

Utilisation de la spectroscopie FT-NIR pour prédire l'élasticité superficielle et globale de la tomate lors de l'évolution en shelf-life

Cédric CAMPS et Céline GILLI, Agroscope, 1964 Conthey, Suisse

Renseignements: e-mail: cedric.camps@agroscope.admin.ch, tél. +41 58 481 35 30, www.agroscope.ch



Introduction

L'étude des pratiques culturales sur la qualité des tomates nécessite des centaines d'analyses. Celles-ci sont consommatrices de temps de main-d'œuvre et détruisent les échantillons. Le développement d'une méthode d'analyse non destructive s'avère donc nécessaire.

La spectroscopie proche infrarouge est largement utilisée pour développer des modèles de prédiction de la qualité de diverses espèces de fruits (Camps et Christen 2009a, 2009b; Camps *et al.* 2007; Christen *et al.* 2012) et de la tomate en particulier (Baranska *et al.*

2006; Clement *et al.* 2008a, 2008b; De Nardo *et al.* 2009; Flores *et al.* 2009; Kusumiyati *et al.* 2008; Pedro et Ferreira 2005, 2007).

Récemment, Ecartot *et al.* (2013) ont démontré la faisabilité de prédire la qualité des tomates de la variété Micro-Tom dans le cadre d'une étude de phénotypage. Dans cette étude, des paramètres tels que la teneur en matières solubles (SSC), l'acidité (TA) ou encore la fermeté ont été prédits avec un certain succès.

L'analyse de la texture des fruits fournit des données très intéressantes pour les attentes des consommateurs ou pour la capacité d'un fruit à être stocké et

transporté. Des études, notamment sur pommes, ont identifié des paramètres de texture issus de mesures de pénétrométrie ou de compression uniaxiale (Camps *et al.* 2005; Jourjon *et al.* 2007; Mehinagic *et al.* 2003; Mehinagic *et al.* 2004). L'approche suivie dans ce travail vise à extraire de ces méthodes de mesure de la texture les paramètres relatifs à l'élasticité des fruits, au niveau superficiel et global. Ces paramètres ont été suivis sur des tomates exposées à température ambiante durant une puis deux semaines afin de simuler leur évolution dans le commerce et chez les consommateurs. Enfin, des modèles de prédiction de ces paramètres par spectroscopie proche infrarouge à transformée de Fourier ont été établis et leur pertinence est discutée.

Matériel et méthodes

Fruits

Pour cette expérimentation, des tomates de la variété grappe Endeavour issues d'une culture hors-sol ont été choisies dans les serres du centre de recherche d'Agroscope à Conthey en 2014. Afin d'optimiser la variabilité de la texture, 90 fruits ont été analysés au travers d'une expérience d'entreposage dite en «shelf-life». Les fruits ont ainsi été divisés en trois lots de 30, le premier étant analysé le jour de la récolte et les deux suivants après respectivement sept et quatorze jours d'entreposage à température ambiante.

Analyse des propriétés physiques de la texture

L'analyse des propriétés physiques relatives à l'élasticité des tomates a été réalisée en deux étapes. Un test de pénétrométrie a d'abord été effectué afin de mesurer l'élasticité de surface (ou locale) des fruits. Dans un deuxième temps, l'élasticité globale du fruit a été mesurée par un test de compression uniaxiale.

Analyse par pénétrométrie

La mesure a été réalisée à l'aide d'un texturomètre de type QTS25 (texture analyser, Brookfield, Royaume-Uni) portant une sonde métallique cylindrique, d'un diamètre de 1 mm. La mesure a consisté à faire pénétrer cette sonde à une vitesse de 10 mm/s dans le fruit jusqu'à une profondeur de 10 mm. A la suite de ce test, une courbe numérisée des forces en fonction de la distance parcourue par la sonde est récupérée et analysée. Cette courbe forme une matrice $\mathbf{P}_{n,2}$ de n lignes (nombre de mesures) et deux colonnes, la première contenant les valeurs de déplacement de la sonde et la seconde les valeurs de forces mesurées pour chaque pas de distance considéré (Camps *et al.* 2005). De cette courbe numérisée, la valeur du module d'élasticité ex-

Résumé

La texture des fruits est un critère de qualité encore peu exploité dans la chaîne d'approvisionnement, malgré l'importance qu'il revêt dans la description sensorielle par les consommateurs. L'élasticité du fruit, une des composantes de la texture, est aussi pertinente pour déterminer la capacité d'un fruit à supporter un itinéraire post-récolte incluant des manipulations par les opérateurs, le transport et des durées d'exposition variables sur les étals du commerce et chez les consommateurs *in fine*. Mesurer l'élasticité d'un fruit est invasif et parfois destructif. Dans la présente étude, des modèles de prédiction utilisant la mesure par spectroscopie proche infrarouge à transformée de Fourier ont été développés pour évaluer la faisabilité de cette mesure sans porter atteinte aux propriétés physiques et chimiques du fruit. Les modèles établis sont prometteurs, avec des valeurs de R^2 comprises entre 0,75 et 0,88 ainsi que des erreurs relatives de prédiction inférieures ou égales à 11 %. Deux modèles sur trois ont pu être validés du point de vue statistique (ISO 12099) sur la base de l'évaluation du biais, de la pente et de l'erreur aléatoire de prédiction (SEP).

périmental (E_p) et celle relative au déplacement de la sonde jusqu'à rupture de l'épiderme du fruit (D_p) ont été extraites. Cette analyse des courbes de force/déplacement a été réalisée avec le logiciel Matlab R2013a.

Analyse par compression uniaxiale

Un test de compression uniaxiale comprenant un seul cycle de charge et de décharge a été réalisé sur les fruits entiers. Pour ce test, l'analyseur de texture précédemment décrit a été utilisé (QTS25) mais avec une sonde de forme cylindrique, plate et d'un diamètre de 50 mm. La mesure a consisté à comprimer le fruit à hauteur de 5 % de son calibre. Cette courbe numérisée forme une matrice $\mathbf{C}_{n,2}$ de n lignes (nombre de mesures) et deux colonnes, la première contenant les valeurs de déplacement de la sonde et la seconde les valeurs de forces mesurées pour chaque pas de distance considéré. De cette courbe numérisée, la valeur du module d'élasticité expérimental (E_c) a été extraite (Camps *et al.* 2005). Cette analyse des courbes de force/déplacement a été réalisée avec le logiciel Matlab R2013a.



Analyse des données de texture

Les paramètres extraits des courbes numérisées de pé-nétrométrie et de compression ont été analysés par ANOVA et les valeurs moyennes de chaque modalité comparées à l'aide d'un test HSD à un niveau de signification de 5%. Avant l'analyse de variance, la distribution des valeurs a été examinée afin de s'assurer de la normalité ou quasi-normalité des distributions. Trois

tests ont servi à vérifier la distribution des données: Shapiro-Wilk, Anderson-Darling et Lilliefors. Toutes ces analyses ont été effectuées avec le logiciel Matlab R2013a.

Spectroscopie FT-NIR

Les spectres de tomates ont été acquis en mode réflexion diffuse à l'aide d'un spectromètre proche infrarouge à transformée de Fourier (FT-NIR, MPA, Bruker). Les

Tableau 1 | Paramètres calculés pour l'évaluation des modèles de prédiction PLS

Paramètre calculé	Formule algébrique	Annotations des formules algébriques
Coefficient de détermination	$Q^2 \text{ or } R^2 = R_{cv}^2 = 1 - \frac{PRESS}{TSS}$	$PRESS = \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2$ $TSS = \sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2$
Ratio de la déviation sur la performance	$RPD = \frac{SD}{SECV \text{ or } RMSECV}$	Avec SD la déviation standard: $SD = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2}{n-1}} = \sqrt{\frac{TSS}{n-1}}$
Ratio de la distance interquartile sur la performance	$RPIQ = \frac{(Q_3 - Q_1)}{SECV \text{ or } RMSECV}$	Q_1 et Q_3 : valeurs des premier et troisième quartiles des valeurs de référence
Résidus	$e_i = y_i - \hat{y}_i$	y_i est la i^e valeur de référence \hat{y}_i est la i^e valeur prédite
Biais	$\bar{e} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n e_i$	e_i : résidu
Limites de confiance du biais (Le calcul des limites de confiance du biais déterminent l'acceptation ou le rejet des performances des équations sur l'échantillon de validation).	$T_b = \frac{\pm t_{(1-\alpha/2)*SEP}}{\sqrt{n}}$	α : probabilité d'erreur de type I t : valeur de Student appropriée pour un test bilatéral avec des degrés de liberté associés à la SEP et la probabilité choisie d'une erreur de type I n : nombre d'échantillons indépendants SEP: erreur type de prédiction
Erreur quadratique (RMSE)	$RMSEP = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n e_i^2}{n}}$ $RMSEP = \sqrt{\frac{(n-1)}{n} * SEP^2 + \bar{e}^2}$	Cette valeur peut être comparée à SEC et/ou SECV. Elle comprend l'erreur aléatoire (SEP) et l'erreur systématique (biais). Elle comprend également l'erreur des méthodes de référence (tout comme SEC et SECV).
Erreur type de prédiction (SEP)	$SEP = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (e_i - \bar{e})^2}{n-1}}$	La SEP peut être reliée à la SEC et/ou la SECV pour vérifier la validité du modèle d'étalonnage pour l'ensemble de validation choisi.
Limites de confiance d'erreur inexpliquée (SEP)	$T_{UE} = SEC * \sqrt{F(\alpha, \vartheta, M)}$	$\vartheta = n - 1$: degrés de liberté du numérateur associé à SEP de l'ensemble de validation $M = n_c - p - 1$: degrés de liberté du dénominateur associé à SEC n_c : nombre d'échantillons de l'étalonnage p : le nombre de termes (dimensions) du modèle de prédiction PLS
Pente (b)	$y = a + b\hat{y}$ $b = \frac{S_{\hat{y}y}}{S_{\hat{y}}^2}$	$S_{\hat{y}y}$: covariance entre les valeurs de référence et les valeurs prédites $S_{\hat{y}}^2$: variance des n valeurs prédites
Evaluation de la pente	$t_{obs} = b - 1 \sqrt{\frac{S_{\hat{y}}^2(n-1)}{S_{res}^2}}$	La pente est considérée comme $\neq 1$ lorsque $t_{obs} \geq t^{(1-\alpha/2)}$ S_{res} : écart type résiduel $S_{res} = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (y_i - a - b\hat{y}_i)^2}{n-2}}$
Ordonnée à l'origine (a)	$a = \bar{y} - b\bar{\hat{y}}$	$\bar{\hat{y}}$: moyenne des valeurs prédites \bar{y} : moyenne des valeurs de référence b : pente

spectres sont des moyennes de 32 scans enregistrés à une résolution de 8 nm de 12000 cm⁻¹ jusqu'à 4000 cm⁻¹. Une collection de 180 spectres (deux spectres par fruit) a été constituée. Afin de minimiser les effets incontrôlés d'intensités et les problèmes liés à la ligne de base, les spectres ont subi des prétraitements tels que SNV, dérivées 1^{re} ou 2^e, MSC, etc. (Barnes *et al.* 1989; Moons et Sinnaeve 2000).

Modèles quantitatifs

Les spectres ont été compilés dans une matrice $X_{n,p}$ dans laquelle n est le nombre de spectres ($n = 180$) et p le nombre de pas de nombre d'ondes ($p = 3000$). Les valeurs de références de texture (E_p , D_p et E_c) sont quant à elles compilées dans des vecteurs colonnes $y_{n,1}$. Les modèles sont élaborés en trois étapes: 1) la détermination du nombre optimal de variables latentes (LV) à introduire dans le modèle, 2) l'étalonnage du modèle et 3) sa validation par un jeu de spectres test.

La première étape s'appuie sur deux méthodes. Premièrement, il s'agit de trouver le nombre de LV pour lequel la valeur de coefficient de détermination est maximale et la valeur de l'erreur quadratique minimale. Cette étape utilise une procédure classique dite de «leave-one-out». Deuxièmement, une méthode visant à analyser la covariance de la matrice X et des vecteurs y est appliquée (Roger *et al.* 2011). Pour l'étape 3, environ 10 % des échantillons ont été placés dans un jeu test de manière aléatoire.

Evaluation des modèles de prédiction

La précision et l'évaluation des paramètres des modèles doivent être examinées d'après des indicateurs calculés. Ces paramètres sont regroupés dans le tableau 1.

La précision est d'abord évaluée par les paramètres mettant en lumière la linéarité du modèle et sa pré-

sion: le coefficient de détermination (R^2), l'erreur quadratique ($RMSEC/P$), l'erreur standard de prédiction (SEP), le biais ($e\bar{}$) ou encore la pente (b). Le biais correspond à l'erreur systématique du modèle alors que SEP correspond à l'erreur aléatoire. $RMSEC/P$ regroupe les deux types d'erreurs (tabl. 1).

L'évaluation du modèle est possible par le calcul de deux paramètres qui permettent de comparer la variabilité du jeu de données de référence analysé à l'erreur du modèle. Ces paramètres sont notés RPD et RPIQ (tabl. 1; Bellon-Maurel *et al.* 2010). RPD est pertinent si la distribution des données est normale, tandis que RPIQ permet l'analyse des données de référence qui s'écartent de la normalité.

Enfin, il est possible de calculer les limites de confiance du biais ($e\bar{}$), de SEP et de la pente (b) (tabl. 1). Toutes les analyses de données ont été effectuées avec les logiciels Matlab R2013a et OPUS (Bruker).

Résultats et discussion

Analyse de la texture des fruits

La distribution des données de texture (E_p , D_p et E_c) a été testée du point de vue de la loi normale (tabl. 2). Les valeurs p des différents tests indiquent une distribution parfaitement «normale» pour D_p et proche de la normale pour les deux autres paramètres. La figure 1 illustre les distributions empiriques et normales des données de texture.

Tableau 2 | Valeur «p» des tests de normalité

	Shapiro-Wilk	Anderson-Darling	Lillefors
E_p	2,87 10 ⁻⁴	5,0 10 ⁻⁴	1,0 10 ⁻³
D_p	0,287	0,485	0,382
E_c	8,64 10 ⁻⁶	5,0 10 ⁻⁴	1,0 10 ⁻³

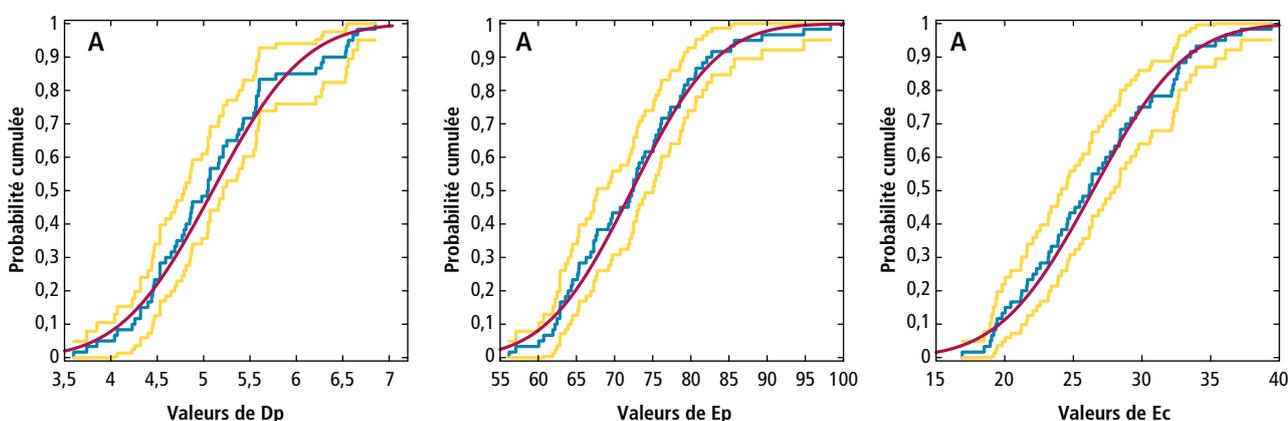


Figure 1 | Distribution des valeurs de texture. « D_p » (A), « E_p » (B) et « E_c » (C). Distribution normale théorique (—) et empirique (—). Les lignes jaunes indiquent l'intervalle de confiance à 5%.

Au cours de l'exposition à température ambiante (shelf-life), les propriétés de texture relatives à l'élasticité des fruits ont varié significativement (tabl. 3). L'élasticité de surface du fruit a diminué de 24 % après sept jours et de 34 % après quatorze jours. De même, l'élasticité globale a diminué de 28 % et de plus de 40 % après les mêmes intervalles à température ambiante. Le paramètre D_p , lié à l'élasticité de surface, a uniquement augmenté au cours des sept premiers jours de shelf-life (+29 %).

E_p (le module d'élasticité expérimental ou module de Young) et D_p (la déformation à la rupture de l'épiderme du fruit) ne sont donc pas corrélés durant l'évolution de la texture en shelf-life. Par conséquent, ils pourraient apporter des informations complémentaires sur l'évolution physiologique et/ou physique de la texture du fruit. Des travaux sur pommes ont déjà établi cette complémentarité (Camps *et al.* 2005). Cette absence de corrélation fait des paramètres d'élasticité de bons candidats pour la construction de modèles basés sur les données spectrales mesurées par FT-NIR.

Tableau 3 | Moyennes des valeurs de texture lors de l'exposition en «shelf-life»

Paramètres de texture	A la récolte	Après 7 jours de shelf-life	Après 14 jours de shelf-life	Valeur de p
E_p (surface)	224,4A	170,3B	147,6C	$7,4 \cdot 10^{-16}$
D_p (surface)	2,4a	3,1b	3,1b	$5,4^{10-7}$
E_c (global)	98,1*	71,1**	58,5***	$1,3 \cdot 10^{-21}$

Elaboration des modèles FT-NIR

Les modèles établis fournissent de bonnes précisions pour les trois paramètres D_p , E_p et E_c . Lors de la validation, la bonne linéarité des modèles est confirmée par les valeurs de R^2 , respectivement 0,78, 0,78 et 0,88 pour D_p , E_c et E_p (tabl. 4). En termes d'erreur relative (Rel_SEP), les paramètres sont estimés avec une précision de l'ordre de 10 à 11 %. Les valeurs de RPD et RPIQ, entre 1,66 et 3,18, sont prometteuses. Concernant ces deux

Tableau 4 | Valeurs des modèles PLS pour les paramètres D_p , E_p , E_c mesurés sur les fruits laissés à température ambiante

	E_p		D_p		E_c	
	CV	VAL	CV	VAL	CV	VAL
Ecart-type	30,76	34,76	0,52	0,50	18,96	17,79
Moyenne	176,30	190,51	2,84	2,81	75,72	76,42
Biais	-2,26E-03	5,88E+00	1,32E-05	1,72E-01	7,04E-04	2,88E+00
RMSEV	21,14	21,08	0,18	0,34	6,84	8,12
SEP	21,21	20,95	0,18	0,31	6,86	7,87
LV	7	7	11	11	8	8
Covariance	946,53	1233,51	0,27	0,28	359,49	349,64
Variance	952,80	1294,79	0,28	0,27	361,71	340,88
R^2	0,68	0,75	0,90	0,78	0,88	0,88
Rel_RMSEV	0,12	0,11	0,06	0,12	0,09	0,11
Rel_SEP	0,12	0,11	0,06	0,11	0,09	0,10
RPD	1,45	1,66	2,94	1,64	2,76	2,26
RER	7,99	6,44	15,38	8,53	14,67	10,53
RPIQ	2,54	2,74	4,72	1,62	3,68	3,18
Tb	3,421	11,531	0,029	0,168	1,065	4,513
Tb x SEP	72,553	241,595	0,005	0,052	7,306	35,532
F(α , ν , M):	1,310	1,759	1,308	1,758	1,297	1,781
TUE :	24,276	28,123	0,204	0,236	7,815	9,159
Pente	0,993	0,953	0,993	1,030	0,994	1,026
t	1,976	2,131	1,976	2,131	1,975	2,145
tOBS	0,007	0,016	0,008	0,011	0,010	0,009
Ord. Orig.	1,159	14,894	0,019	0,088	0,464	0,918
Evaluation de:						
Biais		OK		NO		OK
Pente		OK		OK		OK
SEP		OK		NO		OK



Prise de mesure au spectromètre NIR sur tomates.

derniers paramètres, des valeurs encore légèrement trop faibles ($RPD < 2$) sont notées pour les prédictions de D_p et E_p ($RPD \sim 1,6$). Afin de renforcer ces modèles, il serait souhaitable d'ajouter des mesures de texture effectuées sur des fruits dont les propriétés d'élasticité sont significativement différentes. Pour cela, de nouvelles conditions post-récolte des mêmes variétés de tomate ou l'ajout de nouvelles variétés pourraient

constituer des pistes intéressantes. La figure 2 illustre l'expression des résidus sur les valeurs prédites afin de s'assurer de l'absence de données aberrantes (outlayers). Quel que soit le modèle de prédiction (D_p , E_p ou E_c), aucune valeur de texture ne dépasse les seuils limites positifs ou négatifs à 99 % ($\pm 3\sigma$) ou 95 % ($\pm 2\sigma$). Il n'est donc pas nécessaire d'éliminer des données des jeux de validation.

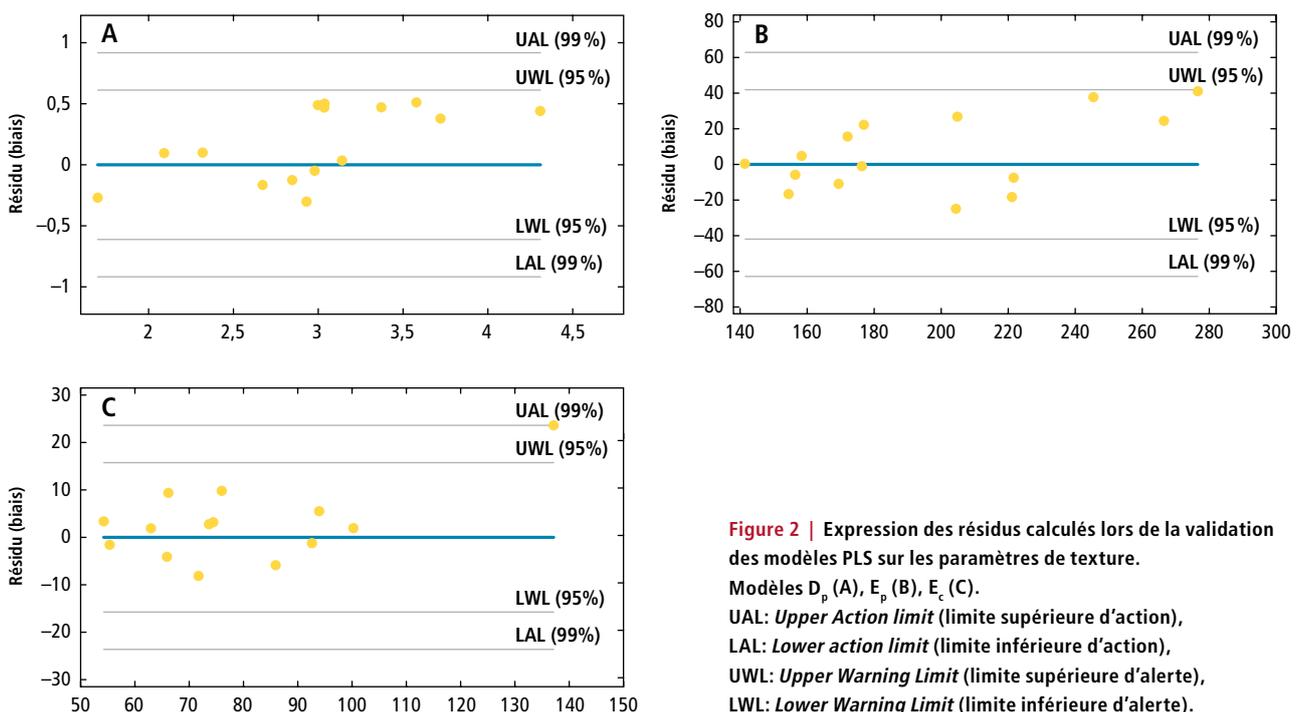


Figure 2 | Expression des résidus calculés lors de la validation des modèles PLS sur les paramètres de texture.

Modèles D_p (A), E_p (B), E_c (C).

UAL: Upper Action limit (limite supérieure d'action),

LAL: Lower action limit (limite inférieure d'action),

UWL: Upper Warning Limit (limite supérieure d'alerte),

LWL: Lower Warning Limit (limite inférieure d'alerte).

L'évaluation des paramètres de biais (erreur systématique), de pente ou encore d'erreur de prédiction (SEP) permet d'évaluer la robustesse des modèles (tabl.4). Concernant la prédiction d' E_p et E_c , les tests statistiques utilisés ont donné des réponses positives pour les trois paramètres. Les biais calculés ne sont pas significativement différents de 0, la pente n'est pas significativement différente de 1 et la SEP est statistiquement acceptable pour un échantillon de validation de $n = 15$ individus. Concernant la prédiction de D_p , l'erreur aléatoire mesurée (SEP) est acceptable pour un jeu de validation de quinze individus. En revanche, la valeur du biais (0,172) étant supérieure à celle de $T_b \times SEP$ (0,052), nous devons considérer que celle-ci est différente de 0 et donc encore inacceptable au stade de développement actuel du modèle. De même, la limite d'acceptation de la SEP (erreur de prédiction) est de 0,236 mm. La SEP calculée étant de 0,31 mm, même si ces deux valeurs sont relativement proches, il n'est statistiquement pas possible de valider l'acceptabilité de la SEP pour le modèle de prédiction D_p .

Conclusions

- La présente étude visait à évaluer la possibilité de prédire certaines valeurs de texture par spectrométrie FT-NIR, s'appliquant à l'évolution des tomates à température ambiante (shelf-life).
- Les paramètres de texture testés sont représentatifs de l'élasticité du fruit, au niveau local (superficiel) ou global, et permettent de discriminer la texture des fruits en fonction de la durée de shelf-life. Leur pertinence est donc établie.
- Les modèles de prédiction développés utilisant la spectrométrie FT-NIR sont prometteurs. En particulier, les paramètres des modèles PLS de prédiction des modules d'élasticité (E_p et E_c) ont pu être validés du point de vue statistique.
- Toutefois, cet essai reste préliminaire car l'analyse repose sur moins de 200 spectres et une modélisation robuste demanderait quelques centaines d'individus. L'étape d'étalonnage doit donc se poursuivre avant la validation complète des modèles. ■

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. doi: 10.1021/ac061220j
- 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.
- 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. doi: 10.1016/j.trac.2010.05.006
- Camps C. & Christen D., 2009a. Non-destructive assessment of apricot fruit quality by portable visible-near infrared spectroscopy. *Lwt-Food Science and Technology* **42** (6), 1125-1131.
- Camps C. & Christen D., 2009b. On-tree follow-up of apricot fruit development using a hand-held NIR instrument. *Journal of Food, Agriculture & Environment* **7** (2), 394-400.
- Camps C., Guillermin P., Mauget J. & Bertrand D., 2005. Data analysis of penetrometric force/displacement curves for the characterization of whole apple fruits. *Journal of Texture Studies* **36** (4), 387-401.
- Camps C., Guillermin P., Mauget J. & Bertrand D., 2007. Discrimination of storage duration of apples stored in cooled room and shelflife by visible-near infrared spectroscopy. *Journal of near Infrared Spectroscopy* **15** (3), 169-177.
- Christen D., Camps C., Besse S., Guelat L.-M., Coutant C., Ducruet J. & Rossier J., 2012. Outils d'aide à la décision pour la récolte des abricots Luizet à distiller. *Revue suisse Vitic., Arboric., Hortic.* **44** (2), 114-119.
- 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. doi: 10.1021/jf072182n
- 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. doi: 10.1021/jf801299r
- 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. doi: 10.1021/jf802920z
- 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. doi: 10.1016/j.jfoodeng.2008.09.013
- Jourjon F., Mehinagic E., Camps C., Guillermin P., Bertrand D., Laurens F. & Vigouroux B., 2007. Différentes approches de la mesure de la texture des pommes et raisins. Paper presented at the Colloque Végétal et Semences.
- 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.
- Mehinagic E., Royer G., Bertrand D., Symoneaux R., Laurens F. & Jourjon F., 2003. Relationship between sensory analysis, penetrometry and visible-NIR

Summary

Using FT-NIR spectroscopy to predict surface and overall elasticity of tomato during shelf-life

The texture of fruit is a quality criterion largely untapped in the supply chain despite its importance from the point of view of sensory description by consumers. The elasticity, a component of the texture, is also relevant in determining the ability of a product to support a postharvest itinerary that includes handling by operators, transport and various durations of exposure on stalls trade and at home among consumers. Measuring the elasticity of a fruit is invasive and sometimes destructive. In this study, prediction models using measurement by near infrared spectroscopy have been initiated to assess the possibility of this measure without affecting the physical and chemical properties of the fruit. Established models are promising with R^2 values between 0.75 and 0.88, a relative prediction error lower than or equal to 11 %. Two out of three models have been statistically validated (ISO 12099) on the basis of the assessment of bias, slope and SEP-values.

Key words: texture, FT-NIR, PLS, elasticity, tomato, shelf-life.

Zusammenfassung

FT-NIR Spektroskopie zur Messung der oberflächlichen und globalen Elastizität von Tomaten während dem «shelf-life»

Die Textur von Früchten und Gemüse wird in der Versorgungskette noch sehr wenig als Qualitätsmerkmal genutzt, obwohl sie für Konsumenten ein wichtiges sensorisches Kriterium darstellt. Die Elastizität, eine der Komponenten der Textur, ist auch von grosser Bedeutung um die Fähigkeit einer Frucht zu bestimmen, Nachernteprozesse intakt zu überstehen, wie Manipulationen entlang der Versorgungskette, Transporte, sowie unterschiedliche Verweildauer in den Verkaufsläden und beim Konsumenten. Die Elastizität einer Frucht wurde bisher vor allem auf invasive oder destruktive Art gemessen. In der vorliegenden Studie, wird die nicht destruktive Methode mittels Fourier-Transform-Nahinfrarotspektroskopie getestet, um die Entwicklung der Elastizität während dem «shelf-life» zu verfolgen. Die aufgestellten Modelle sind vielversprechend mit R^2 Werte zwischen 0,75 und 0,88 und einem relativen Vorhersagefehler unter oder gleich 11 %.

Riassunto

Utilizzazione della spettroscopia FT-NIRS per predire l'elasticità superficiale e globale del pomodoro durante un'esposizione in shelf-life

Nonostante la sua importanza nella descrizione sensoriale da parte dei consumatori, la consistenza dei frutti è un criterio di qualità in gran parte inutilizzato nella catena d'approvvigionamento. L'elasticità del frutto, una delle componenti della consistenza, è altrettanto pertinente per determinare la capacità di un frutto a sopportare un itinerario post-raccolta che include le manipolazioni degli operatori, i trasporti e le durate variabili d'esposizione sugli scaffali di vendita e, infine, presso i consumatori. Misurare l'elasticità di un frutto è invasivo e, a volte, distruttivo. Per poter valutare la possibilità di effettuare questa misurazione senza alterare le proprietà fisiche e chimiche del frutto, nel presente studio sono stati sviluppati dei modelli previsionali utilizzando la misura per spettroscopia nel vicino infrarosso a trasformata di Fourier. I modelli stabiliti sono promettenti con dei valori di R^2 compresi tra 0,75 e 0,88 e un errore relativo di previsione inferiore o uguale all'11 %. Dal punto di vista statistico in base alla valutazione dello scostamento, della pendenza e dell'errore aleatorio di previsione (SEP), due modelli su tre hanno potuto essere validati (ISO 12099).

spectroscopy of apples belonging to different cultivars. *Food Quality and Preference* **14** (5–6), 473–484. doi: [http://dx.doi.org/10.1016/S0950-3293\(03\)00012-0](http://dx.doi.org/10.1016/S0950-3293(03)00012-0)

- Mehinagic E., Royer G., Symoneaux R., Bertrand D., & Jourjon F., 2004. Prediction of the sensory quality of apples by physical measurements. *Postharvest Biology and Technology* **34** (3), 257-269. doi: <http://dx.doi.org/10.1016/j.postharvbio.2004.05.017>
- 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., 2005. Nondestructive determination of solids and carotenoids in tomato products by near-infrared spectroscopy and multivariate calibration. *Analytical Chemistry* **77** (8), 2505–2511. doi: [10.1021/ac048651r](https://doi.org/10.1021/ac048651r)
- 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. doi: [10.1016/j.aca.2007.03.036](https://doi.org/10.1016/j.aca.2007.03.036)
- 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.