

На правах рукописи



Абакумов Алексей Геннадьевич

**Установление сортовой и региональной принадлежности сортовых вин
на основе их многоэлементного «образа»**

1.4.2 – Аналитическая химия (химические науки)

АВТОРЕФЕРАТ

Диссертации на соискание ученой степени
кандидата химических наук

Краснодар
2022

Работа выполнена на кафедре аналитической химии федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Кубанский государственный университет»

Научный руководитель: доктор химических наук, профессор
Темердашев Зауаль Ахлоевич

Официальные оппоненты: доктор химических наук, профессор, профессор
кафедры технологии виноделия, бродильных
производств, сахаристых, и пищевкусовых
продуктов имени профессора А.А. Мержаниана
ФГБОУ ВО «Кубанский государственный
технологический университет»
Стрижов Николай Константинович

доктор химических наук, доцент, профессор
кафедры общей и неорганической химии
ФГБОУ ВО «Саратовский национальный
исследовательский государственный
университет имени Н.Г. Чернышевского»
Бурмистрова Наталия Анатольевна

Ведущая организация: ФГБНУ «Северо-Кавказский федеральный
научный центр садоводства, виноградарства,
виноделия», г. Краснодар

Защита диссертации состоится 27 октября 2022 г. в 16–00 часов на заседании диссертационного совета 24.2.320.05, созданного на базе ФГБОУ ВО «КубГУ», по адресу: 350040, Краснодар, ул. Ставропольская, д. 149, ауд. 3030Л. С диссертацией и авторефератом можно ознакомиться в научной библиотеке ФГБОУ ВО «КубГУ», на сайтах ВАК Минобрнауки РФ <http://vak.ed.gov.ru> и ФГБОУ ВО «КубГУ» <http://www.kubsu.ru>.

Отзывы на автореферат в двух экземплярах с указанием контактных данных, заверенные печатью организации, прошу направлять по адресу: 350040, Краснодар, ул. Ставропольская, д. 149, Ученому секретарю диссертационного совета 24.2.320.05 Киселевой Наталии Владимировне.

Автореферат разослан «___»_____2022 г.

Ученый секретарь
диссертационного совета

Киселева Наталия Владимировна

Общая характеристика работы

Актуальность работы.

Минеральный состав является одним из основных показателей сортовой и региональной принадлежности вин. Взаимосвязи между минеральным составом вина, винограда и почвы с места произрастания винограда позволяют с высокой достоверностью установить сортовое и географическое происхождение вина за счет формирования элементного «образа», характерного для сорта винограда, возделанного на конкретной территории. Как инструмент идентификации географического происхождения минеральный состав вин используется практически во всех основных винодельческих странах мира. Элементный состав вина должен зависеть только от минерального состава почвы, винограда и климатических условий, а не технологии его производства, транспортировки или хранения. Однако взаимосвязь в цепочке почва-виноград-вино может нарушаться из-за того, что большую роль в формировании элементного состава вина играют технологические приемы при получении вин, например, их стабилизация и осветление с использованием вспомогательных материалов для удаления избыточного количества компонентов, образующих помутнения различной природы.

Существующие на сегодняшний день методики определения качества вин требуют существенной актуализации, т.к. в большинстве случаев они направлены, в основном, на контроль безопасности и установление соответствия продукции своей товарной группе. Эти методики базируются на традиционных подходах оценки качества и не в полной мере дают представления о подлинности вин.

Вызывает несомненный научный и практический интерес со стороны исследователей, технологов, а также потребителей оценка качества вин по географическому признаку, включающая определение таких физико-химических показателей как содержание органических кислот, фенольных соединений, альдегидов, аминов, различных изотопов (водорода, углерода, кислорода, стронция, свинца). Многие исследователи при идентификации сортовой и региональной принадлежности вин применяют подход, основанный на получении большого массива данных по элементному составу вин, винограда и почв, соответствующих области произрастания ягоды, и выявлении взаимосвязи между ними.

Для установления региональной и сортовой принадлежности вин должна быть выявлена корректная взаимосвязь в цепочке почва-виноград-вино с учетом способов выращивания винограда и условий производства вин.

Диссертационная работа выполнена в рамках проектов РФФИ № 18-03-00059 и № 20-33-90046 с использованием научного оборудования ЦКП “Эколого-аналитический центр” Кубанского госуниверситета.

Цель диссертационной работы – установление подходов по оценке качества, сортовой и региональной принадлежности вин по их компонентному составу и выявленной взаимосвязи между элементным составом вин в цепочке почва-виноград-вино с учетом способов и условий выращивания винограда.

Для достижения поставленной цели решали следующие **задачи**:

- выявление взаимосвязи между минеральным составом вина, винограда и почв, соответствующих территориям его произрастания, а также характером поступления металлов в систему почва-виноград;
- изучение распределения элементов в ягоде и составляющих фрагментах (кожица, косточки и мякоть) винограда и выявление элементов-маркеров его сортовой принадлежности;
- сравнительный анализ вклада металлов и летучих компонентов в сенсорные свойства вин;
- изучение осветления и стабилизации виноматериалов бентонитовыми глинами на элементный «образ» вин;
- оценить вклад определяющих сортовую принадлежность макро- и микроэлементов в элементный «образ» вин;
- выявление маркеров региональной и сортовой принадлежности вин по данным их многоэлементного состава и разработка вероятностно-статистических моделей оценки качества вин методами многомерного анализа данных.

Научная новизна диссертационного исследования:

Установлены критерии комплексной идентификации натуральности, качества, региональной и сортовой принадлежности вин по данным их многоэлементного состава.

Выявлены маркеры региональной и сортовой принадлежности белых и красных сухих вин, произведенных в Краснодарском крае, по данным многоэлементного анализа почв, ягод винограда и вин с мест произрастания.

Показана возможность идентификации вин и региона их произрастания по концентрациям в них элементов методами статистического моделирования – дискриминантным анализом, деревьями классификации, а также нейронными сетями.

Изучено влияние осветления и стабилизации виноматериалов бентонитовыми глинами на элементный образ вин и оценен вклад макро- и микроэлементов в формировании их элементного образа.

Практическая значимость

По результатам элементного анализа предложены математические модели оценки качества вин, построены схемы идентификации географической, сортовой принадлежности и подлинности сухих вин, произведенных в Краснодарском крае. Разработаны программные продукты, автоматизирующие определение географической, сортовой принадлежности и подлинности сухих вин.

Выявлено влияние различных групп бентонитовых глин на формирование элементного состава красных виноматериалов, произведенных из сортов винограда Каберне Совиньон, Мерло и Молдова.

Положения, выносимые на защиту:

- результаты исследований взаимосвязей элементов в цепочке почва-виноград-вино и характера поступления металлов в системе почва-виноград с учетом форм извлечения элементов из почв;
- распределение микро- и макроэлементов в ягоде винограда и составляющих ее фрагментах (кожица, косточки и мякоть);
- хемометрическая оценка вклада взаимодействия металлов и летучих компонентов в сенсорные свойства вин;
- влияние осветления и стабилизации виноматериалов бентонитовыми глинами различной природы на элементный состав вин;
- хемометрическая оценка вклада макро- и микроэлементов в элементный образ вин для установления их сортовой принадлежности;
- вероятностно-статистические модели по определению региональной и сортовой принадлежности красных и белых вин.

Степень достоверности результатов исследований.

Достоверность результатов исследований обусловлена значительным объемом экспериментальных работ и репрезентативностью выборки анализируемого материала; использованием современных методов исследования – методов рентгенофазового анализа, атомной спектрометрии; применением аттестованных стандартных образцов и методов многомерного анализа данных; согласованностью теоретически ожидаемых и экспериментально полученных данных; воспроизводимостью результатов и их непротиворечивостью известным данным из литературных источников.

Апробация работы. Результаты диссертационной работы обсуждены на III Всероссийской конференции по аналитической спектроскопии с международным участием (Туапсе, 2019 г.), XXI Менделеевском съезде по общей и прикладной химии (Санкт-Петербург, 2019 г.), IV Всероссийской конференции по аналитической хроматографии и капиллярному электрофорезу (Краснодар, 2020 г.), XI Всероссийской научной конференции «Аналитика Сибири и Дальнего Востока» (Новосибирск, 2021 г.), XII International Conference on Chemistry for Young Scientists «Mendeleev» (Санкт-Петербург, 2021 г.).

Публикации. По результатам проведенных исследований опубликованы 9 статей в рецензируемых научных изданиях, рекомендованных ВАК РФ и индексируемых в международных базах Web of Science и Scopus, получены 2 свидетельства о государственной регистрации программ для ЭВМ, а также 6 тезисов докладов в материалах научных конференций.

Личный вклад соискателя. Соискателем выполнены экспериментальные и теоретические исследования по установлению фазового и элементного анализа исследуемых объектов методами рентгенофазового анализа, атомно-эмиссионной спектроскопии с индуктивно-связанной плазмой и масс-спектрометрии с индуктивно-связанной плазмой, хемометрической оценке полученных данных. Формулировка целей и задач исследования, интерпретация экспериментальных данных, систематизации результатов исследования и оформление публикаций выполнены совместно с научным руководителем.

Структура и объем работы. Диссертационная работа состоит из введения, обзора литературы, экспериментальной части, обсуждения результатов общих выводов, списка цитируемой литературы. Материал диссертации изложен на 200 страницах машинописного текста, содержит 45 таблиц и 22 рисунка, в списке цитируемой литературы 319 источника.

ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во введении обоснована актуальность и практическая значимость работы, сформулированы цели и задачи исследования, научная новизна и положения, выносимые на защиту.

В обзоре литературы проанализированы опубликованные в научной периодике работы и нормативные документы, посвященные вопросам контроля качества и региональной принадлежности вин. Рассмотрен химический состав винограда и изготавливаемой из него винодельческой продукции, показано его качественное и количественное изменение в процессе винификации, созревания и выдержки вин. Обсуждаются основные компоненты, содержания и соотношения которых определяют качественные характеристики вин. Проведен анализ научной литературы и нормативной базы, регламентирующей качество вин на территории России и стран Европейского союза, существующих подходов к определению их подлинности, указаны достоинства и недостатки. Обсуждены примеры использования различных критериев для установления натуральных и фальсифицированных вин, а также подходов их комплексной идентификации и создания системы оценки качества винодельческой продукции. Проанализированы основные методические подходы к установлению региональной принадлежности вин, сочетающие возможности современных методов анализа, математического моделирования и статистики, продемонстрированы примеры их использования на практике.

В экспериментальной части описаны объекты и методы исследования, материалы и реактивы, основное и вспомогательное научное оборудование, а также приведены методики исследования вин. При проведении экспериментальных

исследований использовали: одноэлементные стандартные растворы – As, Be, Bi, Ga, Ge, Hf, Nb, Sb, Sn, Ta, Th, Tl, U, Y и Zr, с концентрацией 1,0 г/дм³ (Inorganic Ventures, США); государственные стандартные образцы состава растворов металлов серии ГСО (Fe, Cu, Co, Cd, Ni, Zn, Pb, Mn, Na, K, Mg, Ca, Ba, Ti, V, W, Al, Li, Sr, Si, Ag и Cs). Используемые в экспериментальных исследованиях растворители и реактивы имели квалификацию «ос.ч.» или «х.ч.».

Объектами исследования были: образцы винограда сортов Каберне Совиньон, Рислинг Рейнский, Мерло и Мускат Оттонель урожая 2014-2015 г.г., а также почв, используемых для возделывания данных сортов винограда и отобранные с полей двух винодельческих предприятий Краснодарского края – ЗАО Агрофирма «Кавказ» и ОАО АПФ «Фанагория». Предприятия расположены на территории Анапо-Таманской зоны, ЗАО Агрофирма «Кавказ» – Анапской подзоне, ОАО АПФ «Фанагория» – Таманской подзоне; сортовые сухие красные и белые вина Каберне (76 образцов), Мерло (68 образцов), Рислинг (49 образцов), Шардоне (56 образцов) и Мускат (48 образцов), произведенные в 2012-2015 гг. в винодельческих предприятиях ЗАО «Запорожское», ООО «Кубань-Вино», ОАО АПФ «Фанагория», ООО АПК «Мильстрим-Черноморские вина», ЗАО АФ «Кавказ», ЗАО «Абрау-Дюрсо», ЗАО АПК «Геленджик», ЗАО АФ «Мысхако», ООО «Фирма Сомелье», ООО АФ «Саук-Дере», ООО «Союз-Вино», относящиеся к разным географическим зонам (подзонам) Краснодарского края – Южно-предгорной и Черноморской зонах, Анапской и Таманской подзонах; сортовые сухие красные и белые вина Каберне (16 образцов), Мерло (13 образцов), Пино Нуар (11 образцов), Рислинг (15 образцов), Шардоне (17 образцов) и Совиньон Блан (15 образцов), произведенные в 2017-2018 гг. « АПФ «Фанагория», ООО «Имение Сикоры», ООО «Кубань-Вино», ООО «Союз-вино», ООО «Винодельня Юбилейная», ООО АФ «Саук – Дере», ООО «Вилла Романова», ЗАО «Кубанская лоза» и ООО АПК «Мильстрим Черноморские вина».

Вина были разлиты в темно-зеленые стеклянные бутылки с винтовыми крышками, хранили их при 10 °С. Все образцы вин были сухими, содержание алкоголя варьировало от 9 v% до 13 v%. Значение рН варьировало от 3,61 до 3,79. Уровень растворенного кислорода в винах был ниже 1,0 мг/дм³.

В качестве оклеивающих агентов использовали 32 образца бентонитовых глин, произведенных в различных странах, различной степени дисперсности и торговых марок (таблица 1). Все образцы бентонитовых глин, кроме Хакасского, Дагестанского и Крымского происхождения, применяются для коммерческого использования в технологии приготовления вин. Отобранные непосредственно с месторождений в республиках Дагестан, Хакасии и Крым бентонитовые глины подготавливали с учетом требований по производству винодельческой продукции.

Таблица 1 – Перечень исследованных бентонитовых глин

№	Наименование бентонитовой глины	Страна	№	Наименование бентонитовой глины	Страна
1	Electra	Италия	17	Azerbaijan	Азербайджан
2	Aktivit	Германия	18	CaGranulat	Германия
3	NaCalitPore-Tec	Германия	19	Gumbrin	Грузия
4	Granula	Франция	20	Askangel	Грузия
5	Inobent	Франция	21	KaliNat Erbslöh	Германия
6	Aktivit Erbslöh	Германия	22	Extrabent	Франция
7	Seporit Pore-Tec	Германия	23	Extrabent Super	Франция
8	Bentovin	Азербайджан	24	GranuBent Pore-Tec	Германия
9	Claris P	Босния и Герцеговина	25	ClarisP70	Босния и Герцеговина
10	Bentovin (фракция 0.05 мм)	Азербайджан	26	Bentovin (фракция 0.07 мм)	Азербайджан
11	BentoVinumGold (фракция 0.05 мм)	Казахстан	27	BentoVinumGold (фракция 0.07 мм)	Казахстан
12	Винобент "10 Хутор" (фракция 0.05 мм)	Россия	28	Винобент "10 Хутор" (фракция 0.07 мм)	Россия
13	Винобент "10 Хутор"	Россия	29	Иджеванский бентонит	Армения
14	Хакасское месторождение	Россия	30	Хакассия Sigma-Trade	Россия
15	Дагестанское месторождение	Россия	31	Крымское месторождение	Россия
16	ClarisP70 «Meridian»	Босния и Герцеговина	32	Курцевское месторождение	Россия

Научное оборудование. Подготовку образцов почв, ягод винограда и бентонитовых глин к анализу проводили автоклавной СВЧ-кислотной минерализацией с использованием системы микроволнового разложения проб Ethos 1 (Milestone, Италия).

Элементный состав вин устанавливали методами атомно-эмиссионной спектроскопии с индуктивно-связанной плазмой (ИСП-АЭС) с использованием спектрометра iCAP 7400 (Thermo Scientific, США) и масс-спектрометрии с индуктивно-связанной плазмой (ИСП-МС) с использованием спектрометра iCAP RQ (Thermo Scientific, США). Рентгенофазовый анализ бентонитовых глин проводили на рентгеновском дифрактометре «Shimadzu XRD-7000» (Япония).

Хемометрические исследования данных по многоэлементному составу образцов проводили в среде пакета STATISTICA v.13.

В обсуждении результатов исследовали взаимосвязи элементов в цепочке почва-ягода-вино и характер поступления металлов в системе почва-виноград с учетом форм извлечения элементов из почв. Проанализированы данные распределения элементов в ягоде винограда, а также в составляющих ее фрагментах (кожица, косточки и мякоть). Установили влияние процедуры осветления и стабилизации виноматериалов бентонитовыми глинами различной природы на элементный состав вин. Проведена хемометрическая оценка вклада взаимодействия металлов и летучих компонентов в сенсорные свойства вин, макро- и микроэлементов в формирование элементного образа вин, определяющего их сортовую принадлежность. С использованием различных статистических математических моделей установили региональную и сортовую принадлежность красных и белых вин, произведенных на территории Краснодарского края.

Взаимосвязи между элементным составом в цепочке почва-виноград-вино

Существующие взаимосвязи между минеральным составом винограда, почвы с места его произрастания и вина позволяют установить сортовое и региональное происхождение вина за счет формирования элементного «образа», характерного для сорта вина, возделанного на конкретной территории.

Установление элементного состава для выявления взаимосвязей между объектами в цепочке почва-виноград-вино проводили с использованием образцов почвы, винограда сортов Мускат Оттонель (12 образцов), Каберне Совиньон (15) и Мерло (12), отобранных с полей ЗАО АФ «Кавказ» (Анапский район) в 2015 г., и произведенных из данных сортов винограда вин.

Проведенные экспериментальные исследования показали, что средние содержания элементов, извлекаемых сортами винограда различными способами, в зависимости от форм их нахождения в почвах, значительно отличаются. Подвижные формы извлекаемых элементов (ацетатно-аммонийным буфером) составили около 52-54% от валовых их содержаний в почвах. Доля подвижных форм по отношению к валовому содержанию макроэлементов (К, Na и Mg) очень мала (менее 5%), что свидетельствует об их слабой мобильности, для данных металлов диффузионное движение в почве протекает очень медленно. Доля извлеченных кислотным разложением форм металлов составила 65-71% от общего их содержания. Максимальные отношения (более 40%) кислоторастворимых форм к валовому содержанию элементов приходятся на Sr, K, Rb, Li, Ca и Cd.

В ягодах винограда суммарное содержание каждого элемента оценивали по их концентрации в кожице, мякоти и косточках. Наиболее распространенным элементом с общим содержанием от 1540 до 3770 мг/кг оказался К, за ним – Ca (от 175 до 845 мг/кг), Mg (от 90 до 310 мг/кг) и Na (от 1,4 до 37 мг/кг). Для вин наблюдали схожее распределение элементов. Содержания макроэлементов для всех сортов

снижались в последовательности $K > Ca > Mg > Na$, причем концентрация K доминировала над содержаниями остальных металлов (более 80% от общего содержания).

Взаимосвязи между элементами в системе почва-ягода оценивали по значению биологического коэффициента поглощения – отношению концентраций подвижных форм металлов в почве к их общему содержанию в ягодах винограда (таблица 2).

Таблица 2 – Усвоение элементов ягодами различных сортов винограда из почвы

Элемент	Биологический коэффициент поглощения в системе почва-ягода		
	ягода Мускат Оттонель/ПФ	ягода Каберне Совиньон/ПФ	ягода Мерло/ПФ
Li	0,011	0,147	-
Mg	0,457	0,630	0,765
Al	0,050	0,059	0,072
K	9,084	6,819	8,395
Ca	0,002	0,003	0,003
V	0,004	0,012	0,009
Mn	0,006	0,008	0,009
Fe	0,029	0,054	0,072
Ni	0,033	0,013	0,012
Co	0,001	0,001	0,001
Cu	0,103	0,180	0,282
Zn	0,413	0,359	0,708
Rb	3,300	3,059	4,895
Cd	0,007	0,006	-
Ba	0,003	0,002	0,002
Pb	0,065	0,013	0,013
Na	0,142	0,157	0,214
Ti	1,533	1,790	3,247
Sr	0,004	0,004	0,005

*ПФ – подвижная форма металлов, извлеченных ацетатно-аммонийным буфером

Наибольшее усвоение ягодами из почвы проявили K , Rb , Ti , Mg и Zn . Общее содержание K , Rb , и Ti в образцах ягод оказалось выше, чем концентрации подвижных форм этих элементов в почве, независимо от сорта винограда. Эти различия были наиболее выраженными для K . Несоответствие между концентрациями подвижных форм элементов в почве и их общим содержанием в ягодах подтверждает тот факт, что виноградная лоза помимо подвижных форм извлекает из почвы и более труднорастворимые соединения. Биологический коэффициент поглощения для ягод винограда Мерло оказался выше по Rb , Ti , Mg , Zn , Cu , Na , Fe , Al и Sr ; Муската Оттонель – K , Pb и Ni ; Каберне Совиньон – V и Mn .

Переход металлов из ягоды в вино для всех сортов сопровождался снижением концентраций Mg , Al , K , Ca , Mn , Ni , Cu , Zn , Rb , Ba , Ti и Sr . Различие в элементном составе ягоды и вина можно, по-видимому, объяснить особенностями

технологических стадий производства вин: косточки и кожица винограда, характеризующиеся высокими концентрациями элементов, участвуют только в процессе брожения виноградного сока, после чего их удаляют из сусла. Повышение содержаний V, Fe, Co, Pb и Na (в три раза) наблюдали при их переходе из ягоды в вино. В первую очередь, это связано с применением вспомогательных материалов в технологии производства вин и диффузии металлов из структуры (или межслоевого пространства) оклеивающих агентов. Обогащение данными металлами вин также может связано с их выдержкой в металлических резервуарах без соответствующего покрытия.

Исследованные взаимосвязи между элементным составом в цепочке почва-виноград-вино показали, что каждый сорт винограда за счет различного характера усвоения металлов формирует свой индивидуальный элементный «образ», что позволяет использовать многоэлементный анализ для классификации вин относительно места происхождения.

Установление сортовой принадлежности винограда по выявленным элементам-маркерам в ягоде и различных её составляющих частях

Элементный состав различных частей виноградной ягоды (кожица, мякоть и косточки) для каждого сорта винограда неодинаков. Можно предположить, что содержание и распределение элементов в различных частях ягоды позволит дифференцировать сортовое происхождение ягоды.

Для выявления элементов-маркеров сортовой принадлежности винограда сортов Каберне Совиньон и Рислинг Рейнский определяли 21 элемент (Al, Ba, Ca, Cd, Cr, Co, Cu, Fe, K, Li, Mg, Mn, Mo, Na, Ni, Pb, Rb, Sr, Ti, V и Zn) в образцах ягоды и различных ее частях (кожица, мякоть и косточки), выращенных в винодельческом хозяйстве с детальной направленностью виноградарства и виноделия ОАО АПФ «Фанагория».

При подготовке образцов ягод винограда и ее различных частей к анализу условия их вскрытия выбирали максимально идентичные для исключения потерь аналитов или загрязнения. Все пробы к анализу готовили по единой методике с использованием микроволнового разложения, после которого возможно одновременное определение аналитов методом ИСП-АЭС в широком диапазоне их концентраций.

Элементы по уровню их содержаний в образцах условно разделили на три группы: микроэлементы – Ba, Cd, Co, Cr, Li, Mo, Ni, Pb, Ti и V (концентрация элемента не выше 1 мг/кг); минорные элементы – Al, Cu, Fe, Mn, Rb, Sr и Zn – (концентрация элемента не выше 10 мг/кг); макроэлементы – Ca, K, Mg и Na – (концентрация элемента более 10 мг/кг). Разделение элементов на группы проводили для оценки влияния анализируемой матрицы с учетом содержания в ней компонентов

на аналитический сигнал (АС) элемента при проведении анализа образцов методом ИСП-АЭС. Учет и снижение матричного влияния на АС элементов при проведении градуировки спектрометра с использованием стандартных растворов элементов в градуировочные растворы осуществляли введением добавки, содержащей К и Са с концентрациями 100 и 50 мг/дм³, соответственно. В оптимизированных условиях анализа проводили определения металлов в ягоде винограда и ее различных частях. В ягоде и ее частях содержания элементов были различными (исключение – К, который равномерно распределялся во всех частях ягоды). В мякоти ягод преобладали Na и К, кожице – Al, Fe, К, Na и косточках – Cu, Fe, К, Zn. Для выявления элементов-маркеров, характерных для сортов винограда, исследовали распределение элементов в ягодах и различных их частях (по 15 образцов).

Применение пошагового дискриминантного анализа, реализованного в программе STATISTICA, позволило графически установить межгрупповые отличия между объектами по элементному составу частей ягод и сортовой принадлежности винограда. Пошаговый дискриминантный анализ позволил исключить из дальнейшего анализа неинформативные, с точки зрения различия групп объектов, переменные по показателю уровня значимости (*p-уров.*) критерия Фишера (*F*). Ввиду большого количества переменных (21) для осуществления процесса дискриминации выбрали пошаговый с исключением метод, который предполагает их автоматическое исключение программой и в интерактивном режиме анализа позволяет увидеть, как исключаются переменные при дискриминации. Переменные (элементы), для которых уровень значимости при дискриминантном анализе превышал значение 0,05, из анализа целесообразно исключить. Ввиду низкого содержания в исследуемых объектах Cd, Co, Mo и V были исключены из дискриминационной модели. Затем, последовательно, за 11 шагов исключили еще 11 элементов, для характеристики модели остались Ba, Cr, Mg, Rb, Sr и Ti.

На диаграмме рассеяния канонических значений (рисунок 1) образцы частей ягод для каждой группы изображены в виде одинаковых геометрических фигурок одного цвета. Диаграмма позволила являющиеся объектами в шестимерном пространстве (по количеству элементов) образцы перенести в пространство размерности 2, сохранив порядок расстояний между ними. Видно, что кластеры образцов ягод, соответствующие 6 группам локализованы в определенных частях плоскости. При этом на значительном расстоянии друг от друга расположены группы *Каберне Совиньон (косточки)*, *Рислинг Рейнский (косточки)*, *Каберне Совиньон (кожица)*, *Рислинг Рейнский (кожица)*. На незначительном удалении от двух последних групп расположены *Каберне Совиньон (мякоть)* и *Рислинг Рейнский (мякоть)*, т.е. по концентрациям совокупности выделенных компонентов отличия между кожицей и мякотью у обоих сортов вин незначительные. Более существенные отличия в значениях концентраций элементов наблюдаются в косточках и кожицей с мякотью. Диаграмма дополнительно подтверждает целесообразность использования

пошагового дискриминантного анализа для анализа содержания элементов в частях ягоды винограда, позволившего выявить элементы-маркеры, средние значения, разбросы и диапазоны, изменения которых существенно отличались в различных фрагментах ягоды винограда Рислинг и Каберне.

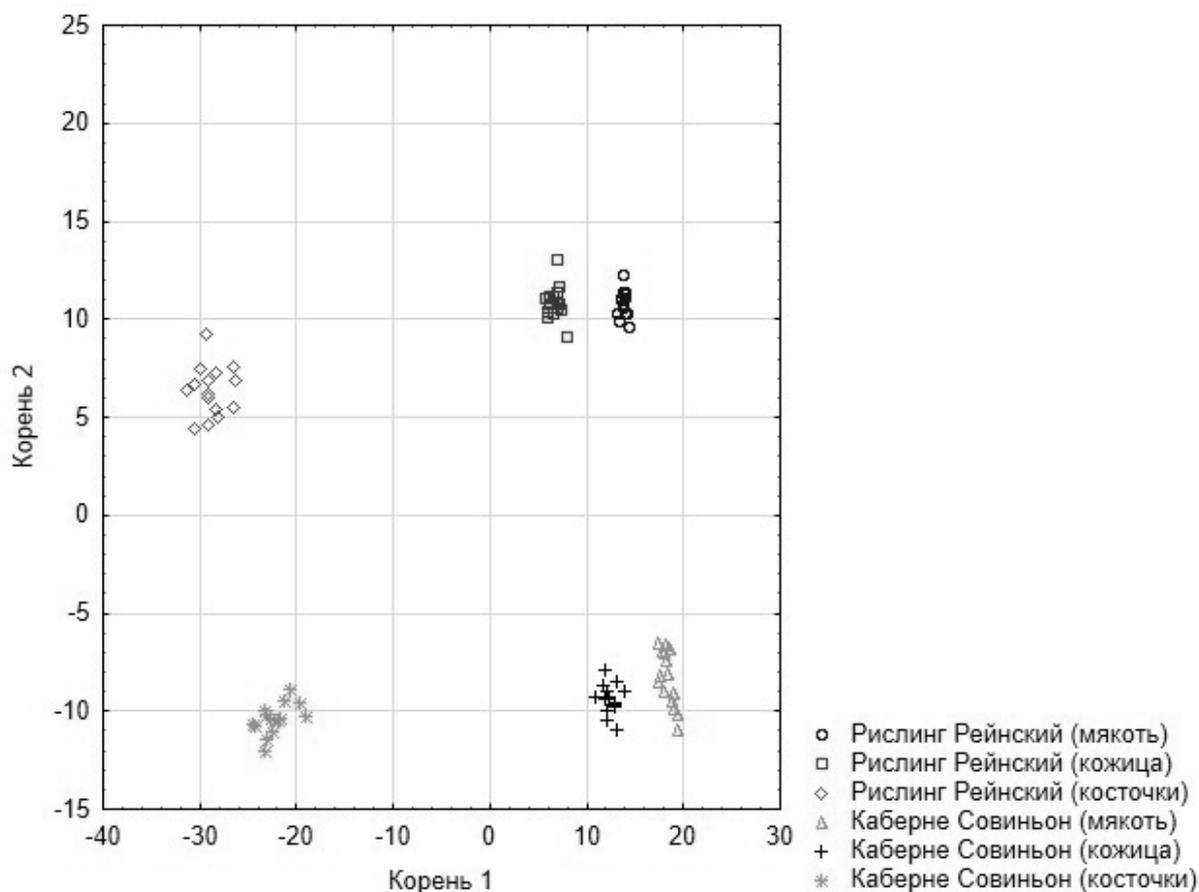


Рисунок 1 – Диаграмма рассеяния канонических значений для различных частей ягоды винограда

Высокая адекватность построенной модели определяется величиной критерия адекватности – лямбды Уилкса (λ). В рассматриваемом случае величина лямбды Уилкса максимально приближена к нулю ($\lambda < 0.000$), что позволяет утверждать о построении в высокой степени адекватной модели дискриминации.

Функции классификации $F_1, F_2, F_3, F_4, F_5, F_6$ соответственно групп образцов фрагментов ягод *Рислинг Рейнский (мякоть)*, *Рислинг Рейнский (кожица)*, *Рислинг Рейнский (косточки)*, *Каберне Совиньон (мякоть)*, *Каберне Совиньон (кожица)*, *Каберне Совиньон (косточки)* имеют вид:

$$\begin{aligned}
 F_1 &= -12C_{Ba} - 134C_{Cr} + 31C_{Rb} + 11C_{Sr} - 14C_{Ti} + 0.060C_{Mg} - 19 \\
 F_2 &= -50C_{Ba} - 404C_{Cr} + 75C_{Rb} + 48C_{Sr} - 81C_{Ti} + 0.095C_{Mg} - 125 \\
 F_3 &= -16C_{Ba} - 760C_{Cr} + 60C_{Rb} + 179C_{Sr} - 398C_{Ti} + 0.820C_{Mg} - 1010 \\
 F_4 &= -6.5C_{Ba} + 1987C_{Cr} + 18C_{Rb} - 3.8C_{Sr} - 73C_{Ti} - 0.031C_{Mg} - 159 \\
 F_5 &= -50C_{Ba} + 1696C_{Cr} + 44C_{Rb} + 34C_{Sr} - 26C_{Ti} - 0.056C_{Mg} - 210 \\
 F_6 &= -141C_{Ba} + 438C_{Cr} + 26C_{Rb} + 135C_{Sr} - 222C_{Ti} + 1.250C_{Mg} - 792,
 \end{aligned}$$

где C_{Ba} , C_{Cr} , C_{Rb} , C_{Sr} , C_{Ti} , C_{Mg} концентрации элементов-маркеров.

При помощи классификационных функций по содержаниям 6 элементов-маркеров (Ba, Cr, Mg Rb, Sr и Ti) в одной из трех частей ягоды – мякоти, коже или косточке можно идентифицировать сорт винограда. Для этого достаточно концентрации элементов подставить в уравнения и вычислить их значения. Виноград принадлежит к той из 6 групп, а значит и сорту, для которой функция классификации принимает наибольшее значение.

Хемометрическая оценка вклада металлов и летучих соединений в сенсорные свойства вин

Для оценки вклада металлов и летучих соединений в сенсорные свойства красных и белых вин использовали данные элементного и компонентного состава 87 образцов, произведенных в Краснодарском крае, включающие 17 макро- и микроэлементов и 13 летучих соединений. Для красных вин были характерны более высокие содержания металлов – Ba, Co, Fe, K, Pb, Sr и летучих соединений – 1-гексанола, (мезо)-2.3-бутандиола, (P)-2.3-бутандиола, уксусной кислоты, изоамилового спирта, изобутанола и метанола, а в белых винах были выше концентрации Al, Li, Na, Rb, Ti, Zn, 2-пропанола и ацетальдегида. Содержания Ca, Cr, Cu, Mg, Mn, 1-бутанола, 1-пропанола, этилацетата и фурфурола в красных и белых винах оказались приблизительно одинаковыми. Диапазон изменения сенсорной оценки красных и белых вин также оказался примерно одинаковым – от 80 до 90 баллов.

С помощью *линейных регрессионных моделей* осуществили сравнительный анализ вклада металлов и летучих соединений в формировании сенсорных свойств вин. Для красных вин в регрессионную модель оказались включенными 6 летучих соединений и 7 металлов. Дисперсионный анализ показал, что регрессионная модель описывает примерно 67% изменчивости зависимой переменной относительно среднего значения, что говорит о построении адекватной линейной модели, пригодной для прогнозирования сенсорной оценки. Уравнение линейной регрессионной модели для красных вин имеет вид:

$$Y=77.319+0.023X_1-0.008X_2+0.128X_3-0.012X_4-0.022X_5-0.004X_6+0.008X_7-5.372X_8+0.012X_9+2.599X_{10}+1.129X_{11}+0.012X_{12}-1.436X_{13},$$

где Y – отклик, определяющий прогнозные значения сенсорной оценки, X_1, X_2, \dots, X_{13} предикторы модели, обозначающие концентрации компонентов: (мезо)-2.3-бутандиол, метанол, 1-бутанол, изоамиловый спирт, 1-гексанол, (P)-2.3-бутандиол, а также K, Al, Mg, Mn, Sr, Na и Zn, соответственно.

Для белых вин в регрессионную модель были включены 7 летучих соединений и 7 металлов. Уравнение линейной регрессии для белых вин, описывающее 87% изменчивости сенсорной оценки относительно среднего значения, имеет вид:

$$Y = 84.886 + 0.056X_1 - 0.051X_2 - 0.012X_3 - 0.12X_4 - 0.007X_5 + 0.024X_6 + 0.009X_7 + 0.052X_8 - 1.697X_9 - 0.003X_{10} - 1.161X_{11} + 0.01X_{12} - 0.001X_{13} - 0.02X_{14},$$

где Y – отклик, определяющий прогнозные значения сенсорной оценки, X_1, X_2, \dots, X_{14} предикторы модели, обозначающие концентрации компонентов: этилацетат, 1-гексанол, уксусная кислота, 1-бутанол, изоамиловый спирт, 1-пропанол, метанол, а также Ca, Cu, Mg, Al, Na, K и Sr, соответственно.

Помимо определения влияния изучаемых компонентов на сенсорную оценку определенным интерес представляла оценка вклада металлов и летучих соединений в ее вариабельность (изменчивость). Данное исследование осуществили с применением *общих линейных моделей*. Наибольший вклад в изменчивость сенсорной оценки красных вин вносили: из металлов – K и Al, летучих соединений – 1-бутанол. Усредненный вклад металлов и летучих соединений при этом оказался примерно одинаковым. Для белых вин наибольший вклад в изменчивость сенсорной оценки вносили: из летучих соединений – уксусная кислота и этилацетат, металлов – Ca. Однако, нужно отметить, что средний вклад летучих соединений в изменчивость сенсорной оценки белых вин примерно в четыре раза оказался выше по сравнению с металлами.

Влияние стадии осветления вин различными бентонитовыми глинами на формирование их элементного «образа»

В технологии виноделия для осветления и стабилизации вин широко используют бентонитовые глины, позволяющие осветлять виноматериалы и выводить в осадок лабильные формы высокомолекулярных соединений, снижать концентрации токсичных соединений. С другой стороны, их применение может существенно повлиять на элементный «образ» виноматериала, что значимо при установлении региональной и сортовой принадлежности вин. Были проведены исследования по формированию элементного состава вина в различных условиях стадий его осветления и стабилизации бентонитовыми глинами.

В качестве оклеивающих агентов использовали 32 образца бентонитовых глин, произведенных в различных странах, различной степени дисперсности и торговых марок. Для установления возможных механизмов обмена металлами методом рентгенофазового анализа провели качественный и количественный фазовый анализ, по результатам которых бентонитовые глины разделили на четыре группы. К первой группе отнесли образцы, основу которых составляет натриевый монтмориллонит, имеющие базальное отражение 001 в области 12,5 Å и содержащие до 3% CaCO₃. Ко второй группе отнесли бентониты, основу которых составлял натрий-кальциевый монтмориллонит с базальным отражением 001 в области 15,04 Å, в которых присутствует до 3% кварца. В третью группу отнесли образцы, содержащие разные

формы монтмориллонита с содержаниями кварца и кальцита более 5%. Четвертую группу формировали образцы, которые по своим свойствам не были отнесены ни к одной из этих трех групп.

Элементный состав виноматериалов изучали методами ИСП-АЭС и ИСП-МС. Сводные данные по диапазонам содержаний макро- (Ca, K, Mg и Na) и микрокомпонентов (Ag, Al, As, Ba, Be, Bi, Cd, Co, Cs, Cu, Fe, Gd, Ge, Ho, Li, Mo, Mn, Nb, Ni, Pb, Ru, Sb, Sn, Sr, Ta, Th, Ti, Tl, U, V, W, Y, Zn и Zr) в исходных и обработанных бентонитовыми глинами различных сортов виноматериалов представлены в таблице 3.

Таблица 3 – Суммарные содержания макро- и микрокомпонентов в различных сортах виноматериалов при обработке бентонитовыми глинами

Диапазон содержаний элементов, мг/дм ³					
Исходный виноматериал		группа 1	группа 2	группа 3	группа 4
Каберне Совиньон					
макроэлементы	919	818-985	830-931	871-940	875-898
микроэлементы	3,9	4,1-6,5	4,2-6,0	4,2-6,1	4,1-4,6
Мерло					
макроэлементы	1036	941-1098	945-1058	991-1062	990-1021
микроэлементы	3,8	4,2-6,6	4,0-5,8	4,1-6,1	4,1-4,7
Молдова					
макроэлементы	926	828-1026	844-950	883-957	893-912
микроэлементы	5,1	5,5-8,0	5,1-7,4	5,3-7,8	5,4-6,0

Анализ данных по суммарному содержанию макро- и микроэлементов в виноматериалах показал (таблица 3), что концентрации металлов в виноматериалах, обработанных бентонитовыми глинами, меняются разнонаправленно. При внесении бентонитов первой, второй и третьей групп в виноматериалы происходит увеличение (до 11% от общего содержания Na, Mg, Ba и Ca) и снижение (до 11% K, Cu, Zn и Rb) суммарной концентрации элементов по сравнению с их исходными содержаниями. Обработка виноматериалов всех типов бентонитами четвертой группы приводит к снижению их суммарных содержаний макрокомпонентов на 2.2–4.8% в исходном материале. Концентрации микроэлементов в виноматериалах после обработки возрастают по суммарному их содержанию от 5 до 73% в зависимости от группы используемых бентонитов.

При оценке влияния бентонитов на осветление и стабилизацию виноматериалов выяснили, что внесение бентонитовых глин одной и той же группы по-разному сказывается на элементный «образ» и зависит от сорта виноматериала. При обработке виноматериала Каберне Совиньон бентонитами первой группы

максимально возрастали концентрации Bi, Ca, Cd, Co, Cs, Li, Mo, Ni, Sr, Th, Tl, V и W; второй – Al, Ba, Ga, Pb, Sn, Ta и Ti; третьей – Fe, Ge, Na, Nb, Sb, U, Y и Zr; четвертой – Be и Hf. При обработке виноматериала Мерло бентонитами первой группы максимально возрастали концентрации Ca, Cd, Co, Cs, Fe, Li, Mn, Ni, Sr, Tl, U и V; второй – Al, Hf, Mo, Pb и Sr; третьей – Ba, Be, Ga, Ge, Mg, Na, Sb, Ta, Ti, Y и Zr. При обработке виноматериала Молдова бентонитами первой группы максимальными были концентрации Bi, Ca, Cd, Co, Fe, Li, Mn, Nb, Ni, Sr, Ta и V; второй – Ag, Al, Mo, Pb и Th; третьей – Ba, Be, Cs, Ga, Ge, hf, Mg, Na, Sb, Ta, Ti, U, W, Y, и Zr; четвертой – Sn.

Кластерную структуру обработанных и необработанных виноматериалов, определяемую сортавыми различиями по совокупности концентраций металлов, исследовали дискриминантным анализом. Упорядоченная последовательность 16 металлов по степени убывания их вклада в модель дискриминации, а значит, и формирование сортовой кластерной структуры виноматериалов, выглядела в следующей последовательности: Zn, Cu, K, Rb, Ge, Mo, Li, Mg, Ca, Pb, Zr, Na, Cd, Nb, Co и Be. Для графической иллюстрации кластерной структуры строили диаграмму рассеяния канонических значений, на которой необработанные и обработанные бентонитовыми глинами виноматериалы отображали в виде различных геометрических фигурок на плоскости (рисунок 2).

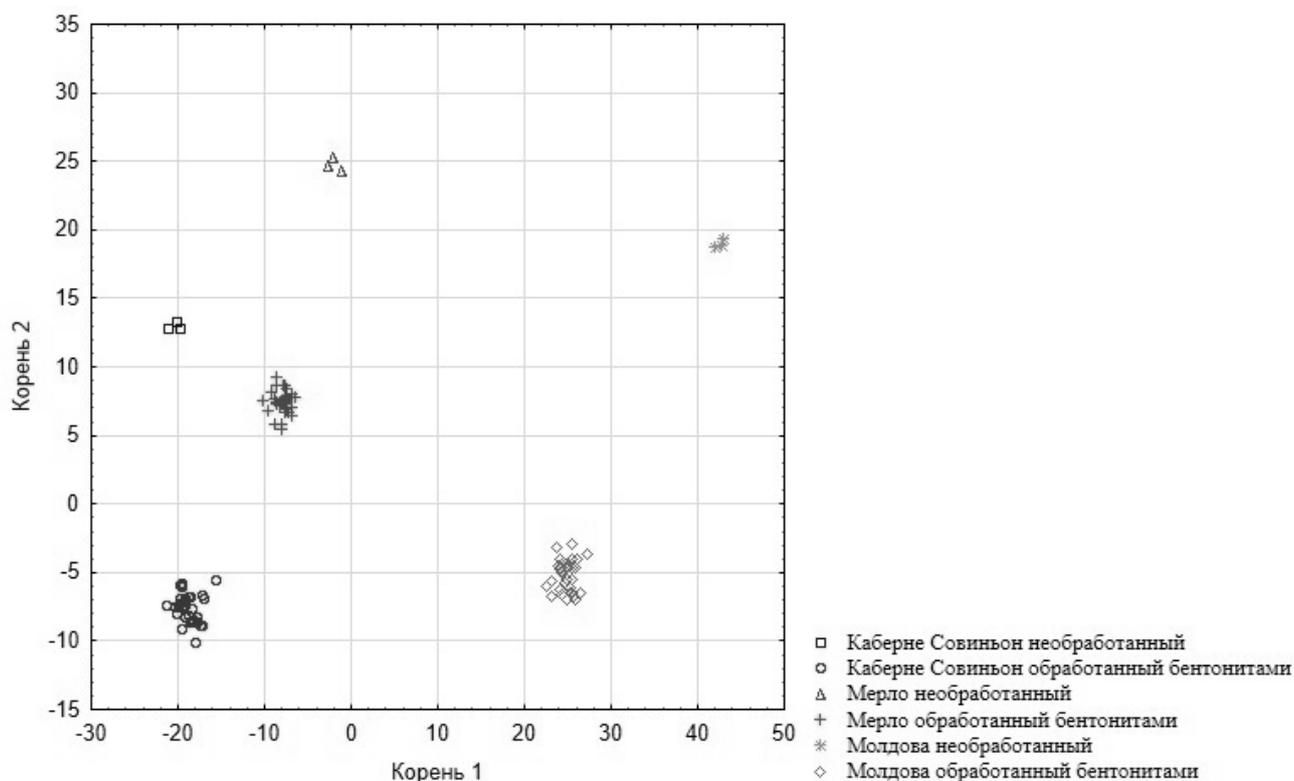


Рисунок 2 – Диаграмма рассеяния канонических значений образцов виноматериалов

На диаграмме видно образование виноматериалами групп однородности – кластеров, также можно оценить степень сходства/различия, как между объектами, так и между их группами посредством расстояний между ними по принципу – чем больше расстояние, тем меньше сходство, а значит больше отличие. Наблюдали определенное отличие между необработанными образцами виноматериалов, причем отличие между сортами Каберне Совиньон и Мерло оказалось меньше, чем между ними и Молдовой. Такой же характер сортового отличия наблюдали и после обработки виноматериалов бентонитовыми глинами. Высокая плотность расположения обработанных виноматериалов одного наименования говорит о высокой степени сходства между виноматериалами каждого наименования. Дополнительным подтверждением наличия «сортовой» кластерной структуры исходных и обработанных виноматериалов являлся и тот факт, что все образцы виноматериалов верно классифицировались моделью дискриминации.

Методом дискриминантного анализа также были оценены вклады по отдельности макро- и микроэлементов в формировании элементного «образа» обработанных и необработанных вин, определяющих их сортовую принадлежность. Показано, что по способности представления сортового образа виноматериалов микроэлементы существенно превосходят макроэлементы. Тем не менее, объединение наиболее информативных в определении кластерной структуры виноматериалов макро- и микроэлементов увеличивают возможности оценки внутрисортового сходства и межсортовых отличий виноматериалов.

Оценка сортовой и региональной принадлежности красных и белых вин нейронными сетями

Была рассмотрена возможность установления сорта винограда и региона его произрастания искусственными нейронными сетями (*Neural Network*). Для выделения элементов-предикторов нейросетевых моделей классификации использовали коэффициент непараметрической корреляции Спирмена, характеризующий корреляционную связь наименований образцов вин, региона, в котором был выращен виноград, и концентрациями элементов в этих образцах. Предикторными переменными для красных и белых вин были выбраны элементы со статистически значимыми, наибольшими корреляционными связями – Fe, Mg, Rb, Ti, Na.

Топология построенной нейронной сети для установления сортовой принадлежности на примере белых вин схематично изображена на рисунке 3. Сеть имеет 5 входов, обозначающие предикторные переменные X_i – концентрации элементов; 10 скрытых нейронов Y_j ; 3 выходных нейрона, представляющие объекты классификации Q_k – наименования вин Мускат, Рислинг, Шардоне, а также связи между ними в виде весов W_{ij} , W_{jk} .

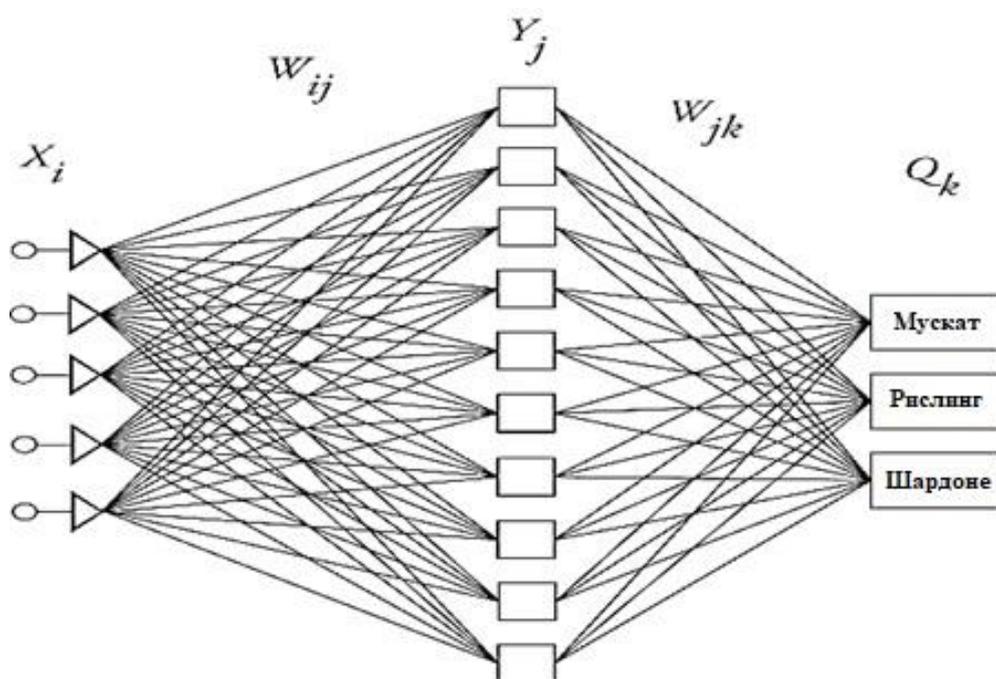


Рисунок 3 – Нейронная сеть для определения наименований белых вин

Для образцов красных вин построенная нейронная сеть правильно идентифицировала 97.2% (общее количество ошибочных классификации из 144 образцов составило 4). Вклады элементов в прогностические свойства модели убывали в последовательности Fe, Rb, Mg, Na, Ti.

Общее количество ошибочных классификации из 153 образцов белых вин оказалось равным 3, т.е. нейронная сеть правильно идентифицировала примерно 98% образцов вин. Вклады элементов в прогностические свойства модели принадлежности вин убывали в последовательности Fe, Ti, Rb, Na, Mg.

Предсказание наименования сети по 5 выбранным элементам показало возможность решения более сложной задачи – установление региона произрастания винограда. Для решения этой задачи и увеличения прогностической достоверности программой *Statistica Neural Network* образцы красных и белых вин разделили на обучающую, контрольную и тестовую выборки.

Для белых вин наибольший процент правильной классификации (100%) региона произрастания винограда сетью наблюдали у Черноморской зоны – без ошибок определены образцы по всем выборкам. Следующей по точности классификации оказалась Таманская подзона – по обучающей, контрольной и тестовой выборке классифицировали правильно соответственно: 98%; 91,67%; 100%. Далее идет Южно-предгорная зона - точность классификации по выборкам составила 90,48%, 100%, 100% соответственно. Наихудшую классификацию наблюдали для образцов Анапской подзоны: 85,71%, 100%, 100%. Важно то, что на тестовой выборке образцы вин правильно классифицированы по всем регионам.

Для красных вин характерно аналогичное распределение точности классификации по регионам: Черноморская зона (100%, 100%, 100%); Таманская подзона (100%, 85,71%, 100%); Южно-предгорная зона (100%, 80,95%, 100%) и Анапская подзона (100%, 71,43%, 100%). На тестовой выборке также верно классифицированы образцы красных вин по всем регионам.

Полученные в процессе обучения параметры сетей – их топология и значения весов позволили в среде программирования *Visual C#* разработать программный продукт, автоматизирующий процесс идентификации наименований вин, с последующим определением регионов произрастания винограда. Стартовое окно программы изображено на рисунок 4. В предусмотренные поля интерфейсного окна вводятся значения концентраций элементов Fe, Mg, Na, Rb, Ti (в мкг/дм³), затем нажимается кнопка *Рассчитать*. В нижней левой части окна появится наименование вина и регион, в котором был выращен виноград.

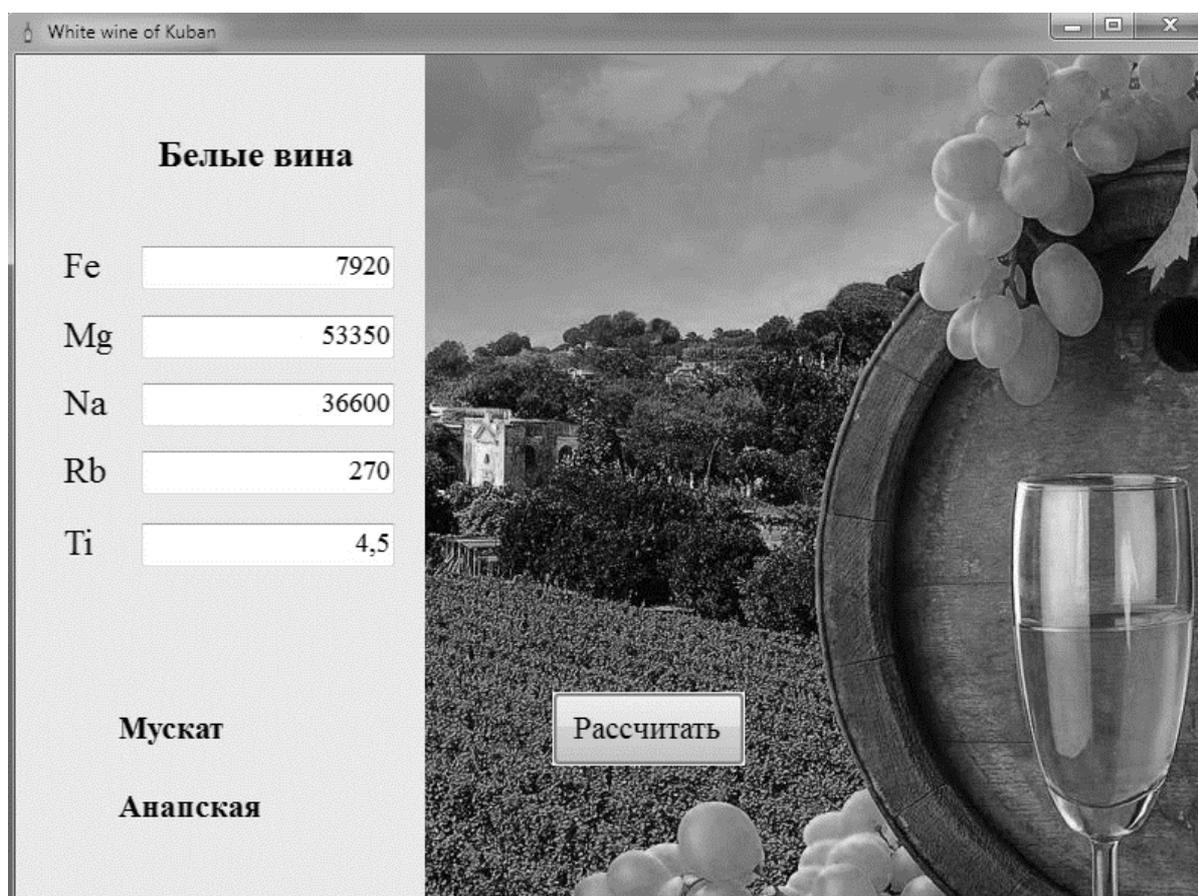


Рисунок 4 – Стартовое окно программы программного модуля по установлению сортовой и региональной принадлежности вин

ВЫВОДЫ

1. Изучены взаимосвязи между минеральным составом в цепочке почва-виноград-вино для установления территории произрастания винограда, а также характера поступления металлов в систему почва-виноград с учетом валовой, кислоторастворимой и подвижной форм элементов в почве. Показано, что виноградная лоза помимо подвижных форм извлекает из почвы и более труднорастворимые соединения. С использованием диаграмм рассеяния канонических значений, построенных по концентрациям металлов, показано, что, независимо от формы их извлечения из почвы, образуются сгруппированные по сортам винограда кластеры.

2. Изучено распределение макро- и микроэлементов в ягоде винограда и составляющих ее фрагментах (кожица, косточки и мякоть). Пошаговым дискриминантным анализом по элементному «образу» установлены элементы-маркеры отличия различных фрагментов ягод винограда Каберне и Рислинг. Составлены функции классификации, позволяющие по концентрациям элементов-маркеров Ba, Cr, Mg, Rb, Sr и Ti определять сортовую принадлежность винограда.

3. Проведен сравнительный анализ вклада металлов и летучих соединений в сенсорные свойства вин, где консолидированной характеристикой является среднее значение экспертных оценок. Линейными регрессионными моделями установили, что вклад летучих соединений в сенсорную оценку красных вин более чем в два, а белых вин в три раза выше вклада металлов. Общими линейными моделями оценили вклад металлов и летучих соединений в изменчивость сенсорных оценок: для красных вин он приблизительно одинаков для металлов и летучих соединений, для белых - летучие соединения в четыре раза превышали суммарный вклад металлов.

4. Проведена оценка формирования элементного «образа» красных вин при осветлении и стабилизации виноматериалов из сортов винограда Каберне Совиньон, Мерло и Молдова бентонитовыми глинами различной природы. Кластерная структура обработанных бентонитовыми глинами виноматериалов сохраняется относительно содержания в них металлов, что подтверждает образование групп однородности в соответствии с наименованиями виноматериалов. Бентонитовые глины, влияя на элементный состав, сохраняли элементный «образ» виноматериалов, а также сортовую индивидуальность и характер их сортового отличия.

5. Построены характеристические элементные профили вин географических объектов со схожим характером распределения элементов в винах различных производителей внутри каждой зоны. По данным многоэлементного анализа построены вероятностно-статистические модели, позволившие идентифицировать сорт винограда и регион произрастания. Для белых и красных вин нейронными сетями *Neural Network* показана возможность установления сорта винограда и региона его произрастания.

6. Для автоматизации вычислений по разработанным моделям созданы программные модули, позволяющие оценить сортовую принадлежность вина и регион его производства по содержанию выбранных для построения модели элементов.

СПИСОК РАБОТ, ОПУБЛИКОВАННЫХ ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИИ:

1. Титаренко, В.О. Идентификация сортовой и региональной принадлежности красных вин методами классификационного анализа / В.О. Титаренко, А.А. Халафян, З.А. Темердашев, А.А. Каунова, А.Г. Абакумов // Журнал аналитической химии. – 2018. – Т. 73. – № 2. – С. 141-152.

Titarenko, V.O. Identification of the varietal and regional origin of red wines by classification analysis / V.O. Titarenko, A.A. Khalafyan, Z.A. Temerdashev, A.A. Kaunova, A.G. Abakumov // Journal of Analytical Chemistry. – 2018. – Vol. 73. – no. 2. – P. 195-206.

2. Халафян, А.А. Установление сортовой и региональной принадлежности белых вин с использованием нейросетевых технологий / А.А. Халафян, З.А. Темердашев, А.А. Каунова, А.Г. Абакумов, В.О. Титаренко, В.А. Акиншина, Е.А. Ивановец // Журнал аналитической химии. – 2019. – Т. – 74. – № 6. – С. 464-471.

Khalafyan, A.A. Determination of the wine variety and geographical origin of white wines using neural network technologies / A.A. Khalafyan, Z.A. Temerdashev, A.A. Kaunova, A.G. Abakumov, V.O. Titarenko, V.A. Akin'shina, E.A. Ivanovets // Journal of Analytical Chemistry. – 2019. – Vol. 74. – no 6. – P. 617-624.

3. Абакумов, А.Г. Установление сортовой принадлежности винограда по выявленным элементам-маркерам в ягоде и различных её составляющих частях / А.Г. Абакумов, В.О. Титаренко, А.А. Халафян, З.А. Темердашев, А.А. Каунова // Аналитика и контроль. – 2019. – Т. 23. – № 1. – С. 61-70.

4. Temerdashev Z. Using neural networks to identify the regional and varietal origin of cabernet and merlot dry red wines produced in Krasnodar region / Z. Temerdashev, A. Khalafyan, A. Kaunova, A. Abakumov, V. Titarenko, V. Akinshina // Foods and Raw Materials. – 2019. – Vol. 7. – no. 1. – P. 124-130.

5. Халафян, А.А. Хемометрическая оценка вклада металлов и летучих соединений в сенсорные свойства некоторых натуральных виноградных вин / А.А. Халафян, З.А. Темердашев, А.Г. Абакумов, Ю.Ф. Якуба // Журнал аналитической химии. – 2021. – Т. 76. – № 8. – С. 746-757.

Khalafyan, A.A. Chemometric estimation of the contributions of metals and volatile compounds to the sensory properties of some natural grape wines / A.A. Khalafyan, Z.A.

Temerdashev, A.G. Abakumov, Y.F. Yakuba // Journal of Analytical Chemistry. – 2021. – Vol. 76. – no. 8. – P. 1016-1027.

6. Темердашев, З.А. Взаимосвязи между элементарным составом винограда, почвы с места его произрастания и вина / З.А. Темердашев, А.Г. Абакумов, А.А. Халафян, Н.М. Агеева // Заводская лаборатория. Диагностика материалов. – 2021. – Т. 87. – № 11. – С. 11-18.

7. Абакумов, А.Г. Влияние бентонитовых глин на минеральный состав красных столовых виноматериалов / А.Г. Абакумов, З.А. Темердашев, Н.М. Агеева // Известия высших учебных заведений. Пищевая технология. – 2021. – № 4 (382). – С. 22-27.

8. Temerdashev, Z. Instrumental assessment of the formation of the elemental composition of wines with various bentonite clays / Z. Temerdashev, A. Abakumov, M. Bolshov, A. Khalafyan, N. Ageeva, A. Vasilyev, A. Ramazanov // Microchemical Journal. – 2022. – Vol. 175. – no. 107145.

9. Temerdashev, Z. Data on the influence of clarification and stabilization with bentonite clays on the elemental composition of red wines determining their varietal affiliation / Z. Temerdashev, A. Abakumov, M. Bolshov, A. Khalafyan, N. Ageeva, A. Vasilyev // Data in Brief. – 2022. – Vol. 42. – no. 108163.

10. Свидетельство: 2019665908. Определение наименования белых и красных вин по концентрации микроэлементов методом деревьев решений: программа для ЭВМ / Акиньшина В.А., Абакумов А.Г., Темердашев З.А., Халафян А.А. (RU); правообладатель ФГБОУ ВО КубГУ. № 2019665177; заявл. 22.11.2019, опубл. 03.12.2019

11. Свидетельство: 2019665909. Определение наименования белых и красных вин по концентрации микроэлементов методом нейронных сетей: программа для ЭВМ / Акиньшина В.А., Абакумов А.Г., Темердашев З.А., Халафян А.А. (RU); правообладатель ФГБОУ ВО КубГУ. № 2019665179; заявл. 22.11.2019, опубл. 03.12.2019

12. Абакумов, А.Г. Влияние бентонитовых глин различных торговых марок на газохроматографический профиль и элементный состав вин / А.Г. Абакумов, З.А. Темердашев // Материалы XXI Менделеевского съезда по общей и прикладной химии. Санкт-Петербург. 2019. Т. 4. – С. 333.

13. Абакумов, А.Г. О некоторых подходах оценки соответствия виноградных вин требованиям качества / А.Г. Абакумов, Д.Д. Абакумова, З.А. Темердашев // Материалы XXI Менделеевского съезда по общей и прикладной химии. Санкт-Петербург. 2019. – Т. 4. – С. 334.

14. Абакумов, А.Г. Оценка влияния бентонитовых глин различных торговых марок на элементный состав вин / А.Г. Абакумов, З.А. Темердашев // Материалы III

Всероссийской конференции по аналитической спектроскопии с международным участием. Краснодар. 2019. – С. 169.

15. Абакумов, А.Г. Спектрометрическое изучение химического и фазового состава бентонитовых глин для оценки возможности их применения в виноделии / А.Г. Абакумов, А.М. Васильев, Л.В. Васильева, А.Ш. Рамазанов., З.А. Темердашев // Материалы III Всероссийской конференции по аналитической спектроскопии с международным участием. Краснодар. 2019. С. 170.

16. Абакумов, А.Г. Определение сортовой принадлежности вин по концентрациям металлов и летучих соединений методами деревьев решений и нейронных сетей / А.Г. Абакумов, З.А. Темердашев, А.А. Халафян, Д.Д. Абакумова // Материалы XI Всероссийской научной конференции «Аналитика Сибири и Дальнего Востока». Новосибирск. – С. 166.

17. Abakumov, A.G. Influence of bentonite clays on gas chromatographic profile of red wine / A.G. Abakumov, Z.A. Temerdashev, Yu.F. Yakuba // Материалы XII International Conference on Chemistry for Young Scientists «Mendeleev». St. Petersburg. 2021. – P. 47.

Автор выражает глубокую признательность д.т.н., профессору Халафяну А. А., д.х.н. Якубе Ю.Ф., а также сотрудникам кафедры аналитической химии и УНПК «Аналит» за оказанную методическую помощь и содействие.

АБАКУМОВ АЛЕКСЕЙ ГЕННАДЬЕВИЧ

Установление сортовой и региональной принадлежности сортовых вин на основе их многоэлементного «образа»

АВТОРЕФЕРАТ

Диссертации на соискание ученой степени
кандидата химических наук

Подписано в печать 05.08.2022 г.

Формат 60×84¹/₁₆. Бумага офсетная. Печать цифровая.

Уч.-изд. л. 1,0. Тираж 100 экз. Заказ № 4953.1

Издательско-полиграфический центр

Кубанского государственного университета

350040, г. Краснодар, ул. Ставропольская, 149.