

# ESPECTROSCOPIA DE INFRARROJO CERCANO (NIR) PARA EL ESTUDIO DE LA MADURACIÓN DE LA NECTARINA

Jokin Ezenarro, Daniel Schorn-García, Montserrat Mestres, Laura Aceña, Olga Busto, Ricard Boqué

Universitat Rovira i Virgili, Grupo ChemoSens, Departamento de Química Analítica y Química Orgánica, Tarragona, España  
chemosens@urv.cat, www.chemosens.recerca.urv.cat

## Abstract

El control preciso de la maduración en nectarinas y otras frutas representa un desafío clave en su producción. La variabilidad del fruto en el árbol y las limitaciones de los métodos destructivos dificultan una cosecha óptima y homogénea, afectando la calidad y rentabilidad. Este trabajo presenta un enfoque integrado para el estudio de la maduración en nectarinas, combinando espectroscopía en el infrarrojo cercano (NIR)\* con análisis multivariante mediante análisis de la varianza (ANOVA)-análisis de componentes simultáneos (ASCA)\* y modelización predictiva mediante regresión por mínimos cuadrados parciales (PLS)\*. A partir del estudio del fruto y de las hojas próximas, y considerando efectos posicionales en la copa (altura, orientación y prominencia), se confirma que los frutos en posiciones más soleadas maduran antes, y que el análisis de las hojas permite anticipar parámetros como peso y firmeza. Este enfoque no destructivo puede ayudar en las estrategias de cosecha e impulsar una agricultura de precisión orientada a la calidad.

\*Siglas en inglés

## 1. Introducción

La calidad del fruto y su punto óptimo de maduración son variables críticas en la cadena de producción agroalimentaria, especialmente en productos como la nectarina (*Prunus persica* var. *nucipersica*), donde las propiedades organolépticas (firmeza, dulzor, acidez) determinan su aceptación comercial [1]. Las prácticas agrícolas actuales se enfrentan a un dilema: la cosecha temprana mejora la resistencia a golpes y permite una logística más eficiente, pero compromete la calidad organoléptica final del producto. En este contexto, existe un interés creciente en herramientas que permitan caracterizar y predecir la madurez del fruto de manera no destructiva, rápida y representativa de las diferencias dentro del árbol, para optimizar la recogida con el objetivo de obtener un producto de mayor calidad [2].

La espectroscopía en el infrarrojo cercano (NIR) se ha consolidado como una técnica de análisis no invasiva que permite obtener información sobre la composición interna de matrices biológicas complejas [3]. Sin embargo, la mayoría de estudios han centrado su atención en el análisis puntual del fruto, sin considerar suficientemente la influencia de su posición en el árbol ni explorar alternativas indirectas como el análisis foliar. Las hojas, al ser centros de fotosíntesis y transporte de

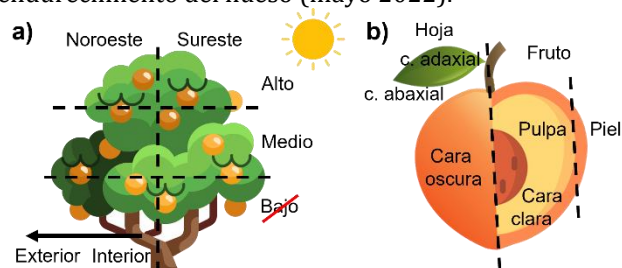
nutrientes, reflejan de manera indirecta el estado metabólico del árbol y podrían servir como indicadores tempranos de madurez [4].

En este trabajo se combinan dos aproximaciones complementarias. Por un lado, se estudia la maduración del fruto mediante NIR aplicado directamente sobre nectarinas a lo largo de once semanas, evaluando el efecto de factores posicionales mediante ASCA. Por otro lado, se analiza el potencial de las hojas próximas como indicadores de madurez, usando una estrategia homóloga. Finalmente, se desarrollan modelos PLS para predecir propiedades del fruto a partir de espectros foliares, integrando ambos enfoques para el diagnóstico y seguimiento de la madurez, y, por lo tanto, de la calidad.

## 2. Material y métodos

### 2.1. Finca y diseño del muestreo

El estudio se llevó a cabo en una finca comercial de nectarinas de la variedad 'Luciana' ubicado en Artesa de Lleida (Cataluña, España; 41°32'20.2"N 0°42'43.7"E, 205 m s.n.m.), caracterizado por un clima continental con veranos secos y elevada irradiación solar. Se seleccionaron aleatoriamente 12 árboles en la finca, sobre los que se realizó un seguimiento semanal (durante 11 semanas) desde la semana posterior al endurecimiento del hueso (mayo 2022).



**Fig. 1.** Ilustración del diseño experimental. a) Posiciones del fruto en el árbol. b) Adquisición de los espectros en el fruto y hojas adyacentes.

En el diseño experimental (DoE) se consideraron tres factores posicionales: altura en el árbol (media o alta; debido a que las frutas en la posición baja se perdieron por congelación), orientación (sureste o noroeste) y prominencia (interior o exterior de la copa) (Fig. 1a). Cada combinación fue muestreada con cuatro réplicas biológicas. Además, se recolectaron hojas adyacentes a cada fruto muestreado, diferenciando la cara superior

(adaxial) e inferior (abaxial) para el análisis espectroscópico [5].

## 2.2. Análisis espectroscópico

Los espectros NIR tanto del fruto como de las hojas se obtuvieron con un espectrofotómetro Antaris II FT-NIR (Thermo Fisher Scientific) en modo reflectancia difusa (1000–2500 nm), sin preparación previa de la muestra. Cada espectro se obtuvo como el promedio de 25 escaneos. Para las hojas se empleó un soporte adaptado.

En cada fruta entera se midieron cuatro espectros: dos en la cara clara y dos en la oscura [6]. En cada hoja también se midieron cuatro espectros: dos en la cara adaxial y dos en la abaxial (Fig. 1b).

## 2.3. Análisis fisicoquímicos

De cada fruto se determinaron el peso (g), la firmeza (kg) mediante penetromía, los sólidos solubles totales (TSS, °Brix) por refractometría, el pH con un pH-metro y la acidez (g·L<sup>-1</sup> ácido málico) por valoración con hidróxido de sodio. Las medidas de pH se iniciaron en la tercera semana y las de acidez en la séptima, debido al volumen limitado de extracto en etapas tempranas de madurez.

## 2.4. Análisis estadístico multivariante

Los datos espectrales se analizaron mediante ASCA, descomponiendo la variabilidad atribuible a cada factor experimental y sus interacciones. ASCA es una técnica que combina el Análisis de la Varianza (ANOVA) con el análisis de componentes principales (PCA), permitiendo descomponer la variabilidad total en componentes asociadas a los factores experimentales y sus interacciones (Ecuación 1) [7]. Mientras el ANOVA identifica las fuentes de variación estructurada, el PCA aplicado sobre cada submatriz asociada a un factor permite visualizar los patrones principales de variación multivariante, facilitando la interpretación de los efectos.

$$X = X_{F1} + X_{F2} + X_{F1-F2} + E \quad (\text{Ec. 1})$$

Se aplicaron dos estrategias de disposición de los datos: despliegue por muestra y estratificación por semanas (modelos específicos por semana) para estudiar la dinámica temporal. Para estos modelos no se aplicó ningún preprocesado a los espectros, más que el centrado a la media (MC).

La predicción de propiedades del fruto a partir de espectros foliares se realizó mediante regresión PLS [8], optimizando el número de variables latentes y el preprocesamiento mediante la métrica J-score [9]. Se evaluaron los modelos mediante el coeficiente de determinación de validación cruzada (R<sup>2</sup><sub>cv</sub>), la raíz del error cuadrático medio de la validación cruzada (RMSE<sub>cv</sub>), y su relación con la desviación estándar de la variable (RPD) y con el rango de la variable (RER) [10].

## 3. Resultados

La caracterización del proceso de maduración de las nectarinas mediante espectroscopía infrarroja reveló una dinámica compleja e influenciada por factores espaciales dentro del árbol. Además, el seguimiento fisicoquímico a lo largo de once semanas permitió establecer curvas de evolución para los principales parámetros de calidad: peso, firmeza, sólidos solubles totales (TSS), pH y acidez. Los resultados mostraron que tanto el peso como el contenido en TSS siguieron una evolución sigmoideal, con incrementos más marcados a partir de la sexta semana, coincidiendo con el periodo de mayor actividad fisiológica del fruto. Esta acumulación de azúcares se asoció con una creciente variabilidad entre muestras, presumiblemente debida a diferencias en la exposición a la luz solar y en la actividad fotosintética de las hojas adyacentes.

La firmeza presentó un descenso progresivo, siendo más acusado a partir de la octava semana. En paralelo, el pH mostró un leve ascenso, mientras que la acidez total descendió gradualmente desde la séptima semana en adelante. Estos cambios confirman que el proceso de maduración avanza de forma coordinada entre las diferentes dimensiones fisiológicas del fruto. Sin embargo, más allá de estos promedios globales, se observó una alta dispersión intra-semana, lo que sugiere una maduración asincrónica entre frutos del mismo árbol, cuya explicación requería un análisis más detallado de los factores posicionales.

**Tabla 1.** Resultados del modelo ASCA para los espectros NIR de fruta, considerando los factores del DoE y sus interacciones. \*Efecto significativo (valor  $p < 0,05$ ).

Factor	Efecto (%)	Valor $p$
Semana	82,56	0,001*
Orientación	0,01	0,303
Altura en el árbol	0,10	0,002*
Prominencia	0,18	0,001*
Cara del fruto	0,04	0,048*
Semana × Orientación	0,39	0,001*
Semana × Altura	0,26	0,003*
Semana × Prominencia	0,27	0,011*
Semana × Cara	0,20	0,067
Orientación × Altura	0,00	0,629
Orientación ×	0,02	0,268
Orientación × Cara	0,01	0,312
Altura × Prominencia	0,00	0,792
Altura × Cara	0,00	0,836
Prominencia × Cara	0,00	0,607
Residual	15,95	

El análisis espectroscópico NIR aplicado a frutas enteras, sin pelar, permitió capturar estas diferencias internas mediante patrones espectrales específicos. Los resultados del modelo ASCA (Tabla 1) confirmaron que

la evolución temporal fue el principal factor de variabilidad en los espectros, explicando un 82% de la varianza. Aunque este resultado era esperable, dado que los cambios bioquímicos que experimenta la nectarina durante la madurez ya han sido estudiados, también quedó patente que el fuerte dominio del factor “Semana” enmascaraba la contribución de otros efectos, como los relacionados con la posición del fruto en el árbol.

Para revelar estos efectos latentes se llevó a cabo un análisis por estratificación semanal (un ASCA por semana) permitiendo descomponer el efecto de cada factor posicional a lo largo del proceso de maduración. Este enfoque reveló que la influencia de los factores no es constante, sino que varía de forma sustancial a lo largo del desarrollo del fruto (Fig. 2).

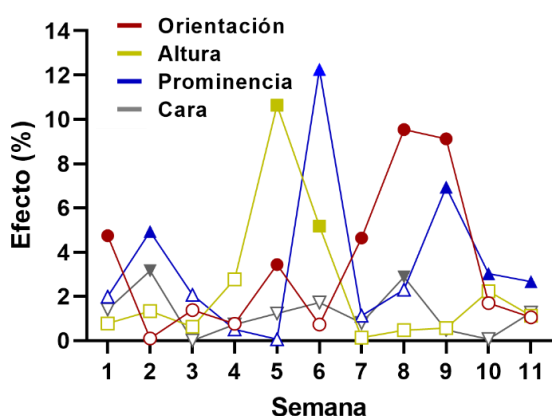


Fig. 2. Efectos de los factores posicionales por semanas (desde endurecimiento del hueso).

Durante las semanas iniciales, cuando aún no se observaban grandes cambios en los parámetros fisicoquímicos, la altura y su combinación con la prominencia mostraron un impacto destacado en los espectros. Este hallazgo indica que los frutos situados en la parte alta y más expuesta de las ramas iniciaban el proceso madurativo antes que los ubicados en zonas más interiores. En las semanas centrales, cuando el aumento de peso y TSS se aceleraba, los efectos posicionales disminuían, presumiblemente porque la mayor actividad metabólica reducía las diferencias relativas entre posiciones. Sin embargo, en las semanas finales, el efecto de la orientación y su interacción con la prominencia en la rama eran significativas nuevamente. Esto sugiere una desincronización progresiva en la maduración del fruto dentro del árbol, de modo que en el momento de la cosecha (alrededor de la semana 10) aún existen diferencias marcadas entre zonas más y menos expuestas al sol.

En general, estos resultados no solo aportan evidencia empírica sobre la heterogeneidad de la maduración, sino que también tienen implicaciones prácticas relevantes. La identificación de una maduración más avanzada en frutos de las zonas altas y soleadas del árbol plantea la posibilidad de implementar cosechas escalonadas por zonas del árbol, recogiendo primero los frutos más maduros y permitiendo que el resto continúe su

desarrollo. Esta estrategia permitiría obtener lotes más homogéneos en calidad y reducir pérdidas por sobremaduración o recolección anticipada, además de un ahorro de coste al no requerirse tanto espacio de almacenamiento.

En paralelo al análisis directo del fruto, se exploró la posibilidad de utilizar hojas adyacentes a cada fruto como sensores biológicos no destructivos para predecir el estado de madurez del fruto. Se aplicó la misma técnica, NIR, sobre ambas caras de la hoja (adaxial y abaxial), revelando perfiles espectrales distintos entre caras, consistentes con diferencias en la composición química y exposición solar, que afectan a las bandas dominadas por agua, celulosa y otros compuestos estructurales. Se observó que los espectros de la cara adaxial podrían ofrecer una mejor comprensión de la evolución, ya que también contienen información correspondiente a las ceras naturales de la hoja.

Tabla 2. Resultados del modelo ASCA para los espectros NIR de las hojas (cara adaxial), considerando los factores del DoE y sus interacciones. \*Efecto significativo (valor  $p < 0,05$ ).

Factor	Efecto (%)	
	C. adaxial	C. abaxial
Semana	28,93*	22,11*
Orientación	0,86*	0,66
Altura	0,54	0,38
Prominencia	0,28	0,11
Semana × Orientación	2,98	3,93*
Semana × Altura	1,17	1,89
Semana × Prominencia	2,70	3,81*
Orientación × Altura	0,08	0,27
Orientación × Prominencia	0,53	0,15
Altura × Prominencia	0,03	0,32
Residual	61,90	66,38

El modelo ASCA aplicado a los espectros de las hojas (Tabla 2) mostró que el factor “Semana” volvía a ser el más influyente, explicando un 29% de la varianza. Aunque los factores posicionales tuvieron un efecto menor cuando se consideraron de forma conjunta, sus interacciones con el tiempo sí resultaron significativas, especialmente en las semanas intermedias y finales del proceso.

Un resultado especialmente relevante fue que algunos de los factores que influían en la señal espectral de las hojas anticipaban los efectos observados posteriormente en los frutos. Por ejemplo, la prominencia resultó significativa en las hojas en la semana 8, mientras que en el fruto el mismo efecto fue detectable en la semana 9. Esta correspondencia retardada sugiere que las hojas actúan como “indicadores” fisiológicos del futuro estado del fruto, y que su análisis puede permitir diagnósticos tempranos de maduración.

**Tabla 3.** Resultados de la regresión PLS y métricas de calidad para los mejores modelos, obtenidos a partir de espectros NIR para cada propiedad analizada. <sup>a</sup> Número de variables latentes seleccionadas para el modelo. <sup>b</sup> Coeficiente de determinación en validación cruzada. <sup>c</sup> Error cuadrático medio en validación cruzada (RMSE<sub>cv</sub>). <sup>d</sup> Relación entre error y desviación (RPD). <sup>e</sup> Relación entre el error y el rango (RER). <sup>f</sup> Índice de calidad del modelo basado en Ezenarro et al. (2023) [9]. <sup>g</sup> Espectros de ambas caras de la hoja fusionados mediante concatenación. <sup>h</sup> Espectros promedio entre ambas caras de la hoja. <sup>i</sup> Normalización vectorial estándar (SNV). <sup>j</sup> Corrección de tendencia lineal (orden 1). <sup>k</sup>: Suavizado Savitzky-Golay WxOy (x: tamaño de la ventana espectral, y: orden del polinomio).

Propiedad	Estrategia	Preprocesado	Nº LV <sup>a</sup>	R <sup>2</sup> <sub>cv</sub> <sup>b</sup>	RMSE <sub>cv</sub> <sup>c</sup>	RPD <sup>d</sup>	RER <sup>e</sup>	J-Score <sup>f</sup>
Peso (g)	LL-DF <sup>g</sup>	Gaussian W15 Detrending <sup>i</sup>	10	0,644	41,20	1,67	6,25	0,233
Firmeza (kg)	LL-DF	SG W1302 <sup>k</sup> SNV	8	0,544	1,3	1,49	8,96	0,259
TSS (°Brix)	LL-DF	SG W1102 SNV	8	0,572	1,8	1,52	7,31	0,270
pH	Promedio <sup>h</sup>	Gaussian W15 Detrending	9	0,543	0,17	1,49	5,56	0,257
Acidez (g eq. a. málico · L <sup>-1</sup> )	Promedio	SG W1502 SNV	4	0,418	0,47	1,31	6,05	0,354

Estos resultados, que demuestran que la evolución que se observa en los frutos también se observa de alguna forma en las hojas, justificaron el desarrollo de modelos de regresión PLS para predecir propiedades del fruto a partir de los espectros foliares. Se exploraron diversas configuraciones, entre ellas el uso de espectros individuales por cara, el promedio de ambas, y la fusión de datos de bajo nivel (LL-DF), en la que se concatenaron los espectros de las dos caras para maximizar la información disponible. Esta última estrategia resultó ser la más eficaz, proporcionando modelos con buenas capacidades predictivas para parámetros como el peso y la firmeza del fruto. En el caso del peso, el modelo alcanzó un valor de R<sup>2</sup> de validación cruzada de 0,64, con errores aceptables y valor de RPD de 1,7, lo que indica un poder predictivo útil para la toma de decisiones en campo. En contraste, los modelos para firmeza, TSS y pH mostraron peores resultados, aunque aceptables, con R<sup>2</sup> de entre 0,54 y 0,57, posiblemente debido a la baja correlación entre este parámetro y los metabolitos foliares.

La comparación entre el enfoque directo (fruta) e indirecto (hoja) permite concluir que ambos son complementarios. El análisis directo es más preciso para caracterizar el estado actual del fruto, pero requiere contacto y, en muchos casos, destrucción de la muestra. El análisis foliar, en cambio, es completamente no invasivo, viable para monitoreo en campo, y permite realizar predicciones con una antelación suficiente para planificar acciones de cosecha. Esta integración entre espectroscopía, análisis multivariante y diseño experimental adaptado representa una estrategia sólida y reproducible para la implementación de prácticas avanzadas de agricultura de precisión.

#### 4. Conclusiones

Este trabajo ha demostrado que la combinación de espectroscopía infrarroja, análisis multivariante y un diseño experimental cuidadosamente estructurado permite caracterizar de forma detallada, no destructiva y eficiente el proceso de maduración en nectarinas, tanto a partir de la fruta como mediante el análisis de hojas próximas.

En primer lugar, los modelos ASCA aplicados a los espectros de frutos confirmaron que la maduración no ocurre de manera homogénea dentro del árbol. Los factores posicionales, especialmente la prominencia en la rama y la orientación solar, afectan significativamente la evolución del fruto, con patrones diferenciados a lo largo del tiempo, tal como se confirmó al estudiar los espectros foliares. Dicha evidencia justifica estrategias de cosecha diferenciada basadas en la ubicación de los frutos para optimizar la uniformidad del producto y reducir pérdidas por sobremaduración.

De manera destacada, se observó que las hojas reflejan, en forma anticipada, cambios metabólicos que se manifiestan posteriormente en el fruto, lo que las convierte en sensores fisiológicos prometedores para la monitorización del estado madurativo. Además, los modelos de regresión PLS desarrollados a partir de espectros foliares mostraron una buena capacidad predictiva para parámetros clave como el peso. Aunque las predicciones para firmeza, TSS y pH fueron aceptables y las de acidez menos satisfactorias, los resultados globales apuntan a un gran potencial para el uso de hojas en el diagnóstico no destructivo de la calidad del fruto.

En conjunto, estos hallazgos refuerzan la utilidad de la espectroscopía infrarroja como herramienta de agricultura de precisión, permitiendo un seguimiento dinámico y localizado del proceso de maduración sin necesidad de recurrir a métodos destructivos. La posibilidad de integrar los análisis foliares en protocolos rutinarios de campo abre nuevas oportunidades para optimizar la cosecha, mejorar la gestión del cultivo y, en última instancia, incrementar el valor añadido del producto.

### Agradecimientos

A los autores les gustaría mostrar su agradecimiento a Ricard Torrent Pellisé, el dueño de la finca de nectarinas, a los miembros del Programa de Poscosecha del IRTA Fruitcentre, y a los miembros de la Fundació Miquel Agustí, por su colaboración en la investigación.

### Referencias

- [1] I. Iglesias, G. Echeverría, Differential effect of cultivar and harvest date on nectarine colour, quality and consumer acceptance, *Sci. Hortic* 120 (2009) 41–50. <https://doi.org/10.1016/j.scienta.2008.09.011>
- [2] M. Forlani, B. Basile, C. Cirillo, C. Iannini, Effects of harvest date and fruit position along the tree canopy on peach fruit quality, *Acta Hortic* 592 (2002) 459–466. <https://doi.org/10.17660/ActaHortic.2002.592.62>
- [3] J. Lammertyn, A. Peirs, J. De Baerdemaeker, B. Nicolai, Light penetration properties of NIR radiation in fruit with respect to non-destructive quality assessment, *Postharvest Biol. Technol.* 18 (2000) 121–132. [https://doi.org/10.1016/S0925-5214\(99\)00071-X](https://doi.org/10.1016/S0925-5214(99)00071-X)
- [4] S. Borraz-Martínez, R. Boqué, J. Simó, M. Mestre, A. Gras, Development of a methodology to analyze leaves from *Prunus dulcis* varieties using near infrared spectroscopy, *Talanta* 204 (2019) 320–328. <https://doi.org/10.1016/j.talanta.2019.05.105>
- [5] J. Ezenarro, D. Schorn-García, A. Palou, M. Mestres, L. Aceña, M. Abadias, I. Aguiló-Aguayo, O. Busto, R. Boqué, Characterisation of position-dependant ripening dynamics of nectarines using near-infrared spectroscopy and ASCA, *J. Chemom.* 38 (2024) e3576. <https://doi.org/10.1002/cem.3576>
- [6] R.P. Marini, J.R. Trout, Sampling procedures for minimizing variation in peach fruit quality, *J. Am. Soc. Hortic. Sci.* 109 (1984) 361–364. <https://doi.org/10.21273/JASHS.109.3.361>
- [7] A.K. Smilde, J.J. Jansen, H.C.J. Hoefsloot, R.-J.A.N. Lamers, J. van der Greef, M.E. Timmerman, ANOVA-simultaneous component analysis (ASCA): a new tool for analyzing designed metabolomics data, *Bioinformatics* 21 (2005) 3043–3048. <https://doi.org/10.1093/bioinformatics/bti476>
- [8] P. Geladi, B.R. Kowalski, Partial least-squares regression: A tutorial, *Anal. Chim. Acta* 185 (1986) 1–17. [https://doi.org/10.1016/0003-2670\(86\)80028-9](https://doi.org/10.1016/0003-2670(86)80028-9)
- [9] J. Ezenarro, D. Schorn-García, L. Aceña, M. Mestres, O. Busto, R. Boqué, J-Score: A new joint parameter for PLSR

model performance evaluation of spectroscopic data, *Chemom. Intell. Lab. Syst.* 240 (2023) 104883. <https://doi.org/10.1016/j.chemolab.2023.104883>

[10] J. Ezenarro, D. Schorn-García, How are chemometric models validated? A systematic review of linear regression models for NIRS data in food analysis, *J. Chemom.* 39 (2025) e70036. <https://doi.org/10.1002/cem.70036>