



Méthodes non destructives d'évaluation des composés dérivés de la fumée

Vasiliki Summerson, Claudia Gonzalez Viejo, Sigfredo Fuentes

Digital Agriculture Food and Wine Group, School of Agriculture and Food, Faculty of Veterinary and Agricultural Sciences, The University of Melbourne, Building 142, Parkville 3010, Victoria, Australia

Les incendies de forêt sont de plus en plus fréquents dans le monde. L'exposition de la vigne à la fumée peut donner des vins caractérisés par des arômes de fumée désagréables. Les techniques chromatographiques actuelles pour évaluer les niveaux de composés dérivés de la fumée dans les baies et le vin sont destructives, longues et coûteuses à mettre en œuvre. Cette étude a permis d'évaluer l'utilisation de la technologie proche infrarouge ainsi que la modélisation du réseau neuronal artificiel comme outils rapides, non destructifs et rentables pour évaluer les composés dérivés de la fumée dans les baies, le moût et le vin.

Essais sur le terrain, vinification et analyse des phénols volatils et des glycoconjugués

Trois traitements par la fumée ont été appliqués pendant une heure sur des vignes de Cabernet Sauvignon, environ sept jours après la véraison, à l'aide d'une tente spécialement conçue à cet effet^{1, 2}. Les deux premiers traitements consistaient en une exposition à de la fumée de haute et de basse densité provenant de la combustion de ~5 et 1,5 kg de paille d'orge, respectivement ; le troisième traitement consistait en une exposition à de la fumée de haute densité couplée à un fin brouillard d'eau appliqué au niveau de la canopée, en plus d'un traitement témoin sans exposition à la fumée ni au brouillard d'eau, ainsi que d'un traitement témoin avec un brouillard d'eau mais sans exposition à la fumée. Les raisins ont ensuite été vinifiés à petite échelle en utilisant 5 kg de grappes par lot de fermentation, et en effectuant des triplicatas pour chaque traitement. Les niveaux de phénols volatils (PV) et de leurs glycoconjugués ont été déterminés dans le jus/homogénat de raisin (moût) des baies récoltées un jour après l'exposition à la fumée et à la récolte, ainsi que dans le vin final, en utilisant des méthodes d'analyse par dilution isotopique (SIDA) déjà décrites^{2, 3}.

Modèles de spectroscopie proche infrarouge

L'empreinte chimique des baies a été obtenue 24 heures après l'application des traitements par la fumée à l'aide d'un appareil portable de spectroscopie proche infrarouge (PIR) (Analyseur microPHAZIR™ RX ; Thermo Fisher Scientific, Waltham, MA, USA), dont la plage de mesure est de 1596-2396 nm^{1, 4}. Les mesures ont été effectuées sur un total de 36 baies par traitement en triplicatas et à température ambiante. Les échantillons de moût et de vin ont été évalués selon un protocole précédemment rapporté qui utilise un papier filtre Whatman® imbibé de l'échantillon analysé⁵. Chaque échantillon a été mesuré trois fois en utilisant trois échantillons par traitement.

Modélisation par apprentissage automatique (Machine learning)

Cinq modèles de régression de réseau neuronal artificiel (RNA) ont été développés à l'aide d'un code MATLAB® R2020b (Mathworks, Inc., Natick, MA, USA ; Figure 1) personnalisé⁵. Les modèles 1-3 ont utilisé les spectres PIR des baies de raisin (1596-2396 nm) mesurés 24 heures après l'exposition à la fumée comme entrées pour prédire

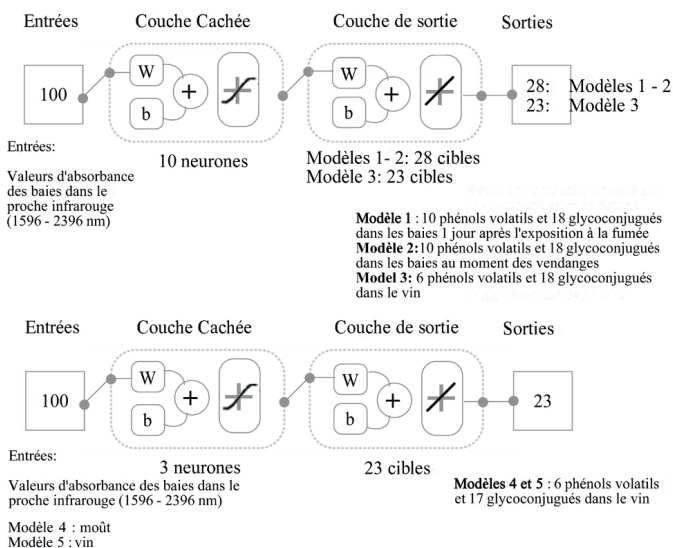


FIGURE 1. Réseaux feed-forward à deux couches pour les cinq modèles de réseaux neuronaux artificiels développés.

les niveaux de 10 PV et 18 glycoconjugués différents dans les raisins, 24 heures après l'exposition à la fumée (modèle 1) et à la récolte (modèle 2), ainsi que six PV et 17 glycoconjugués dans le vin final (modèle 3). D'autre part, les modèles 4 et 5 ont été créés en utilisant les valeurs d'absorbance PIR (1596-2396 nm) du moût et du vin, respectivement, pour prédire les niveaux de six PV et de 17 glycoconjugués dans le vin.

Résultats et discussion

Les cinq modèles ont été en mesure de prédire les niveaux de PV et de glycoconjugués dans les échantillons de baies et de vin avec une grande précision selon le coefficient de corrélation ($R \geq 0,98$) et sans aucun signe de surajustement selon leur performance basée sur l'erreur quadratique moyenne (EQM ; Figure 2). Les modèles 1-3 peuvent donc fournir une méthode applicable sur le terrain, non destructive et rapide pour évaluer les niveaux de composés de fumée dans les baies et le vin potentiel, permettant aux producteurs de prendre des décisions à temps pour éviter les baies fortement contaminées et économiser de l'argent en sélectionnant des échantillons plus petits pour une analyse chimique plus approfondie. En outre, les modèles 4 et 5 peuvent



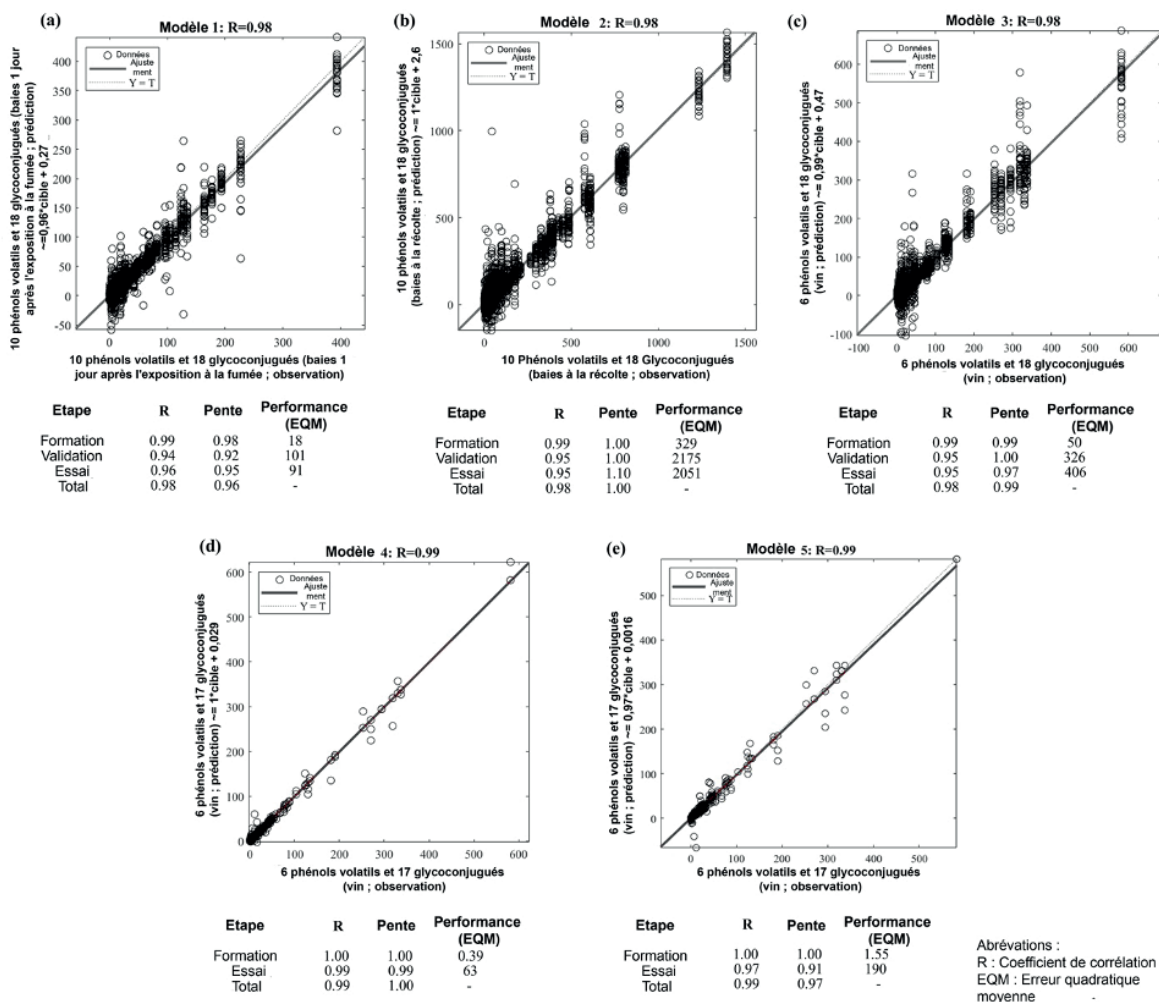


FIGURE 2. Modèles globaux de régression de réseau neuronal artificiel pour prédire les phénols volatils et les glycoconjugués (a) dans les baies un jour après exposition à la fumée, (b) dans les baies à la récolte, (c) dans le vin en utilisant les valeurs d'absorbance dans le proche infrarouge (PIR) des baies, et pour prédire les phénols volatils et les glycoconjugués (d) dans le vin en utilisant les valeurs d'absorbance dans le PIR du moût, et (e) dans le vin en utilisant les valeurs d'absorbance dans le PIR du vin.

être utilisés par les vinificateurs pour évaluer en temps quasi réel les niveaux de PV et de glycoconjugués dans le vin, en vue de décider s'il faut appliquer des traitements d'amélioration permettant de réduire ou d'éliminer le goût de fumée tels que le charbon actif. De plus, comme cette technique n'est pas destructive, des évaluations répétées peuvent être effectuées, permettant aux vinificateurs d'évaluer les changements dans les niveaux de PV et de glycoconjugués au fil du temps. Cependant, des recherches supplémentaires doivent être menées pour déployer les modèles dans des vignes naturellement contaminées par la fumée et pour développer des modèles pour d'autres cépages et types de vin⁵.

Conclusions

La spectroscopie proche infrarouge, associée à l'apprentissage automatique, peut fournir des outils rapides et non destructifs pour évaluer les niveaux de PV et de leurs glycoconjugués dans les raisins et le vin, permettant aux vinificateurs et aux viticulteurs de prendre des décisions rapides et rentables concernant les raisins et le vin contaminés. La méthode proposée est également peu coûteuse compte tenu de la disponibilité de dispositifs PIR abordables dont le prix

varie entre 2 000 et 5 000 dollars américains. Les modèles peuvent être intégrés et automatisés en utilisant des jumeaux numériques, ce qui peut favoriser la disponibilité des scénarios prédits d'altération liée à la fumée pour les producteurs. Ces derniers pourraient alors évaluer les meilleures techniques d'atténuation de l'altération liée à la fumée en temps opportun si des feux de brousse se produisent. ■

Financement : Remerciements : les auteurs tiennent à remercier Colleen Szeto et le professeur Kerry Wilkinson pour l'opportunité de participer à cette recherche. Le soutien financier de cette recherche a été fourni par le programme Digital Viticulture financé par le Networked Society Institute de l'Université de Melbourne, Australie, ainsi que par l'Australian Government Training Program Scholarship.

Sources : Article prenant sa source de l'article de recherche "Detection of smoke-derived compounds from bushfires in Cabernet-Sauvignon grapes, must, and wine using Near-Infrared spectroscopy and machine learning algorithms" (OENO One, 2020).

1 Summerson, V., Gonzalez Viejo, C., Torrico, D. D., Pang, A., & Fuentes, S. (2020). Detection of smoke-derived compounds from bushfires in Cabernet-Sauvignon grapes, must, and wine using Near-Infrared spectroscopy and machine learning algorithms. *OENO One*, 54(4), 1105–1119. <https://doi.org/10.20870/oeno-one.2020.54.4.4501>.

2 Szeto, C., Ristic, R., Capone, D., Puglisi, C., Pagay, V., Culbert, J., Jiang, W., Herderich, M., Tuke, J., & Wilkinson, K. (2020). Uptake and Glycosylation of Smoke-Derived Volatile Phenols by Cabernet Sauvignon Grapes and Their Subsequent Fate during Winemaking. *Molecules*, 25(16), 3720. <https://doi.org/10.3390/molecules25163720>.

3 Hayasaka, Y., Baldock, G., Parker, M., Pardon, K. H., Black, C. A., Herderich, M. J., Jeffery, D. W. (2010). Glycosylation of smoke-derived volatile phenols in grapes as a consequence of grapevine exposure to bushfire smoke. *Journal of Agricultural and Food Chemistry*, 58, 10989–10998. <https://doi.org/10.1021/jf103045t>.

4 Summerson, V., Gonzalez Viejo, C., Szeto, C., Wilkinson, K. L., Torrico, D. D., Pang, A., De Bei, R., & Fuentes, S. (2020). Classification of Smoke Contaminated Cabernet Sauvignon Berries and Leaves Based on Chemical Fingerprinting and Machine Learning Algorithms. *Sensors*, 20(18), 5099. <https://doi.org/10.3390/s20185099>.

5 Fuentes, S., Tongson, E. J., De Bei, R., Gonzalez Viejo, C., Ristic, R., Tyerman, S., & Wilkinson, K. (2019). Non-Invasive Tools to Detect Smoke Contamination in Grapevine Canopies, Berries and Wine: A Remote Sensing and Machine Learning Modeling Approach. *Sensors*, 19(15), 3335. <https://doi.org/10.3390/s19153335>.