

DOI: <https://doi.org/10.26896/1028-6861-2023-89-10-25-33>

ХАРАКТЕРИЗАЦИЯ КОНЬЯКОВ И ВИНОГРАДНЫХ БРЕНДИ ПО СПЕКТРАМ ФЛУОРЕСЦЕНЦИИ, ОБРАБОТАННЫМ С ПОМОЩЬЮ МЕТОДОВ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ

© Арам Ваганович Саакян¹, Михаил Константинович Аленичев²,
Александр Давидович Левин^{1,2*}

¹ Московский физико-технический институт, Россия, 141701, Московская область, Долгопрудный, Институтский пер., д. 9.

² Всероссийский научно-исследовательский институт оптико-физических измерений (ФГБУ «ВНИИОФИ»), Россия, 119361, Москва, ул. Озерная, д. 46; *e-mail: levin-ad@vniiofi.ru

*Статья поступила 13 февраля 2023 г. Поступила после доработки 30 мая 2023 г.
Принята к публикации 22 июня 2023 г.*

Предложен метод экспрессной характеристики коньяков и виноградных бренди на примере их классификации по географическому происхождению, который основан на использовании информативных фрагментов спектров флуоресценции образцов различного географического происхождения и их обработке с помощью алгоритмов машинного обучения. В качестве информативных были отобраны три вида флуоресцентных спектров: синхронного сканирования при разности длин волн 50 нм, эмиссии при длинах волн возбуждения 250 и 280 нм. Эти спектры были зарегистрированы для 43 образцов коньяков и виноградных бренди, которые по географическому происхождению были разделены на три класса — регионы Российской Федерации, кроме Дагестана, Республика Дагестан и Республика Армения. Из исследованных образцов были сформированы обучающий набор из 33 образцов и тестовый набор из 10 образцов. Для обучения моделей был выбран экстремальный градиентный бустинг — один из современных алгоритмов машинного обучения, пригодный при ограниченном числе образцов в обучающем наборе. Правильность распознавания образцов тестового набора (состоящего из 10 образцов, не использованных при обучении) составила 100 % для моделей на основе спектров эмиссии при длинах волн возбуждения 250 и 280 нм и синхронного сканирования. Полученные результаты демонстрируют принципиальную возможность использования информативных фрагментов спектров флуоресценции в сочетании с машинным обучением для характеристики коньяков и виноградных бренди, в том числе, для их классификации по географическому происхождению. Однако применение этого метода в регламентированных процедурах контроля продукции возможно только для коньяков и виноградных бренди с защищенным географическим наименованием (указанием места происхождения). Изложенный подход может быть также использован для классификации других жидких пищевых продуктов (соков, меда и т.п.).

Ключевые слова: флуоресценция; хеометрика; машинное обучение; эмиссионные спектры; коньяк; классификация.

CHARACTERIZATION OF COGNACS AND GRAPE BRANDIES BY FLUORESCENCE SPECTRA PROCESSED USING MACHINE LEARNING METHODS

© Aram V. Sahakyan,¹ Mikhail K. Alenichev,² Alexander D. Levin^{1,2*}

¹ Moscow Institute of Physics and Technology, 9, Institutsky per., Dolgoprudny, Moscow obl., 141701, Russia.

² All Russian Scientific and Research institute for Optical and Physical Measurements, 46, Ozeraya ul., Moscow, 119361, Russia; *e-mail: levin-ad@vniiofi.ru

Received February 13, 2023. Revised May 30, 2023. Accepted June 22, 2023.

A method for express characterization of cognacs and grape brandies is proposed in the case study of their classification by geographical origin. The method is based on the use of informative fragments of fluorescence spectra of samples of different geographic origin and their subsequent processing using machine learning algorithms. Three types of fluorescence spectra were selected, i.e., spectra of synchronous scanning at a wavelength difference of 50 nm, and emission spectra at an excitation wavelength of 250 and 280 nm. These spectra were measured for 43 samples of cognacs and grape brandies, which were divided into 3 classes according to their geographical origin, the regions of the Russian Federation (except for Dagestan), the Republic of Dagestan (Russian Federation), and the Republic of Armenia. A training set consisting of 33 samples and a test set consisting of 10 samples were formed from the samples under study.

To train the models, an extreme gradient boosting, one of the modern machine learning algorithms, was chosen as suitable for a limited number of samples in the training set. The correctness of the sample recognition of the test set (consisting of 10 samples not used in training) was 100% for models based on emission spectra and spectra of synchronous scanning. The results obtained demonstrate the fundamental possibility of using informative fragments of fluorescence spectra in combination with machine learning to characterize cognacs and grape brandies, including their classification by the geographical origin. However, the use of this method in regulated procedures of the product control is possible only for cognacs and grape brandies with a protected geographical indication (designation of the origin). The above approach can also be used to classify other liquid food products (juices, honey, etc.).

Keywords: fluorescence; chemometrics; machine learning; emission spectra; brandy, classification.

Введение

Коньяки и бренди являются одним из наиболее дорогих видов алкогольной продукции, стоимость которых определяется качеством, сроком и условиями выдержки коньячных дистиллятов, входящих в их состав, и их географическим происхождением¹ (ГП). Поэтому недобросовестные производители и продавцы часто прибегают к преднамеренной фальсификации и искажению сведений о характеристиках коньяков и бренди, а также других дорогостоящих алкогольных напитков. В связи с этим большое внимание уделяется разработке надежных способов контроля подлинности характеристик, указанных производителями таких напитков [1].

В настоящее время признанными методами определения химического состава алкогольной продукции являются хроматография (газовая и жидкостная), различные виды элементного, в том числе изотопного анализа с использованием масс-спектрометрии с индуктивно-связанной плазмой (ИСП-МС) и масс-спектрометрии изотопного отношения [2 – 4]. Несомненными достоинствами данных методов являются возможность анализа сложной и многокомпонентной по составу продукции, в том числе бренди и коньяков, селективность, а также воспроизводимость и достоверность получаемых результатов. Однако широкое применение этих методов для контроля подлинности напитков ограничено сложностью требуемой пробоподготовки, высокой стоимостью аппаратуры, а также необходимостью привлечения высококвалифицированного персонала. Указанные методы позволяют проводить количественный анализ с высокими точностью и чувствительностью, включая определение веществ-маркеров, концентрация которых в той или иной степени зависит от ГП, сроков и условий выдержки и других особенностей контролируемого напитка. Наряду с применением рассмотренных

методов анализа в последнее время все большее внимание уделяется развитию экспрессных подходов, сочетающих в себе использование недорогой аппаратуры и современные алгоритмы обработки получаемых данных. Зачастую такие методы позволяют значительно снизить трудоемкость пробоподготовки, а в некоторых случаях обойтись без нее, а также дают возможность проводить анализ непосредственно на месте взятия пробы. Большими возможностями в этом плане обладают методы оптической спектроскопии, применение которых для контроля различных видов пищевой продукции в последнее время расширяется. В этом случае постановка задачи предполагает установление воспроизводимых различий между спектрами образцов методами анализа многомерных данных (на основе хеометрики и машинного обучения). При этом не требуется выявление конкретных веществ-маркеров, концентрации которых ответственны за различия в спектрах. Правильно подобранные фрагменты оптических спектров напитка содержат информацию о химическом и дисперсном составе образца, которая формируется под воздействием многих факторов, таких как сорт винограда, условия его выращивания, материал бочки, в которой выдерживают коньячный дистиллят, условия и длительность выдержки, технология изготовления коньяка или бренди. При этом возможны случаи, когда ГП винограда и материала бочки не полностью совпадают. Например, при производстве испанского бренди Torres 10 Double Barrel на одной из стадий дистиллят выдерживают в бочках из американского дуба [5].

Совокупность информативных фрагментов оптических спектров, однозначно характеризующих объект в составе достаточно широкой выборки, может рассматриваться как *спектральный портрет* этого объекта. Такая концепция спектрального портрета была предложена при участии одного из авторов данной статьи и успешно использована для контроля подлинности и идентификации сухих и полусладких белых вин и виноматериалов отечественного и зарубежного производства [6].

Весьма информативными для контроля подлинности и характеристик алкогольной продук-

¹ В Федеральном законе № 468 ФЗ «О виноградарстве и виноделии в Российской Федерации» (ст. 29) используются термины «географическое указание» и «наименование места происхождения». В научной литературе по методам идентификации вин и коньяков используется термин *geographical origin* (географическое происхождение).

ции являются методы флуоресцентной спектроскопии: например, в работе [7] эти методы использовали для классификации австралийских вин по конкретным регионам происхождения, а авторы работы [8] сравнивали эффективность использования различных видов спектров флуоресценции для классификации бренди по ГП.

При этом используют различные виды спектров флуоресценции — возбуждения и/или эмиссии, спектры синхронного сканирования и трехмерные (3D) спектры флуоресценции. Существует две схемы регистрации спектров флуоресценции — прямоугольная, когда излучение флуоресценции собирают под прямым углом к возбуждающему излучению (*right angle fluorescence*), и фронтальная, когда излучение собирают с передней поверхности образца (*front face fluorescence*). При анализе алкогольной продукции применяют обе схемы: например, в работе [9] в схеме фронтальной флуоресценции были измерены спектры возбуждения и эмиссии 120 красных вин; на основании этих спектров проведена классификация вин по типу, ГП и урожаю винограда.

Спектры синхронного сканирования регистрируют при фиксированном значении разности длин волн возбуждения и эмиссии. Они также оказываются информативными при классификации алкогольной продукции, включая бренди и коньячные изделия [10]. Информативность этих спектров во многих случаях сравнима с информативностью трехмерных спектров флуоресценции, но их регистрация значительно проще и требует меньше времени.

Следует отметить, что в многочисленных статьях по классификации алкогольной продукции, в том числе по географическому происхождению, методами оптической спектроскопии, опубликованных в ведущих отечественных и зарубежных журналах (например, [2 – 4], [7 – 12]), анализируют образцы, приобретенные в торговых сетях. При этом исходят из информации о ГП и других характеристиках образцов, указанной в маркировке (на упаковке или этикетке) напитка. В результате таких исследований устанавливают информативные фрагменты оптических спектров и алгоритмы обработки спектральных данных, необходимые для сертификации данного вида продукции с использованием стандартных образцов.

Для извлечения информации из различных видов спектров флуоресценции весьма эффективными оказываются методы хемометрики, которые применяют для обработки спектров при решении многих прикладных задач [7 – 12]. Использование спектров флуоресценции в сочетании с хемометрической обработкой данных позволяет обойтись без применения трудоемких

методов пробоподготовки и протоколов анализа. В последнее время для обработки оптических спектров наряду с хемометрическими стали применять методы машинного обучения.

Для каждого вида спектров флуоресценции необходим правильный выбор информативных фрагментов, т.е. диапазонов длин волн, которые должны содержать максимум информации об исследуемом образце, но при этом не должны быть слишком широкими, так как это усложняет последующую обработку данных. Кроме того, данные, которые не несут особого физико-химического смысла, фактически выполняют роль помех и могут приводить к искажению получаемой информации.

Классификация образцов коньяков и бренди по одной или нескольким характеристикам с использованием спектров флуоресценции является задачей дискриминантного анализа, поскольку разбиение на классы (группы) задается априори, а не определяется в ходе построения модели. В качестве алгоритма классификации в данной статье был выбран экстремальный градиентный бустинг (ЭГБ), который в последние годы зарекомендовал себя как один из наиболее эффективных алгоритмов классификации при машинном обучении по сравнению с другими (например, линейным дискриминантным анализом). Преимущества ЭГБ проявляются в случаях построения моделей при ограниченном числе образцов обучающего набора [7]. Обучение модели ЭГБ заключается в ее пошаговом совершенствовании: на каждом из шагов предсказанное распределение образцов по классам сопоставляется с исходными данными обучающего набора, и параметры модели корректируются с учетом результатов этого сопоставления. Таким образом, каждая следующая модель учится на ошибках предыдущей. Процесс обучения прекращается после того, как различие между предсказаниями и исходными данными перестают уменьшаться при переходе к следующему шагу или удовлетворяют заданному критерию. Подробное описание алгоритма ЭГБ, включая его математический аппарат, приведено, например, в работах [13, 14].

Цель данной работы — определение набора спектров флуоресценции для построения спектральных портретов и возможной классификации коньяков и виноградных бренди по ГП с использованием алгоритмов МО.

Коньяки и виноградные бренди являются родственными видами алкогольной продукции, содержащими в своем составе в основном одни и те же вещества [15]. В большинстве случаев виноградные бренди изготавливают по «коньячной» технологии, предусматривающей, в частности, выдержку винного дистиллята в контакте с древесиной дуба, и отличающейся от коньяка

только длительностью выдержки (менее трех лет). Во многих работах коньяк рассматривается как частный случай виноградных бренди. Действующим российским стандартом допускается также возможность добавления к дистилляту перед выдержкой винного спирта-ректификата, такие напитки могут более существенно отличаться от коньяков [15], в данной работе их не рассматривали и не использовали.

Исследовали образцы бренди и коньяков, разделенные по географическому происхождению на три класса: регионы Российской Федерации, кроме Дагестана; Дагестан (Российская Федерация); Республика Армения.

При разбиении на классы учитывали, что в регионах Российской Федерации, кроме Дагестана, при производстве коньяков может использоваться зарубежное сырье — коньячные дистилляты и виноград [16], в то время как дагестанские [17, 18] и армянские [19] производители коньяков используют, как правило, сырье собственного происхождения и производства. Такое разбиение на классы должно обеспечить возможность отличать дагестанские и армянские коньяки от выпущенных другими производителями.

Следует иметь в виду, что химический и дисперсный составы образца определяются не только сырьем, но и особенностями технологии (включая выдержку в дубовых бочках), применяемой на данном предприятии. Поэтому при отнесении данного образца к определенному классу мы сохранили подход, применяемый в упомянутых выше исследованиях по классификации алкогольной продукции — руководствовались данными, указанными в его маркировке (упаковке или этикетке).

Экспериментальная часть

Для регистрации спектров флуоресценции использовали спектрофотометр-флуориметр СФФ-2 «Флуоран», разработанный ФГУП «ВНИИОФИ» с прямоугольной схемой регистрации флуоресценции.

Отбор образцов коньяков и бренди. Для проведения исследований были подготовлены 43 образца виноградных бренди и коньяков с разным сроком выдержки коньячных дистиллятов, различных марок ведущих российских и зарубежных производителей.

Большинство армянских бренди и коньяков было получено в Армении на заводе-изготовителе или куплено в магазинах «duty free», куда напитки поставляет завод-изготовитель напрямую, без посредников, а остальные были приобретены в крупных сетевых магазинах. Большинство дагестанских бренди и коньяков было получено на заводе-изготовителе, а остальные были куплены в крупных сетевых магазинах. В этих условиях мало оснований сомневаться в подлинности использованных образцов. Следует также отметить, что согласно законодательству Республики Армения [19] в армянских коньяках допускается использование только выращенного в Армении винограда, причем определенных сортов, а среди отобранных образцов дагестанского коньяка три образца — «Старая крепость» (четырёхлетний), «коньяк пятилетний Дербент» и «КВ Дербент» (пятилетний) относятся к напиткам с защищенным географическим указанием «Дагестан» [20 – 22].

Информация об образцах различного ГП приведена в табл. 1.

Были выбраны виды спектров флуоресценции и их фрагменты, имеющие характерные особенности, по совокупности которых предполага-

Таблица 1. Информация об образцах бренди и коньячной продукции

Table 1. Data on samples of brandy and cognac products

Страна	Производитель	Возраст (количество образцов)
Российская Федерация (кроме Дагестана)	ООО «ССБ», Коньяк ООО «Винно-коньячный завод «КВС», Ставропольский винно-коньячный завод ЗАО, АО Московский Винно-коньячный завод «КиН», ООО КВКЗ (Коломенский винно-коньячный завод), АО «Татспиртпром», АО «Мосазервинзавод», ООО «ДЗАП «ОСТ-АЛКО», АО вино-коньячный комбинат РУСЬ, ООО «АЛВИСА», ВКЗ «Альянс-1892», ООО «СОРДИС», АО «Бахчисарайский комбинат Стройиндустрия», ООО «Завод Первомайский», ООО Завод марочных вин «Коктебель», ООО «ДЗАП, «ОСТ-АЛКО»	Меньше 3 лет (2), 3 года (8), 4 года (2), 5 лет (9), 7 лет (1)
Российская Федерация (Дагестан)	АО «Дербентский коньячный комбинат», АО «Кизлярский коньячный завод»	Меньше 3 лет (1), 3 года (1), 4 года (2), 5 лет (5)
Республика Армения	ЗАО «Ереванский Коньячный Завод», ООО «Коньячный завод «Агерак», Гетапский винный завод (ИП), Вединский винно-коньячный завод Vedi — Alco (ИП), ООО «Арапатский Винный Завод», ООО Винно-коньячный дом «Шахназарян», ООО «Ijevan Wine-Brandy Factory», «Арапат ЕКВВК», ООО «АР-МЕНИЯ ВАЙН»	3 года (6), 5 лет (5), 15 лет (1), 20 лет (1)

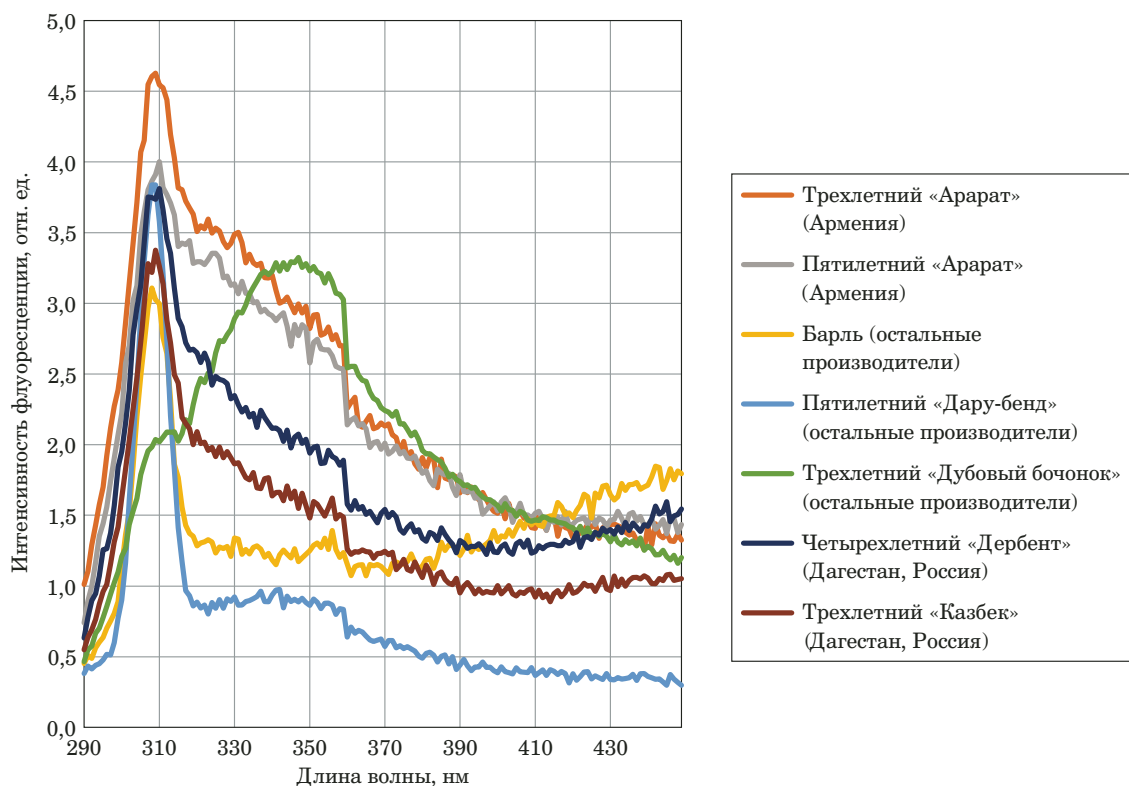


Рис. 1. Спектры эмиссии в диапазоне длин волн 290 – 450 нм при длине волны возбуждения 280 нм (коньячный максимум)

Fig. 1. Emission spectra in the wavelength range from 290 to 450 nm at an excitation wavelength 280 nm (brandy maximum)

лось установление значимых различий между образцами бренди и коньяков различного ГП:

спектры эмиссии в диапазоне длин волн от 290 до 450 нм при длине волны возбуждения 280 нм (коньяки обладают максимумом поглощения при 280 нм, коньячный максимум) и в диапазоне длин волн от 260 до 420 нм при длине волны возбуждения 250 нм (коньяки обладают минимумом поглощения при 250 нм, коньячный минимум)²;

спектры синхронного сканирования в диапазоне длин волн от 235 до 450 нм при разнице длин волн испускания и возбуждения 50 нм.

Перед проведением измерений образцы бренди и коньяков предварительно разбавляли деионизованной водой в соотношении 1:29 для того, чтобы минимизировать эффект внутреннего фильтра, который мог бы привести к искажению получаемых спектров, о чем упоминают авторы работы [7].

На основании полученных данных строили модель машинного обучения с использованием алгоритма ЭГБ. При этом в качестве входных переменных (предикторов) использовали наборы значений интенсивностей флуоресценции в вы-

бранном фрагменте спектра. В качестве выходных (целевых) переменных использовали номера классов, к которым относятся соответствующие образцы.

Алгоритм ЭГБ был реализован с помощью программы, написанной на языке Python 3.7 с использованием пакетов xgboost, pandas и sklearn. Программа была написана в среде программирования Spyder 4.

Обсуждение результатов

Примеры полученных спектров флуоресценции приведены на рис. 1 – 3.

Обучение модели проводили на тренировочном (обучающем) наборе в составе 33 образцов бренди и коньяков различных марок.

Достоверность классификации образцов с помощью обученной модели оценивали в два этапа.

На первом этапе проводили проверку модели для каждого вида спектров методом перекрестной валидации с использованием только образцов, входивших в обучающий набор. Правильность распознавания при проверке обучающего набора, состоящего из 33 образцов бренди и коньяка, составила 100 %.

На втором этапе модели, обученной ранее по 33 образцам бренди и коньяков, предоставляли тестовый набор, состоящий из 10 образцов раз-

² Термины «коньячный максимум» и «коньячный минимум» были предложены в работе [23] применительно к спектрам абсорбции образцов коньячной продукции.

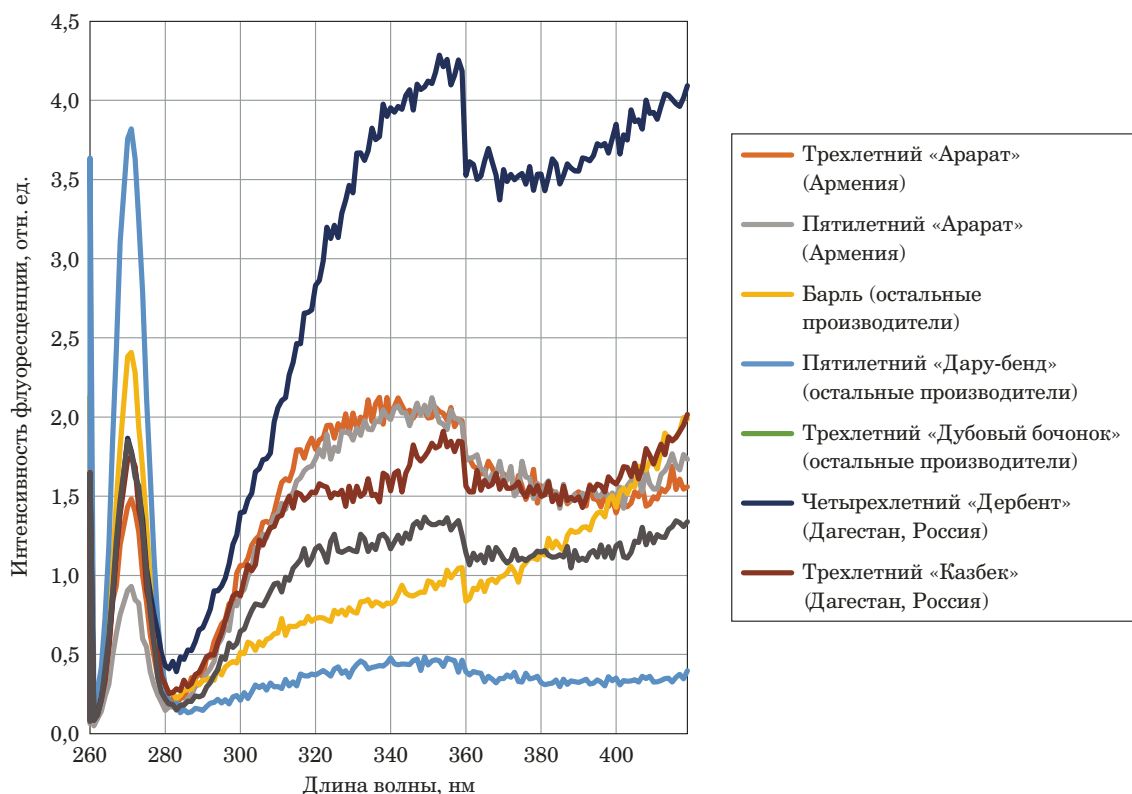


Рис. 2. Спектры эмиссии в диапазоне длин волн 260 – 420 нм при длине волны возбуждения 250 нм (конъючный минимум)

Fig. 2. Emission spectra in the wavelength range from 260 to 420 nm at excitation wavelength of 250 nm (brandy minimum)

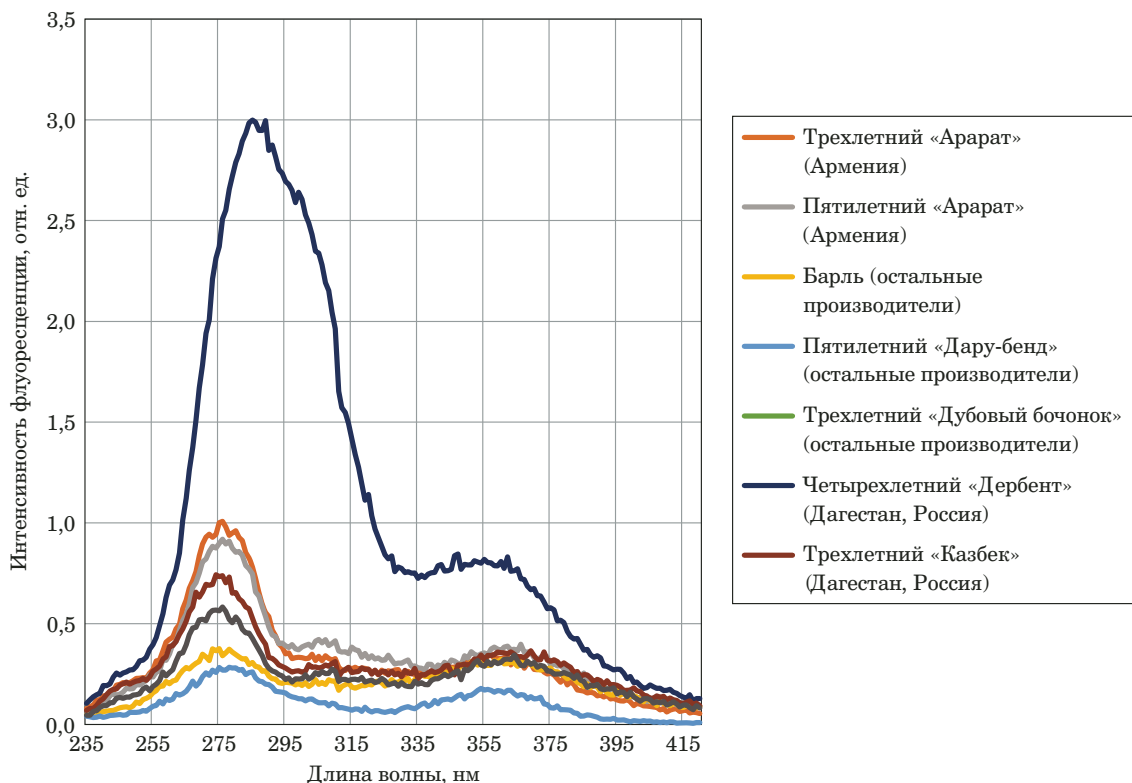


Рис. 3. Спектры синхронного сканирования в диапазоне длин волн 235 – 450 нм при разности длин волн возбуждения и эмиссии $\Delta\lambda = 50$ нм

Fig. 3. Spectra of synchronous scanning in the wavelength range from 235 to 450 nm at the wavelength difference between the excitation and emission $\Delta\lambda = 50$ nm

личных напитков различных марок, которые не участвовали в обучении. Результаты предсказаний ГП, полученные с помощью обученных моделей для образцов тестового набора, представлены в табл. 2 – 4. В каждой из этих таблиц в левом столбце приведены исходные данные об образце, включая его ГП, а в остальных столбцах — предсказания ГП с указанием их доверительных вероятностей P . Ячейки с правильными результатами предсказаний выделены зеленым цветом. Подобные таблицы используются в машинном обучении для сопоставления результатов предсказаний с исходными данными и носят название матриц ошибок или матриц несоответствий (в англоязычной литературе — confusion matrix).

Правильность распознавания образцов тестового набора составила 100 % для моделей, построенных как по спектрам синхронного скани-

рования, так и эмиссии при возбуждении на длинах волн конъюнкционного минимума и максимума.

Средние значения доверительной вероятности для предсказаний классов по спектрам эмиссии на длине волны возбуждения конъюнкционного минимума (250 нм) и максимума (280 нм) составили 0,975 и 0,966 соответственно, а для предсказаний по спектрам синхронного сканирования — 0,971.

Помимо классификации по ГП, реализованный метод представляет интерес для экспрессного анализа (скрининга) образцов алкогольной продукции при проверке и подтверждении их подлинности и соответствия характеристик, заявляемых производителями и продавцами. Это можно проиллюстрировать данными рис. 1, где приведены спектры эмиссии в диапазоне длин волн 290 – 450 нм при длине волны возбуждения 280 нм. Видно, что спектр одного из образцов

Таблица 2. Результаты обработки спектров эмиссии при длине волны возбуждения конъюнкционного минимума (250 нм), тестовый набор

Table 2. Results of processing emission spectra at an excitation wavelength of 250 nm (test set)

Исходные данные об образце	Предсказанное ГП с доверительной вероятностью		
	Армения	Регионы России, кроме Дагестана	Россия (Дагестан)
Армения «Арагат» трехлетний	$P = 0,979$	$P = 0,01$	$P = 0,011$
Армения «Арвест» пятилетний	$P = 0,972$	$P = 0,012$	$P = 0,016$
Армения «Митридат» трехлетний	$P = 0,973$	$P = 0,012$	$P = 0,014$
Армения «Митридат» пятилетний	$P = 0,981$	$P = 0,01$	$P = 0,009$
Россия «Киноровский» трехлетний	$P = 0,017$	$P = 0,971$	$P = 0,012$
Россия «Командирский»	$P = 0,009$	$P = 0,978$	$P = 0,013$
Россия «Олд барель» пятилетний	$P = 0,003$	$P = 0,986$	$P = 0,01$
Россия «Трофейный» четырехлетний	$P = 0,005$	$P = 0,986$	$P = 0,002$
Россия (Дагестан) «Казбег» трехлетний	$P = 0,025$	$P = 0,031$	$P = 0,944$
Россия (Дагестан) «Лезгинка» пятилетний	$P = 0,014$	$P = 0,01$	$P = 0,976$

Таблица 3. Результаты обработки спектров эмиссии на длине волны возбуждения конъюнкционного максимума (280 нм), тестовый набор

Table 3. Results of processing of emission spectra at an excitation wavelength of 280 nm (test set)

Исходные данные об образце	Предсказанное ГП с доверительной вероятностью		
	Армения	Регионы России, кроме Дагестана	Россия (Дагестан)
Армения «Арагат» трехлетний	$P = 0,969$	$P = 0,014$	$P = 0,017$
Армения «Арвест» пятилетний	$P = 0,960$	$P = 0,017$	$P = 0,023$
Армения «Митридат» трехлетний	$P = 0,975$	$P = 0,01$	$P = 0,015$
Армения «Митридат» пятилетний	$P = 0,975$	$P = 0,016$	$P = 0,009$
Россия «Киноровский» трехлетний	$P = 0,011$	$P = 0,978$	$P = 0,012$
Россия «Командирский»	$P = 0,008$	$P = 0,978$	$P = 0,014$
Россия «Олд барель» пятилетний	$P = 0,01$	$P = 0,975$	$P = 0,015$
Россия «Трофейный» четырехлетний	$P = 0,02$	$P = 0,955$	$P = 0,025$
Россия (Дагестан) «Казбег» трехлетний	$P = 0,02$	$P = 0,05$	$P = 0,930$
Россия (Дагестан) «Лезгинка» пятилетний	$P = 0,014$	$P = 0,02$	$P = 0,966$

Таблица 4. Результаты обработки спектров синхронного сканирования со сдвигом длины волны 50 нм
Table 4. Results of processing of synchronous scanning spectra at a wavelength difference of 50 nm (test set)

Исходные данные об образце	Предсказанное ГП с доверительной вероятностью		
	Армения	Регионы России, кроме Дагестана	Россия (Дагестан)
Армения «Арапат» трехлетний	$P = 0,982$	$P = 0,006$	$P = 0,012$
Армения «Арвест» пятилетний	$P = 0,976$	$P = 0,01$	$P = 0,014$
Армения «Митридат» трехлетний	$P = 0,973$	$P = 0,01$	$P = 0,017$
Армения «Митридат» пятилетний	$P = 0,966$	$P = 0,014$	$P = 0,02$
Россия «Киноровский» трехлетний	$P = 0,009$	$P = 0,973$	$P = 0,018$
Россия «Командирский»	$P = 0,01$	$P = 0,966$	$P = 0,024$
Россия «Олд барель» пятилетний	$P = 0,006$	$P = 0,985$	$P = 0,009$
Россия «Трофейный» четырехлетний	$P = 0,006$	$P = 0,982$	$P = 0,012$
Россия (Дагестан) «Казбег» трехлетний	$P = 0,03$	$P = 0,036$	$P = 0,934$
Россия (Дагестан) «Лезгинка» пятилетний	$P = 0,014$	$P = 0,015$	$P = 0,971$

(трехлетний «Дубовый бочонок») заметно отличается от спектров остальных. Такое отличие может быть обусловлено фальсификацией, в случае реального скрининга оно послужило бы основанием для более тщательной проверки данного образца с использованием хроматографических или масс-спектральных методов.

Заключение

Апробирован подход к характеристике коньяков и бренди на примере их классификации по географическому происхождению, основанный на выделении характерных фрагментов спектров флуоресценции и обработке спектральных данных с помощью машинного обучения. Регистрировали спектры эмиссии при возбуждении на длинах волн 250 и 280 нм и спектры синхронного сканирования при разности длин волн возбуждения и эмиссии 50 нм.

Правильность распознавания образцов тестового набора, не использовавшихся для обучения модели, составила 100 % для всех моделей.

Предлагаемый в данной статье метод может быть использован для сертификации и других контрольных процедур только коньяков и виноградных бренди с защищенным географическим наименованием (указанием места происхождения), а также для экспресс-анализа (скрининга) образцов алкогольной продукции при проверке их подлинности, в процедурах контроля технологических процессов при производстве коньяка и других видов алкогольной продукции. Подход, изложенный в настоящей статье, может быть также использован для классификации других жидких пищевых продуктов (соков, меда и т.п.).

ЛИТЕРАТУРА

1. Теневой рынок алкогольной продукции: исследование Центра развития потребительского рынка Московской школы управления Сколково и Центра социального проектирования «Платформа». https://sk.skolkov.ru/storage/file_storage/b28ed58b-cc05-4c31-8e97-48c0dac647e0/SKOLKOVO_CMDC_Shadow_alcohol_market_Full_Report_Rus.pdf (дата обращения 13 февраля 2023 г.).
2. Coetzee P., van Jaarsveld F., Vanhaecke F. Intraregional classification of wine via ICP-MS elemental fingerprinting / Food Chem. 2014. Vol. 164. P. 485 – 492. DOI: 10.1016/j.foodchem.2014.05.027
3. Geana I., Iordache A., Ionete R., et al. Geographical origin identification of Romanian wines by ICP-MS elemental analysis / Food Chem. 2013. Vol. 138. N 2 – 3. P. 1125 – 1134. DOI: 10.1016/j.foodchem.2012.11.104
4. Savchuk S. A., Palacio C., Gil A., et al. Determination of the chemical composition of alcoholic beverages by gas chromatography-mass spectrometry / J. Food Process. Preserv. 2020. Vol. 44. N 9. e14676. DOI: 10.1111/jfpp.14676
5. Бренди двойной выдержки Torres 10 Double Barrel. <https://www.torresbrandy.com/ru/brandies/torres-10-double-barrel> (дата обращения 13 февраля 2023 г.).
6. Левин А. Д., Садагов А. Ю., Нагаев А. И., Карахотин С. Н. Качественный анализ вин на основе совместного использования их оптических спектров различной физической природы / Аналитика и контроль. 2018. Т. 22. № 2. С. 147 – 156.
7. Ranaweera R. K. R., Gilmore A. M., Capone D. L., et al. Authentication of the geographical origin of Australian Cabernet Sauvignon wines using spectrofluorometric and multi-element analyses with multivariate statistical modeling / Food Chem. 2021. Vol. 335. 127592. DOI: 10.1016/j.foodchem.2020.127592
8. Basalekou M., Kyraliou M., Killithraka S. Authentication of wine and other alcohol-based beverages — Future global scenario / Future Foods. Global. Trends. Opportunities and Sustainability Challenges. Ch. 38. P. 669 – 695. DOI: 10.1016/B978-0-323-91001-9.00028-1
9. Dufour É., Letort A., Laguet A., et al. Investigation of variety, typicality and vintage of French and German wines using front-face fluorescence spectroscopy / Anal. Chim. Acta. 2006. Vol. 563. N 1 – 2. P. 292 – 299. DOI: 10.1016/j.aca.2005.11.005
10. Silveira A., Barbeira P. A fast and low-cost approach for the discrimination of commercial aged cachazas using synchronous fluorescence spectroscopy and multivariate classification / J. Sci. Food Agric. 2022. Vol. 102. N 11. P. 4918 – 4926. DOI: 10.1002/jsfa.11857

11. **Tóthová J., Sádecká J., Májek P.** Total Luminescence Spectroscopy for Differentiating Between Brandies and Wine Distillates / *Czech J. Food Sci.* 2009. Vol. 27. N 6. P. 425 – 432. DOI: 10.17221/125/2008-CJFS
12. **Tóthová J., Sádecká J., Májek P.** Classification of brandies and wine distillates using front face fluorescence spectroscopy / *Food Chem.* 2009. Vol. 117. N 3. P. 491 – 498. DOI: 10.1016/j.foodchem.2009.04.053
13. **Mustapha I. B., Saeed F.** Bioactive Molecule Prediction Using Extreme Gradient Boosting / *Molecules.* 2016. Vol. 21. N 8. 983. DOI: 10.3390/molecules21080983
14. **Natekin A., Knoll A.** Gradient boosting machines, a tutorial / *Front. Neurobotics.* 2013. Vol. 7. DOI: 10.3389/fnbot.2013.00021
15. **Скурихин И. М.** Химия коньяков и бренди. — М.: ДелиПринт, 2005. — 296 с.
16. ЗАО «Ставропольский винно-коньячный завод». <http://www.stavvinprom.com/index.php/predpriyatiya/item/174> (дата обращения 13 февраля 2023 г.).
17. «Дербентский» винно-коньячный комбинат. <https://derkonyak.ru/terroir> (дата обращения 13 февраля 2023 г.).
18. «Кизлярский» коньячный завод. <https://kizlyar-cognac.ru/%d0%bf%d1%80%d0%be%d0%b8%d0%b7%d0%b2%d0%be%d0%b4%d1%81%d1%82%d0%b2%d0%be/?age-verified=81f16562e7> (дата обращения 13 февраля 2023 г.).
19. Закон Республики Армения «Об алкогольных напитках на основе виноградного сырья», глава 5, ст. 24 – 25. <http://www.parliament.am/legislation.php?sel=show&ID=3348&lang=rus#5> (дата обращения 13 февраля 2023 г.).
20. Российский коньяк четырехлетний «Старая крепость» с защищенным географическим указанием. <https://reestrinform.ru/federalnyi-reestr-alkogolnoi-produktcii/233-koniak-s-zashchishchennym-geograficheskim-ukazaniem/-obj200036395.html> (дата обращения 13 февраля 2023 г.).
21. Российский коньяк четырехлетний «Дербент ****» с защищенным географическим указанием. <https://reestrinform.ru/federalnyi-reestr-alkogolnoi-produktcii/233-koniak-s-zashchishchennym-geograficheskim-ukazaniem/-obj200055716.html> (дата обращения 13 февраля 2023 г.).
22. Российский коньяк пятилетний «Дербент *****» с защищенным географическим указанием. <https://reestrinform.ru/federalnyi-reestr-alkogolnoi-produktcii/233-koniak-s-zashchishchennym-geograficheskim-ukazaniem/-obj200036393.html> (дата обращения 13 февраля 2023 г.).
23. **Осеledтseva И. В.** Научное обоснование и развитие методологии контроля качества коньячных дистиллятов и коньяков: Дисс. ... докт. техн. наук. — Краснодар, 2017. — 437 с.
6. **Levin A. D., Sadagov A. Yu., Nagaev A. I., Karakhotin S. N.** Qualitative analysis of wines based on the joint use of their optical spectra of different physical nature / *Analit. Kontrol'.* 2018. Vol. 22. N 2. P. 147 – 156 [in Russian].
7. **Ranaweera R. K. R., Gilmore A. M., Capone D. L., et al.** Authentication of the geographical origin of Australian Cabernet Sauvignon wines using spectrofluorometric and multi-element analyses with multivariate statistical modeling / *Food Chem.* 2021. Vol. 335. 127592. DOI: 10.1016/j.foodchem.2020.127592
8. **Basalekou M., Kyraliou M., Killithraka S.** Authentication of wine and other alcohol-based beverages — Future global scenario / *Future Foods. Global. Trends, Opportunities and Sustainability Challenges.* Ch. 38. P. 669 – 695. DOI: 10.1016/B978-0-323-91001-9.00028-1
9. **Dufour É., Letort A., Laguet A., et al.** Investigation of variety, typicality and vintage of French and German wines using front-face fluorescence spectroscopy / *Anal. Chim. Acta.* 2006. Vol. 563. N 1 – 2. P. 292 – 299. DOI: 10.1016/j.aca.2005.11.005
10. **Silveira A., Barbeira P.** A fast and low-cost approach for the discrimination of commercial aged cachaças using synchronous fluorescence spectroscopy and multivariate classification / *J. Sci. Food Agric.* 2022. Vol. 102. N 11. P. 4918 – 4926. DOI: 10.1002/jsfa.11857
11. **Tóthová J., Sádecká J., Májek P.** Total Luminescence Spectroscopy for Differentiating Between Brandies and Wine Distillates / *Czech J. Food Sci.* 2009. Vol. 27. N 6. P. 425 – 432. DOI: 10.17221/125/2008-CJFS
12. **Tóthová J., Sádecká J., Májek P.** Classification of brandies and wine distillates using front face fluorescence spectroscopy / *Food Chem.* 2009. Vol. 117. N 3. P. 491 – 498. DOI: 10.1016/j.foodchem.2009.04.053
13. **Mustapha I. B., Saeed F.** Bioactive Molecule Prediction Using Extreme Gradient Boosting / *Molecules.* 2016. Vol. 21. N 8. 983. DOI: 10.3390/molecules21080983
14. **Natekin A., Knoll A.** Gradient boosting machines, a tutorial / *Front. Neurobotics.* 2013. Vol. 7. DOI: 10.3389/fnbot.2013.00021
15. **Skourikhin I. M.** Chemistry of cognac and brandy. — Moscow, DeliPrint, 2005. — 296 p. [in Russian].
16. CJSC “Stavropol Wine and Cognac Factory”. <http://www.stavvinprom.com/index.php/predpriyatiya/item/174> (accessed February 13, 2023) [in Russian].
17. Derbent wine and cognac plant. <https://derkonyak.ru/terroir> (accessed February 13, 2023) [in Russian].
18. Kizlyar brandy plant. <https://kizlyar-cognac.ru/%d0%bf%d1%80%d0%be%d0%b8%d0%b7%d0%b2%d0%be%d0%b4%d1%81%d1%82%d0%b2%d0%be/?age-verified=81f16562e7> (accessed February 13, 2023) [in Russian].
19. Law of the Republic of Armenia “On Alcoholic Beverages Based on Grape Raw Materials”. Ch. 5. P. 24 – 25. <http://www.parliament.am/legislation.php?sel=show&ID=3348&lang=rus#5> (accessed February 13, 2023) [in Russian].
20. Four-year old Russian cognac “Staraya Krepost” with protected geographical indication. <https://reestrinform.ru/federalnyi-reestr-alkogolnoi-produktcii/233-koniak-s-zashchishchennym-geograficheskim-ukazaniem/-obj200036395.html> (accessed February 13, 2023) [in Russian].
21. Four-year old Russian cognac “Derbent ****” with protected geographical indication. <https://reestrinform.ru/federalnyi-reestr-alkogolnoi-produktcii/233-koniak-s-zashchishchennym-geograficheskim-ukazaniem/-obj200036393.html> (accessed February 13, 2023) [in Russian].
22. Five-year old Russian cognac “Derbent *****” with protected geographical indication. <https://reestrinform.ru/federalnyi-reestr-alkogolnoi-produktcii/233-koniak-s-zashchishchennym-geograficheskim-ukazaniem/-obj200036417.html> (accessed February 13, 2023) [in Russian].
23. **Oseledtseva I. V.** Scientific rationale and development of quality control methodology of cognac distillates and cognacs. Doctoral thesis. — Krasnodar, 2017. — 437 p. [in Russian].

REFERENCES