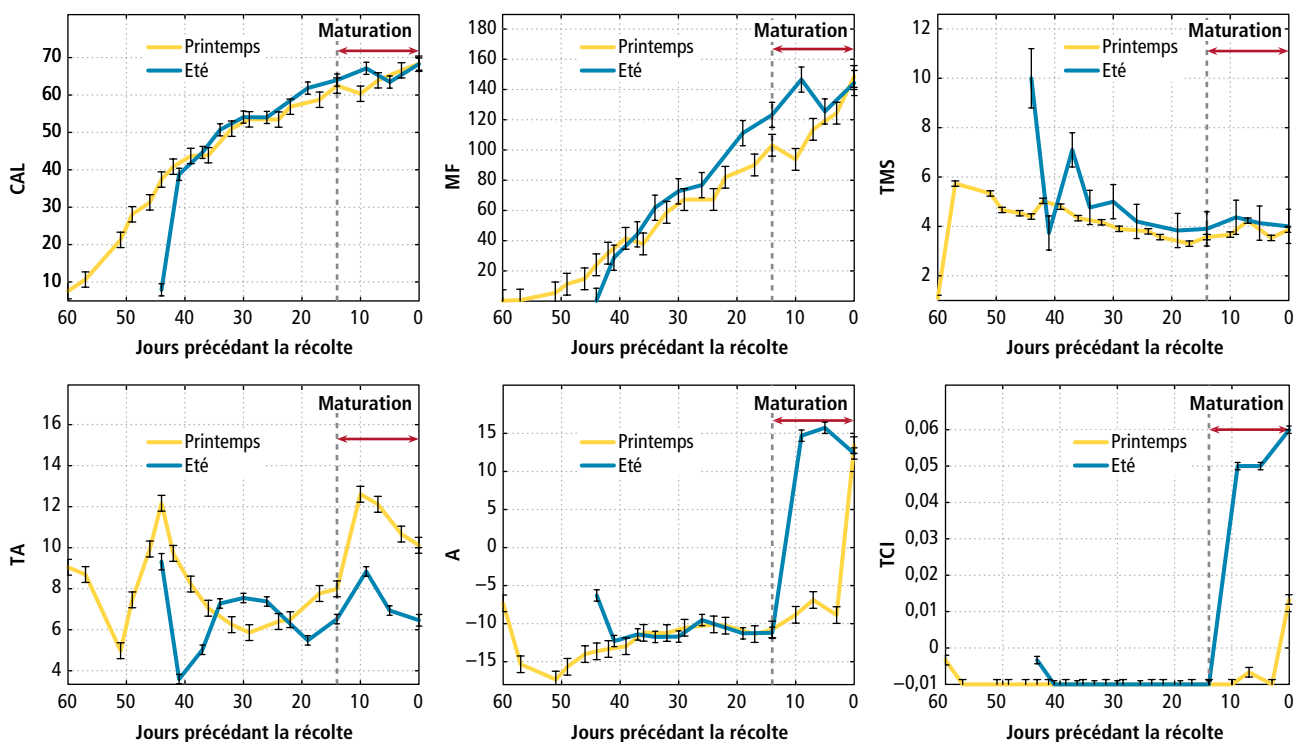


Figure 1 | Evolution de la qualité des fruits au cours de leur croissance et développement en serre au printemps (symboles blancs) et en été (symboles noirs). Cal: calibre, MF: masse fraîche, TMS: teneur en matières solubles, TA: acidité totale, A et TCI caractérisent la couleur. Les données ont été analysées par ANOVA et test hsd de Tukey ($p = 0,05$). Les barres d'erreur représentent les intervalles de confiance à 95 % de l'analyse de variance et du test hsd.

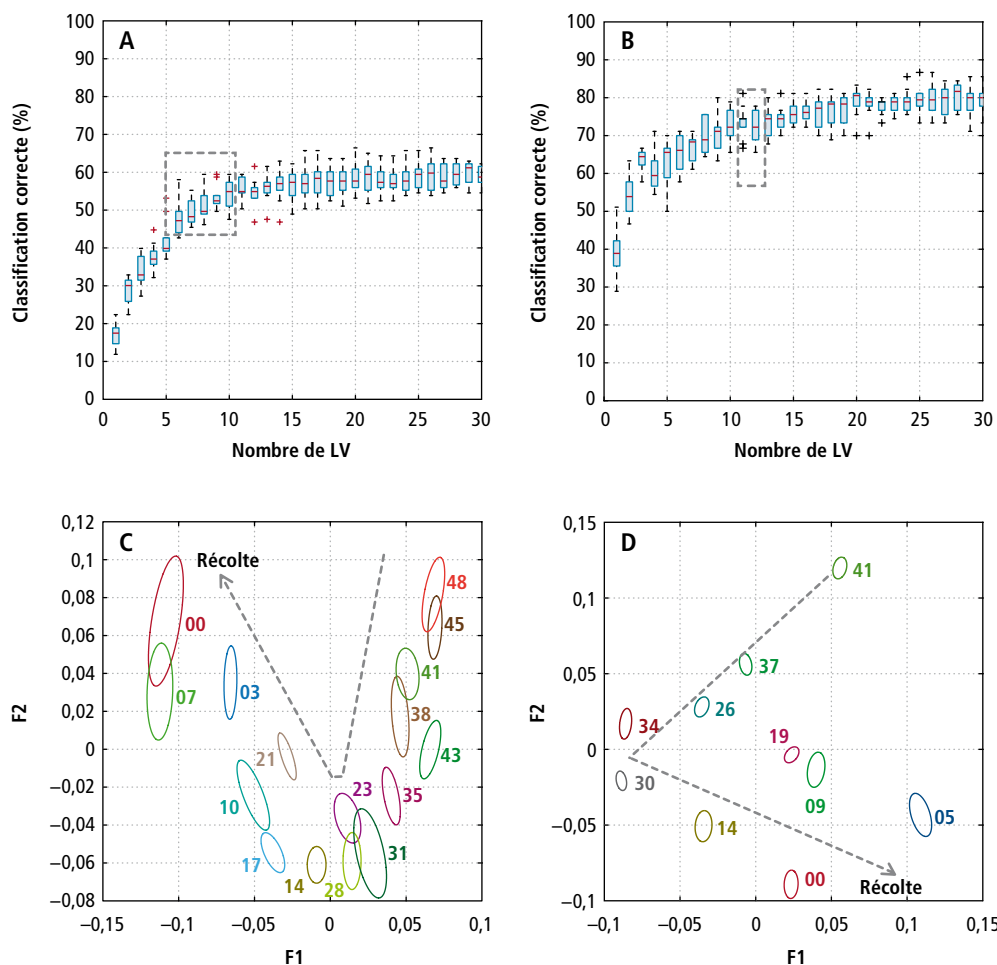


Figure 2 | Pourcentage de classification correcte par le modèle AFD en fonction du nombre de dimensions introduites dans le modèle utilisant les fruits de printemps (A) et d'été (B). Cartes factorielles de l'AFD d'après les deux premières coordonnées factorielles avec les fruits de printemps (C) et d'été (D).

Tableau 1 | Valeurs des modèles de prédictions PLS pour la teneur en matières solubles (TMS) et l'acidité totale (TA)

Saison		Printemps						Été						Printemps + été					
Stade		PM+M		PM		M		PM+M		PM		M		PM+M		PM		M	
Etape		C	V	C	V	C	V	C	V	C	V	C	V	C	V	C	V	C	V
TMS	LV	9	9	6	6	6	6	7	7	8	8	6	6	9	9	8	8	8	8
	R	0,87	0,79	0,90	0,89	0,71	0,55	0,77	0,53	0,88	0,79	0,91	0,86	0,72	0,66	0,77	0,74	0,93	0,85
	RMSEc	0,26	0,32	0,23	0,24	0,28	0,30	0,30	0,43	0,25	0,34	0,07	0,09	0,32	0,40	0,32	0,40	0,10	0,14
	RPD	1,73	1,45	2,08	1,84	1,00	0,97	1,20	0,88	1,84	1,41	2,24	1,90	1,04	0,89	1,23	0,83	2,54	1,70
	RPIQ	3,13	3,11	4,13	3,74	1,07	1,00	2,00	1,40	2,40	2,06	4,29	3,33	1,88	2,00	2,34	2,00	3,00	2,14
	CV	12,6	12,7	12,8	12,7	10,2	8,9	10,8	11,1	12,1	12,3	4,3	4,0	11,6	13,1	12,4	14,2	6,7	6,5
TA	LV	5	5	5	5	7	7	8	8	7	7	8	8	8	8	3	3	6	6
	R	0,51	0,49	0,61	0,58	0,84	0,57	0,92	0,76	0,97	0,94	0,98	0,84	0,79	0,69	0,73	0,62	0,92	0,88
	RMSEc	1,99	1,91	1,42	1,49	0,69	1,43	0,63	1,15	0,35	0,57	0,22	0,52	1,41	1,7	1,46	1,71	0,42	0,53
	RPD	0,59	0,61	0,77	0,71	1,51	0,87	2,34	1,47	4,46	2,67	4,78	1,46	1,3	1,08	1,06	0,83	2,28	1,77
	RPIQ	1,78	1,84	1,57	1,4	1,96	1,11	1,57	1,37	7,11	4,46	9,77	2,77	2,08	1,39	1,22	0,92	2,05	1,7
	CV	26,5	24,7	22,6	23,3	11,1	15,0	23,3	24,0	25,4	26,4	13,7	12,9	29,3	28,9	28,8	29,3	15,4	16,0

Saison: données spectrales et de référence utilisées pour la construction du modèle PLS en fonction des saisons: printemps et été. Stade: données utilisées pour la construction du modèle PLS en fonction du stade de développement des fruits: pré-maturation (PM) et maturation (M). Etape: calibration (C) et validation (V). LV: nombre de variables latentes introduit dans le modèle PLS. R: coefficient de corrélation. RMSEc: erreur quadratique du modèle PLS après correction du biais. RPD: rapport de la déviation sur la précision du modèle PLS. RPIQ: rapport de la distance interquartile sur la précision du modèle PLS. CV: coefficient de variation des valeurs de référence.

pleine maturité. La première composante factorielle décrit la variabilité principale de l'arc paramétré, fonction des dates de récolte, alors que la seconde composante factorielle décrit une variabilité secondaire liée au point d'inflexion situé vers 30 jours avant récolte. Avec le modèle utilisant les fruits d'été, la variabilité de 41 à 30 jours avant récolte est essentiellement décrite par la première composante factorielle. Au-delà, la variabilité est décrite par la seconde composante factorielle.

La majorité des longueurs d'onde impliquées dans la modélisation sont liées à des harmoniques de vibration des liaisons CH, CH₂ et CH₃ (1^{re}, 2^e ou 3^e harmonique) et à la bande d'absorption de l'eau (2^e harmonique). Les courbes représentant les corrélations des absorbances aux différentes longueurs d'ondes avec les deux premières coordonnées factorielles sont très similaires pour les modèles «printemps» et «été» (fig. 3).

Modèles quantitatifs: régression PLS

Teneur en matières solubles et acidité totale

Le tableau 1 résume les résultats des régressions PLS pour la prédiction de TMS et TA.

Les modèles ont été construits en fonction de la saison (printemps, été, printemps + été) et du stade de développement des fruits (pré-maturation PM, maturation M, PM+M).

Concernant la TMS, les calibrations ont montré des valeurs de RMSE n'excédant pas 0,32% Brix. Cette valeur a été atteinte avec le modèle regroupant les fruits des deux saisons et les différents stades de développement. Les modèles PM et M sont globalement plus précis que les modèles PM+M. La figure 4 qui exprime les valeurs de TMS réelles en fonction des valeurs de TMS prédites illustre bien le gain de linéarité des modèles PM et M par rapport au modèle PM+M.

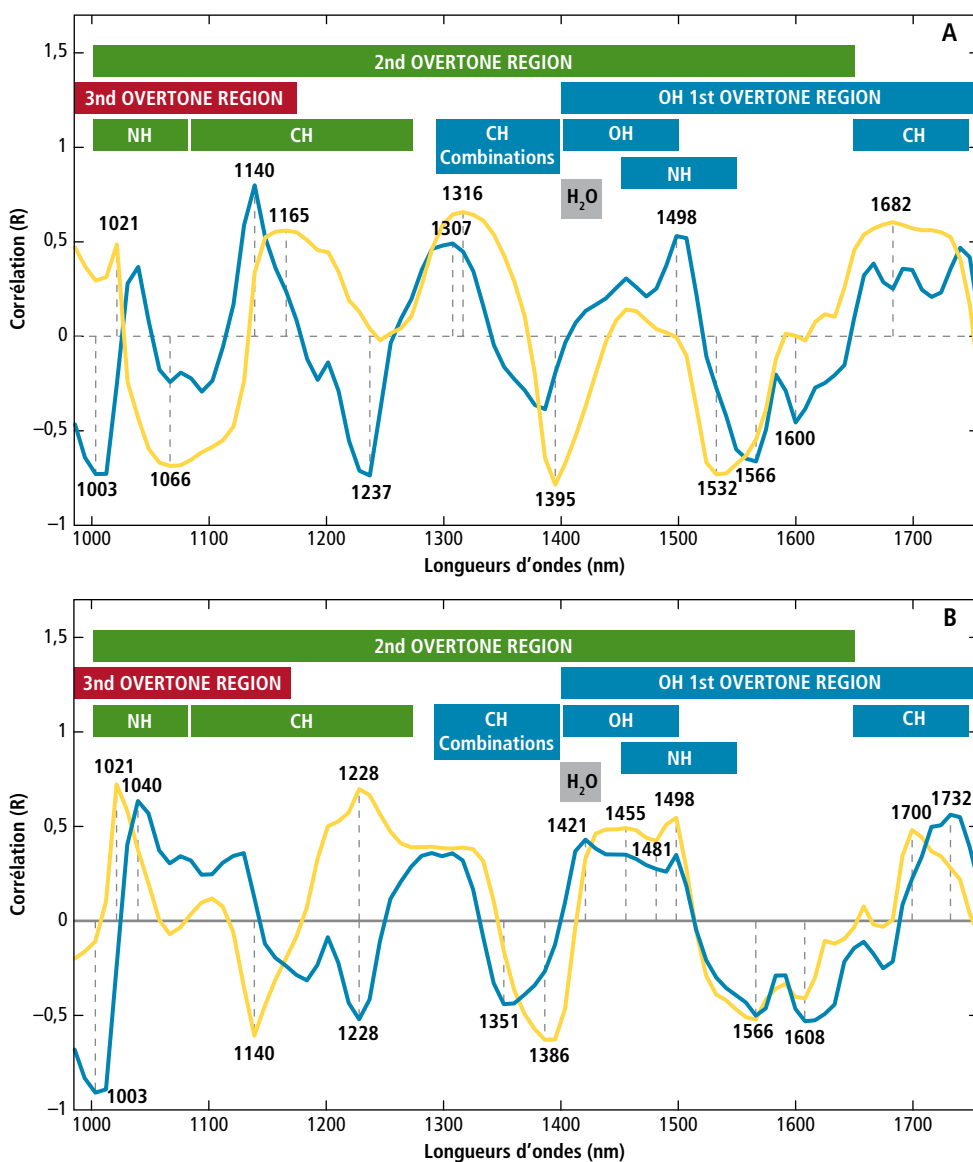


Figure 3 | Corrélation entre les deux premières coordonnées factorielles (F1: — et F2: —) de l'AFD et les données spectrales X pour le modèle de printemps (A) et d'été (B).

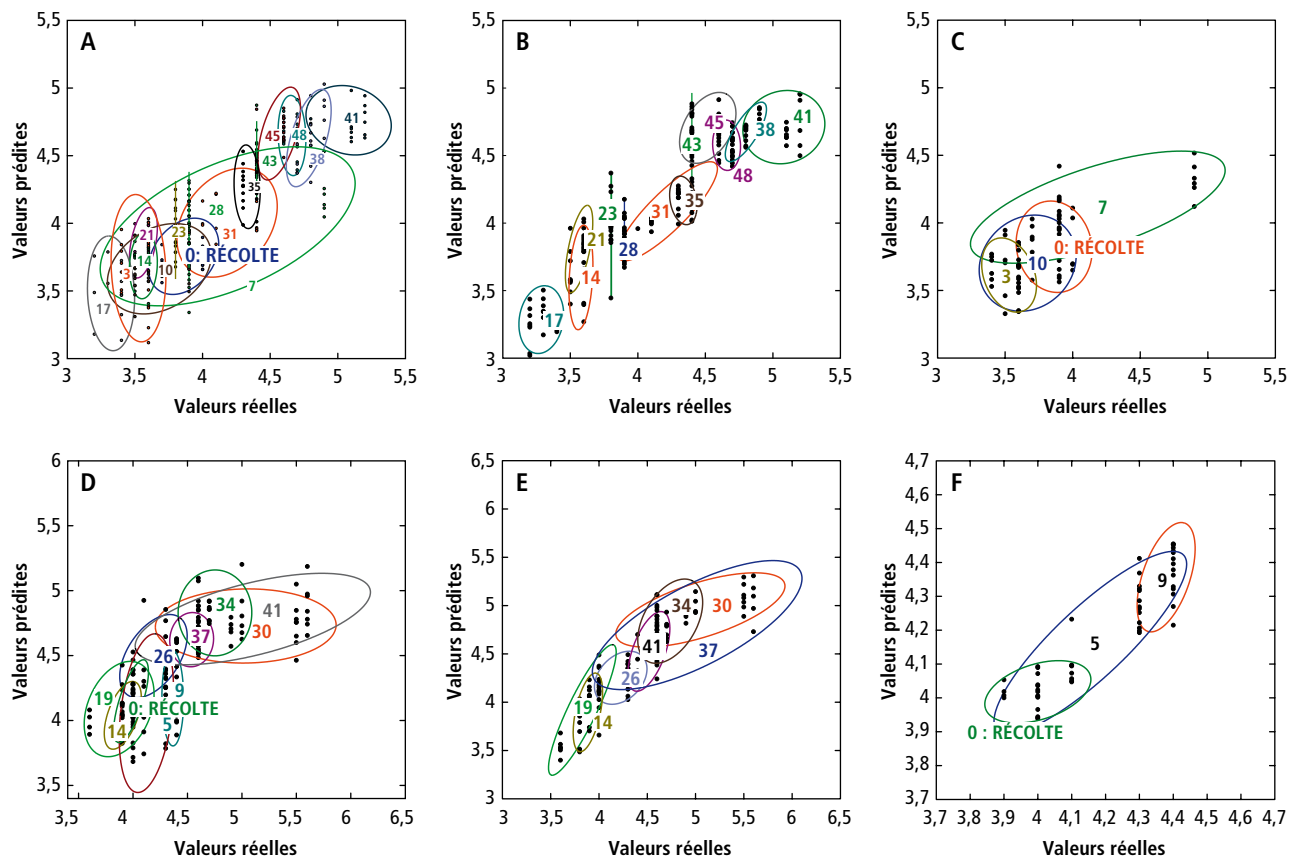


Figure 4 | Valeurs réelles et prédites de TMS. Modèles de printemps regroupant les fruits PM+M (A), PM (B) et M (C). Modèles d'été regroupant les fruits PM+M (D), PM (E) et M (F). Niveau de signification des ellipses de confiance $p = 0,05$. PM: fruits avant maturation, M: fruits en cours de maturation.

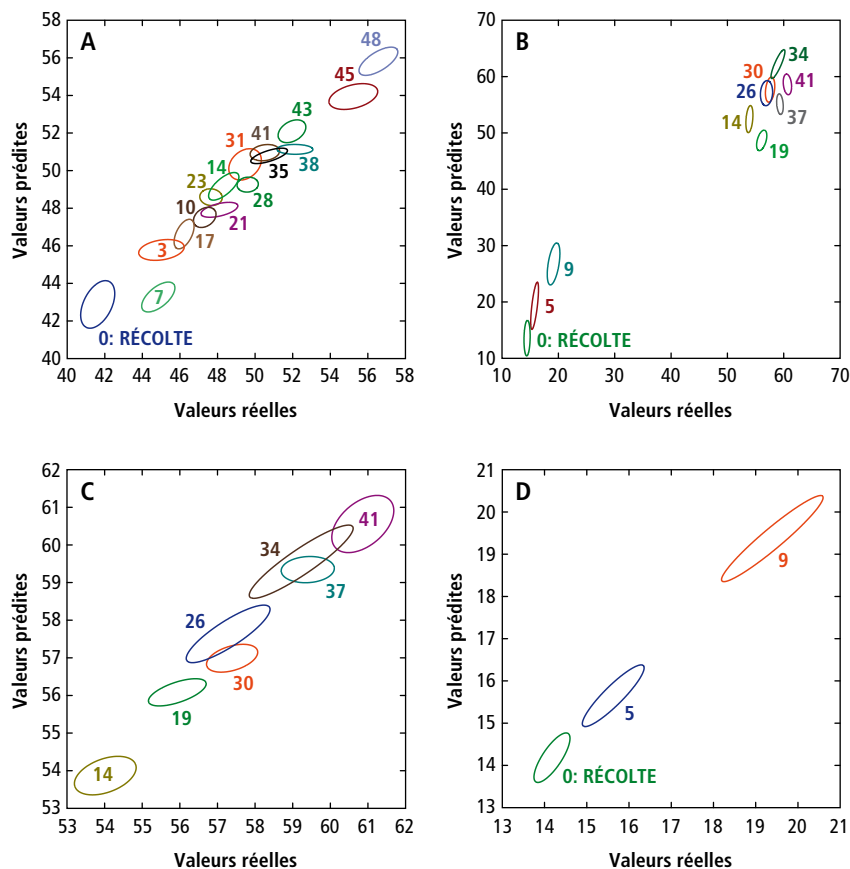


Figure 5 | Valeurs réelles et prédites de L*. Modèle de printemps (A) et d'été (B) regroupant les fruits PM+M. Modèles d'été utilisant les fruits PM (C) et M (D). Niveau de signification des ellipses des barycentres des nuages de points $p = 0,05$. PM: fruits avant maturation, M: fruits en cours de maturation.

Pour les fruits d'été, les modèles PM et M permettent d'atteindre une meilleure précision que le modèle PM+M, en particulier lors de la maturation des fruits. De manière générale, l'erreur commise sur la mesure de TMS est comprise entre 0,23 et 0,40 % Brix. Cette gamme d'erreur peut être comparée aux données publiées dans la littérature. Des travaux récents ont rapporté des valeurs de R^2 de 0,82 et de RMSE de l'ordre de 0,45 % Brix (Clement *et al.* 2008b; Flores *et al.* 2009) pour des fruits (variété Micro-Tom) avec des valeurs de TMS de 3,2 à 10 % Brix.

Les modèles de prédiction de TA des fruits PM+M sont légèrement moins précis que ceux des fruits PM ou M pris séparément. Quelle que soit la saison de développement des fruits, les modèles utilisant les fruits en cours de maturation (M) sont bons ($0,84 < R < 0,98$ et $RMSE = 0,52$ méq/100 g). Pour les fruits PM, les modèles donnent de bons résultats en été ($0,94 < R < 0,97$ et $RMSE = 0,57$ méq/100 g) mais insuffisamment précis au printemps ($0,58 < R < 0,61$ et $RMSE = 1,49$ méq/100 g).

Couleur des fruits

L^* est prédit avec une précision de 5–6 unités lors de la validation et des valeurs de RPD de 2,47 et 1,9 sont respectivement obtenues pour les modèles été et printemps + été. Concernant le modèle printemps, des valeurs de RMSE et RPD de 0,75 unité et 3,25 ont été calculées. Dans le modèle été, à maturation (M), une forte diminution de L^* (de 50 à 14 unités) a été mesurée en l'espace de quelques jours ($CV = 17,6\%$). Dans la même période de maturation, les valeurs de L^* au printemps restent stables autour de 40 unités ($CV = 5,6\%$). Cette stabilité n'offre pas la variabilité des mesures nécessaire à une bonne modélisation. La figure 5 permet de visualiser les valeurs réelles et prédites de L^* . La variabilité au printemps a fourni un continuum de valeurs permettant une bonne modélisation. Par contre, les valeurs obtenues en été forment deux lots distincts correspondant aux phases de PM et M. Il est alors important de séparer ces deux lots pour créer deux modèles afin d'éviter le piège d'un « faux bon modèle ». En effet, une

Tableau 2 | Valeurs des modèles de prédictions PLS pour les paramètres de couleur L^* , a^* et b^*

Saison		Printemps						Été						Printemps + été					
Stade		PM+M		PM		M		PM+M		PM		M		PM+M		PM		M	
Etape		C	V	C	V	C	V	C	V	C	V	C	V	C	V	C	V	C	V
L^*	LV	6	6	7	7	7	7	8	8	5	5	8	8	8	8	8	8	4	4
	R	0,88	0,89	0,89	0,79	0,92	0,66	0,93	0,91	0,88	0,81	0,96	0,75	0,84	0,82	0,94	0,93	0,97	0,97
	RMSEc	2	1,83	1,49	1,9	0,99	2,07	7,47	7,3	1,33	1,52	0,73	1,7	7,1	7,95	1,96	2,01	3,93	3,9
	RPD	1,84	1,94	2	1,4	2,27	1,23	2,47	2,36	1,9	1,45	3,78	1,36	1,55	1,41	2,67	2,68	3,99	4
	RPIQ	2,74	2,67	2,69	2,21	3,76	1,64	5,46	0,97	3,12	2,67	5,13	1,44	1,36	1,3	4,56	4,72	8,16	8,39
	CV	8,6	8,3	6,6	6,2	5,6	5,6	46,9	37,7	5,0	4,6	17,6	15,6	28,2	31,2	10,8	10,3	50,7	49,6
a^*	LV	9	9	7	7	6	6	7	7	6	6	7	7	8	8	5	5	9	9
	R	0,91	0,76	0,91	0,79	0,89	0,90	0,86	0,85	0,70	0,50	0,95	0,90	0,84	0,77	0,53	0,40	0,93	0,90
	RMSEc	3,43	4,56	0,81	1,16	4,59	4,71	6,37	6,64	0,85	0,98	1,51	2,01	5,84	7,01	0,95	0,93	4,12	5,02
	RPD	2,18	1,33	2,17	1,37	1,94	2,18	1,68	1,73	0,97	0,84	2,96	2,06	1,51	1,23	0,62	0,58	2,54	1,94
	RPIQ	0,9	0,68	3,46	2,41	3,97	4,97	3,51	3,46	1,41	1,38	2,9	2,67	1,15	0,48	1,45	1,51	5,29	4,78
	CV	–	–	–	–	–	–	–	–	–	–	–	–	–	–	–	–	–	–
b^*	LV	7	7	6	6	2	2	8	8	6	6	7	7	8	8	6	6	3	3
	R	0,88	0,84	0,89	0,86	0,48	0,17	0,94	0,86	0,67	0,52	0,92	0,87	0,80	0,74	0,69	0,58	0,84	0,77
	RMSEc	1,71	2,02	1,71	1,8	1,87	2,09	2,52	3,21	1,84	2,2	1,35	2,29	2,93	3,43	1,78	2,02	3,17	3,71
	RPD	1,82	1,56	1,94	1,56	0,55	0,36	2,65	1,57	0,91	0,83	2,26	1,84	1,34	1,19	0,94	0,84	1,54	1,32
	RPIQ	2,69	1,88	2,68	2,39	1,87	1,41	5,74	1,95	1,52	1,52	1,55	2,6	1,38	1,21	1,67	1,39	3,87	3,1
	CV	17,2	18,3	17,5	16,5	11,9	11,4	43,0	35,4	11,6	12,0	44,4	52,4	27,1	28,8	12,1	12,3	43,5	39,8

Saison: données spectrales et de référence utilisées pour la construction du modèle PLS en fonction des saisons: printemps et été. Stade: données utilisées pour la construction du modèle PLS en fonction du stade de développement des fruits: pré-maturation (PM) et maturation (M). Etape: calibration (C) et validation (V). LV: nombre de variables latentes introduit dans le modèle PLS. R: coefficient de corrélation. RMSEc: erreur quadratique du modèle PLS après correction du biais. RPD: rapport de la déviation sur la précision du modèle PLS. RPIQ: rapport de la distance interquartile sur la précision du modèle PLS. CV: coefficient de variation des valeurs de référence.

forte valeur de R peut être obtenue dans une régression linéaire mettant en jeu deux lots de données fortement éloignés. Les modèles séparément construits pour les fruits des phases PM et M (fig. 5C,D) améliorent le continuum recherché des valeurs à prédire.

Le paramètre de couleur a^* évolue essentiellement durant la phase de maturation (M), quelle que soit la saison. Avant cette phase, les valeurs sont relativement constantes. La modélisation de la prédiction de a^* est relativement précise pour les modèles utilisant les fruits de la phase M. Les valeurs de RMSE oscillent entre 2 et 5 unités.

Au printemps, la diminution du paramètre b^* survient dans la phase PM alors qu'elle ne se produit que dans la phase M en été. Pour l'été, la modélisation de la prédiction de b^* est correcte avec des valeurs respectives de R de 0,92 et 0,87 pour la calibration et la validation. Au printemps, la modélisation de b^* dans la phase PM est aussi correcte avec des valeurs de R de 0,89 et 0,86. Le modèle printemps + été est moins précis.

Bibliographie

- Baranska M., Schütze W. & Schulz H., 2006. Determination of lycopene and beta-carotene content in tomato fruits and related products: Comparison of FT-Raman, ATR-IR, and NIR spectroscopy. *Analytical Chemistry* **78** (24), 8456–8461.
- Barnes R. J., Dhanoa M. S. & Lister S. J., 1989. Standard normal variate transformation and de-trending of near-infrared diffuse reflectance spectra. *Applied Spectroscopy* **43** (5), 772–777.
- Beckles D. M., Hong N., Stamova L. & Luengwilai K., 2012. Biochemical factors contributing to tomato fruit sugar content: a review. *Fruits* **67** (1), 49–64.
- Bellon-Maurel V., Fernandez-Ahumada E., Palagos B., Roger J. M. & McBratney A., 2010. Critical review of chemometric indicators commonly used for assessing the quality of the prediction of soil attributes by NIR spectroscopy. *Trac-Trends in analytical Chemistry* **29** (9), 1073–1081.
- Bellon Maurel V., Crochon M. & Roger J. M., 2002. GLOVE: an instrumented glove to non destructively and rapidly assess fruit quality. In: Fruit Nut and Vegetable Production Engineering 6th International Symposium. Potsdam, DEU.
- Bertrand D., Courcoux P., Autran J. C., Meritan R. & Robert P., 1990. Stepwise canonical discriminant-analysis of continuous digitized signals – application to chromatograms of wheat proteins. *Journal of Chemometrics* **4** (6), 413–427.
- Camps C. & Christen D., 2009. Non-destructive assessment of apricot fruit quality by portable visible-near infrared spectroscopy. *LWT – Food Science and Technology* **42** (6), 1125–1131.
- Camps C., Simone C. & Gilli C., 2012. Assessment of tomato quality using portable NIR spectroscopy and PLSR with wavelengths selection. *Acta Horticulturae* **936**, 437–442.
- Camps C., Toussiroit M., Quennoz M. & Simonnet X., 2011. Determination of artemisinin and moisture content of *Artemisia annua* L. dry powder using a hand-held near infrared spectroscopy device. *Journal of near Infrared Spectroscopy* **19** (3), 191–198.
- Centeno D. C., Osorio S., Nunes-Nesi A., Bertolo A. L. F., Carneiro R. T., Araujo W. L., Steinhauser M. C., Michalska J., Rohrmann J., Geigenberger P., Oliver S. N., Stitt M., Carrari F., Rose J. K. C. & Fernie A. R., 2011. Malate Plays a Crucial Role in Starch Metabolism, Ripening, and Soluble Solid Content of Tomato Fruit and Affects Postharvest Softening. *Plant Cell* **23** (1), 162–184.
- Clement A., Dorais M. & Vernon M., 2008a. Multivariate approach to the measurement of tomato maturity and gustatory attributes and their rapid assessment by Vis-NIR Spectroscopy. *Journal of agricultural and Food Chemistry* **56** (5), 1538–1544.
- Clement A., Dorais M. & Vernon M., 2008b. Nondestructive Measurement of Fresh Tomato Lycopene Content and Other Physicochemical Characteristics Using Visible-NIR Spectroscopy. *Journal of agricultural and Food Chemistry* **56** (21), 9813–9818.
- De Nardo T., Shiroma-Kian C., Halim Y., Francis D. & Rodriguez-Saona L. E., 2009. Rapid and Simultaneous Determination of Lycopene and beta-Carotene Contents in Tomato Juice by Infrared Spectroscopy. *Journal of agricultural and Food Chemistry* **57** (4), 1105–1112.
- Delwiche S. R., Mekwatanakarn W. & Wang C. Y., 2008. Soluble solids and simple sugars measurement in intact mango using near infrared spectroscopy. *Horttechnology* **18** (3), 410–416.
- Ecartot M., Baczyk P., Tessarotto L. & Chervin C., 2013. Rapid phenotyping of the tomato fruit model, Micro-Tom, with a portable VIS-NIR spectrometer. *Plant Physiol. Biochem.* **70**, 159–163.
- Flores K., Sanchez M. T., Perez-Marin D., Guerrero J. E. & Garrido-Varo A., 2009. Feasibility in NIRS instruments for predicting internal quality in intact tomato. *Journal of Food Engineering* **91** (2), 311–318.
- Giovannoni J. J., 2004. Genetic regulation of fruit development and ripening. *Plant Cell* **16**, S170–S180.
- Kusumiyati A., Akinaga T., Tanaka M. & Kawasaki S., 2008. On-tree and after-harvesting evaluation of firmness, color and lycopene content of tomato fruit using portable NIR spectroscopy. *Journal of Food Agriculture & Environment* **6** (2), 327–332.

Conclusions

- Le développement d'un outil de mesure non destructif de la qualité est utile pour détecter au plus vite dans la saison une incidence potentielle de l'environnement ou des conduites culturales sur la qualité organoleptique des tomates.
- De plus, la grande variabilité qualitative des lots de fruits demande de multiplier les mesures afin d'obtenir des résultats robustes et fiables. Cette multiplication des mesures est consommatrice de temps et de main-d'œuvre. La spectroscopie proche infrarouge pourrait réduire ces contraintes.
- La spectroscopie proche infrarouge portable semble prometteuse pour le suivi global du développement physiologique des fruits.
- La prédiction quantitative de la teneur en matières solubles (sucres) est possible tandis que celle de l'acidité totale est moins fiable.
- La prédiction des paramètres de couleur est particulièrement précise pour les phases de développement où les fruits changent de couleur. ■

Summary

Monitoring of tomato quality by hand-held NIR spectroscopy and chemometric

The objective of the present study was to evaluate the use of hand-held near infrared spectroscopy to monitor the quality of tomatoes grown in greenhouse. The soluble solids content (TMS), total acidity (TA) and color settings were followed from fruit set until harvest at full maturity. This monitoring was conducted during the Spring and Summer. The spectral data and quality have been used to construct chemometric models in order to (1) monitor the fruit according to their stage of development and (2) predict fruit quality. The discriminant models have traced the chronological evolution of fruit and mark the entry in the maturation stage. Quantitative models (PLS) were used to predict the TMS, TA and fruit color considering the season and the fruit maturity stage.

Key words: NIR spectroscopy, quality, tomato, FDA, PLS.

Zusammenfassung

Überwachung der Qualität von Tomaten im Gewächshaus mittels mobiler NIR-Spektroskopie und Chemometrie

Ziel dieser Studie war es, die Verwendung von Spektroskopie im infrarotnahen Bereich für die Qualitätsentwicklung von Tomaten im Gewächshaus zu beurteilen. Der Gehalt an löslichem Material (TMS) und an Gesamtsäure (TA) sowie die Farbparameter wurden ab Fruchtansatz bis zur Ernte bei voller Reife verfolgt. Diese Beobachtung ist während des Frühlings und des Sommers durchgeführt worden. Diese spektralen Werte und die Qualitätsdaten sind dazu benutzt worden, chemometrische Modelle aufzustellen, um (1) die Entwicklung der Früchte in Abhängigkeit ihres Reifestadiums zu beobachten und, um (2) die Qualität der Früchte voraussagen. Durch eine Diskriminanzanalyse der Modelle konnte die chronologische Entwicklung der Früchte ausgewertet werden und die Früchte konnten bei Beginn der Reifephase gekennzeichnet werden. Quantitative Modelle (PLS) ermöglichten es, TMS, TA und Farbe der Früchte voraussagen, die Präzision dieser Voraussagen ist abhängig von der Saison und dem Reifestadium der Früchte.

Riassunto

Monitoraggio della qualità dei pomodori in serra mediante portatile spettroscopia NIR e chemiometria

Lo scopo di questo studio era di valutare l'uso di un sistema portatile di spettroscopia nel vicino infrarosso (NIR) per monitorare la qualità dei pomodori in serra. Il tenore in materia solubile (TMS), l'acidità totale (AT) come pure i parametri della colorazione sono stati monitorati dall'allegazione dei frutti fino al raccolto a piena maturazione. Questo monitoraggio è stato effettuato durante la primavera e l'estate. I dati ottenuti dalla spettroscopia e dalla qualità sono stati utilizzati in modo da costruire dei modelli chemiometrici miranti a (1) seguire l'evoluzione dei frutti in funzione del loro stadio di sviluppo e per (2) predire la qualità dei frutti. I modelli discriminanti hanno permesso di rintracciare l'evoluzione cronologica dei frutti e di marcare l'entrata nella fase di maturazione. I modelli quantitativi (PLS) hanno permesso di predire la TMS, l'AT e la colorazione dei frutti con delle precisioni dipendenti dalla stagione e dallo stadio di maturità dei frutti.

- Luengwilai K. & Beckles D. M., 2009. Starch Granules in Tomato Fruit Show a Complex Pattern of Degradation. *Journal of agricultural and Food Chemistry* 57 (18), 8480–8487.
- Moons E. & Sinnaeve G., 2000. Non destructive Vis and NIR spectroscopy measurement for the determination of apple internal quality. *Acta Hort.* 517, 441–448.
- Pedro A. M. K. & Ferreira M. M. C., 2007. Simultaneously calibrating solids, sugars and acidity of tomato products using PLS2 and NIR spectroscopy. *Analytica chimica Acta* 595 (1-2), 221–227.
- Petreikov M., Yeselson L., Shen S., Levin I., Schaffer A. A., Efrati A. & Bar M., 2009. Carbohydrate Balance and Accumulation during Development of Near-isogenic Tomato Lines Differing in the AGPase-L1 Allele. *Journal of the American Society for horticultural Science* 134 (1), 134–140.
- Roger J. M., Palagos B., Bertrand D. & Fernandez-Ahumada E., 2011. CovSel: Variable selection for highly multivariate and multi-response calibration: Application to IR spectroscopy. *Chemometrics and intelligent Laboratory Systems* 106, 216–223.
- Saranwong S., Sornsrivichai J. & Kawano S., 2003. On-tree evaluation of harvesting quality of mango fruit using a hand-held NIR instrument. *Journal of near Infrared Spectroscopy* 11 (4), 283–293.
- Williams P. & Sobering D., 1993. Comparison of commercial near infrared transmittance and reflectance instruments for analysis of whole grains and seeds. *Journal of near Infrared Spectroscopy* 1 (1), 25–32.