УДК 663.2 + 663.3
DOI 10.35547/IM.2022.20.77.014

ОРИГИНАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ

Проектирование и оптимизация состава вин и алкогольных напитков методом купажа

Тимофеев Р.Г.✉

Всероссийский национальный научно-исследовательский институт виноградарства и виноделия «Магарач» РАН, Россия, Республика Крым, 298600, г. Ялта, ул. Кирова, 31

✉Russ1970@mail.ru

Аннотация. Сформулированы основные типы подзадач, возникающие в процессе расчета и оптимизации состава и свойств купажа винодельческого продукта. Предложены математические модели, удобные для решения прикладных и теоретических задач по регулированию и оптимизации состава винопродукции методом купажа. Предложены универсальные подходы к решению задач по проектированию и моделированию состава и свойств купажных напитков, реализуемые численными методами на ЭВМ. Результаты работы могут быть использованы для создания прикладных программ по составлению рецептур напитков с заданным составом, а также корректировке и оптимизации состава винодельческой продукции в условиях непостоянства сырьевой базы виноделия.

Ключевые слова: виноделие; купажирование; оптимизация состава; численные методы; линейное программирование.

Для цитирования: Тимофеев Р.Г. Проектирование и оптимизация состава вин и алкогольных напитков методом купажа // «Магарач». Виноградарство и виноделие. 2022; 24(2):186-192. DOI 10.35547/IM.2022.20.77.014

ORIGINAL RESEARCH

Project developing and optimizing the composition of wines and alcoholic beverages by blending

Timofeev R.G.✉

All-Russian National Research Institute of Viticulture and Winemaking Magarach of the RAS, 31 Kirova Str., 298600 Yalta, Republic of Crimea, Russia

✉Russ1970@mail.ru

Abstract. The main types of subtasks arising in the process of calculating and optimizing the composition and properties of a wine product blend are formulated. Mathematical models, convenient for solving applied and theoretical problems of regulating and optimizing the composition of wine products using the blending method are proposed. Universal approaches to solving problems of project developing and modeling the composition and properties of blended beverages, implemented by numerical methods on computer system, are suggested. The results of the work can be used to create application programs for compiling beverage recipes with a given composition, as well as adjusting and optimizing the composition of wine products in conditions of instability in raw material base of winemaking.

Key words: winemaking; blending; composition optimization; numerical methods; linear programming.

For citation: Timofeev R.G. Project developing and optimizing the composition of wines and alcoholic beverages by blending. Magarach. Viticulture and Winemaking. 2022; 24(2):186-192 (*in Russian*). DOI 10.35547/IM.2022.20.77.014

Введение

Купаж в виноделии – смешивание различных материалов с целью обеспечения определенного физико-химического состава и потребительских свойств продукции. Полученную смесь также называют купажом. Актуальность создания купажа вызвана необходимостью обеспечить постоянство состава и качества конечной продукции в условиях, когда обеспечить должное сырье затруднительно [1-3]. Операции купажирования предшествует технологический расчет состава купажа, который на современном этапе развития вычислительной техники можно уже рассматривать как этап проектирования и оптимизации состава и свойств путем моделирования на ЭВМ в зависимости от поставленной перед технологом цели. Более рациональными будут решения, подкрепленные математическими расчетами, полученные научными методами поиска решения совместно с методами, позволяющими заблаговременно оценить последствия каждого решения, отбросить недопустимые варианты и рекомендовать наиболее удачные [2-6], что ставит необходимость создания специализированных прикладных компьютерных программ для обеспечения доступности данной технологии на производстве.

Любая разработка программного обеспечения начинается с формулировки целей и задач, решаемых данным софтом, а также разработки математической модели процесса или объекта (его цифровой копии) которая отражает основные свойства реального объекта или процесса, с точки зрения решаемой задачи. Поэтому представляется актуальным создание математических моделей пригодных для постановки и решения задач по моделированию и проектированию свойств продуктов и процессов в пищевой и перерабатывающей промышленности, в частности в винодельческой отрасли.

Целью настоящей работы является создание единых методологических подходов к проектированию и моделированию на ЭВМ состава и свойств продукции винодельческой отрасли для решения практических задач их регулирования методом купажа.

Объекты и методы исследований

Объектами исследований являлись математические модели напитка и купажа, методы постановки и решения задач по составлению и оптимизации состава купажа.

За основу построения математических моделей, пригодных для решения задач регулирования состава и свойств напитков методом купажа, были взяты классические работы по купажированию вин с использованием численных методов [7-9], работы проведенные Международным институтом вина в Монпелье по оптимизации состава купажей [10, 11], а также собственные работы автора [12, 13]. Построение математических моделей напитка и купажа, постановка и алгоритмы решения аналитических задач по определению состава винопродукции, а также проверка их адекватности моделей и их редукция осуществлялась с использованием программы MS Exel.

Результаты исследований и их обсуждение

Информационные и теоретические исследования операций показали, что все задачи при составлении купажа сводятся к одной или суперпозиции из следующих трех основных:

– прямая задача – нахождение объема (количества) и показателей состава купажа при условии смешивания заданных соотношений исходных компонентов с известными составом;

– обратная задача – это нахождение необходимых соотношений компонентов купажа с известным составом с целью получения продукта с требуемыми показателями состава;

– задача оптимизации, которая заключается в оптимизации состава купажа с какой-либо целью.

Расчет может осуществляться либо на определенный объем готовой продукции либо из условия израсходования одного и или нескольких лимитирующих компонентов [12].

Требования к математической модели напитка

Была поставлена задача – создать единую математическую модель купажа и теорию решения задач по составлению и расчету купажей любых напитков, которая бы обеспечивала решение прямой и обратной задачи при составлении купажа. Для прямой задачи необходимо следующее:

– расчет показателей состава купажа при смешивании определенных соотношений либо объемов купажных материалов с известными кондициями (прямая задача);

– расчет купажа по n-параметрам (кондициям) при известных $n+m$ кондициях исходных компонентов с возможностью расчета остальных m кондиций получившегося купажа (обратная задача).

Для обратной задачи модель должна:

– обеспечить расчет необходимого количества исходных компонентов при заданном количестве купажа, а также расчет количества купажа и остальных исходных компонентов при заданном количестве одного из компонентов;

– обеспечить решение из условия полного использования одного из купажных материалов при расчете на заданный объем купажа;

– обеспечить решение задачи при условии присутствия в готовом купаже определенного процентного содержания одного из купажных материалов;

– позволить выработать критерий, дающий однозначное решение вопроса о корректности постановки задачи по составлению купажа при данных исходных компонентах.

Общие требования:

– учет контракции (изменения объема) при составлении купажей спиртных напитков;

– возможность создания универсального алгоритма решения задачи по расчету купажа, реализуемый численными методами на ЭВМ.

Введем некоторые понятия необходимые для дальнейшего рассмотрения.

Регулируемый параметр – это концентрация какого-либо вещества либо функция физико-химического состава, значение которого необходимо придать готовому купажу. Обычно в винодельческой практике такими параметрами являются объемная доля этилового спирта, массовые концентрации сахаров, титруемых кислот и концентрации других веществ в зависимости от поставленной задачи.

Контролируемый параметр – это концентрация какого-либо вещества или функция физико-химического состава, которая получится в результате купажа при достижении заданных кондиций по основным регулируемым параметрам и его необходимо вычислить.

В основу построения математической модели купажного напитка было положено два постулата.

Первый постулат – выполнение показательных балансов технологических уравнений купажа. Под показательными балансами подразумеваются балансы спирта, сахара, титруемых кислот или других веществ, являющихся показателями состава, из допущения, что при смешивании эти вещества не переходят в другие соединения в результате химических реакций, т. е. количество (объем, масса) отдельных соединений, вносимых в смесь компонентами купажа, должно быть равным их содержанию в готовом купаже. Математически это можно записать в виде системы линейных алгебраических уравнений вида

$$a_i = \sum_{j=1}^{k} a_{ij}\overline{x_j}\ , \qquad (1)$$

где a_i – массовая (объемная) концентрация i-го вещества в готовом купаже, k – количество купажных компонентов a_{ij} – массовая (объемная) концентрация i-го вещества в j-м компоненте купажа $\overline{x}_j = x_j/x$ – объемная доля j-го компонента купажа, x_j – объем j-го компонента, x – объем купажа.

Второй постулат – учет нарушения аддитивности объема при купаже содержащих этанол компонентов осуществляется путем составления материального баланса по массе исходных компонентов и купажа из допущения, что они являются системой этанол-вода по таблицам плотности водно-спиртовых растворов [14]:

$$\rho = \sum_{j=1}^{k} \rho_j \overline{x_j}\ , \qquad (2)$$

где ρ и ρ_j – плотность водно-спиртового раствора с объемной долей этилового спирта, как в купаже и в j-м компоненте соответственно.

Приемлемость подобного подхода делается на основании работ Т.Л. Парфентьевой [15], которая изучила влияние на степень сжатия при спиртовании сусла и вина содержания в них общего экстракта и установила, что его влияние на величину контракции незначительно в пределах концентраций имеющих место в винодельческих продуктах.

Следовательно, любой купаж с известными n-кондициями можно представить в виде n уравнений показательного баланса типа (1) совместно с уравнением (2), и с математической точки зрения прямая задача расчета купажа заключается в вычислении полученного объема купажа – x, и в расчете коэффициентов a_i – кондиций полученного при купажировании виноматериала при известных значениях кондиций a_{ij} и объемов компонентов купажа – x_j. Обратная задача заключается в нахождении x_j – необходимых объемов компонентов с известными кондициями a_{ij} с целью достижения определенных кондиций a_i готового купажа, что связано с решением систем линейных алгебраических уравнений (СЛАУ).

Постановка и решение «прямой» задачи моделирования купажа

Пусть имеется k компонент с известными n кондициями a_{ij}. Запишем систему уравнений показательного и материального балансов

$$\left.\begin{aligned} a_1 &= \sum_{j=1}^{k} a_{1j}\overline{x_j} \\ &.. \ .. \ .. \ .. \\ a_n &= \sum_{j=1}^{k} a_{nj}\overline{x_j} \\ \rho &= \sum_{j=1}^{k} \rho_j \overline{x_j} \end{aligned}\right\} \qquad (3)$$

Ввиду того, что в общем случае сумма объемов компонент не равна объему купажа, а для вычисления величин $\overline{x_j}$ необходимо знать x – объем получившегося купажа с учетом контракции, прибегнем к следующему приему.

Пусть S и V – объемная доля этилового спирта и воды соответственно, которая получится в результате купажа. Уравнения материального баланса по спирту и объему воды запишем в виде:

$$Sx = \sum_{j=1}^{k} S_j x_j\ , \qquad (4)$$

$$Vx = \sum_{j=1}^{k} V_j x_j\ . \qquad (5)$$

где S_j и V_j – объемная доля этилового спирта и воды в j-м компоненте.

Если поделить уравнение (4) на уравнение (5), то получим величину

$$\frac{S}{V} = \sum_{j=1}^{k} S_j x_j \Big/ \sum_{j=1}^{k} V_j x_j\ , \qquad (6)$$

которая не зависит от объема получившегося купажа, а только отражает отношение количества абсолютного алкоголя к объему воды в купаже. Следовательно, если известно аналитическое или табличное выражение функции $\rho(S/V)$, то, получив отношение S/V из формулы (6), нетрудно получить само значение ρ – плотности водно-спиртового раствора с объемной долей этилового спирта как у купажа и по формуле

$$x = \sum_{j=1}^{k} \rho_j x_j \Big/ \rho\ . \qquad (7)$$

получить объем купажной смеси. Далее, вычислив значения $\overline{x_j}$ по формуле $\overline{x_j} = x_j/x$ и подставив их в уравнения показательных балансов системы (3), получим кондиции готового купажа $a_1....a_n$, что и требуется для решения «прямой» задачи.

Постановка и решение обратной задачи моделирования купажа

Пусть имеется k компонент с известными $n+m$ кондициями a_{ij}. Запишем систему уравнений показательного и материального балансов для регулируемых параметров

$$\left.\begin{aligned} a_1 &= \sum_{j=1}^{k} a_{1j}\overline{x_j} \\ &.. \ .. \ .. \ .. \\ a_n &= \sum_{j=1}^{k} a_{nj}\overline{x_j} \\ \rho &= \sum_{j=1}^{k} \rho_j \overline{x_j} \end{aligned}\right\} \qquad (8)$$

и для контролируемых параметров

$$\left.\begin{aligned} a_{n+1} &= \sum_{j=1}^{k} a_{n+1,j}\overline{x_j} \\ &.. \ .. \ .. \ .. \\ a_{n+m} &= \sum_{j=1}^{k} a_{n+m}\overline{x_j} \end{aligned}\right\} \qquad (9)$$

Теория методов решения СЛАУ уравнений типа (8), т. е. нахождения $\overline{x_j}$, хорошо описана соответствующими главами линейной алгебры и теории матриц [16], разработаны стандартные алгоритмы решения СЛАУ, реализованные численными методами на ЭВМ [17, 18]. Сформулируем основные положения, которые необходимы для корректной математической постановки «обратной» задачи для различных случаев и разработки алгоритмов ее решения.

Все методы решения СЛАУ, которые теоретически дают точные значения неизвестных $\overline{x_1}......\overline{x_n}$, например метод Гаусса, Крамера и др. имеют некоторые особенности. Во-первых, предназначены для решения систем уравнений, где количество уравнений в общем случае равно количеству неизвестных, что обязывает нас взять $n+1$ исходный компонент для составления купажа с n регулируемыми параметрами. Во-вторых, если составить квадратную матрицу A размерности $n+1$ вида

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1,n} & a_{1,n+1} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2,n} & a_{2,n+1} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ a_{n,1} & a_{n,2} & \cdots & a_{n,n} & a_{n,n+1} \\ \rho_1 & \rho_2 & \cdots & \rho_n & \rho_{n+1} \end{pmatrix}, \qquad (10)$$

где элементы a_{ij}, ρ_j матрицы соответствуют обозначениям системы (8), то эти методы не позволяют найти решение системы (8), при условии равенства нулю определителя матрицы det A, составленного из параметров элементов купажа даже при существовании такового.

Это возможно в следующих случаях:

– когда мы имеем два или более равных друг другу столбца или строки в матрице – случай реализуется, когда мы имеем среди исходных компонентов два или более идентичных по параметрам, либо когда все элементы купажа имеют две или более одинаковые по величине кондиции;

– когда мы имеем матрицу, в которой все элементы хотя бы одного столбца или строки равны нулю – случай, когда один из предусмотренных параметров исходных компонентов и купажа равен нулю (например, купаж сухих виноматериалов);

– когда мы имеем матрицу, элементы какой-либо строки (столбца) которой равны линейной комбинации элементов других строк (столбцов), – случай реализуется очень редко, но он будет возникать каждый раз при купаже компонент с одинаковой объемной долей этилового спирта.

Случай 1, как правило, тривиален, так как при смешивании компонентов с одинаковыми кондициями кондиции купажа не зависят от соотношения исходных компонентов.

Случай 2 реализуется более часто, но это легко обойти, введя в матрицу элемент с неравным нулю соответствующим параметром, который, однако, не войдет в данный купаж при условии равенства нулю соответствующего параметра купажа.

В случае 3 тоже легко получить неравный нулю определитель матрицы, введя как элемент купажа продукт с отличной от других компонент объемной долей этилового спирта.

Даже при существовании решения системы уравнений (8) нас интересует только тот случай, когда все $\overline{x}_j \geq 0$, т. к. отрицательные значения объемной доли элемента купажа не имеют практического смысла. Следовательно, условие $\overline{x}_j \geq 0$ (для $1 \leq j \leq k$) может быть использовано совместно с условием det$A \neq 0$ как критерий корректности постановки задачи составления купажа с заданными кондициями при данных исходных компонентах.

Непосредственные значения необходимых количеств купажных материалов при заданном количестве купажа можно определить из формулы

$$x_j = \overline{x}_j \cdot x \,. \qquad (11)$$

Если у нас задано количество одного из купажных материалов и необходимо определить количество купажа и остальных элементов купажа, то предварительно вычисляют объем купажа $x = x_j/\overline{x}_j$, а затем по формуле (11) находят количество остальных исходных компонентов.

Если необходимо вычислить значения каких-либо контролируемых параметров, которые получились в результате купажа, то их значения находят из уравнений (9) путем подстановки ранее вычисленных в результате решения обратной задачи значений $\overline{x}_j$.

Для решения обратной задачи с условием присутствия в конечном купаже определенного количества одного из купажных материалов (для определенности пусть это будет z-й компонент ($1 \leq z \leq k$) при заданном объеме купажа), к системе (8) необходимо добавить еще одно уравнение вида

$$1 = \frac{x}{x_z}\overline{x}_z \,, \qquad (12)$$

где x – заданный объем купажа, x_z – объем z-го компонента купажа, который необходимо использовать полностью.

В случае постановки и решения обратной задачи с условием присутствия в конечном купаже определенного процентного содержания z-го компонента, к системе (8) необходимо добавить уравнение вида

$$1 = \frac{100}{p}\overline{x}_z \,, \qquad (13)$$

где p – процентное содержание z-го компонента в купаже. После чего эти СЛАУ решаются вышеназванными методами, только при этом следует учесть, что такая постановка задачи обязывает нас взять $n+2$ исходных купажных компонента для достижения заданных n регулируемых параметров.

Методологические подходы к решению задачи оптимизации состава купажа

Минимизация себестоимости единицы продукции. Пусть имеется k потенциальных купажных материалов с кондициями a_{ij} (i – индекс показателя состава, j – индекс компонента купажа) и себестоимостью единицы объема j-го купажного материала – C_j. Требуется составить купаж с n-кондициями a_i и минимально возможной себестоимостью.

Очевидно, что себестоимость единицы готовой продукции C будет слагаться из себестоимостей единиц купажных компонент C_j умноженных на объемные доли этих компонент $\overline{x}_j$, входящих в купаж, что математически можно записать в виде

$$C = \sum_{j=1}^{k} C_j \overline{x}_j \,, \qquad (14)$$

Таким образом, задача оптимизации в этом случае сведена к Основной Задаче Линейного Программирования (ОЗЛП) [4], которую для нашего случая можно сформулировать так: найти неотрицательные значения переменных $\overline{x}_j$, которые удовлетворяют всем уравнениям системы (8) и одновременно обращают в минимум или максимум линейную функцию (14) этих переменных.

Оптимизация содержания каких-либо компонентов или веществ при одновременном достижении заданных кондиций. Рассмотрим сначала случай оптимизации содержания каких-либо компонентов. Такая задача может возникнуть при необходимости максимизировать содержание какого-либо компонента или группы компонентов купажа при одновременном достижении в купаже заданных концентраций технологически важных веществ, регламентированных в нормативно-технической документации на данную готовую продукцию.

Предположим, что некоторые из компонентов x_j значительно улучшают качество готового продукта, а следовательно, чем больше их присутствие в готовом купаже, тем лучше. Присвоим каждому компоненту x_j определенный вес K_j – показатель, характеризующий способность улучшать качество готового продукта. Чем численное значение K_j выше, тем больше способность j-го компонента улучшать качество купажа. Введем линейную функцию вида

$$L(x_1.....x_k) = \sum_{j=1}^{k} K_j \overline{x_j} \ . \qquad (15)$$

Очевидно, чем выше объемная доля компонент с большими весами K_j, тем больше значение функции L.

Таким образом, задача оптимизации в этом случае также сведена к ОЗЛП, которую в этом случае можно сформулировать следующим образом: найти неотрицательные значения переменных $x_1......x_k$, которые удовлетворяют всем уравнениям системы (8) и одновременно обращают в максимум линейную функцию L этих переменных. Функция L называется целевой функцией.

Если необходимо оптимизировать содержание какого-либо вещества при одновременном выполнении основных кондиций, то в качестве целевой функции можно использовать непосредственно уравнение показательного баланса вида

$$a = \sum_{j=1}^{k} a_j \overline{x_j} \ , \qquad (16)$$

где a – концентрация вещества в купаже, содержание которого необходимо оптимизировать, a_j – концентрация оптимизируемого вещества в j-м компоненте купажа.

Задачу оптимизации в этом случае можно сформулировать так: найти неотрицательные значения переменных $x_1......x_k$, которые удовлетворяют всем уравнениям системы (8) и одновременно обращают в максимум или минимум (в зависимости от поставленной задачи) линейную функцию (16) этих переменных.

Получение купажа с составом, максимально приближенным к эталону. Такая задача может возникнуть ввиду невозможности составить купаж с требуемыми концентрациями технологически важных веществ из данных купажных материалов. В этом случае иногда допустимо получение купажа с максимально возможным приближением к требуемому.

Для облегчения понимания возможных подходов к решению этой задачи численными методами на ЭВМ целесообразно использовать понятие n-мерного Евклидова пространства показателей состава, где любой напиток можно представить в виде радиус-вектора в Линейном Пространстве Технологически Важных Показателей (ЛПТВП) в виде

$$\mathbf{r}(a_i, x) = \sum_{i=1}^{n} \mathbf{r}_i a_i \beta_i x \ , \qquad (17)$$

где $\mathbf{r}$ – радиус-вектор в ЛПТВП, a_i – абсолютное значение i-го показателя состава, с точностью до определения массовая или объемная концентрация i-го технологически важного вещества (интенсивный параметр), β_i – нормировочный коэффициент, численно равный $1/\max\{a_i\}$, x – объем напитка (экстенсивный параметр), n – размерность линейного пространства, $\mathbf{r}_i$ – единичный орт в ЛПТВП. Введение нормировочного коэффициента в ряде случаев необходимо для нормальной работы алгоритмов оптимизации основанных на использовании понятия расстояния в ЛПТВП, чтобы нивелировать разницу в абсолютных численных значениях различных показателей состава и, следовательно, их вклад в расстояние между векторами.

Соответствующая координата в ЛПТВП линейно пропорциональна произведению параметра интенсивности (концентрации) a_i на экстенсивный параметр (объем) напитка – x, а будучи деленная на соответствующий нормировочный коэффициент имеет физический смысл абсолютного количества i-го технологически важного вещества в количестве напитка x. Однако такое же абсолютное количество i-го вещества, а, следовательно, и соответствующие координаты вектора $\mathbf{r}$ в ЛПТВП можно получить за счет использования меньшего количества напитка, но с большими концентрациями веществ $a_1......a_n$. Чтобы избежать этой неопределенности, было принято условно, что для любого напитка a_1=1. Тогда проекция $\mathbf{r}$ на направление $\mathbf{r}_1$ будет численно выражать объем напитка. Строго говоря, с целью учета контракции (изменение объема при смешивании компонентов купажа) при купаже, корректнее было бы использовать в качестве a_1 плотность напитка ρ. В этом случае соответствующая координата будет численно равна массе напитка. Однако с целью упрощения модели, а также учитывая, что зачастую не стоит задача получить абсолютно точное значение кондиций купажа, то принятое допущение a_1=1 в большинстве случаев вполне приемлемо. Тогда купаж k-компонентов можно записать как линейную комбинацию компонентов купажа $\mathbf{r}_j$ (a_{ij}, x_j) в виде:

$$\mathbf{r}(a_i, x) = \sum_{j=1}^{k} x_j \sum_{i=1}^{n} \mathbf{r}_i \cdot a_{ij} \cdot \beta_i \ , \qquad (18)$$

где a_i – i-й показатель состава купажа, x и x_j – объем купажа и j-го компонента купажа соответственно, a_{ij} – i-й показатель состава j-го компонента купажа.

В данном представлении купаж является суперпозицией векторов его элементов. Векторное представление напитка в линейном пространстве ЛПТВП позволяет ввести понятие расстояния в ЛПТВП, определенное как корень квадратный из суммы квадратов разностей соответствующих координат двух векторов и применить стандартные алгоритмы оптимизации в рамках основной задачи линейного программирования для решения практических задач по расчету и оптимизации состава винопродукции методом купажа [13]. Прямая задача решается путем подстановки известных значений x_j в формулу (18), обратная – стандартными методами решения систем линейных алгебраических уравнений [16-18], либо сводится к частной задаче оптимизации состава купажа из условия максимального достижения заданных кондиций методами последовательной оптимизации с ограничениями [19, 20].

Рассмотрим задачу оптимизации, которая наиболее универсальна как для решения задач оптимизации состава купажа, так и решения «обратной задачи» при составлении купажа. Пусть необходимо составить купаж $\mathbf{r}(a_i, x)$ с максимально приближенными к эталону $\mathbf{r}(a_i^0, x)$ концентрациями технологически важных веществ. Запишем разность двух векторов $\mathbf{r}$ и $\mathbf{r}_0$

$$\Delta\mathbf{r} = \mathbf{r} - \mathbf{r}_0 = \sum_{j=1}^{k} x_j \sum_{i=1}^{n} \mathbf{r}_i a_{ij} \beta_i - x \sum_{i=1}^{n} \mathbf{r}_i a_i^0 \beta_i \ , \quad (19)$$

Очевидно, если вектор $\Delta\mathbf{r}$, а следовательно, и абсолютное значение его координат будут уменьшаться, то это означает, что получен купаж более приближенный по технологически важным показателям состава к эталону. Чтобы не учитывать знаки отклонений по каждой координате вектора $\Delta\mathbf{r}$ от $\mathbf{r}_0$, возведем каждое отклонение в квадрат и просуммируем квадраты отклонений по всем координатам. Пусть f сумма квадратов координат вектора $\Delta\mathbf{r}$

$$f(x_j, a_{ij}, a_i^0, x) = \sum_{i=1}^{n} \beta_i^{\,2} \left(\sum_{j=1}^{k} a_{ij} x_j - a_i^o x\right)^2. \quad (20)$$

Тогда, задачу оптимизации состава купажа в этом случае можно свести к поиску таких неотрицательных значений x_j – объемов компонент, при которых функция f обращается в минимум, при заданных условиях a_{ij}, a_i^0, x.

В некоторых случаях могут быть лимитированы максимально возможные количества купажных материалов $x_j \leq b_j$. С учетом вышесказанного общую задачу поиска максимума функции f можно сформулировать так: при заданном комплексе условий a_{ij}, a_i^0, x и $x_j \leq b_j$ найти такие неотрицательные значения x_j, которые обращают функцию f в минимум. Этот минимум обозначим:

$$f^* = \min_{0 \leq x_j \leq b_j} \{f(x_j, a_{ij}, a_i^0, x)\} \ . \quad (21)$$

Для нахождения x_j, обращающих функцию f в минимум, можно использовать два подхода:

– аналитический, путем нахождения частных производных;

– с использованием итерационных алгоритмов реализованных численными методами.

С точки зрения поиска решения поставленной задачи на ЭВМ предпочтительнее второй подход [20].

В случае, если x_j не лимитированы, то условием экстремума функции, а значит и возможного минимума является равенство нулю производных f по всем x_j. Однако, в случае, если x_j лимитированы, а возможные минимумы функции f находятся вне области допустимых значений для x_j, данный подход не приведет к желаемому результату.

С целью устранения указанного недостатка, а также удобства нахождения минимума функции f численными методами на ЭВМ, целесообразно применить метод штрафной функции [19], который заключается в преобразовании задачи минимизации функции f с соответствующими ограничениями наложенными на x_j, в задачу поиска минимума без ограничений функции вида

$$Z(x_j, a_{ij}, a_i^0, x, b_j) = f(x_j, a_{ij}, a_i^0, x) + p(x_j, b_j) \ , \quad (22)$$

где функция $\rho(x_j, b_j)$ называется штрафной, необходимо, чтобы при нарушении ограничений она штрафовала функцию Z, т. е. увеличивала ее значение [19]. В нашем случае удобно выбрать штрафную функцию следующего вида

$$p(x_j, b_j) = \varepsilon \prod_{j=1}^{k} \frac{1}{(b_j - x_j)} \ , \quad (23)$$

где ε – неотрицательное число, достаточно малое по величине, чтобы уменьшить разницу между функцией f и Z. особенно в области значений аргументов x_j близких к соответствующим b_j.

Тогда для функции Z в нашем случае можно записать

$$Z(x_j, a_{ij}, a_i^0, x, b_j) = \sum_{i=1}^{n} \beta_i^{\,2} \left(\sum_{j=1}^{k} a_{ij} x_j - a_i^o x\right)^2 + \varepsilon \prod_{j=1}^{k} \frac{1}{(b_j - x_j)} \ . \quad (24)$$

Из общего вида функции Z очевидно, что при ε стремящемся к нулю ($\varepsilon \to 0$), значения x_j отвечающие минимуму функции Z задачи оптимизации без ограничений совпадают с значениями функции f соответствующей задачи оптимизации функции f с ограничениями ($b_j \geq x_j$), а сами значения f и Z при $\varepsilon \to 0$ совпадают, что можно записать в виде

$$f^*(x_j, a_{ij}, a_i^0, x) = \lim_{\varepsilon \to 0} [\min Z(x_j, a_{ij}, a_i^0, x, b_j)] \ . \quad (25)$$

Функция (24) легко минимизируема любым методом последовательной оптимизации без ограничений, например методом покоординатного спуска [19], однако, следует учесть то, что поиск оптимальных значений x_j следует начинать из области допустимых значений для x_j ($0 \geq x_j \geq b_j$) в силу специфики функции Z.

Выводы

В результате проведенной работы сформулированы основные принципы построения математических моделей пригодных для решения задач по моделированию и проектированию состава и свойств напитков методом купажа. Выделены и сформулированы основные типы задач, возникающие в процессе решения задач по моделированию и проектированию состава и свойств винодельческой продукции методом купажа, а также базовые алгоритмы и методы их решения численными методам на ЭВМ.

Полученные результаты могут быть основой для создания прикладных программ для расчета и оптимизации состава купажных напитков на ЭВМ.

Источник финансирования

Не указан.

Financing source

Not specified.

Конфликт интересов

Не заявлен.

Conflict of interests

Not declared.

Список литературы

1. Меденников В.И., Горбачев М.И., Муратова Л.Г., Сальников С.Г. Концепция развития информатизации АПК при переходе к цифровой экономике // Международный сельскохозяйственный журнал. 2017;5:49-53.
2. Khalafyan A.A., Temerdashev Z.A., Yakuba Yu.F., Guguchkina T.I. Computer analysis of the sensory qualities of red wines

as a method to optimize their blend formulation. Heliyon. 2019;5:e01602. DOI 10.1016/j.heliyon.2019.e01602.
3. Koak J.H., Kang B.S., Hahm Y.T., Park C.S., Baik M.Y. & Y.K.B. Blending of different domestic grape wines using mixture design and optimization technique. Food science and biotechnology. 2010;19(4):1011–1018.
4. Вентцель Е.С. Исследование операций: задачи, принципы, методология. 2-е изд. М.: Наука. Гл. ред. физ.-мат. лит-ры, 1988:1-208.
5. Khalafyan A.A., Yakuba Yu.F., Temerdashev Z.A., Kaunova A.A., Titarenko V.O. Statistical probability simulation of the organoleptic properties of grape wines. J. Anal. Chem. 2016;71:1138-1144.
6. Khalafyan A.A., Yakuba Yu.F., Temerdashev Z.A. Application of ranging analysis to the quality assessment of wines on a nominal scale. J. Anal. Chem. 2016;71:205-214.
7. Moore D.B., Griffin T.G. Computer blending technology. American Journal of Enology and Viticulture, 1978;29(1):50–53. http://www.ajevonline.org/content/29/1/50.
8. Datta S., Nakai S. Computer-aided optimization of wine blending. Journal of Food Science. 1992;57(1):178–182. DOI 10.1111/j.1365-2621.1992.tb05450.x.
9. Ferrier J.G., Block D.E. Neural-network-assisted optimization of wine blending based on sensory analysis. American Journal of Enology and Viticulture. 2001;52(4):386–395. http://www.ajevonline.org/content/52/4/386.
10. Vismara P., Coletta R., Trombettoni G. Constrained wineblending. In Proceedings CP, Constraint programming, Springer. LNCS 8124. 2013:864–879.
11. Vismara P., Coletta R., Trombettoni G. Constrained global optimization for wine blending. Constraints. 2016;21:597–615. DOI 10.1007/s10601-015-9235-5.
12. Тимофеев Р.Г. Некоторые приложения теории матриц к решению задач создания напитков с заданными кондициями методом купажа // Виноградарство и виноделие. 1996;1:82-86.
13. Тимофеев Р.Г., Кречетов И.В. Методы математического моделирования на ЭВМ для получения оптимальных купажей // Виноград и вино России. 1998;6:29-31.
14. Таблицы для определения содержания этилового спирта в водно-спиртовых растворах (Спиртометрические таблицы). М.: Государственный комитет стандартов Совета министров СССР. 1972:1-364.
15. Парфентьева Т.Л. К вопросу о контракции при спиртовании сусел и вин // Тр. Краснодарского ин-та пищ. пром-сти. Вопросы технологии вина. 1961;22:386-388.
16. Боревич З.И. Определители и матрицы. М.: Наука. Гл. ред. физ.-мат. лит. 1988:1-184.
17. Дьяконов В.П. Справочник по алгоритмам и программам на языке Бейсик для персональных ЭВМ: Справочник. М.: Наука: Гл. ред. физ.-мат. лит-ры, 1989:1- 240.
18. Мудров А.Е. Численные методы для ПЭВМ на языках Бейсик, Фортран и Паскаль. Томск: МП «РАСКО». 1991:1-272.
19. Банди Б. Методы оптимизации. Вводный курс: Пер. с англ. М.: Радио и связь. 1988:1-128.
20. Гилл Ф., Мюрей У., Райт М. Практическая оптимизация: Пер. с англ. М.: Мир. 1985:1-509.

References

1. Medennikov V.I., Gorbachev M.I., Muratova L.G., Salnikov S.G. The concept of development of informatization of the AIC at the transition to the digital economy. International agricultural journal. 2017; 5:49-53 (*in Russian*).
2. Khalafyan A.A., Temerdashev Z.A., Yakuba Yu.F., Guguchkina T.I. Computer analysis of the sensory qualities of red wines as a method to optimize their blend formulation. Heliyon. 2019;5:e01602. DOI 10.1016/j.heliyon.2019.e01602.
3. Koak J.H., Kang B.S., Hahm Y.T., Park C.S., Baik M.Y. & Y.K.B. Blending of different domestic grape wines using mixture design and optimization technique. Food science and biotechnology. 2010;19(4):1011–1018.
4. Ventsel E.S. Operations research: tasks, principles, methodology. 2-e edition. M.: Nauka. Ch. ed. phys.-math. literature, 1988:1-208 (*in Russian*).
5. Khalafyan A.A., Yakuba Yu.F., Temerdashev Z.A., Kaunova A.A., Titarenko V.O. Statistical probability simulation of the organoleptic properties of grape wines. J. Anal. Chem. 2016;71:1138-1144.
6. Khalafyan A.A., Yakuba Yu.F., Temerdashev Z.A. Application of ranging analysis to the quality assessment of wines on a nominal scale. J. Anal. Chem. 2016;71:205-214.
7. Moore D.B., Griffin T.G. Computer blending technology. American Journal of Enology and Viticulture, 1978;29(1):50–53. http://www.ajevonline.org/content/29/1/50.
8. Datta S., Nakai S. Computer-aided optimization of wine blending. Journal of Food Science. 1992;57(1):178–182. DOI 10.1111/j.1365-2621.1992.tb05450.x.
9. Ferrier J.G., Block D.E. Neural-network-assisted optimization of wine blending based on sensory analysis. American Journal of Enology and Viticulture. 2001;52(4):386–395. http://www.ajevonline.org/content/52/4/386.
10. Vismara P., Coletta R., Trombettoni G. Constrained wineblending. In Proceedings CP, Constraint programming, Springer. LNCS 8124. 2013:864–879.
11. Vismara P., Coletta R., Trombettoni G. Constrained global optimization for wine blending. Constraints. 2016;21:597–615. DOI 10.1007/s10601-015-9235-5.
12. Timofeev R.G Some applications of the theory of matrices to the composing of beverage blends with pre-fixed conditions. Viticulture and Winemaking. 1996; 1:82-86 (*in Russian*).
13. Timofeev R.G., Krechetov I.V. Methods of mathematical modeling on a computer to obtain optimal blends. Grapes and wine of Russia. 1998;6:29-31(*in Russian*).
14. Tables for determining the content of ethyl alcohol in water-alcohol solutions (Alcoholometric tables). M.: The State Committee of Standards of the Council of Ministers of the USSR. 1972:1-364 (*in Russian*).
15. Parfentyeva T.L. On the issue of contraction during alcoholization of musts and wines. Works of Krasnodar Institute of Food Industry. Questions of wine technology. 1961;22:386-388 (*in Russian*).
16. Borevich Z.I. Determinants and matrices. M.: Science. Ch. ed. of phys.-math. lit. 1988:1-184 (*in Russian*).
17. Dyakonov V.P. Handbook of algorithms and programs in BASIC for Personal Computers: A Handbook. M.: Nauka: Ch. ed. of phys.-math. lit. 1989:1-240 (*in Russian*).
18. Mudrov A.E. Numerical methods for PC in BASIC, Fortran and Pascal. Tomsk: MP RASKO. 1991:1-272 (*in Russian*).
19. Bunday B.D. Basic optimisation methods. Edward Arnold Publishers. M.: Radio i svyaz' publ. 1988:1-128 (*in Russian*).
20. Gill F., Myurei U., Rait M. Practical optimization: translated from English. M.: Mir. 1985:1-509 (*in Russian*).

Информация об авторе

Руслан Генрихович Тимофеев, канд. техн. наук, доцент, заведующий лабораторией тихих вин; е-мейл: Russ1970@mail.ru; https://orcid.org/0000-0002-6105-944X.

Information about author

Ruslan G. Timofeev, Cand. Techn. Sci., Assistant Professor, Head of the Laboratory of Still Wines; e-mail: Russ1970@mail.ru; https://orcid.org/0000-0002-6105-944X.

Статья поступила в редакцию 04.05.2022, одобрена после рецензии 13.05.2022, принята к публикации 20.05.2022