

Doktori értekezés tézisei

Vitális Flóra

Budapest

2024



Magyar Agrár- és Élettudományi Egyetem

**Innovatív gyors mérési módszerek fejlesztése
gyümölcsök és gyümölcsstermékek
minősítésére és eredetvizsgálatára**

DOI: 10.54598/005910

Flóra Vitális

Budapest
2024

Doktori Iskola/ Program

Megnevezés Élelmiszertudományi Doktori Iskola
Tudományága: Élelmiszertudomány
Vezetője: **Simonné Sarkadi Livia, DSc**
 Táplálkozástudományi Tanszék
 Élelmiszertudományi és Technológiai Intézet
 Magyar Agrár- és Élettudományi Egyetem

Témavezető:

Kovács Zoltán, PhD
Élelmiszeripari Méréstechnika és Automatizálás Tanszék
Élelmiszertudományi és Technológiai Intézet
Magyar Agrár- és Élettudományi Egyetem

A jelölt a Magyar Agrár- és Élettudományi Egyetem Doktori Szabályzatában előírt valamennyi feltételnek eleget tett, a műhelyvita során elhangzott észrevételeket és javaslatokat az értekezés átdolgozásakor figyelembe vette, ezért az értekezés védési eljárásra bocsátható.

.....
Doktori iskola vezetője

.....
Témavezető

Tartalomjegyzék

1.	BEVEZETÉS.....	1
2.	CÉLKITŰZÉSEK.....	2
3.	ANYAGOK ÉS MÓDSZEREK.....	3
3.1.	Anyagok.....	3
3.1.1.	Az érettségmeghatározás során elemzett gyümölcsminták	3
3.1.2.	A Monilinia kimutatási vizsgálatok során elemzett gyümölcsminták.....	3
3.1.3.	A gyümölcsle-dúsítási vizsgálatok során elemzett minták.....	4
3.2.	Alkalmazott módszerek	5
3.2.1.	Referencia módszerek a gyümölcsök érettségvizsgálataiban	5
3.2.2.	Közeli infravörös spektroszkópia a gyümölcsminőséget meghatározó vizsgálatokban.....	6
3.2.3.	Hiperspektrális képalkotás gyümölcsök <i>Monilinia</i> szennyezettségének kimutatására	7
3.3.	A kutatási eredmények értékelése	7
3.3.1.	Referencia mérésekkel kapott eredmények értékelése	7
3.3.2.	Korrelatív analitikai módszerekkel kapott eredmények elemzése	8
4.	EREDMÉNYEK ÉS ÉRTÉKELESÜK.....	11
4.1.	Csonthéjas gyümölcsök érettségének meghatározása NIR spektroszkópiával.....	11
4.1.1.	Cseresznye érettségének meghatározása	11
4.1.2.	Meggy érettségének meghatározása	11
4.1.3.	Szilva érettségének meghatározása	11
4.2.	<i>Monilinia</i> fertőzés kimutatása csonthéjas gyümölcsökön spektrális jellemzők alapján.....	12
4.2.1.	Kimutatási eredmények kézi NIR spektrométerrel	12
4.2.2.	Kimutatási eredmények hiperspektrális képfeldolgozással	13
4.3.	Gyümölcsle dúsítás meghatározása NIR spektroszkópiával	14
4.3.1.	Kimutatási eredmények meggylevelek esetében.....	14
4.3.2.	Kimutatási eredmények szilvalevek esetében	15
5.	KÖVETKEZTETÉSEK ÉS JAVASLATOK.....	16
6.	ÚJ TUDOMÁNYOS EREDMÉNYEK.....	18
7.	TÉMÁHOZ KAPCSOLÓDÓ PUBLIKÁCIÓK.....	20
	IRODALOMJEGYZÉK.....	22

1. BEVEZETÉS

Az élelmiszer-fogyasztási trendek jelentős változáson mentek keresztül az elmúlt években, különösen az egészség- és környezettudatosság, valamint a COVID-19 járvány hatására. Ezek a változások jól nyomon követhetőek a gyümölcsök és gyümölcs alapú termékek fogyasztásában, amelyek keresletét különböző társadalmi-gazdasági hatások, fogyasztói preferenciák és közegészségügyi ajánlások is befolyásolják. Az elvárt minőség biztosítása komoly kihívást jelent az ipar számára. Ahhoz, hogy a gyümölcsök a boltok polcaira az általunk keresett formában, feldolgozottsági szinten és minőségben kerüljenek, nagyon összetett utat kell bejárniuk, amit élelmiszerláncként ismerünk. Az első kihívások már a gyümölcsösökben jelentkeznek: gondoljunk az enyhe telekre, a fagyos tavaszokra, az aszályos nyarakra és a kártevők sokaságára. Ezt követi a kritikus kérdés: mikor kezdődjön a betakarítás? Mennyi ideig, hol és milyen körülmények között érleljük és/vagy tároljuk a gyümölcsöket, hogy az ipar megannyi módon dolgozhassa fel őket?

A gyümölcstermesztésben és a minőségellenőrzési gyakorlatban elterjedten alkalmazott vizsgálatok általában empirikus és gyakran roncsolásos módszereken alapulnak. Az empirikus megközelítés alatt értjük, amikor a termelők például a gyümölcsök betakarításának kezdetét olyan tulajdonságok alapján állapítják meg, pl. mennyire könnyen válik le a gyümölcs a szárról, a gyümölcs repedésre való hajlama vagy a gyümölcs édessége kóstolás alapján, amelyek természetüknél fogva szubjektívek. Objektívebb megközelítés a gyümölcs tömegének, színének, keménységének és cukortartalmának műszeres mérése. Ezek célzott technikák, egyszerre egyetlen jellemző meghatározására alkalmasak, és önmagukban nem elegendőek a minőségi különbségek teljes spektrumának lekövetésére.

Az élelmiszerek eredetiségének és nyomon követhetőségének biztosítása elképzelhetetlen a digitális megoldások használata nélkül, és az innovatív gyors módszerek lehetővé teszik a roncsolásmentes és akár érintésmentes helyszíni elemzések végzését. Az ilyen elemzések során egyszerre akár több száz vagy több ezer adat gyűjthető, amelyek adott minta „ujjlenyomatát” adják. Ezen ujjlenyomatok alapján, referencijellemzőkkel és kemometriai modellezéssel párosítva lehetővé válik a korábban ismeretlen minták roncsolásmentes minősítése. Egyre inkább támaszkodunk tanítható digitális megoldásokra, amelyek képesek kemometriai vezérléssel számos különféle kérdés megválaszolására.

A doktori kutatás célkitűzései az Agricolae Kft-vel együttműködésben valósultak meg. A vállalat székhelye a gyümölcstermesztéséről méltán híres magyarországi Szatmár régióban található. A doktori értekezés középpontjában a spektroszkópián alapuló technikák széleskörű alkalmazása áll a gyümölcstermesztésben és a minőségellenőrzésben, különösen a gyümölcscellátási lánc bizonyos kritikus pontjain. Az együttműködés keretében jelentős gazdasági szerepű gyümölcsfajokat és fajtákat vontunk be. Különös figyelmet fordítottunk arra, hogy meghatározzuk a gyümölcsök élettani állapotát (pl. érettségüket, mikrobiológiai szennyeződésüket), valamint az ezekből készült termékeken specifikus manipulációk kimutathatóságát.

A közeli infravörös (NIR) spektroszkópia egyike azoknak a fejlett, korrelatív analitikai módszereknek, amelyet széles körben alkalmaznak rutinszerű laboratóriumi vagy ipari monitorozási rendszerekben, a 780–2500 nm hullámhossztartományban (Manley, 2014). A miniaturizálási technikák és azok képalkotó technológiákban, pl. a hiperspektrális képalkotásban való alkalmazása lehetővé teszi komplex biológiai rendszerek intakt tanulmányozását. Vizsgálataink során arra kerestük a választ, hogy a NIR-spektroszkópia és a hiperspektrális képalkotás milyen hatékonysággal alkalmazható a kemometriai modellezéssel együtt a gyümölcsök érettségének meghatározására, így a betakarítási idő meghatározására, a nem megfelelő gyümölcstárolás és a *Monilinia* okozta barna rothadás kimutatására, valamint a gyümölcslé dúsításának kimutatására.

2. CÉLKITŰZÉSEK

A dolgozat célja a gyümölcsök és gyümölcstermékek (nevezetesen gyümölcslevek) roncsolásmentes vizsgálatára szolgáló korszerű korrelatív analitikai módszerek alkalmazása és fejlesztése volt. A doktori kutatás során három fő célkitűzést határoztunk meg, amelyekhez kapcsolódó feladatok a következők.

- I. **A NIR-spektroszkópia alkalmazhatóságának vizsgálata különböző csonthéjas gyümölcsök érettségének meghatározására.** E cél elérését a következő feladatok segítették:
 - Az érési és érettségi folyamatok spektrális nyomon követése kézi spektrométerrel,
 - Modellfejlesztés a gyümölcsök érettségi fokozatok szerinti osztályozására,
 - Modellfejlesztés a gyümölcsök egyes minőségi jellemzőinek becslésére.
- II. **A NIR spektroszkópia és a hiperspektrális képfeldolgozás alkalmazhatóságának vizsgálata a *Monilinia* által okozott barna rothadás kimutatására különböző csonthéjas gyümölcsökön.** E cél elérését a következő feladatok segítették:
 - A *Monilinia* konídiumszuszpenzióval különböző koncentrációban szennyezett ép és sérült gyümölcsök hűtőben vagy szobahőmérsékleten történő tárolása során bekövetkező változások nyomon követése,
 - Vizsgálatok elvégzése kézi NIR spektrométerrel és hiperspektrális képalkotással,
 - Modellfejlesztés a különböző tárolási körülmények hatásának meghatározására,
 - Modellfejlesztés a *Moniliniával* különböző módon és mértékben szennyezett gyümölcsök kimutatására,
 - Osztályozó modellek építése a barna rothadás gyanús gyümölcsök korai kimutatására.
- III. **A NIR spektroszkópia alkalmazhatóságának meghatározása gyümölcslevek növényi kivonatokkal történő dúsításának/manipulációjának kimutatására.** E cél elérését a következő feladatok segítették:
 - Növényi kivonatok különböző kombinációban és koncentrációban dúsított gyümölcslevek spektrális elemzése kézi és asztali NIR spektrométerek alkalmazásával,
 - Modellfejlesztés a kivonat típusa és az adagolt koncentráció szerinti osztályozáshoz,
 - Modellfejlesztés a hozzáadott extrakttartalom becslésére.

3. ANYAGOK ÉS MÓDSZEREK

3.1. Anyagok

3.1.1. Az érettségmeghatározás során elemzett gyümölcsminták

A különböző csonthéjas gyümölcsök érettségének, optimális betakarítási idejének meghatározását roncsolásmentes módszerekkel végeztük, Szabolcs-Szatmár-Bereg megyei gyümölcsminták elemzésével. 2021 nyári hónapjaiban szezonális cseresznyét („Bigarreau Burlat”, „Valery Chkalov”), meggyet („Kántorjánosi”, „Újfehértói”) és szilvát („Elena”, „Stanley”) vizsgáltunk. Az érési időszaknak megfelelően a betakarítás júniusban, júliusban és augusztusban történt. A gyümölcsök betakarítása két különböző fázisban zajlott, gyümölcsfajonként egy hét eltéréssel.

A betakarítást követően a gyümölcsöket a Magyar Agrár- és Élettudományi Egyetem (MATE) Élelmiszertudományi és Technológiai Intézetébe (ÉTTI) szállították. A beérkező tételek jelentős variabilitást mutattak; érettségi állapotuk az emberi fogyasztásra alkalmatlantól a teljesen érettig terjedt. A minták megérkezése után a gyümölcsök szárának eltávolítását és osztályozását a lehető leghamarabb megkezdjük, hogy elkerüljük a nem kívánatos romlási folyamatokat.

A gyümölcsök előzetes osztályozása a feltételezett érettségük szerint a látható színárnyalatbeli különbségek alapján történt, a nagyon zöldtől a mélyvörös vagy lila árnyalatokig. Az eredetileg nagyobb számú gyümölcsöt tartalmazó mintahalmazokat kisebb alcsoportokra osztottuk. A kutatási eredmények értelmezésének megkönnyítése érdekében az előzetesen osztályozott mintákat nagyobb érettségi csoportokba rendeztük. Az így kialakított mintaelemszámok az alábbiak:

- **Cseresznyefajták:**

Bigarreau Burlat (BB): 26 osztályozott mintacsoport $\times$ 5 párhuzamos = 130 minta

Valery Chkalov (VC): 21 osztályozott mintacsoport $\times$ 5 párhuzamos = 105 minta

- **Meggyfajták:**

Kántorjánosi (KJ): 20 osztályozott mintacsoport $\times$ 5 párhuzamos = 100 minta

Újfehértói (UF): 21 osztályozott mintacsoport $\times$ 5 párhuzamos = 105 minta

- **Szilvafajták:**

Elena (EL): 20 osztályozott mintacsoport $\times$ 5 párhuzamos = 100 minta

Stanley (ST): 20 osztályozott mintacsoport $\times$ 5 párhuzamos = 100 minta.

3.1.2. A *Monilinia* kimutatási vizsgálatok során elemzett gyümölcsminták

A csonthéjas gyümölcsök barna rothadásához kapcsolódó folyamatok roncsolásmentes vizsgálatához különböző meggy- és szilvafajtákat vontunk be a kutatásba. A gyümölcsfajták betakarítása és vizsgálata eltérő időpontokban történt. Az „Érdi bőtermő” (EB) és „Újfehértói” (UF) meggyek, valamint a „Tepend” (TD) szilvák vizsgálatát 2021-ben, míg a „Tepend plus” (TP) szilvák kísérleteit 2022-ben végeztük. A kiválasztott kísérleti gyümölcsök minden fajtánál egységes érettségűek, színűek voltak, és látható sérülésektől mentesek.

A barna rothadást okozó *Monilinia* fajok izolálása különböző gyümölcsök (például meggy, szilva) felszínéről történt. Számos próbálkozás után végül *M. fructigena* sikerült izolálni és táptalajon szaporítani. A konídiumtermelés céljára szánt gyümölcsöket etanollal (70% V/V) fertőtlenítettük, steril lándzsátűvel megsértettük, majd tiszta tenyészetből származó micéliummal benőtt agarlemezeket helyeztünk a sebekbe.

A konídiumok termeltetéséhez meggyeket, szilvákat és almákat fertőztünk be, amelyeket Fitotronban tároltunk 21 °C hőmérsékleten, 12 órás világítási ciklussal. Körülbelül hét nap elteltével az inokulált gyümölcsök felszínén kialakult konídiumokat gyűjtöttük, majd konídiumszuszpenziókat készítettünk (~10⁵ konídium/mL) és hígítottunk (Horváthné Petróczy 2009). A minták előkészítése előtt a meggy- és szilvaminták szárát eltávolítottuk, majd felületüket finoman megtisztítottuk etanollal (70% V/V) átitatott törölkendővel. Ez a lépés szükséges volt, mivel a kísérletsorozatban kizárólag a *Monilinia* kimutathatóságát végeztük, célunk volt a nem kívánt mikrobiális romlási folyamatok minimalizálása.

A tisztítást követően a gyümölcsök egy részének felületén egy fertőtlenített kés hegyével 5 mm nagyságú bemetszést ejtettünk, amelybe 20 µL hígítatlan (~10² konídium/µL) vagy hígított *M. fructigena* konídiumszuszpenziót pipettáztunk. Ezek a minták alkották az „Injury_{inf}” csoportba tartoztak. A minták egy másik hányadára bemetszés nélkül pipettáztunk 20 µL szuszpenziót, ezek alkották az „Intact_{inf}” csoportot. A fennmaradó gyümölcsöket nem inokuláltuk, ezek szolgálták az „Intact_{con}” és „Injury_{con}” kontrollmintákhoz; utóbbit csak a „Topend plus” szilváknál készítettük elő.

A mintákat hét napig hűtött (kb. 5 °C) vagy szobahőmérsékletű (20 °C feletti) tárolási körülmények között tároltuk szabályozott környezetben. A szobahőmérsékleti tárolás esetében a tárolási környezetet az adott időszakban jellemző szobahőmérsékletre igazítottuk.

A romlási folyamatokat két különböző roncsolásmentes analitikai technikával vizsgáltuk: közeli infravörös (NIR) spektroszkópiával és hiperspektrális képalkotással. A vizsgálatokhoz két azonos módon előkészített mintahalmazt állítottunk össze. Minden mintacsoporthoz öt párhuzamos mintát készítettünk elő, így a mintaelemszámok az alábbiak szerint alakultak:

- **Meggyfajták:**

Érdi bőtermő (EB)

$$((\text{Intact}_{\text{con}} + 4 \text{ Injury}_{\text{inf}} + 4 \text{ Intact}_{\text{inf}}) \times 2 \text{ tárolási körülmény}) \times 5 \text{ párhuzamos} = 90 \text{ meggy minta}$$

Újfehértói (UF)

$$((\text{Intact}_{\text{con}} + 4 \text{ Injury}_{\text{inf}} + 4 \text{ Intact}_{\text{inf}}) \times 2 \text{ tárolási körülmény}) \times 5 \text{ párhuzamos} = 90 \text{ meggy minta}$$

- **Szilvafajták:**

Topend (TD)

$$((\text{Intact}_{\text{con}} + 3 \text{ Injury}_{\text{inf}} + 3 \text{ Intact}_{\text{inf}}) \times 2 \text{ tárolási körülmény}) \times 5 \text{ párhuzamos} = 70 \text{ szilva minta}$$

Topend plus (TP)

$$((\text{Intact}_{\text{con}} + \text{Injury}_{\text{con}} + 3 \text{ Injury}_{\text{inf}} + 3 \text{ Intact}_{\text{inf}}) \times 2 \text{ tárolási körülmény}) \times 5 \text{ párhuzamos} = 80 \text{ szilva minta}$$

3.1.3. A gyümölcslé-dúsítási vizsgálatok során elemzett minták

Ezekben a kísérletekben meggy- és szilvale sűrítményből készült gyümölcsléveket elemeztünk, hogy minimalizáljuk a nem kívánatos, ismeretlen termékmanipulációk kockázatát. A gyümölcslésűrítmények kezdeti koncentrációja (kb. 65% Brix) alapján tiszta, körülbelül 20% brix koncentrációjú leveket készítettünk desztillált vízzel történő hígítással. Az alaplevekhez tözegáfonya (CBE), szőlőmag (GSE) vagy gránátalma kivonatot (PGE) adtunk, hat koncentrációs szinten, úgy, hogy az összes kivonatkonzentráció 0,5 és 2,5 g/100 mL között változzon. Ezek képezték az

egykomponensű keverékeket, amelyeket koncentrációszerintként azonos arányban elegyítve két- és háromkomponensű keverékeket állítottunk elő. Ezekben az esetekben is biztosítottuk, hogy a gyümölcslevek összes kivonattartalma 0,5 és 2,5 g/100 mL között legyen. A gyümölcslevek előkészítése során mintacsoportonként három párhuzamos mintát készítettünk. A tiszta meggy- és szilvaleknél öt párhuzamos mintát állítottunk elő, amelyek a 0 g/100 mL koncentrációs szintet képviselték. A gyümölcslevek vonatkozó mintaszámok az 1. és 2. egyenletben részletezett módon alakultak. A kész gyümölcsleveket 15 mL-es autoklávozható centrifugacsövekbe pipettáztuk, hőkezeltük (85 °C, 60 s), majd lehűtöttük és hűtve tároltuk a roncsolásmentes analitikai vizsgálatokig.

$$(5 \text{ tiszta gyümölcslé}) + (3 \text{ kivonat} \times 6 \text{ koncentráció} \times 3 \text{ párhuzamos}) + (3 \text{ bináris keverék} \times 6 \text{ koncentráció} \times 3 \text{ párhuzamos}) + (1 \text{ ternáris keverék} \times 6 \text{ koncentráció} \times 3 \text{ párhuzamos}) = \quad (1)$$

131 meggylé minta

$$(5 \text{ tiszta gyümölcslé}) + (3 \text{ kivonat} \times 6 \text{ koncentráció} \times 3 \text{ párhuzamos}) + (3 \text{ bináris keverék} \times 6 \text{ koncentráció} \times 3 \text{ párhuzamos}) + (1 \text{ ternáris keverék} \times 6 \text{ koncentráció} \times 3 \text{ párhuzamos}) = \quad (2)$$

131 szilvalé minta

3.2. Alkalmazott módszerek

3.2.1. Referencia módszerek a gyümölcsök érettségvizsgálataiban

Csonthéjas gyümölcsök színjellemzőinek meghatározása

A különböző érettségű csonthéjas gyümölcsök színjellemzőit ColorLite sph850 spektrofotométerrel (ColorLite GmbH, Németország) határoztuk meg. A műszer kalibrálása után a gyümölcsök éretlen és érett oldalán mértük színjellemzőket, a világosság (L^*), a zöld-vörös (a^*) és a kék-sárga (b^*) színezeti értékeket. Az előzetesen osztályozott minta csoportok öt párhuzamos mintáját véletlenszerű mérési sorrendben mérték, minden színjellemzőt háromszor, és ezek átlagát használták a későbbi adatértékeléshez.

Csonthéjas gyümölcsök szárazanyag-tartalmának meghatározása

A különböző érettségű csonthéjas gyümölcsök szárazanyag-tartalmának (DMC) meghatározásához a gyümölcsök húsát előválogatott mintacsoportok szerint aprítottuk. Körülbelül 10 g aprított gyümölcsöt mértünk be és kíméletesen 70 °C-on szárítószekrényben szárítottuk (Memmert, Schwabach, Németország) tömegállandóságig. A minták magas cukortartalma miatt kíméletes szárításra volt szükség, hogy elkerüljük azok károsodását. A szárazanyag-tartalom a száraz tömeg és a kezdeti tömeg arányaként lett kiszámítva (Schuck, Dolivet és Jeantet 2012). Minden mintacsoportnál három mérés történt, és ezek átlaga lett felhasználva a későbbi adatelemzés során.

Csonthéjas gyümölcsök összes savtartalmának meghatározása

A különböző érettségű csonthéjas gyümölcsök összes savtartalmának (TA) meghatározásához a korábban aprított gyümölcsöket egy kézi botmixerrel (Philips, Amsterdam, Hollandia) pépesítettük. Körülbelül 10 g gyümölcspürét mértünk be, majd az savtartalmat potenciometrikus titrálassal határoztuk meg 0,1 mol/dm³ nátrium-hidroxid-oldattal (pH 8,2), fenolftalein indikátor jelenlétében. A mérés során Hanna HI2209 asztali pH-mérőt használtunk (Hanna Instruments, Smithfield, USA). Az összes savtartalom kiszámítása és kifejezése mg/g (friss tömeg) almavitaminsavban történt (Tyl és Sadler 2017). Minden előválogatott mintacsoport esetén három mérés történt, és ezek átlagát használtuk a későbbi adatelemzés során.

Csonthéjas gyümölcsök összes oldható szilárdanyag-tartalmának meghatározása

A különböző érettségű csonthéjas gyümölcsök összes oldható szilárdanyag-tartalmának (SSC) meghatározásához a korábban pürésített gyümölcsöket 50 mL-es csőbe mérve, 6000 rpm sebességgel, 20 percig centrifugáltuk (Micro 22R Hettich, Németország), majd a felülúszó lé néhány cseppjét digitális refraktométerrel (Pocket PAL-1, ATAGO, Tokió, Japán) mértük. A műszert desztillált vízzel kalibráltuk. Az eszköz az gyümölcslevek oldható szilárdanyag-tartalmát % brixben adta (Chockchaisawasdee et al. 2016). Minden előválogatott mintacsoport esetén három mérés történt, és ezek átlagát használtuk a későbbi adatelemzés során.

Csonthéjas gyümölcsök összes antociánin-tartalmának meghatározása

A különböző érettségű csonthéjas gyümölcsök összes antociánin-tartalmának (TAC) meghatározásához a korábban elkészített felülúszó levet pH-differenciál módszerrel (Lao és Giusti 2016; Lee et al. 2005, 2016) mértük és elemeztük, Fodor et al. (2022, 2023) tanulmányai nyomán. A mérésekhez pH-mérőt (Hanna Instruments, Smithfield, USA) és UV-Vis spektrofotométert (Thermo Electronic UV-Vis 2.02, Thermo Fisher Scientific, Waltham, MA, USA) használtunk. Az eredményeket mg/L-ban kifejezett cianidin-3-glikozid ekvivalensben adtuk meg. Minden előválogatott mintacsoport esetén három mérés történt, és ezen mérésének átlagát használtuk a későbbi adatelemzés során.

3.2.2. Közeli infravörös spektroszkópia a gyümölcsminőséget meghatározó vizsgálatokban

Kézi NIR spektrométer alkalmazása csonthéjas gyümölcsök érettségének meghatározására

A különböző csonthéjas gyümölcsök betakarítási érettségének roncsolásmentes módon történő modellezésére közeli infravörös (NIR) spektroszkópiát alkalmaztunk. A vizsgálatokat egy kézi, visszaverődésen alapuló NIR spektrométerrel (NIR-S-G1, InnoSpectra Co., Hszincsu, Tajvan) végeztük. Az eszköz lehetővé teszi a kontaktusos mérést belső világítással, összesen 256 spektrális sávban a 900-1700 nm hullámhossztartományban, Hadamard-módszer alkalmazásával. A gyümölcsök spektrumait az előválogatott mintahalmazok öt párhuzamos mintájának mind az éretlen, mind az érett oldalán rögzítettünk. Minden mérési pozíciónál három egymást követő spektrumfelvételt végeztünk. A gyümölcsöket randomizált mérési sorrendben szkenneltük.

Kézi NIR spektrométer alkalmazása a *Monilinia* kimutatására csonthéjas gyümölcsökön

M. fructigena-val fertőzött, különböző körülmények között tárolt meggyek és szilvák roncsolásmentes vizsgálatához ugyanazt a műszert és beállítást alkalmaztuk. A meggyek esetén a gyümölcsök vízszintes tengelyén rögzítettük a spektrumokat, míg a szilváknál a függőleges tengelyük mentén, gyümölcsönként három mérési pontot használva. A második mérési pont mindig a gyümölcs befertőzés pontja volt. Minden mérési pozíciónál három egymást követő spektrumfelvételt végeztünk. Minden mérés után az eszköz érintkezési felületét alkoholos törlőkendővel fertőtlenítettük a keresztszennyeződés elkerülése érdekében. A spektrális adatgyűjtést naponta végeztük a hét napos tárolás során. A gyümölcsöket randomizált mérési sorrendben szkenneltük.

Kézi NIR spektrométer alkalmazása dúsított gyümölcslevek vizsgálatára

A növényi kivonattal dúsított gyümölcslé keverékek vizsgálatához kézi MicroNIR spektrométert (Viavi, Scottsdale, USA) alkalmaztunk transzflexiós mérési beállítással. Az eszköz lehetővé teszi belső megvilágítású kontakt mérések elvégzését összesen 125 spektrális sávban a 900–1700 nm hullámhossztartományban. A gyümölcslevek spektrumait üveg hengerküvetében rögzítettük 0,5 mm-es rétegvastagságot biztosító visszaverő felület alkalmazásával. Az eredendően nagy számú

gyümölcsle keverékszám kompenzálására a tiszta gyümölcsleveket többször is megmértük. Meggy és szilva levéből készült öt minta mindegyikét összesen háromszor szkenneltük. Minden minta betöltésekor három egymást követő spektrumot rögzítettünk. Minden minta mérését követően a kavitát alaposan megtisztítottuk desztillált vízzel és etanollal (70% V/V), majd szárítottuk és az azt követő gyümölcsle mintával öblítettük, hogy elkerüljük a keresztszennyeződést. A gyümölcsleveket randomizált mérési sorrendben szkenneltük. Ezen méréseket az Innsbrucki Egyetem Analitikai Kémia és Radiokémia Intézetében végeztük.

Asztali NIR spektrométer alkalmazása dúsított gyümölcslevek vizsgálatára

A gyümölcslevek spektrális tulajdonságait transzmissziós mérési elrendezésben is vizsgáltuk. Erre a célra egy moduláris Fourier-transzformációs spektrométert (NIRFlex N-500, Büchi Labortechnik AG, Flawil, Svájc) használtunk, ami összesen 1178 spektrális sávban gyűjtöttek adatokat az 1000-1890 nm hullámhossztartományban. Hasonlóképpen, a fentebb részletezettekhez, a mintákat randomizált sorrendben, három egymást követő szkenneléssel elemeztük 1 mm-es úthosszúságú üvegküvetttel. A küvettt a fent leírtak szerint tisztítottuk, sűrített, tisztított levegővel végzett további szárítással, hogy a lehető legtöbb nedvességet eltávolítsuk a küvettből. A küvettt is átöblítettük a következő mintával. Ezeket a méréseket is az az Innsbrucki Egyetem Analitikai Kémia és Radiokémia Intézetében végeztük.

3.2.3. Hiperspektrális képalkotás gyümölcsök *Monilinia* szennyezettségének kimutatására

A *M. fructigena*-val fertőzött és különböző körülmények között tárolt meggyek és szilvák roncsolásmentes és érintésmentes analíziséhez asztali Headwall Photonics XEVA-1648 XC134 hiperspektrális képalkotó (HSI) rendszert használtunk (Specim spektrográf, Xenics InGaAs 14 bites szenzor, 256 × 320 px spektrális és térbeli felbontás). A rendszer lehetővé tette a gyümölcsök egyidejű NIR spektrális és térbeli jellemzését. A műszer "pushbroom" konfigurációban működött, összesen 155 spektrális sávot rögzített a 900-1700 nm-es hullámhossztartományban, 5 nm-es spektrális felbontással és 0,475 mm/pixel térbeli felbontással. A mérőrendszer működtetése tanszéki fejlesztésű Argus szoftverrel (Firtha 2011) történt. Randomizált mérési sorrendben szilvamintákon naponta, míg meggy mintákon és összesen hat alkalommal folytattunk HSI-t a hétnapos tárolásuk során. A HSI rendszerrel hiperkockában rögzített adatokból a gyümölcshöz kapcsolódó képpontok szegmentálása egy tanszéki fejlesztésű HyperGrab hiperspektrális képfeldolgozó szoftverrel (GillaySoft, Budapest, Magyarország) történt. A szoftver lehetővé tette az átlagos abszorbancia értékek kinyerését mérésenként kilenc területről egyszerre.

3.3. A kutatási eredmények értékelése

Az adatok rendszerezése, kiértékelése és szemléltetése Microsoft Excel 365 (Microsoft Corporation, Redmond, Washington, USA), Origin Pro 2018 (OriginLab Corp. Northampton, MA, USA), R-projekt (3.6.3-as verzió), valamint az „aquap2” bővítménycsomag (Pollner és Kovács 2016) használatával történt. Ez a rész az eredmények értékelésére használt módszereket foglalja össze.

3.3.1. Referencia mérésekkel kapott eredmények értékelése

Referencia mérések csak az érettségmeghatározási vizsgálatok során elemzett minták esetében állnak rendelkezésre. Az előválogatott mintahalmazokon kapott szín (L^* , a^* , b^*) és összetételi jellemzőket (DMC, SSC, TA, TAC) érettségi klaszterek szerint átlagoltuk.

3.3.2. Korrelatív analitikai módszerekkel kapott eredmények elemzése

Spektrális adatok előfeldolgozása

A NIR spektroszkópiával és hiperspektrális képfeldolgozással nyert spektrumokat először az értékelésre szánt hullámhossztartományokra szűkítettük, a kiugró értékeket eltávolítottuk, majd többváltozós statisztikai elemzéseket végeztünk. Azokban a kísérletekben, ahol különböző műszerek hatékonyságát hasonlították össze (pl. asztali és kézi NIR műszerek), a kiértékeléseket azonos hullámhossztartományokon végeztük, a spektrumokat egyik esetben sem átlagoltuk. A spektrumok zajcsökkentésére Savitzky-Golay simítást (másodrendű polinom) alkalmaztunk (Savitzky és Golay 1951), más spektrális előfeldolgozási módszerekkel (pl. szóródáskorrekció, detrending, deriváltak) együtt a statisztikai modellezések optimalizálása érdekében.

Spektrális adatok főkomponens elemzése

A főkomponens elemzést (PCA) alkalmaztunk a jelentősen korreláló NIR spektrális adatok olyan változókba (főkomponensek, PC-k) tömörítésére, amelyek nem korrelálnak egymással. Ezenkívül ez a módszer lehetővé tette a kiugró értékek azonosítását a 95%-os konfidencia intervallumon kívül eső adatpontok kimutatásával. A PCA ezen funkcióját csak a csonthéjas gyümölcsök tárolásának és *Monilinia* okozta romlásának nyomon követését célzó eredmények értékelésére használtuk.

A PCA modellezést előzetes mintázatfeltérképezésként is alkalmaztuk simított (Savitzky-Golay simítás 2. rendű polinommal, 21 adatpont; „sgol-2-21-0”) és többszörös szóródási korrekciónak (msc) alávetett adatokon. Az eredmények feltárták, hogy az egyes hullámhosszok hogyan korrelálnak a főkomponensekkel, amelyeket loading diagramokkal illusztráltunk. A PCA modelleket gyümölcsfajtánként a teljes adatkészletre építettük, hogy feltérképezzük a gyümölcserésben, a *Monilinia*-fertőzött gyümölcsök kezelésében és tárolásában, vagy a dúsított gyümölcslevek teljes hozzáadott kivonattartalmának mintázatait.

Soft independent modelling of class analogies

Soft independent modelling of class analogies módszerét (SIMCA) csak a *Monilinia* kimutatási vizsgálatok eredményeinek értékelésére során alkalmaztuk. A módszert a PCA eredmények mellett végeztük, azzal a különbséggel, hogy a modellezést a tárolás elején (1. nap), közepén (4. nap) és végén (7. nap) rögzített adatokon végeztük, simítás és msc előkezelések után. E felügyelt osztályozási módszer segített jobban megérteni a hasonlóságokat és különbségeket a mintacsoportok között, amelyek ezen értékeléseknél a különböző kezelési csoportok voltak (befertőzés módja és tárolási körülmény együttesen).

A SIMCA modellezi adott mintacsoport által alkotott többváltozós teret, az osztályok közötti távolságok és a változók (azaz a hullámhosszok) fontossága alapján kiszámítja, hogy egy adott megfigyelés egy adott csoporthoz tartozik-e. Ez a megközelítés a változók megkülönböztető erejét is adja, jelentősen hozzájárulva a csoportok differenciálásához, hozzájárulva a spektrális különbségekhez kapcsolódó abszorpciós sávok azonosításához (Wold és Sjostrom 1977).

Spektrális adatok lineáris diszkriminancia elemzése

Lineáris diszkriminanciaanalízist (LDA) végeztünk felügyelt osztályozási módszerként minták megkülönböztetésére és osztályozására különböző osztályozó változók alapján. Speciális alkalmazásunkban a főkomponens “score”-ok szolgáltattak bemeneti értéként az LDA modellekhez. A modellezési folyamatban használt főkomponensek (NrPC-k) optimális számát egy R-alapú algoritmus határozta meg, amely összegyűjtötte és összehasonlította az LDA-modell kalibrációs és

validálási pontosságát előre meghatározott 20 NrPC-ig, háromszoros keresztvalidáció során. A tényleges modellezéshez azokat az NrPC-eket választottuk ki, amelyek a modell kalibrációs és a validációs pontosság közötti legkisebb eltérést, valamint a legmagasabb validálási pontosságot adták. A PCA-LDA modellek adathalmazokra szűrt adatokra épültek, amelyeket előkezelték és NrPC-kre optimalítottak. A modelleket egy minta kihagyásos (LOSO) validációval teszteltük, ami azt jelenti, hogy a modell építése úgy történt, hogy egyszerre adott mintacsoportokhoz tartozó párhuzamos minta adatait hagytuk ki a rendelkezésre álló előre osztályozott mintakészletekből. A tesztelés során a korábban kihagyott minták adatait kivetítettük a fejlesztett PCA-LDA modellbe. A modellépítés és a tesztelés ciklikusan zajlott mindaddig, amíg az egyes minták összes adata legalább egyszer be nem került a modellezésbe. A modellek építése és tesztelése során kapott osztályozási eredményeket (%) úgynevezett konfúziós táblázatokba foglaltuk össze. Ezenkívül ez a módszer lehetővé tette azon abszorpciós sávok azonosítását is, amelyek nagyban hozzájárultak a mintacsoportok közötti különbségtételhez.

Az érésvizsgálatok során először gyümölcsfajtánként, majd külön a gyümölcsök érettebb és éretlen oldalain kapott adatokra épültek az érettségi szint szerint osztályozó modellek. Ezt azért végeztük, hogy feltárjuk a spektrumfelvétel helyének az osztályozási pontosságra gyakorolt hatását.

A *Monilinia* kimutatással kapcsolatos kísérletek értékelése során kezelési csoportonként történt osztályozó modellek építése a gyümölcsök befertőzését követő napon rögzített spektrum előkezelés és NrPC szerint optimalított adatok alapján, hogy meghatározzuk a gyümölcs felületén a kezdeti konídiumos fertőzés kimutathatóságát. Az osztályozó modellezés 0,1, 1, 1, 10, 100 konídium/ μL szennyezettségi szintekre történt. Emellett modelleztük azoknak a mintáknak a spektrális tendenciáját is, amelyekről bebizonyosodott, hogy a tárolás során *Monilinia* okozta romlás mentek keresztül. Ez csak a sérülés útján fertőzött és szobahőmérsékleten tárolt gyümölcsökre volt jellemző (“~ 20 °C Injury_{inf}”). Miután minta specifikusan meghatároztuk, hogy a gyümölcsök melyik tárolási napon mutatták a *Monilinia* fertőzés látható jeleit (a “0. nap” -ként jelölve), a “0. nap” adataihoz képest ± 2 napos intervallumot lefedő adatokat vontuk be a modellezésbe.

A PCA-LDA-t különböző koncentrációjú növényi kivonatokkal dúsított gyümölcslé keverékek minőségi osztályozására is alkalmaztuk. Modelleket építettünk a hozzáadott kivonatok típusának egy-, két- vagy háromkomponensű kombinációkban történő kimutatására, az összes hozzáadott kivonattartalom szerinti csoportosítására.

Részleges legkisebb négyzetek regresszió a spektrális adatokon

Részleges legkisebb négyzetek regresszióját (PLSR) alkalmaztuk a mennyiségi összetételi jellemzők becslésére a spektrális adatok alapján. A PLSR modelleket minden gyümölcsfajtára egyedileg építettük spektrum előkezelésre és látens változósámszámra (NrLV) optimalított adatok felhasználásával. A modellek validálása szintén egy minta kihagyásos (LOSO) validációval történt az LDA-nál leírtaknak megfelelően, biztosítva a predikciós teljesítmény robusztus értékelését. A modellek pontosságát és megbízhatóságát a determinációs együtthatóval (R^2) és a négyzetes eltéréssel (RMSE) számszerűsítettük. A modellépítés (C) és a tesztelés (CV) során kapott modellillesztési pontosságokat a becsült paraméterek szerinti összefoglaló táblázatokba rendeztük. Mindemellett részeredményként kaptuk a regressziós vektorokat, amelyek információt szolgáltatnak arról, hogy az egyes változók milyen mértékben korrelálnak a becsült jellemzőkkel.

Az érettségi vizsgálatok során PLSR modelleket alkalmaztunk a különböző érettségű gyümölcsök egyes minőségi tulajdonságainak (szín, DMC, SSC, TA, TAC) roncsolásmentes becslésére. A

modelleket először gyümölcsfajtánként, majd a gyümölcsök érettebb, illetve éretlenebb oldalán nyert adatokra építettük, hogy feltárjuk ennek a becslési pontosságra gyakorolt hatását.

PLSR modellezést is alkalmaztunk a hozzáadott kivonat koncentráció becslésére a különböző mértékben dúsított gyümölcslevekben. A modelleket először gyümölcsfajok szerinti léminták felhasználásával építettük, majd egyszerű, két- és háromkomponensű keverékek alapján szűrtük az adatokat CBE, GSE, PGE és az összes kivonattartalom becsléséhez.

Kemometria modellezési eredményekben gyakran előforduló abszorpciós sávok azonosítása

A különböző kemometria megközelítések mindegyikére vonatkozóan meghatároztuk, hogy az egyes hullámhosszok milyen mértékben támogatják az alkalmazott modellezés teljesítményét. Az egyes modellek építése szempontjából releváns hullámhosszakat a PCA loadingok, a SIMCA és LDA diszkrimináló erő és a PLSR regressziós vektorok spektrális csúcsai alapján azonosítottuk. Gyümölcsfajonként és analitikai módszerként a kemometria modellezésekben az egyes változók (azaz hullámhosszok) előfordulási gyakoriságát összegeztük, körülbelül 10 nm-es spektrális ablakokat használva. Az így kapott abszorbanciasávokat a hozzájuk tartozó előfordulási értékekkel vonaldiagramokon ábrázoltuk.

4. EREDMÉNYEK ÉS ÉRTÉKELÉSÜK

4.1. Csonthéjas gyümölcsök érettségének meghatározása NIR spektroszkópiával

Ez az alfejezet gyümölcsfajonként foglalja össze a kézi NIR spektrométer hatékonyságát a csonthéjas gyümölcsök érettségének és egyes minőségi jellemzőinek becslésében. Minden esetben PCA-LDA és PLSR modelleket fajtánként építettük először a teljes adatkészletre, majd a gyümölcsök érettebb és éretlenebb oldalán rögzített adatokra, optimált spektrum előkezelést követően.

4.1.1. Cseresznye érettségének meghatározása

A különböző érettségi állapotban betakarított cseresznyék esetében összesen 26, illetve 21 előválogatott mintacsoport került elemzésre. A cseresznyék színe a teljesen éretlen zöldtől a túlérett, mélyvörös árnyalatig terjedt. Az előválogatott gyümölcsmintákat hat érettségi klaszterbe soroltuk. A PCA-LDA osztályozó modellek mindkét fajtánál azt mutatták, hogy a különböző érettségi szintek világosan elkülöníthetők. A modellek validálása során az átlagos helyes osztályba sorlás a BB fajtánál 42,5 - 55,5%, a VC fajtánál pedig 48,8 - 78,0% között volt.

Cseresznyefajták esetén a legpontosabb PLSR modelleket az átlagos L^* , DMC, SSC és TAC becslése során kaptuk. A BB fajtánál a DMC maximális becslési pontossága 0,88 - 0,83 R^2 és 2,07 - 2,50% m/m RMSE volt. Az SSC becslése 0,89 - 0,86 R^2 -tel és 1,09 - 1,23% brix RMSE-vel történt. A TAC becslése 0,86 - 0,83 R^2 -tel és 12,14 - 13,51 mg/L RMSE-vel történt a kalibráció és validáció során. A VC fajtánál az SSC maximális becslési pontossága 0,95 - 0,93 R^2 és 0,69 - 0,79% brix RMSE volt. A TAC becslése 0,91 - 0,87 R^2 -tel és értékkel 16,20 - 19,86 mg/L RMSE-vel történt. Az átlagos L^* becslése 0,83 - 0,78 R^2 -tel és értékkel 4,76 - 5,44-vel RMSE történt kalibráció és validáció során.

4.1.2. Meggy érettségének meghatározása

A különböző érettségi állapotban betakarított meggyek esetében összesen 20, illetve 21 előválogatott mintacsoport került elemzésre. A meggyek színe a világos rózsaszíntől a mélyvörös érett színig terjedt. Az előválogatott gyümölcsmintákat négy érettségi klaszterbe soroltuk. A PCA-LDA osztályozó modellek mindkét fajtánál azt mutatták, hogy a különböző érettségi szintek világosan elkülöníthetők. A modellek validálása során az átlagos helyes osztályba sorlás a KJ fajtánál 76,8 - 82,4%, az UF fajtánál pedig 78,3 - 80,9% között volt. Féreosztályozás jellemzően a szomszédos érettségi szinteken fordult elő.

Meggyfajták esetén a legpontosabb PLSR modelleket az átlagos L^* , b^* , DMC, SSC és TAC becslése során kaptuk. A KJ fajtánál a DMC maximális becslési pontossága 0,79 - 0,72 R^2 és 1,47 - 1,67% m/m RMSE volt. A TAC becslése 0,91 - 0,87 R^2 -tel és 15,14 - 18,03 mg/L RMSE-vel történt. Az átlagos b^* becslése 0,93 - 0,91 R^2 -tel és 1,26 - 1,51 RMSE-vel történt a kalibráció és validáció során. Az UF fajtánál az SSC maximális becslési pontossága 0,87 - 0,83 R^2 és 0,98 - 1,10% brix RMSE volt. A TAC becslése 0,89 - 0,87 R^2 -tel és 18,67 - 20,98 mg/L RMSE-vel történt. Az átlagos b^* becslése 0,91 - 0,89 R^2 -tel és 1,54 - 1,78 RMSE-vel történt a kalibráció és validáció során.

4.1.3. Szilva érettségének meghatározása

A különböző érettségi állapotban betakarított szilvák esetében összesen 20 és 20 előválogatott mintacsoport került elemzésre. A szilvák színe az éretlen zöldtől a sötétlilaig terjedt. Az előválogatott gyümölcsmintákat fajtánként öt, illetve négy érettségi klaszterbe soroltuk. A szilvamintákat jelentős arányú éretlen gyümölcs jellemezte, amit a PCA-LDA modellek is egyértelműen mutattak. A modellek validálása során az átlagos helyes osztályba sorolás az EL fajtánál 60,1 - 70,7%, az ST

fajtánál pedig 58,7 - 68,0% között volt. Félreosztályozás jellemzően a szomszédos érettségi szinteken fordultak elő.

Szilvafajták esetén a legpontosabb PLSR modelleket a színjellemzők, SSC és TA becslése során kaptuk. Az EL fajtánál az SSC maximális becslési pontossága 0,97 - 0,95 R^2 és 0,32 - 0,41% brix RMSE volt. A TA becslése 0,97 - 0,95 R^2 -tel és 0,58 - 0,74 mg/g RMSE-vel történt. Az átlagos b^* becslése 0,92 - 0,88 R^2 -tel és 2,40 - 2,84 RMSE-vel történt a kalibráció és validáció során. Az ST fajtánál az SSC maximális becslési pontossága R^2 0,93 - 0,86 és 0,40 - 0,55% brix RMSE volt. A TA becslése 0,94 - 0,90 R^2 -tel és 0,52 - 0,66 mg/g RMSE-vel történt. Az átlagos L^* becslése 0,86 - 0,82 R^2 -tel és 2,75 - 3,12 RMSE-vel történt a kalibráció és validáció során.

4.2. *Monilinia* fertőzés kimutatása csonthéjas gyümölcsökön spektrális jellemzők alapján

Ebben a részben foglaljuk össze a kézi NIR-műszer és a hiperspektrális képalkotás alkalmazásának hatékonyságát a különbözőképpen fertőzött és tárolt meggy és szilva megkülönböztetésére. Az osztályozási modelleket fajtánként és kezelési csoportonként, optimált spektrális előkezelés után építettük.

4.2.1. Kimutatási eredmények kézi NIR spektrométerrel

Meggy vizsgálati eredmények

A kézi spektrométerrel rögzített adatok előzetes vizsgálata során csak az UF meggyek mutattak megfigyelhető elkülönülési tendenciákat a mintaelőkészítés függvényében. A tárolási hőmérséklet hatása egyértelműen megfigyelhető volt, míg a minták befertőzésének módja kevésbé, mialapján nem volt kimutatható szignifikáns különbség.

Felügyelt osztályozásként optimált PCA-LDA modellezést alkalmaztunk annak meghatározására, hogy milyen pontossággal lehet a kezdeti *Monilinia* konídium koncentrációt meghatározni a meggy NIR spektrumok alapján. Ehhez az osztályozáshoz a fertőzés utáni napon rögzített spektrumokat használtuk, amelyeket tovább szűrtünk a minták befertőzése és tárolási körülményei alapján. A hűtött körülmények között tárolt minták esetében az átlagos helyes osztályba sorolás a modellépítés során 63,1 - 85,1%, míg a validálás során 30,5 - 42,0% között mozgott. A szobahőmérsékleten tárolt minták esetében az átlagos helyes osztályozásba sorolás a modellépítés során 58,2 - 75,4%, míg a validálás során 23,5 - 31,5% között mozgott.

A kísérletbe bevont *M. fructigena* szaporodási jellemzői miatt csak azok a minták mutattak *Monilinia* aktivitást, amelyek sérülés útján lettek befertőzve és szobahőmérsékleten voltak tárolva. A romlás jeleit mutató gyümölcsök tekintetében jelentős variabilitás volt megfigyelhető még a párhuzamosan előkészített minták között is, ami a meggy szerkezeti és összetételbeli inhomogenitásának tulajdonítható. Fontosnak tartották megvizsgálni a tárolás különböző napjain barna rothadás jeleit mutató meggyekben kimutatható spektrális trendeket. Ehhez szintén optimált PCA-LDA modellezést alkalmaztunk, kizárólag azon minták spektrumait felhasználva, amelyek a 7 napos tárolás során rothadás jeleit mutatták. A modellezést megelőzően az adatokat specifikusan szűrtük azokra a napokra, amikor a rothadás megjelent (ezt "0. nap"-ként jelöltük) ± 2 nap intervallumban, és ezt az információt felhasználva végeztük az osztályozó modelleket. Az átlagos helyes osztályozás az EB fajtánál 77,2 és 48,2%, az UF fajtánál 49,1 és 31,7% volt a modellezés és validálás során. Jelentősebb félreosztályozás jellemzően az egymást követő napok adatai között fordult elő.

Szilva vizsgálati eredmények

A kézi spektrométerrel rögzített adatok előzetes vizsgálata során csak az TP szilvák mutattak megfigyelhető elkülönülési tendenciákat a mintaelőkészítés függvényében. A tárolási hőmérséklet hatása egyértelműen megfigyelhető volt, míg a minták befertőzésének módja kevésbé, mialapján nem volt kimutatható szignifikáns különbség.

Felügyelt osztályozásként optimált PCA-LDA modellezést alkalmaztunk annak meghatározására, hogy milyen pontossággal lehet a kezdeti *Monilinia* konídium koncentrációt meghatározni a szilva NIR spektrumok alapján. Ehhez az osztályozáshoz a fertőzés utáni napon rögzített spektrumokat használtuk, amelyeket tovább szűrtünk a minták befertőzése és tárolási körülményei alapján. A hűtött körülmények között tárolt minták esetében az átlagos helyes osztályba sorolás a modellépítés során 74,2 - 92,9%, míg a validálás során 34,0 - 50,4% között mozgott. A szobahőmérsékleten tárolt minták esetében az átlagos helyes osztályozásba sorolás a modellépítés során 77,8 - 89,4%, míg a validálás során 39,2 - 51,6% között mozgott.

Szilvaminták esetében is igaz volt, hogy csak azok a minták mutattak *Monilinia* aktivitást, amelyek sérülés útján lettek befertőzve és szobahőmérsékleten voltak tárolva. Ellentétben a meggyekkel, számos szilvaminta mutatta a rothadás jeleit még viszonylag alacsony kezdeti konídium fertőzés mellett is. Ez a különbség részben a szilvák alacsonyabb savtartalmának tulajdonítható, szemben a meggyekkel, és kedvezőbb feltételeket biztosít a gombás fertőzés terjedéséhez. Fontosnak tartották megvizsgálni a tárolás különböző napjain barna rothadás jeleit mutató szilvákban kimutatható spektrális trendeket. Ehhez szintén optimált PCA-LDA modellezést alkalmaztunk, kizárólag azon minták spektrumait felhasználva, amelyek a 7 napos tárolás során rothadás jeleit mutatták. A modellezést megelőzően az adatokat specifikusan szűrtük azokra a napokra, amikor a rothadás megjelent (ezt "0. nap"-ként jelöltük) ± 2 nap intervallumban, és ezt az információt felhasználva végeztük az osztályozó modelleket. Az átlagos helyes osztályozás az TD fajtánál 61,0 és 49,6%, az TP fajtánál 38,9 és 25,3% volt a modellezés és validálás során. Jelentősebb félreosztályozás jellemzően az egymást követő napok adatai között fordult elő a TD fajtánál.

4.2.2. Kimutatási eredmények hiperspektrális képfeldolgozással

Meggy vizsgálati eredmények

A hiperspektrális képfeldolgozással rögzített meggyadatok előzetes vizsgálata során szintén jelentős, ugyanakkor következetes mintaelőkészítés szerinti trendeket mutatott különösen az UF fajta esetében, bár ez nem volt elegendő szignifikáns különbség kimutatásához.

Szintén optimált PCA-LDA modellezést alkalmaztunk a korábban részletezett adatszűrés után annak meghatározására, hogy milyen pontossággal lehet a kezdeti *Monilinia* konídium koncentrációt meghatározni a meggy hiperspektrális adatok alapján. A hűtött körülmények között tárolt minták esetében az átlagos helyes osztályba sorolás a modellépítés során 85,5 - 98,0%, míg a validálás során 33,1 - 53,3% között mozgott. A szobahőmérsékleten tárolt minták esetében az átlagos helyes osztályozásba sorolás a modellépítés során 61,6 - 89,1%, míg a validálás során 32,5 - 46,3% között mozgott. Az HSI osztályozási pontossága jobb volt, mint a kézi NIR műszerrel rögzített adatoké.

E mintáknál is megfigyelhető volt, hogy a viszonylag nagy variabilitással mutatták a *Monilinia*-fertőzés látható jeleit. Ettől függetlenül a PCA-LDA osztályozás előtti adatszűrést a korábban részletezett módon végeztük, csak éppen meggyek hiperspektrális adatain. Az átlagos helyes osztályozás az EB fajta esetében 72,6 és 25,9%, az UF fajta esetében pedig 86,5 és 57,4% volt.

Szilva vizsgálati eredmények

A hiperspektrális képfeldolgozással rögzített meggyadatok előzetes vizsgálata során szintén jelentős, ugyanakkor következetes mintaelőkészítés szerinti trendeket mutatott, különösen a TP fajta esetében, bár ez nem volt elegendő szignifikáns különbség kimutatásához.

Szintén optimált PCA-LDA modellezést alkalmaztunk a korábban részletezett adatszűrés után annak meghatározására, hogy milyen pontossággal lehet a kezdeti *Monilinia* konídium koncentrációt meghatározni a meggy hiperspektrális adatok alapján. A hűtött körülmények között tárolt minták esetében az átlagos helyes osztályba sorolás a modellépítés során 83,8 - 96,9%, míg a validálás során 50,0 - 69,5% között mozgott. A szobahőmérsékleten tárolt minták esetében az átlagos helyes osztályozásba sorolás a modellépítés során 81,6 - 100%, míg a validálás során 42,8 - 75,2% között mozgott. Az HSI osztályozási pontossága jobb volt, mint a kézi NIR eszközzel rögzített adatoké. A szilvák esetében is igaz volt, hogy az HSI osztályozás pontossága jobb volt, mint a kézi NIR műszerrel rögzített adatoké.

E mintáknál is megfigyelhető volt, hogy a *Monilinia* fertőzés jeleit viszonylag nagy variabilitással mutatták. A PCA-LDA osztályozás előtti adatszűrést a korábban részletezett módon végeztük, csak éppen szilvák hiperspektrális adatain. Az átlagos helyes osztályozás a TD fajta esetében 65,3 és 46,5%, a TP fajta esetében pedig 57,3 és 33,5% volt.

4.3. Gyümölcsle dúsítás meghatározása NIR spektroszkópiával

Ebben a részben foglaljuk össze a kézi és asztali NIR spektrométerekkel elért hatékonyságot a gyümölcslevekhez különböző kombinációkban és koncentrációkban adagolt növényi kivonatok kimutatásában és előrejelzésében. A különböző műszerekkel rögzített spektrumokon alapuló modellezési eredményeket párban mutatjuk, mivel ugyanazo mintákat elemeztük mindkét műszerrel.

4.3.1. Kimutatási eredmények meggylevek esetében

A meggylevek két különböző spektrométerrel rögzített adatainak előzetes elemzése alapvetően az eltérő mérési konstrukcióra világított rá. Az optimált PCA-LDA modellek a meggyle-keverékek logikus rendeződést mutatták. Különösen az asztali NIR-műszer adatain alapuló modellezésben mutatkozott, hogy a keverékek összetettségének növekedésével az ezeket a mintákat reprezentáló adatpontok egyre nagyobb mértékben mutatták a részben hasonló összetételű mintáknak megfelelő pontok átfedését. A kézi műszer esetében az átlagos helyes osztályozás 66,65 és 42,45%, az asztali műszer esetében 71,67 és 56,33% volt a modellépítés és a validálás során.

Fontosnak tartottuk megvizsgálni, hogy a hozzáadott kivonattartalmat milyen pontossággal lehet megkülönböztetni a meggylevekben, a keverékek összetételétől függetlenül. E célra szintén optimált PCA-LDA modellezést alkalmaztunk. Az eredmények egyértelmű szeparációs tendenciát mutattak összes extrakttartalom szerint. Az osztályozási pontosság kézi műszer esetében 71,73 és 49,62%, az asztali műszer esetében 76,02 és 58,29% volt a modellépítés és a validálás során. Félreosztályozás a szomszédos kisebb vagy nagyobb koncentrációs szintekre történt.

PLSR modellezést végeztünk a meggylevekhez adagolt különböző kivonatok koncentrációjának becslésére. A kézi NIR műszer esetében a CBE becslésekor az R_{cv}^2 értéke 0,46 – 0,93 között; az RMSE_{cv} értéke 0,07 – 0,42 g/100 mL között alakult. A GSE becslésekor az R_{cv}^2 értéke 0,65 – 0,93 között; az RMSE_{cv} értéke 0,07 – 0,34 g/100 g/mL között változott. A PGE becslésekor az R_{cv}^2 értéke 0,66 – 0,93 között; az RMSE_{cv} értéke 0,07 – 0,31 g/100 mL között alakult. Az összes kivonattartalom becslésekor az R_{cv}^2 értéke 0,66 – 0,93 között; az RMSE_{cv} értéke 0,22 – 0,49 g/100 mL között alakult. Az asztali NIR műszer esetében a CBE becslésekor az R_{cv}^2 értéke 0,86 – 0,98 között; az RMSE_{cv}

értéke 0,04 – 0,21 g/100 mL között alakult. A GSE becslésekor az R_{cv}^2 értéke 0,90 – 0,98 között; az RMSEcv értéke 0,04 – 0,23 g/100 g/mL között változott. A PGE becslésekor az R_{cv}^2 értéke 0,86 – 0,98 között; az RMSEcv értéke 0,04 – 0,16 g/100 mL között alakult. Az összes kivonattartalom becslésekor az R_{cv}^2 értéke 0,86 – 0,98 között; az RMSEcv értéke 0,12 – 0,32 g/100 mL között alakult.

4.3.2. Kimutatási eredmények szilvalevek esetében

A meggylevelek két különböző spektrométerrel rögzített adatainak előzetes elemzése szintén az eltérő mérési konstrukcióra világított rá. Az optimált PCA-LDA modellek szilvalé-keverékek kevésbé logikus rendeződést mutatták a meggyleveknél tapasztaltakkal ellentétben. Az asztali NIR-műszerrel kapott adatok esetében hangsúlyosabb, hogy a keverékek összetettségének növekedésével az ezeket a mintákat reprezentáló adatpontok egyre nagyobb átfedésbe kerülnek a részben hasonló összetételű mintákat reprezentáló pontokkal. A kézi műszer esetében az átlagos helyes osztályozás 53,11%-ról 27,04%, az asztali műszer esetében 55,08%-ról 34,04% volt a modellépítés és a validálás során.

E minták esetében is fontosnak tartottuk megvizsgálni, hogy a hozzáadott kivonattartalmat milyen pontossággal lehet megkülönböztetni a szilvalevekben, a keverékek összetételétől függetlenül. A PCA-LDA modellezési eredmények egyértelmű összes extrakttartalom szerinti szeparációs tendenciát mutattak. Az osztályozási pontosság kézi műszer esetében 58,07%-ról 41,45%, az asztali műszer esetében 66,96%-ról 46,29% volt a modellépítés és a validálás során. Félreosztályozás a szomszédos kisebb vagy nagyobb koncentrációs szintekre történt.

PLSR modellezést végeztünk a szilvalevekhez adagolt különböző kivonatok koncentrációjának becslésére. A kézi NIR eszköz esetében a CBE becslésekor az R_{cv}^2 értéke 0,53 – 0,84 között; az RMSEcv értéke 0,13 – 0,59 g/100 mL között alakult. A GSE becslésekor az R_{cv}^2 értéke 0,42 – 0,93 között; az RMSEcv értéke 0,12 – 0,43 g/100 g/mL között változott. A PGE becslésekor az R_{cv}^2 értéke 0,47 – 0,93 között; az RMSEcv értéke 0,12 – 0,62 g/100 mL között alakult. Az összes kivonattartalom becslésekor az R_{cv}^2 értéke 0,77 – 0,93 között; az RMSEcv értéke 0,23 – 0,40 g/100 mL között alakult. Az asztali NIR eszköz esetében a CBE becslésekor az R_{cv}^2 értéke 0,61 – 0,98 között; az RMSEcv értéke 0,04 – 0,54 g/100 mL között alakult. A GSE becslésekor az R_{cv}^2 értéke 0,59 – 0,98 között volt; az RMSEcv értéke 0,04 – 0,37 g/100 g/mL között változott. A PGE becslésekor az R_{cv}^2 értéke 0,71 – 0,98 között volt; az RMSEcv értéke 0,04 – 0,32 g/100 mL között alakult. Az összes kivonattartalom becslésekor az R_{cv}^2 értéke 0,87 – 0,98 között; az RMSEcv értéke 0,13 – 0,28 g/100 mL között alakult.

5. KÖVETKEZTETÉSEK ÉS JAVASLATOK

A doktori kutatás keretében NIR spektroszkópián és hiperspektrális képalkotáson alapuló többváltozós statisztikai modellezést végeztünk azzal a céllal, hogy feltérképezzük a technika hatékony alkalmazhatóságának kulcsát csonthéjas gyümölcsök és az azokból készült termékek esetében.

A gyümölcsök fiziológiai érettségének roncsolásmentes meghatározására szánt édesceseresznyt, meggyet és szilvát érettség szerint nagyon inhomogén állapotban takarították be. Ez lehetővé tette az érés széles spektrumának vizsgálatát, de az eredmények nagyfokú variabilitását is eredményezte. Az előbbi megállapítás főként a cseresznyére volt igaz. A gyümölcsök szemmel érzékelhető érettség szerinti válogatását (előzetesen osztályozott minták) gyakran kihívást jelentett a mérések előkészítése során, mivel a rendelkezésre álló gyümölcsállomány nem egyenlő mennyiségben tartalmazta a különböző érettségi fokú gyümölcsöket, ezért a vizsgált gyümölcsök száma a nagyobb érettségi klaszterekben is egyenlőtlen volt. A gyümölcsök spektrális jellemzőinek rögzítéséhez kézi NIR műszert használtunk, amely a gyümölcstermesztési gyakorlatban terepi vizsgálatokhoz egyszerűen alkalmazható. A spektrumokat a gyümölcsök érettebb és kevésbé érett oldalain rögzítettük, hogy teszteljük a spektrum rögzítés hely hatását az becselő modellek pontosságára.

A kvalitatív modellezés, azaz az érettség szerinti osztályozás során spektrális előkezelés és NrPC-optimalizált LDA-t alkalmaztunk. A gyümölcsök egyes értékmérő tulajdonságainak becslésére spektrális előkezelés és NrLV-optimalizált PLS-regresszió került alkalmazásra. Az eredmények szerint az becselő modellek pontosságát befolyásolta, hogy teljes vagy részleges adatbázisokon alapultak-e. Az utóbbi esetben az, hogy érettebb vagy kevésbé érett oldali adatokon alapultak, az adott gyümölcsfajtától és becsült jellemzőtől függően változó volt. Az utóbbi esetben azonban, hogy az érettebb vagy az éretlenebb oldal adataira épültek-e, függhet vagy érzékeny lehet a gyümölcs fajtájától és a becslés tárgyát képező komponenstől.

Különböző meggy- és szilvafajtákat vontunk be azon vizsgálatokba, amelyek gyümölcsök barna rothadást okozó *Monilinia* kimutatását célozták. A spektrumokat kézi NIR-készülékkel három mérési ponton, illetve hiperspektrális képfeldolgozással felületi területről nyertük. Az utóbbi készülék vonalpásztázó működése lehetővé tette a gyümölcsök érintésmentes vizsgálatát, mintha azok egy futószalagon haladnának. A két különböző műszeres elemzéshez külön mintakészleteket készítettünk, mivel az alkalmazott HSI-rendszer megvilágító fénye nagyon intenzív volt.

A *M. fructigena* konídiumokkal különböző módon és mértékben fertőzött gyümölcsök közül csak a 20 °C felett tárolt, sérülés útján fertőzött minták mutatták a rothadás és konídiumképződés jeleit. E mintacsoportokon belül, a várakozásokkal ellentétben, a hasonlóan beoltott és tárolt gyümölcsök fertőzésre adott „válasza” eltérő volt. Egyes gyümölcsök korábban, mások később mutattak „értelmezhető” jeleket, ha egyáltalán mutattak. A felvett spektrumokban zavaró volt a gyümölcs felszínén a konídiumok megnövekedett mennyisége és a sebek levedzése. A zavaró hatás csökkentése érdekében a minőségi modellezés előtt különböző spektrális előkezelési technikákat alkalmaztunk, máskülönben a megkülönböztetés csak fényszóródáson alapult volna.

Általánosságban a SIMCA modellekben jelentős, de nem szignifikáns eltérés mutatkozott, ha a befertőzés és a tárolás különböző módjait együtt értékeltük a tárolás bizonyos napjain. A minták befertőzését követő első tárolási napon rögzített spektrumokon alapuló PCA-LDA modellek változó osztályozási pontosságot mutattak, de általánosságban a HSI pontosabb modelleket eredményezett. Érdekes módon az EB, UF és TP fajták mintái esetében ugyanazon mintacsoportok osztályozása volt

műszerenként a legpontosabb. A *Monilinia* fertőzés látható jeleinek megjelenési napja szerinti osztályozás átlagos helyes osztályozás EB és TD minták esetében kézi NIR spektrumok, UF és TP minták esetében HSI spektrumok alapján volt pontosabb.

Különböző kivonatokkal dúsított gyümölcslevek vizsgálatát transzflekciós és transzmissziós mérési elrendezésekben végeztük kézi NIR és asztali FT-NIR spektrométerekkel. A gyümölcslé mintákat mindkét műszerrel elemeztük. A vizsgált gyümölcslevek egyik sajátossága volt, hogy az adagolt kivonat nem mindig oldódott fel teljesen, és a por állagú szemcsék hajlamosak voltak kiüledni a mintatartóban. Homogenizálást követően a minták betöltésekor törekedtünk arra, hogy zavaró komponensektől mentes oldatot vizsgáljunk. Az adatok kvalitatív és kvantitatív elemzése során spektrum előkezelést, NrPC- vagy NrLV-optimalt PCA-LDA és PLSR modellezést végeztünk.

Eredményeink azt mutatják, hogy az asztali precíziós műszerrel rögzített adatokon alapuló kemometriai modellezés pontosabb osztályozást és koncentráció-bebecslést eredményezett. Ez egyrészt a műszer felbontásának, másrészt a mérési elrendezésnek tulajdonítható. A transzmissziós mérési megközelítés jobban alkalmazható olyan átlátszó folyadékok mérésére, mint a vizsgált gyümölcslevek. A vizsgált gyümölcslevek modellezési eredményeit összehasonlítva megállapítható, hogy a meggylevek jobb illeszkedést mutattak. Feltételezhető, hogy ez a szilvale minták esetében előforduló, ismeretlen mintaelőkészítési anomáliáknak tudható be.

A HSI és NIR műszerekkel rögzített spektrumokon alapuló kemometriai modellezési eredmények viszonylag nagy variabilitást mutatnak, különösen az osztályozás során. Ennek elsődleges oka a gyümölcsök természetesen nagy variabilitása, még a párhuzamos minták ellenére is. Részben méréstechnikai, részben statisztikai módszerfejlesztéseink komoly új tudományos jelentőséggel bírnak, mert olyan gazdaságilag igen jelentős gyümölcsök vizsgálatára épülnek, amelyek amelyek teljeskörű roncsolásmentes minősítéséről mind a szakirodalomban, mind a gyakorlatban nagyon kevés forrásanyag áll rendelkezésre. A disszertációban bemutatott kis méretű kézi NIR-műszerek helyszíni vizsgálatokhoz használhatók, míg a HSI vonal pásztázó spektrum felvétele a folyamatos termelési folyamatokat támogathatja. Ezenkívül a kemometriai modellezések alapján kiemelkedő abszorpciós sávok hozzájárulhatnak a célműszerek fejlesztéséhez.

A fenti összegzés alapján a következő javaslataim vannak a kutatások kiterjesztését illetően:

- A gyümölcsvizsgálatok előkészítése nagyobb elemszámú mintacsoportokkal,
- Nem vizsgált tényezők figyelembe vétele a modellezés során (pl. eltérő származás, szezonális hatások stb.),
- A gyümölcsök előválogatása nem csupán vizuális jellemzők alapján,
- A gyümölcsök tárolásának és mérési körülményeinek nagyon precíz beállítása,
- Különböző hullámhossz szelekciós módszerek alkalmazása kemometriai modellezéseket megelőzően,
- Egyéb kemometriai módszerek bevonása az adatelemzésbe (pl. QDA, PLS-DA, SVM, k-NN),
- Kalibrációtranszfer precíziós asztali és kézi műszerek között,
- A modellek tesztelése teljesen független mintaállományokon.

6. ÚJ TUDOMÁNYOS EREDMÉNYEK

Az új tudományos eredményekben gyümölcsök érettségének meghatározása során használt kézi közeli infravörös (NIR) spektrométer a NIR-S-G1 típusra (InnoSpectra Co., Hsinchu, Tajvan) jelenti. A *Monilinia* kimutatására irányuló vizsgálatokban a kézi NIR-műszer a NIR-S-G1 (InnoSpectra Co., Hsinchu, Tajvan), a hiperspektrális képfeldolgozás pedig a Headwall XEVA-1648 XC134 rendszerre utal. A gyümölcsle vizsgálatok során használt kézi NIR spektrométer a MicroNIR (Viavi, Scottsdale, USA), míg az asztali spektrométer a NIRFlex N-500-ra (Büchi Labortechnik AG, Flawil, Svájc) utal. Az osztályozási modellezés a főkomponens-analízisen alapuló lineáris diskriminancia analízist (PCA-LDA), míg a becslő modellezés a részleges legkisebb négyzetek regressziót (PLSR) jelenti.

Új tudományos eredmények csonthéjas gyümölcsök érettségének meghatározásában kézi NIR spektrométerrel (950-1650 nm)

1. Meghatároztam, hogy a kézi NIR spektrométer milyen hatékonysággal alkalmazható csonthéjas gyümölcsök érettségi szerinti osztályozására.
 - Cseresznyék esetében az osztályozó modellek akár 91,7 és 78,0%-os pontossággal is teljesítettek a modellépítés és validálás során.
 - Meggyek esetében az osztályozó modellek akár 87,8 és 82,4%-os pontossággal is teljesítettek a modellépítés és validálás során,
 - Szilvák esetében az osztályozó modellek akár 82,1%-os és 70,7%-os pontossággal is teljesítettek a modellépítés és validálás során.
2. Meghatároztam, hogy a kézi NIR spektrométer milyen hatékonysággal alkalmazható csonthéjas gyümölcsök szárazanyag-tartalmának becslésére.
 - Cseresznyék esetében a becslés maximális R^2 értéke 0.88 (RMSE_c = 2.07% m/m) és 0.83 (RMSE_{cv} = 2.50% m/m) volt a modellezés és validálás során.
 - Meggyek esetében a becslés maximális R^2 értéke 0.79 (RMSE_c = 1.47% m/m) és 0.72 (RMSE_{cv} = 1.67% m/m) volt a modellezés és validálás során.
 - Szilvák esetében a becslés maximális R^2 értéke 0.45 (RMSE_c = 1.02% m/m) és 0.35 (RMSE_{cv} = 1.11% m/m) a modellezés és validálás során.
3. Meghatároztam, hogy a kézi NIR spektrométer milyen hatékonysággal alkalmazható csonthéjas gyümölcsök vízzoldható szilárdanyag-tartalmának becslésére.
 - Cseresznyék esetében a becslés maximális R^2 értéke 0.95 (RMSE_c = 0.69% brix) és 0.93 (RMSE_{cv} = 0.79% brix) volt a modellezés és validálás során.
 - Meggyek esetében a becslés maximális R^2 értéke 0.87 (RMSE_c = 0.98% brix) és 0.83 (RMSE_{cv} = 1.10% brix) volt a modellezés és validálás során.
 - Szilvák esetében a becslés maximális R^2 értéke 0.97, (RMSE_c = 0.32% brix) és 0.95 (RMSE_{cv} = 0.41% brix) volt a modellezés és validálás során.

Új tudományos eredmények csonthéjas gyümölcsök felületi *Monilinia*-szennyezettségének spektrális kimutathatóságáról kézi NIR spektrométer vagy hiperspektrális képalkotás (1000- 1650 nm) alkalmazásával

4. Először határoztam meg a kézi NIR spektrométer teljesítményét a *Monilinia fructigena* fertőzés detektálására csonthéjas gyümölcsök (sérüléssel vagy anélkül, hűtött vagy szobahőmérsékleten tárolva) felületén a befertőzést követő első tárolási napon rögzített spektrális adatok alapján. Az osztályozó modellek a tárolási körülmények szerint külön épültek:

- meggyek esetében négy konídiumos szennyezettségi szint (tízszerez hígításban: ~ 100-10-1-0.1 konídium/ μ L) szerinti különbségtételhez, amikoris “Érdi bőtermő” meggyek osztályozási pontossága a modellépítés és validálás során 63,1-77,6% és 23,5-34,1% között, “Újfehértói” meggyek esetében pedig 58,2-85,1% és 24,6-42,0% között alakult.
- szilvák esetében három konídiumos szennyezettségi szint (tízszerez hígításban: ~ 100-10-1 konídium/ μ L) szerinti különbségtételhez, amikoris a “Topend” szilvák az osztályozási pontossága a modellépítés és validálás során 74,2-84,2% és 34,0-50,4% között, “Topend plus” szilvák esetében pedig 78,9-92,9% és 35,1-51,6% között alakult.

5. Először határoztam meg a hiperspektrális képfeldolgozás teljesítményét a *Monilinia fructigena* fertőzés detektálására csonthejas gyümölcsök (sérüléssel vagy anélkül, hűtött vagy szobahőmérsékleten tárolva) felületén a befertőzést követő első tárolási napon rögzített spektrális adatok alapján. Az osztályozó modellek a tárolási körülmények szerint külön épültek:

- meggyek esetében négy konídiumos szennyezettségi szint (tízszerez hígításban: ~ 100-10-1-0.1 konídium/ μ L) szerinti különbségtételhez, amikoris “Érdi bőtermő” meggyek osztályozási pontossága a modellépítés és validálás során 61,6-85,6% és 33,1-45,0% között, “Újfehértói” meggyek esetében pedig 83,4-98,0% és 32,5-53,3% között alakult.
- szilvák esetében három konídiumos szennyezettségi szint (tízszerez hígításban: ~ 100-10-1 konídium/ μ L) szerinti különbségtételhez, amikoris a “Topend” szilvák az osztályozási pontossága a modellépítés és validálás során “Topend” szilvák osztályozási pontossága 81,6-97,1% és 42,8-75,2% között, “Topend plus” szilvák esetében pedig 78,9-87,1%-os és 50,0-79,3% között alakult.

Új tudományos eredmények gyümölcslevek növényi kivonatokkal történő dúsításának predikciójáról NIR spektroszkópiával (1000–1650 nm)

6. Meghatároztam a kézi NIR spektrométer teljesítményét a gyümölcslevek növényi kivonatokkal történő dúsításának becslésére.

- Egyszerű meggylé keverékekben a vörösfonya kivonatot $R_{cv}^2 = 0,92$ és $RMSE_{cv} = 0,25$ g/100 mL pontossággal, a szőlőmag kivonatot $R_{cv}^2 = 0,90$ és $RMSE_{cv} = 0,27$ g/100 mL pontossággal, a gránátalma kivonatot pedig $R_{cv}^2 = 0,87$ és $RMSE_{cv} = 0,31$ g/100 mL pontossággal becsültem.
- Egyszerű szilvalé keverékekben a vörösfonya kivonatot $R_{cv}^2 = 0,53$ és $RMSE_{cv} = 0,59$ g/100 mL pontossággal, a szőlőmag kivonat tartalmát $R_{cv}^2 = 0,76$ és $RMSE_{cv} = 0,42$ g/100 mL pontossággal, a gránátalma kivonatot pedig $R_{cv}^2 = 0,47$ és $RMSE_{cv} = 0,62$ g/100 mL pontossággal becsültem.

7. Meghatároztam az asztali NIR spektrométer teljesítményét a gyümölcslevek növényi kivonatokkal történő dúsításának becslésére.

- Egyszerű meggylé keverékekben a vörösfonya kivonatot $R_{cv}^2 = 0,97$ és $RMSE_{cv} = 0,13$ g/100 mL pontossággal, a szőlőmag kivonat tartalmát $R_{cv}^2 = 0,92$ és $RMSE_{cv} = 0,23$ g/100 mL pontossággal, a gránátalma kivonatot pedig $R_{cv}^2 = 0,97$ és $RMSE_{cv} = 0,15$ g/100 mL pontossággal becsültem.
- Egyszerű szilvalé keverékekben a vörösfonya kivonatot $R_{cv}^2 = 0,61$ és $RMSE_{cv} = 0,54$ g/100 mL pontossággal, a szőlőmag kivonat tartalmát $R_{cv}^2 = 0,90$ és $RMSE_{cv} = 0,27$ g/100 mL pontossággal, a gránátalma kivonatot pedig $R_{cv}^2 = 0,98$ és $RMSE_{cv} = 0,18$ g/100 mL pontossággal becsültem.

7. TÉMÁHOZ KAPCSOLÓDÓ PUBLIKÁCIÓK

Elsőszerzős publikációk

- Flóra Vitális**, Juan Pablo Aguinag Bósquez, Mátyás Lukács, Marietta Petróczy, Marietta Fodor, Zoltán Gillay, Zoltán Kovács (2024). Development of state-of-the-art correlative rapid methods for the non-destructive control of fruit products. *Scientia et Securitas*, 4(4), 258-264. (DOI: [10.1556/112.2023.00202](https://doi.org/10.1556/112.2023.00202))
- Flora Vitalis**, Jelena Muncan, Sukritta Anantwittayanon, Zoltan Kovacs, Roumiana Tsenkova (2023). Aquaphotomics Monitoring of Lettuce Freshness During Cold Storage. *Foods*, 12(2): 258. (DOI: [10.3390/foods12020258](https://doi.org/10.3390/foods12020258)) **Q1** (2023)
- Flora Vitalis**, David Tjandra Nugraha, Balkis Aouadi, Juan Pablo Aguinaga Bósquez, Zsanett Bodor, John-Lewis Zinia Zaukuu, Tamás Kocsis, Viktoria Zsom-Muha, Zoltan Gillay, Zoltan Kovacs (2021). Detection of Monilia Contamination in Plum and Plum Juice with NIR Spectroscopy and Electronic Tongue, *Chemosensors*, 9(12), 355. (DOI: [10.3390/chemosensors9120355](https://doi.org/10.3390/chemosensors9120355)) – **Q2** (2023)
- Vitális Flóra** (2021). Növényi eredetű élelmiszerek eredetiségének meghatározása közeli infravörös spektroszkópiával. *Táplálkozástudományi Morzsák Hírlevél*, 4(3), pp. 11-13. (ISSN: [2630-8975](https://doi.org/10.26308/2630-8975))
- Flora Vitalis**, John-Lewis Zinia Zaukuu, Zsanett Bodor, Balkis Aouadi, Géza Hitka, Timea Kaszab, Viktoria Zsom-Muha, Zoltan Gillay, Zoltan Kovacs (2020). Detection and Quantification of Tomato Paste Adulteration Using Conventional and Rapid Analytical Methods, *Sensors*, 20(21), 6059. (DOI: [10.3390/s20216059](https://doi.org/10.3390/s20216059)) **Q1** (2023)
- Vitális Flóra**, Bodor Zsanett, John-Lewis Zinia Zaukuu, Bázár György, Kovács Zoltán (2019). Aquaphotomics: a közeli infravörös spektroszkópia innovatív, víz központú alkalmazása [Aquaphotomics: an innovative application of near-infrared spectroscopy focusing on water]. *Élelmiszervizsgálati Közlemények*, 65(4). pp. 2672-2687., 16 p. (ISSN: [2676-8704](https://doi.org/10.26772/2676-8704)) – **Q4** (2023)

Társszerzős publikációk

- Gergo Szabo, **Flora Vitalis**, Zsuzsanna Horvath-Mezofi, Monika Gob, Aguinaga Juan Palblo Bosquez, Zoltan Gillay, Tamas Zsom, Lien Le Puong Nguyen, Geza Hitka, Zoltan Kovacs, Laszlo Friedrich (2023). Application of Near Infrared Spectroscopy to Monitor the Quality Change of Sour Cherry Stored Under Modified Atmosphere Conditions. *Sensors*. 23(1):479. (DOI: [10.3390/s23010479](https://doi.org/10.3390/s23010479)) **Q1** (2023)
- Livia Darnay, **Flóra Vitális**, Anna Szepessy, Dávid Bencze, Tamás Csurka, József Surányi, Ferenc Firtha, Péter Laczay (2022). Comparison of different visual methods to follow the effect of milk heat treatment and microbial transglutaminase on appearance of semi-hard buffalo cheese. *Food Control*, 139, 109049. (DOI: [10.1016/j.foodcont.2022.109049](https://doi.org/10.1016/j.foodcont.2022.109049)) **D1** (2023)
- Balkis Aouadi, **Flora Vitalis**, Zsanett Bodor, John-Lewis Zinia Zaukuu, Istvan Kertesz, Zoltan Kovacs (2022). NIRS and Aquaphotomics Trace Robusta-to-Arabica Ratio in Liquid Coffee Blends, *Molecules*, 27(2), 388. (DOI: [10.3390/molecules27020388](https://doi.org/10.3390/molecules27020388)) – **Q1** (2023)

- David Tjandra Nugraha, John-Lewis Zinia Zaukuu, Juan Pablo Aguinaga Bósquez, Zsanett Bodor, **Flóra Vitalis**, Zoltan Kovacs (2021). Near-Infrared Spectroscopy and Aquaphotomics for Monitoring Mung Bean (*Vigna radiata*) Sprout Growth and Validation of Ascorbic Acid Content, *Sensors*, 21(2), 611. (DOI: [10.3390/s21020611](https://doi.org/10.3390/s21020611)) – **Q1** (2023)
- Haruna Gado Yakubu, Zoltán Kovács, **Flóra Vitális**, György Bázár (2021). Near-infrared spectroscopy: rapid and effective tool for measuring fructose content [Közeli-infravörös spektroszkópia: gyors és hatékony eszköz a fruktóztartalom mérésére]. *Élelmiszervizsgálati Közlemények*, 67(1), pp. 3249-3268. (DOI: [10.52091/JFI-2021/1-1-ENG](https://doi.org/10.52091/JFI-2021/1-1-ENG)) – **Q4** (2023)
- Balkis Aouadi, John-Lewis Zinia Zaukuu, **Flóra Vitális**, Zsanett Bodor, Orsolya Fehér, Zoltán Gillay, George Bazar, Zoltan Kovacs (2020). Historical Evolution and Food Control Achievements of Near Infrared Spectroscopy, Electronic Nose, and Electronic Tongue — Critical Overview, *Sensors*, 20(19), 5479. (DOI: [10.3390/s20195479](https://doi.org/10.3390/s20195479)) – **Q1** (2023)
- Zoltan Kovacs, Dániel Szöllősi, John-Lewis Zinia Zaukuu, Zsanett Bodor, **Flóra Vitális**, Balkis Aouadi, Zsom-Muha Viktória, Zoltan Gillay (2020). Factors influencing the long-term stability of electronic tongue and application of improved drift correction methods, *Biosensors*, 10(7), 74. (DOI: [10.3390/bios10070074](https://doi.org/10.3390/bios10070074)) – **Q1** (2023)
- Zaukuu, John Lewis Zinia, Aouadi, Balkis, Lukács, Mátyás, Bodor, Zsanett, Vitális, Flóra, Gillay, B., Gillay, Z., Friedrich, L., Kovacs, Z. (2020). Detecting Low Concentrations of Nitrogen-Based Adulterants in Whey Protein Powder Using Benchtop and Handheld NIR Spectrometers and the Feasibility of Scanning through Plastic Bag. *Molecules*, 25(11), 2522. (DOI: [10.3390/molecules25112522](https://doi.org/10.3390/molecules25112522)) – **Q1** (2023)
- Kata Józsa, **Flóra Vitális**, Zoltán Kovács, Gabriella Zsarnóczy (2022). Marhahús sertéshússal történő hamisításának kimutatása spektroszkópiás módszerekkel (1. rész). *A Hús: A Magyar Húsipar Szakmai Folyóirata: Az Országos Húsipari Kutatóintézet Folyóirata* 1: 1-2 pp. 16-21., 6 p. (DOI: [10.56616/meat.3411](https://doi.org/10.56616/meat.3411))

IRODALOMJEGYZÉK

- Chockchaisawasdee, Suwimol, John B. Golding, Quan V Vuong, Konstantinos Papoutsis, and Costas E. Stathopoulos. 2016. "Sweet Cherry: Composition, Postharvest Preservation, Processing and Trends for Its Future Use." *Trends in Food Science & Technology* 55:72–83.
- Firtha, F. 2011. "Argus Szoftver."
- Fodor, Marietta. 2022. "Development of FT-NIR Technique to Determine the Ripeness of Sweet Cherries and Sour Cherries." *Processes* 10(11):2423.
- Fodor, Marietta, Zsuzsa Jókai, Anna Matkovits, and Eszter Benes. 2023. "Assessment of Maturity of Plum Samples Using Fourier Transform Near-Infrared Technique Combined with Chemometric Methods." *Foods* 12(16):3059.
- Horváthné Petróczy, Marietta. 2009. "A Monilinia Fructicola És a Monilia Polystroma Megjelenése Magyarországon És a Védekezés Újabb Lehetősége." Corvinus University of Budapest, Budapest, Magyarország.
- Lao, Fei, and M. Monica Giusti. 2016. "Quantification of Purple Corn (Zea Mays L.) Anthocyanins Using Spectrophotometric and HPLC Approaches: Method Comparison and Correlation." *Food Analytical Methods* 9:1367–80.
- Lee, Jungmin, Robert W. Durst, Ronald E. Wrolstad, and Collaborators: Eisele T. Giusti M. M. Hach J. Hofsommer H. Koswig S. Krueger D. A. Kupina; S. Martin S. K. Martinsen B. K. Miller T. C. Paquette F. Ryabkova A. Skrede G. Trenn U. Wightman J. D. 2005. "Determination of Total Monomeric Anthocyanin Pigment Content of Fruit Juices, Beverages, Natural Colorants, and Wines by the PH Differential Method: Collaborative Study." *Journal of AOAC International* 88(5):1269–78.
- Lee, Sang Gil, Terrence M. Vance, Tae-Gyu Nam, Dae-Ok Kim, Sung I. Koo, and Ock K. Chun. 2016. "Evaluation of PH Differential and HPLC Methods Expressed as Cyanidin-3-Glucoside Equivalent for Measuring the Total Anthocyanin Contents of Berries." *Journal of Food Measurement and Characterization* 10:562–68.
- Manley, Marena. 2014. "Near-Infrared Spectroscopy and Hyperspectral Imaging: Non-Destructive Analysis of Biological Materials." *Chemical Society Reviews* 43(24):8200–8214.
- Pollner, Bernhard, and Zoltan Kovacs. 2016. "Multivariate Data Analysis Tools for R Including Aquaphotomics Methods, Aquap2."
- Savitzky, Abraham, and Marcel J. E. Golay. 1951. "Smoothing and Differentiation of Data by Simplified Least Squares Procedures." *Analytical Chemistry* 36(2):1627–39.
- Schuck, P., A. Dolivet, and R. Jeantet. 2012. "Determination of Dry Matter and Total Dry Matter." *Analytical Methods for Food and Dairy Powders; Schuck, P., Dolivet, A., Jeantet, R., Eds* 45–57.
- Tyl, Catrin, and George D. Sadler. 2017. "PH and Titratable Acidity." *Food Analysis* 389–406.
- Wold, Svante, and Michael Sjostrom. 1977. "SIMCA: A Method for Analyzing Chemical Data in Terms of Similarity and Analogy." Pp. 243–82 in.