

ПРЕДИСЛОВИЕ

С появлением современных технологий сбора, хранения и обработки данных особую актуальность приобрели вопросы их анализа для выявления скрытых знаний (закономерностей) в самых различных сферах человеческой деятельности, в том числе и в пищевой промышленности. В монографии на примере виноматериалов рассмотрены возможности современных методов анализа данных в установлении их качества, распознавании сортовой, региональной принадлежности, подлинности вин, анализе структуры, формы и характера взаимосвязей по органолептическим показателям и компонентному составу — концентрациям микро- и макроэлементов, а также аминокислот, летучих веществ, металлов. Использован широкий спектр современных методов анализа данных — сравнения средних, регрессионного анализа, кросстабуляции, классификации, многомерного шкалирования, анализа соответствий, нейронные сети, общие линейные модели, позиционный анализ, логит-регрессия; планы для смесей, канонический анализ, ковариационный анализ, методы машинного обучения Data Mining пакета STATISTICA.

Выявленные закономерности межкомпонентного взаимодействия вин, характер влияния элементного состава вин на их органолептические и вкусовые свойства, модели определения сортовой и региональной принадлежности и другие результаты математически обоснованы корректностью реализации использованных методов, представлены научному сообществу в виде научных публикаций в отечественных и зарубежных рейтинговых журналах.

Монография написана по итогам исследований, проведенных в рамках проектов РФФИ № 18-03-00059 «Разработка многоэлементного "образа", оценка качества и региональной принадлежности некоторых белых и красных вин на разных стадиях их производства» и № 13-03-96502 «Разработка научно-методического подхода идентификации вин по их региональной принадлежности на основе мультиэлементного анализа».

Для преподавателей вузов, студентов, аспирантов, виноделов, научных работников, специалистов, интересующихся применением методов анализа данных в различных областях научной и практической деятельности.

ВВЕДЕНИЕ

Химический состав и органолептические показатели винодельческой продукции обусловлены качеством исходного сырья, технологическими операциями, вспомогательными материалами, используемыми при производстве вин [1–3].

Анализ площадей виноградников, валового сбора винограда, а также производства вина за 2017–2018 гг. показал, что при стабилизации мирового рынка в целом происходит снижение выпуска вина в Европе при его стабилизации в Южной Америке и возрастании в Азии. При этом главным трендом мирового рынка является глобализация производства. Если в 2001 г. экспорт-импорт винодельческой продукции составлял 22 %, то к 2017 г. он вырос в 2 раза, составив 44 % [4].

Производство вина в 2018 г. в сравнении с 2017 г. возросло на 13 % и составило 279 млн гкл, то есть фактически вернулось к уровню 2000 года. В отдельные годы, например в 2004 и 2013 гг., его производство достигало максимальных значений, которые чередовались со спадами, зафиксированными в 2002, 2012 и 2017 гг. При этом на пять стран приходится 63 % мирового производства вина. Доля Италии составляет 18 %, Франции — 17 %, Испании — 15 %, США — 9 %, Аргентины — 5 %. В 2018 г. произвели (млн гкл): Италия — 48, Франция — 46, Испания — 41, США — 24, Аргентина — 15, Чили — 13, Австралия — 12, Китай — 11, Германия — 10, Южная Африка — 9, Португалия — 5, Бразилия — 4, Новая Зеландия — 3. В России произведено тихого вина 3 млн гкл и игристого 1,25 млн гкл [4]. Мировое потребление вина с 2008 года остается практически постоянным и колеблется в пределах 240...245 млн гкл. В 2017 г. потребление вина составило 244 млн гкл. По данным OIV в 2017 г. наибольшее потребление вина зафиксировано в США — 32,6 млн гкл, Франции — 27,0 млн гкл и Италии — 22,6 млн гкл. Что касается душевого потребления вина, то здесь лидером являются Португалия — 58,8 л, Франция — 50,7 л и Италия — 44,0 л. В целом можно отметить, что пять стран потребляют половину

всей продукции: США — 14 %, Франция — 11 %, Италия — 9 %, Германия — 8 %, Китай — 7 %.

Общая площадь виноградных насаждений в РФ в 2017 г. составила 88 тыс. га, из них промышленно возделываемых виноградников 72,9 тыс. га (82,8 %). На Юге России возделываются 98,4 % виноградников [5]. Производство технических сортов винограда в Краснодарском крае составляет около 135 тыс. т/год, а мощности перерабатывающих предприятий позволяют перерабатывать 500 тыс. т, что способствует экспорту значительного количества виноматериалов из регионов, не имеющих признанных традиций виноделия. В этой ситуации широкое применение начали находить ускоренные технологии производства вин, применение для этих целей различных пищевых добавок. На качестве виноматериалов в РФ существенно начал сказываться недостаточный уровень развития собственной сырьевой базы и практически неконтролируемый состав применяемых вспомогательных материалов. Все эти аспекты вызывают существенные проблемы обеспечения качества и натуральности всего ассортимента производимой и ввозимой на территорию России винодельческой продукции. Современная тенденция развития виноделия во многих странах мира, включая Россию, основана на стремлении производить вина высшей категории качества — защищенных географических указаний и наименований мест происхождения. Федеральный закон от 27 декабря 2019 г. № 468-ФЗ «О виноградарстве и виноделии в Российской Федерации» (с изменениями и дополнениями) запрещает производство, реализацию, а также ввоз на территорию Российской Федерации фальсифицированной, недоброкачественной и контрафактной продукции виноградарства и виноделия. Виноград и винодельческая продукция в своем составе содержат несколько сотен соединений, из которых особый интерес представляют фенольные биологически активные вещества с бактерицидными, антиоксидантными и другими функциональными свойствами. Важными компонентами винограда, оказывающими существенное влияние на здоровье человека, являются фенольные и минеральные вещества, витамины, аминокислоты. Сок виноградной ягоды содержит разнообразные белковые вещества, пептиды и продукты их гидролиза (вплоть до аминокислот), а также амиды кислот, аммиак, нитраты и значительные количества глюкозы. Азотистые вещества виноградного сусла представлены пептидами, которые под влиянием естественной кислотности вина и особенно при повышен-

ных температурах гидролизуются под воздействием протеолитических ферментов до аминокислот, содержания и соотношения которых определяют качественные характеристики вин. Содержащиеся в вине белки и пептиды играют важную роль в формировании аромата и полноты вкуса, они также обеспечивают пенообразование для игристых вин. В целом летучие и нелетучие компоненты вина находятся в постоянной связи и взаимодействии и характеризуют качество вин [6].

Летучие компоненты вин, образующиеся в процессе алкогольного брожения виноградного сусла, — спирты, альдегиды, летучие кислоты, простые и сложные эфиры и др. в основном формируют органолептическую составляющую аромата напитков [2, 3, 6–9]. Вкусовые характеристики вин определяются содержащимися в них неорганическими соединениями, аминокислотами, пептидами, сахарами, целым рядом фенольных соединений и т. д. Авторами [10] выделен перечень некоторых летучих веществ, формирующих аромат натуральных виноградных вин, и определены их пороговые концентрации: ацетальдегид — не более 100, метанол — 63...152, уксусная кислота — не более 500, этилацетат — 50...80 мг/дм³, суммарное содержание высших спиртов — 150...550 мг/дм³. Отмечено, что при содержании в вине свыше 160 мг/дм³ этилацетата проявляется негативное восприятие напитка, подтверждающее его низкое качество. Авторы [8] привели характерные для российских виноградных вин аналогичные данные, мг/дм³: альдегиды — 20...200, уксусная кислота — 300...1500, сумма высших спиртов — 80...150, сложные эфиры (в том числе этилацетат) — 150...800, винная кислота — 1500...5000, яблочная — 1000...5000, молочная — 500...5000, янтарная — 100...1500, лимонная — 800 и некоторые другие соединения. Сложность установления взаимосвязи компонентного состава вин обуславливается также трудностями создания универсальных физико-химических приборов, с помощью которых можно установить интегральную характеристику вин, сравнимую с оценкой дегустатора.

Таким образом, органолептические свойства вин формируются за счет взаимодействия ароматических и вкусовых характеристик, причем ароматические создают по большей части летучие соединения [11], нелетучие — вкусовые свойства [12, 13]. С другой стороны, вкусовые компоненты оказывают влияние на содержание летучих веществ в паровой фазе, их распределение и соотношение, что свидетельствует о неразрывности процесса

дегустации [10, 14–16]. Следует отметить, что вкусовые характеристики вин определяются в большей степени содержанием титруемых кислот, свободных аминокислот, минеральной составляющей, а также фенольным комплексом [17, 18]. Выбор этих компонентов вин обусловлен тем, что именно они преимущественно характеризуют стадии технологического процесса и уровень самого производства [6, 19]. Например, накопление метанола в вино материале происходит за счет контакта сусла с мезгой или некачественного осветления сусла, высших спиртов и фурфурола — длительного контакта вина с дрожжевыми осадками, уксусного альдегида — излишнего доступа кислорода, этилацетата, уксусной кислоты — нарушения температурного режима и т. д. Наряду с уксусной кислотой титруемые кислоты формируют кислый оттенок вкуса, минеральные компоненты и аминокислоты способны проявлять уникальные вкусовые характеристики (паслена, померанца, экзотических фруктов, смородины, ореховые и т. д.) [8, 11, 20]. Минеральные вещества, обнаруженные в винах, включают в себя компоненты, которые могут служить индикаторами пищевой безопасности (Cd, Fe, As, Hg, Co, Pb, Cr) [21, 22], стабильности протекания процессов на этапах технологического процесса производства вин (K, Na, Al, Fe, Cu, Ca, Mg, Mn) [23, 24], а также элементами — маркерами географического происхождения напитка [25, 26]. Они также могут влиять на сортовые особенности вин, включая аромат, свежесть, цвет и вкус [25, 27, 28].

Большое внимание исследователей уделяется изучению содержания минеральных компонентов и азотсодержащих соединений в винах [29]. Аминокислоты, прежде всего незаменимые, определяют пищевую ценность протеина. В соке винограда содержатся аминокислоты нейтральные, серосодержащие, двухосновные, гетероциклические, ароматические и основные. Содержащиеся в вине протеин и пептиды определяют важные характеристики качества вина — от аромата и полноты вкуса до пенообразования для игристых вин [30]. Вино содержит относительно немного протеина (десятки мг), довольно высокие концентрации пептидов — дополнительного источника свободных аминокислот, так как они подвержены гидролизу под действием естественной кислотности вина и ферментов, что приводит к увеличению массовой концентрации свободных аминокислот в процессе выдержки вина. Содержание свободных аминокислот в винах тесно связано с их качеством, технологией и как итог — на-

туральностью. Следует отметить, что концентрация пролина составляет 60...70 % от общей суммы аминокислот в вине, что объясняется особенностями метаболизма дрожжей [2]. Минеральная составляющая виноградного вина формируется за счет катионов калия, натрия, магния и кальция, немаловажное значение для качества вина и его дегустационной оценки имеет также содержание аммония, продукта деструкции аминокислот, пептидов и других азотистых веществ [31]. Содержание катионов в вине подлежит контролю, и выражается количеством и щелочностью золы, а сам параметр рассматривают как интегральный показатель его натуральности [32]. На содержание так называемых макрокатионов и их соотношения существенное влияние оказывают природно-климатические условия места произрастания винограда. Так, многолетние исследования авторов [32, 33] показали, что в Краснодарском крае в соке ягод большинства сортов винограда массовая концентрация калия колеблется в пределах от 900 до 1600...2000 мг/дм³, а натрия — от 130 до 300 мг/дм³. Регулирование содержаний калия, натрия, магния, кальция — основных элементов, ответственных за розливостойкость получаемого вина, достигают в результате брожения виноградного сусла, когда в осадок вместе с дрожжами поступают соли винной кислоты с последующей обработкой холодом в естественных условиях или с помощью холодильных установок [33]. Совершенствование современных аналитических методов определения компонентов вина расширили возможности специалистов для дифференциации их органолептических свойств и установления взаимосвязи химического состава с уникальными характеристиками, специфичными для различных сортов винограда и вин [34].

Использование при производстве вина большого разнообразия различных сортов винограда и методов их переработки привело к увеличению ассортимента винодельческой продукции. Несмотря на сложный химический состав натурального вина и разнообразие его типов, в последнее время оно все чаще становится объектом фальсификации. Часть фальсификатов составляет нелегально импортируемый, выведенный из-под акциза или произведенный под чужой торговой маркой алкоголь. Но большую часть контрафактной винодельческой продукции составляет суррогатная продукция, произведенная с нарушением правил и нормативов производства. Положение усугубляется постоянным совершенствованием методов химической фальсификации алкогольной продукции, адаптированных к действующим мето-

дикам. Причиной роста числа фальсификатов в России также является недостаточная оперативность разработки и внедрения новых нормативных документов, определяющих производство и качество спиртосодержащей продукции. Низкокачественное вино или фальсификат при определенных условиях можно установить инструментальным способом, без участия дегустатора. Но следует отметить, что органолептическая и инструментальная оценка вин существенно дополняют друг друга. Контроль минеральных веществ позволяет установить факт фальсификации вина водой, проявляющаяся в ухудшении вкуса, изменении баланса анионно-катионного состава (ионов хлора, катионов натрия, калия). В странах Европейского союза испытания вин осуществляются по более, чем 40 критериям, установленным Регламентом ЕС и рекомендациями Международной организации винограда и вина [6].

При проведении вкусовой оценки в России повышенное внимание уделяется экспертному методу — дегустационной оценке, что находит отражение в соответствующих национальных стандартах [35]. Предпринятые ранее попытки установления взаимосвязи между содержанием свободных аминокислот и подлинностью вин не дают однозначного ответа [36]. Имеются публикации, в которых рассматриваются зависимости физико-химических и органолептических свойств вина по сорту винограда, его физико-химическим и органолептическим свойствам методами статистического анализа [37].

Современные методы статистического анализа позволяют более информативно и эффективно обрабатывать экспертные оценки. Сенсорно-описательный анализ качества вин в сочетании с многомерным статистическим анализом используется для исследования компонентного состава различных вин [38–42], установления взаимосвязи времени сбора урожая и состава вина [43–45] и географического происхождения вин по фенольным и органолептическим профилям [46, 47].

В настоящей книге анализируются результаты исследований образцов натуральных сухих красных и белых виноградных вин кубанского происхождения, полученные по традиционным технологиям из европейских (Каберне, Мерло, Алиготе, Рислинг, Саперави и т. д.) и гибридных сортов винограда (Бианка, Виорика, Молдова, Первенец Магарача и т. д.). Промышленными производителями вин были винодельня «Мысхако», ОАО «Агропромышленная фирма «Фанагория», АО «Кубаньвино», «Юж-

ная винная компания» (ЮВК), винодельня «Вилла Виктория», ООО «Шато Тамань», ООО «Шато ля гранд Восток», произведенные в 2010–2013 гг. (содержание спирта 9...13 % объемных, кислотность — 4...7 г/дм³), купажные, изготовленные в экспериментальных условиях вина, а также фальсификаты. При оценке их качества не рассматривались вина из европейских сортов винограда, полученные по традиционным технологиям, но без применения процедуры сульфитирования, так как вкусовые компоненты данной категории вин больше подвергаются окислительным процессам из-за отсутствия защитного действия сернистого ангидрида.

Дегустационную (сенсорную) оценку качества вин и установление компонентного состава вин проводили специалисты федерального государственного бюджетного научного учреждения «Северо-Кавказский федеральный научный центр садоводства, виноградарства, виноделия» (г. Краснодар). Центр является ведущим научно-исследовательским учреждением России в области садоводства, виноградарства и виноделия, в его составе действует аккредитованный центр по сертификации продукции, в том числе и вина. При проведении работ по дегустации вин центр руководствуется действующими международными и национальными стандартами. Все образцы вин перед проведением сенсорного анализа обозначались случайным кодом. В процедуре сенсорной оценки участвовали эксперты в области вина, которые работают в винодельческой промышленности, обладают профессиональным опытом в области сенсорного анализа. Установление компонентного состава вин проводили электрофоретическими и хроматографическими методами [48–52].

Содержание микро- и макроэлементов в винах определяли специалисты учебно-научно-производственного коллектива «Аналит» Кубанского госуниверситета методами спектрометрии с индуктивно-связанной плазмой.

Статистические исследования осуществляли в среде пакета STATISTICA 10, 13 (Tibco, USA) англо- и русскоязычных версий [53, 54]. Приведены оригинальные таблицы и графики сгенерированные программой.

В главе 1 построены математические модели зависимости дегустационной оценки вин от содержания в них летучих и нелетучих веществ, входящих в состав вин и обуславливающих их органолептические свойства, с последующим прогнозированием их качества в заданных границах соответствия. Рассмотрены подхо-

ды оценки качества вин по содержаниям в них летучих веществ и результатам их дегустационных испытаний. Используя дискриминантный анализ, предложен и проведен сравнительный анализ оценки вин в номинальной шкале качества — *высокое, среднее, низкое и фальсификат*. Выяснилось, что классификации вин по качеству с использованием метода классификационного анализа — дискриминантного анализа с учетом оценки содержаний в них летучих веществ, обуславливающих их органолептические свойства, не уступает их экспертной (дегустационной) оценке. По результатам этих исследований построена математическая модель классификации вин по указанным категориям, разработан программный модуль для автоматизации вычислений. Показана целесообразность применения дискриминантного анализа и метода общие линейные модели (ОЛМ) для первоначальной оценки качества вин в предложенной номинальной шкале качества — *высокое, среднее, низкое и фальсификат* по содержанию в них летучих веществ, с последующим прогнозом в балльной шкале дегустационной оценки. Используя двумерный частотный анализ — таблицы сопряженности (кросстабуляции), изучили взаимосвязь двух подходов к классификации вин в номинальной шкале (*высокое, среднее, низкое, фальсификат*) по содержаниям в них летучих веществ и результатам их дегустационных испытаний, проведен анализ структуры взаимосвязи. Методом анализа соответствий оценено сходство между одноименными значениями шкал. Построена модель логит-регрессии для выявления фальсификатов вин по анализу состава летучих компонентов. Проведена сравнительная оценка роли аминокислот и летучих соединений в формировании органолептических свойств вин посредством ковариационного анализа.

В главе 2 ковариационным анализом установлено, что рассмотренная в работе совокупность аминокислот — треонин, пролин, аргинин и летучие соединения — метанол, уксусная кислота, фурфурол достаточно полно определяет сенсорные свойства вин, что следует из высокой адекватности построенной ковариационным анализом регрессионной модели. При этом справедливым и в соответствии с критерием одномерной значимости математически вполне обоснованным будет утверждение, что роль аминокислот выше роли летучих соединений в восприятии вкусовых и ароматических характеристик вин экспертами, в роли консолидированного показателя которых выступают результаты дегустации. При этом более 82 % сенсорных характеристик анализи-

руемой группы вин приходится на рассматриваемые аминокислоты — пролин, треонин, аргинин и летучие соединения — метанол, уксусная кислота, фурфурол, менее 18 % — на все остальные компоненты, включая титруемые кислоты, свободные аминокислоты, минеральные составляющие, фенолы и др.

Множественным регрессионным анализом показано, что вклад аминокислот в изменчивость вкусовых и ароматических характеристик вин, консолидированный показатель которых представлен средней сенсорной оценкой экспертов, более чем в 4 раза выше вклада летучих соединений. Каноническим анализом выявлены как сильные и умеренные стохастические взаимосвязи концентраций групп аминокислот и летучих соединений, так и парные корреляционные связи. Показано, что увеличение концентрации аминокислот сопровождается уменьшением концентраций летучих соединений и наоборот, т. е. усилению вкусовых характеристик вин сопутствует уменьшение их ароматических свойств.

Факторным анализом выделены три фактора — *Фактор 1*, *Фактор 2*, *Фактор 3*, из которых первый характеризует ароматический спектр сенсорных свойств вина, второй и третий — вкусовой. В формировании вкусового и ароматического свойств вин принимают участие в большей или меньшей степени аминокислоты и летучие соединения, вступая между собою в сложные стохастические взаимосвязи. При этом аминокислоты и летучие соединения образуют 4 группы однородности — первая состоит из высших спиртов, ментола, фурфурола; вторая — из аминокислот; третья — из ацетальдегида и уксусной кислоты; четвертая — только из этилацетата. Всесторонний анализ структуры взаимосвязей летучих и нелетучих соединений позволит создавать вина не только по результатам сенсорной оценки как интегральной характеристики органолептических свойств вин, но и варьируя концентрации аминокислот и летучих соединений, придавая винам определенные вкусовые и ароматические свойства.

По концентрациям металлов и летучих соединений для белых и красных вин проведен сравнительный анализ роли металлов и летучих соединений в формирование вкусовых и ароматических качеств вин, консолидированной характеристикой которых является среднее значение дегустационной (органолептической) оценки. Для обоих типов вин построены адекватные линейные и общие линейные модели, позволяющие по параметрам моделей оценить вклады металлов и летучих соединений в орга-

нолептическую оценку, также прогнозировать величину органолептической оценки. Для обоих типов вин показано, что вклад в формирование органолептической оценки летучих соединений более чем в 2 раза выше вклада металлов. Вклад летучих соединений в вариабельность органолептической оценки у белых вин более чем в 4 раза выше вклада металлов. У красных вин роль металлов и летучих соединений в вариабельность их органолептической оценки сопоставима.

В главе 3 на примере некоторых белых и красных вин показано, что, несмотря на сложную технологическую цепочку *почва — виноград — сок — вино* в вине сохраняется микроэлементный статистический «портрет» сорта винограда и местности, на которой он был выращен. Для вин, произведенных на территории основных винодельческих предприятий географических зон Краснодарского края, предложены адекватные математические модели для идентификации по концентрациям микроэлементов сорта винограда и региона его произрастания. Модели сопровождаются вычислительными примерами со значениями концентраций микроэлементов в образцах, не принадлежащих исходной выборке. Разработан программный продукт, который автоматизирует необходимые вычисления.

В главе 4 показано, что концентрации некоторых элементов (металлов) как в разных частях ягод винограда, так и в различных сортах существенно различаются. Установлены элемент-маркеры отличия различных фрагментов ягод винограда Каберне и Рислинг. Показана возможность дифференцирования сортов винограда по содержанию элементов в различных фрагментах ягоды. Исследовано влияние осветления и стабилизации виноматериалов бентонитовыми глинами на формирование их «элементного образа» и идентификацию сортов. Выявлено доминирование микроэлементов над макроэлементами в формировании кластерной структуры обработанных виноматериалов. Проведен анализ элементного состава цепочки почва-виноград-вино, взаимосвязей концентраций элементов в указанных средах, их кластерной структуры. Показано, что ягоды, вина и пробы почв обладают сортовой кластерной структурой относительно концентраций металлов.

В главе 5 рассмотрены различные методы оценки согласованности экспертных оценок, которые зависят от способов измерения объектов. Показана возможность использования метода *Надежность и позиционный анализ* для оценки степени

единодушия мнений экспертов в случае, когда результаты экспертных оценок представлены в балльной шкале. На примере дегустации вин показано, что данный метод многомерного анализа данных может быть использован для оценки согласованности экспертных оценок посредством вычисления статистики *альфа Кронбаха* как интегрального числового критерия надежности экспертизы. Предложен альтернативный метод к интегральной оценке результатов экспертных оценок в виде итоговой суммы баллов. Метод основан на представлении объектов экспертизы в виде точек многомерного пространства в системе координат с осями, соответствующими оценкам экспертов. При этом размерность пространства — число осей равно количеству экспертов. Критерием итоговой оценки объектов с последующей возможностью их ранжирования по степени предпочтения использованы расстояния до объекта с наилучшими оценками. Чем меньше расстояние, тем более предпочтителен объект.

В главе 6 при помощи метода *Планы для смесей* получена математически обоснованная рецептура нового купажного вина Звезда Кубани. Для достижения наибольшей дегустационной оценки доли виноматериалов Мерло, Каберне Совиньон, Пино Нуар должны составлять соответственно 45, 35, 20 %. Проведенная экспериментальная проверка купажируемой смеси такого состава показала высокие органолептические показатели. Проиллюстрирована возможность и целесообразность использования *дробных 2^n-p планов* для анализа вклада факторов, влияющих на качество вин. Метод позволяет строить планы для экспериментов, представляющих всевозможные комбинации бинарных значений факторов (да, нет). По результатам проведенных опытов — количественным значениям критерия качества вин и значениям факторов качества построена математическая модель в виде уравнения регрессии. Анализ построенной модели позволил оценить вклад каждого фактора в прогнозируемое значение критерия качества, предсказать значения критерия качества при различных предположениях об уровнях факторов.

В главе 7 показана принципиальная возможность по концентрациям небольшого количества микроэлементов — Fe, Mg, Na, Rb, Ti при помощи нейросетевых технологий идентифицировать наименование вин и далее с учетом установленного наименования и ансамбля упомянутых микроэлементов определить регион произрастания винограда, из которого было произведено вино. Решение задач классификации нейронными сетями оказалось

более эффективным, чем традиционными методами прикладной статистики — дискриминантным анализом и деревьями классификации. Прогностические свойства нейросетевых моделей оказались выше, а количество используемых в моделях микроэлементов более чем в 2 раза меньше, также значительно меньшее количество построенных моделей. Но, на наш взгляд, важным является другое — определенный набор микроэлементов в вине содержит информацию не только о сорте винограда, из которого оно произведено, но и о месте его произрастания. Назовем это явление микроэлементной памятью вина. Традиционные и эвристические методы классификационного анализа, реализованные в современных инструментариях анализа данных, позволяют по «микроэлементной» памяти вина с высокой достоверностью восстановить сорт винограда и место его выращивания.

В главе 8 проведен сравнительный анализ деревьев решений и процедур обучения методов добычи данных (Data Mining) в решении задач идентификации географического происхождения вин, прогнозирования дегустационной оценки и определения класса качества вин. В задаче определения региона происхождения вин наилучшие результаты на тестовой выборке показали автоматизированные нейронные сети, методы бустинг деревьев классификации и регрессии и опорных векторов. В задаче предсказания дегустационной оценки вин методы деревьев решений показали более высокие прогностические свойства, чем процедуры обучения, включая нейронные сети. В задаче идентификации класса качества вин, включая фальсификаты, лучшими оказались нейронные сети, методы опорных векторов, k -ближайших соседей, бустинг деревьев классификации и регрессии и случайного леса.