

Современные подходы к мониторингу и оптимизации состава вин

Тимофеев Р.Г.✉

Всероссийский национальный научно-исследовательский институт виноградарства и виноделия «Магарач»
Национального исследовательского центра «Курчатовский институт», г. Ялта, Россия

✉Russ1970@mail.ru

Аннотация. В работе рассмотрены современные подходы к моделированию и мониторингу состава винодельческой продукции на основе математических методов и неразрушающих физических измерений. Показано, что параметры, такие как плотность, показатель преломления и оптическая плотность обладают аддитивной природой и позволяют построить модели, обеспечивающие восстановление компонентного состава продукта и прогноз целевых характеристик с использованием систем линейных уравнений. Обоснована применимость рефрактоденсиметрического и спектрофотометрического подходов в качестве основы для систем мониторинга и управления качеством на различных этапах технологического цикла. Предложена концепция создания единой информационно-аналитической платформы, объединяющей задачи проектирования состава методом купажа и онлайн-контроля продукции на основе дешёвых сенсорных датчиков и централизованной обработки данных. Представлены примеры математических формализаций, позволяющих учитывать материальные и показательные балансы, аддитивность свойств и буферные свойства компонентов при моделировании и проектировании состава купажа. Полученные результаты подтверждают потенциальную эффективность интеграции математических моделей с методами цифрового мониторинга для повышения производственной гибкости и технологической устойчивости винодельческих процессов.

Ключевые слова: виноделие; неразрушающий контроль; хеометрия; математическое моделирование; купажиrowание вин; оптимизация состава; управление составом и качеством.

Для цитирования: Тимофеев Р.Г. Современные подходы к мониторингу и оптимизации состава вин // «Магарач». Виноградарство и виноделие. 2025;27(3):253-260. EDN RRRDQL.

O R I G I N A L R E S E A R C H

Modern approaches to monitoring and optimization of wine composition

Timofeev R.G.✉

All-Russian National Research Institute of Viticulture and Winemaking "Magarach" of the National Research Centre
"Kurchatov Institute", Yalta, Russia

✉ Russ1970@mail.ru

Abstract. This study presents modern approaches to the modeling and monitoring of wine composition based on mathematical techniques and non-destructive physical measurements. It is shown that such parameters as density, refractive index and optical density possess additive properties, enabling the development of models for reconstructing the component composition of products, and predicting target characteristics using the systems of linear equations. The applicability of refractodensimetric and spectrophotometric approaches is substantiated as a foundation for quality control and monitoring systems throughout various stages of technological cycle. A conceptual framework for a unified information-analytical platform that integrates blend formulation and real-time monitoring of the products based on low-cost sensor devices and centralized data processing is proposed. Mathematical formalizations are presented to account for mass and analytical balances, additive property behavior, and buffer capacity of the components in modeling and designing blend compositions. The findings support the potential effectiveness of integrating mathematical models with digital monitoring tools in order to improve production flexibility and enhance technological resilience of winemaking processes.

Key words: winemaking; non-destructive analysis; chemometrics; mathematical modeling; wine blending; composition optimization; composition and quality management.

For citation: Timofeev R.G. Modern approaches to monitoring and optimization of wine composition. Magarach. Viticulture and Winemaking. 2025;27(3):253-260. EDN RRRDQL (in Russian).

Введение

Основной задачей винодельческих предприятий, как и отрасли в целом, является обеспечение объемов выпуска высококачественной продукции, соответствующей нормативной документации, с соблюдением принципов рационального использования доступных ресурсов. Одним из инструментов управления составом и свойствами винопродукции, а также ее распределения по направлениям использования является купаж [1-3]. Этот прием предоставляет определенные возможности для коррекции состава и качества винопродукции, особенно важно в условиях неоднородности и неопределенности ис-

ходного сырья, обусловленной природными и экономическими ограничениями [4, 5], и может применяться на любой стадии производственного процесса. На практике любому производственному купажу предшествуют расчётные операции, которые на современном этапе развития информационных технологий можно классифицировать как задачи проектирования и моделирования состава и свойств винопродукции методом купажа [5]. Эти задачи включают также оптимизацию использования имеющихся производственных резервов с учётом требований к готовому продукту и планом по выпуску продукции [4]. Другим аспектом эффективного управления любой технологической системой является ее мониторинг, в т.ч. мониторинг состава продукции в процес-

се ее производства с целью получения информации для выработки управленческих решений, а также выполнения требований системы ЕГАИС к обеспечению прозрачности учета спиртосодержащей продукции в процессе ее производства и оборота [6]. Современные достижения в области математического моделирования и информационных технологий совместно с бурным развитием датчиков и устройств, в т.ч. оптоэлектронных ячеек открывают новые горизонты для автоматизации и повышения точности этих процессов в виноделии [7]. Методологические подходы, связанные с моделированием химического состава и свойств вин и напитков, важны для оптимизации их химического состава и потребительских свойств [2, 4, 5], а также для выяснения связи химических и органолептических показателей винопродукции с физическими свойствами, поддающимися измерению неразрушающими методами исследования в условиях производства [6, 8, 9]. Если исходить из постулата, что состав винопродукции (физико-химический, сортовой) однозначно определяет ее физические и потребительские свойства, то возникает вопрос о возможности прогнозирования свойств напитков, исходя из их химического и сортового состава и возможности использования физических неразрушающих методов исследования для мониторинга состава. С другой стороны, регулируя физико-химический состав методом купажа, можно корректировать физико-химические (цветовые характеристики, pH, буферную емкость и др.) свойства и органолептические показатели продуктов виноделия для оптимизации технологического процесса и качества готовой продукции – вина. Важным аспектом проблем моделирования и проектирования, а также проблем мониторинга состава в режиме реального времени является формализация задачи с целью создания математических моделей удобных для работы в рамках стандартных и специальных методов обработки данных.

Целью данной работы является разработка и обобщение методологических подходов к моделированию состава винодельческой продукции в контексте мониторинга ее состава неразрушающими методами, а также решения задач по проектированию и оптимизации состава вина методом купажа.

Материалы и методы исследований

Объектами исследований являлись математические модели напитка и купажа, методы постановки и решения задач по составлению и оптимизации состава купажа, методы аналитической химии, основанные на измерении физических свойств (показателя преломления, массы вещества, плотности, оптической плотности на различных длинах волн). Методологическая основа исследования опирается на комплексный междисциплинарный подход, направленный на систематизацию, интерпретацию и сравнительный анализ современных научных, патентных и технических данных, посвященных применению физического неразрушающего контроля состава винодельческой продукции и методов оптимизации состава вин методом купажа.

Результаты и их обсуждение

Классическим подходом к моделированию связи физических свойств напитка с его составом является применение аддитивных моделей и методов линейной алгебры [10]. Применяя концепцию аддитивности физических свойств, можно описать физические параметры напитка, как линейную комбинацию вкладов компонентов. Предположим, что мы измеряем несколько физических свойств y_i для смеси с несколькими компонентами x_j . В соответствии с принципом аддитивности, для каждого y_i можно записать линейное уравнение:

$$y_i = a_{i1}x_1 + a_{i2}x_2 + \dots + a_{in}x_n, \quad (1)$$

где y_i – измеренное значение физического свойства (например, плотность, показатель преломления, оптическая плотность, скорость звука и др.); x_j – концентрация компонента j (например, сахаров, этанола, кислот); a_{ij} – коэффициенты, определяющие вклад каждого j -го компонента в i -е физическое свойство.

Если эти уравнения объединить в систему, то эта система уравнений может быть представлена в матричном виде:

$$Y = A \cdot X, \quad (2)$$

где Y – вектор-столбец измеренных значений физических свойств; A – матрица коэффициентов, зависящих от вклада каждого компонента; X – вектор-столбец концентраций компонентов состава, который мы хотим определить.

Таким образом, определение химического состава смеси сводится к решению системы линейных уравнений относительно X .

На основе известных образцов с заранее определенными концентрациями каждого компонента можно определить матрицу A , то есть вклад каждого компонента в физические свойства смеси, на чем собственно и основан один из подходов хеометрии, которая использует «обучающие» образцы с известным составом для нахождения матрицы A , а также тестовые образцы, для проверки корректности модели [11]. Данный процесс в хеометрии называется калибровкой, задачей которой является установление функциональной зависимости между набором данных измерения и составом исследуемого объекта и реализуется разными способами в зависимости от специфики объекта исследования или мониторинга и требуемой точности и надежности получения результата. Здесь будет уместно добавить следующую ремарку: коэффициенты a_{ij} уравнения (1), строго говоря, могут зависеть от концентраций отдельных компонентов, однако в диапазоне концентраций, используемом при калибровке, их можно считать постоянными или аппроксимировать полиномами степени не выше второй [11].

Существует множество подходов к решению этой проблемы, простейшим из которых является нахождение коэффициентов уравнений множественной регрессии для физических свойств на основе данных измерений физической величины и массива данных по химическому составу компонентов калибровочных образцов. Наиболее разработанные ме-

тоды калибровки включают [11, 12] одноканальную калибровку (UVR), калибровку методом Фирордта (Vierordt) [13], непрямую калибровку (Indirect), множественную линейную регрессию (MLR), калибровку пошаговой регрессией (SWR), регрессию на главные компоненты (PCR), а также методы проекции на латентные переменные первого (PLS1) и второго (PLS2) порядка. Таким образом, с точки зрения мониторинга состава неразрушающими методами, важным является установление жесткой (детерминированной) связи между измеряемыми физическими свойствами и химическим (компонентным) составом продукта, а также обоснованный выбор набора измеряемых физических параметров, однозначно определяющий химический (компонентный) состав объекта контроля.

Рассмотрим основные физико-химические показатели винопродукции, отражающие ее химический состав в контексте создания моделей связи состава и свойств напитков, подающихся измерению методами неразрушающего анализа.

Плотность. Плотность отражает количество (массу) вещества в единице объема при стандартной температуре измерения. Ввиду несжимаемости жидкостей физико-химический состав винопродукции жестко детерминирован ее плотностью, что используется для оценки концентрации сахаров сусла согласно ГОСТ 27198, экстракта виноматериалов и готовой продукции по ГОСТ 32000. Для растворимых сухих веществ сусла и вина, которые в чистом виде представляют собой твердую фазу, таких как сахара, органические кислоты, минеральные вещества, единица массы этих веществ в растворе занимает определенный постоянный объем, что дает возможность прогнозировать значение плотности винопродукции, исходя из ее химического состава [14]. Простейшее математическое описание данной зависимости можно выразить в виде регрессионного уравнения типа (1), где соответствующий коэффициент a_j есть суть объем занимаемый единицей массы данного вещества в системе, но для более полного описания будет уместно привести следующие выкладки.

Пусть a_j – объем, занимаемый единицей массы j -го растворенного вещества в растворе, ρ_j – плотность растворенного вещества в его гидратированном виде. Если добавить массу растворенного вещества m_j в растворитель, объем растворителя в единице объема продукта уменьшится на величину $a_j = m_j / \rho_j$, так как растворенное вещество вытесняет растворитель пропорционально своему объему, занимаемому в растворе. Это приводит к изменению плотности раствора. На основе анализа зависимости плотности раствора от его концентрации можно вычислить объем, занимаемый единицей массы вещества (удельный объем), а также величину ему обратную – плотность растворенного вещества в гидратированном виде.

Например, для сахарозы вычисленная плотность сахарозы в растворе составляет от 1590 кг/м³ в концентрированных растворах до 1629 кг/м³ в сильно

разбавленных, что соответствует объему 0,628 см³ и 0,612 см³, занимаемому 1 г сахарозы в растворе, соответственно. Как ранее нами было показано, для всех видов винопродукции значение вытесняемого объема единицей массы сахарозы, а также растворимых сухих веществ в пересчете на сахарозу составляет величину порядка 0,614±0,01 см³/г [15], что очень удобный факт, с точки зрения линейной модели зависимости плотности от концентрации. Оценка удельного объема для любого растворимого вещества, присущего для продуктов виноделия, например органических кислот, фенольных веществ и др., что позволит моделировать плотность винопродукции в зависимости от компонентного состава. В случае же, если компонентами состава являются такие вещества, как глицерин или этиловый спирт, то зависимость плотности от концентрации имеет более сложный характер и требует отдельного рассмотрения, но также поддается математическому описанию с целью моделирования [15]. В продуктах виноделия с объемной долей этилового спирта от 0,5 % об. до 35 % об. хорошим компромиссом при моделировании будет допущение, что этанол занимает 92 % от объема безводного спирта, содержащегося в системе.

Показатель преломления. Вторым физическим свойством, легко поддающимся измерению и традиционно используемом для оценки состава однородных жидких сред, на котором хотелось бы остановиться, является показатель преломления n . Показатель преломления показывает, во сколько раз скорость света на определенной длине волны (чаще всего используют D линию натрия $\lambda=589,3$ нм) в материале меньше скорости света в воздухе. Существует понятие абсолютного показателя преломления вещества, когда скорость света в материале сравнивают со скоростью света в вакууме, но в справочной литературе по умолчанию приводят значения относительного показателя преломления (относительно воздуха). Существует также связь между значением показателя преломления и относительной диэлектрической проницаемостью вещества $n = \sqrt{\epsilon}$, что отражает свойство электронной поляризуемости вещества в оптическом диапазоне длин волн, вызванное смещением электронов в атоме во внешнем электрическом поле, а также возникновением дипольного момента и, как следствие, изменением скорости электромагнитного взаимодействия [16].

Сам показатель преломления n имеет близкую к линейной зависимость от концентрации раствора, подобно плотности, но в рамках использования линейных моделей в количественном анализе лучше пользоваться величиной удельной рефракции вещества, которую вычисляют по формуле Лоренц-Лоренца [17]:

$$r = \frac{n^2 - 1}{n^2 + 2} \cdot \frac{1}{\rho}, \quad (3)$$

где r – удельная рефракция на единицу массы вещества; n – показатель преломления вещества; ρ – плотность вещества.

Удельная рефракция определяется путем прямых

измерений показателя преломления и плотности вещества по формуле (3). При невозможности определить показатель преломления и плотность чистого вещества измеряют показатель преломления и плотность растворителя, например воды, и раствора с известной массовой долей вещества, а удельную рефракцию растворенных веществ можно определить по формуле

$$r_x = r_{cm} \cdot \frac{100}{m_x} - r_b \cdot \frac{(100 - m_x)}{m_x}, \quad (4)$$

где r_x – искомая удельная рефракция растворенного вещества; r_{cm} – удельная рефракция раствора; m_x – массовая доля растворенного вещества; r_b – удельная рефракция растворителя, вычисленная по формуле (3).

Ввиду аддитивности удельной рефракции для удельной рефракции смеси веществ можно записать линейное уравнения вида:

$$r_{cm} \cdot 100 = r_1 m_1 + r_2 m_2 + \dots + r_n m_n, \quad (5)$$

где r_{cm} , r_1 , r_2 и r_n – удельная рефракция вина и компонентов его составляющих, а концентрация компонентов выражена в массовых долях, соответственно.

Выражения типа (5) в совокупности с использованием линейных уравнений, выражающих плотность смеси через ее состав, составляют основу рефрактоденсиметрического метода неразрушающего анализа многокомпонентных смесей с детерминированным составом по данным измерения плотности и показателя преломления, в т. ч. применительно к жидким продуктам винодельческой отрасли [15, 17-19]. В данных публикациях рассматриваются методологические подходы к рефрактоденсиметрическому анализу трехкомпонентных растворов, что позволяет на основании измерения показателя преломления и плотности оценить содержание этилового спирта и общего экстракта. Если проводить измерение показателя преломления на нескольких длинах волн и при этом знать удельную рефракцию компонентов смеси на различных длинах волн, то возможно получение более детальной информации о составе продукта.

Оптическая плотность. Продолжая разговор о показателе преломления, следует отметить его связь с оптической плотностью вещества, характеризующей поглощение электромагнитной энергии. Показатель преломления (n) и оптическая плотность (D) описывают разные аспекты взаимодействия света с веществом: n связан с поляризуемостью молекул, а значит, с их структурой и количеством. D отражает поглощение света веществом, зависящее от электронных переходов, отвечающих за цвет и химический состав. Связь между ними описывается через комплексный показатель преломления n_c : $n_c = n + i\varepsilon$, где ε – коэффициент экстинкции, связанный с D через выражение $D = \varepsilon c l$ отражающий закон Бугера – Ламберта – Бера, где, в свою очередь, c – концентрация компонента, l – длина оптического пути [20-22].

Закон Бугера-Ламберта-Бера для многокомпонентного раствора выражается как обобщение классической формы для случая, когда раствор содержит несколько светопоглощающих компонентов. Он

описывает связь между оптической плотностью смеси (D) и концентрациями всех присутствующих поглощающих веществ. Оптическая плотность в этом случае на заданной длине волны λ представляется в виде суммы вкладов всех компонентов:

$$D(\lambda) = \lg \left(\frac{I_0}{I} \right) = \sum_i \varepsilon_i(\lambda) c_i l, \quad (6)$$

где $D(\lambda)$ – общая оптическая плотность раствора при длине волны λ ; ε_i – коэффициент поглощения i -го компонента при длине волны λ , зависящий от природы вещества и длины волны света; c_i – концентрация i -го компонента; l – длина оптического пути; I_0 и I – интенсивности падающего и прошедшего излучения. Каждый компонент вносит свой вклад в общую оптическую плотность пропорционально его концентрации и коэффициенту удельного поглощения. Ввиду того, что спектр поглощения вещества является уникальным для конкретного вещества, то суммарный спектр поглощения можно рассматривать как суперпозицию спектров поглощения отдельных компонентов состава, что дает предпосылки для определения состава смеси с детерминированным составом путем измерения оптической плотности на нескольких длинах волн. Данный подход для анализа состава многокомпонентных смесей впервые применил Карл Фирордт (Karl von Vierordt) в 1873 г. [22], и который является первым разработанным подходом в хемометрии сложных смесей оптическими методами. В этом методе используют столько же длин волн (каналов измерения) сколько в системе присутствует веществ, концентрацию которых требуется определить. Основным принцип, заложенный в методе Фирордта, заключается в аддитивности оптической плотности, которая справедлива при отсутствии взаимодействий между компонентами, изменяющих их поглощательные свойства. Это позволяет разложить общий спектр смеси на отдельные спектры поглощения компонентов. Если для многокомпонентного раствора оптическую плотность измеряют на нескольких длинах волн ($\lambda_1, \lambda_2, \dots$), формула приобретает матричную форму: $D = EC l$, где $D = [D(\lambda_1), D(\lambda_1), \dots, D(\lambda_m)]^T$ – вектор-столбец оптических плотностей на различных длинах волн; $E = [\varepsilon_{ij}]$ – матрица коэффициентов поглощения, ε_{ij} – коэффициент поглощения i -го компонента при длине волны λ_j ; $C = [c_1, c_2, \dots, c_n]^T$ – вектор концентраций компонентов в растворе; l – длина оптического пути. Спектрометрия расширяет аналитические возможности за счёт измерения спектров поглощения или отражения в различных диапазонах. Перспективной для виноделия являются УФ-видимая спектрометрия (200–700 нм) – используется для анализа фенольных соединений, красящих веществ (антоцианов), сернистых соединений и других веществ, поглощающих в этом диапазоне. В ближней (200–280 нм) и дальней (280–400 нм) ультрафиолетовой областях спектра фиксируется интенсивное поглощение излучения, индуцируемое фенольными соединениями винограда. Высокая степень абсорбции в данном диапазоне существенно осложняет проведение спектрофотометриче-

ских измерений, поскольку требует минимизации оптического пути для предотвращения насыщения сигнала. Указанные особенности спектрального поведения фенольных компонентов создают дополнительные трудности при разработке и практической реализации промышленных оптических датчиков для анализа винограда и продуктов его переработки, что требует поиска новых подходов к реализации данных подходов.

Инфракрасная спектроскопия (NIR) и ее разновидности инфракрасная Фурье-спектроскопия (FTIR), особенно в ближнем ИК-диапазоне (700–2500 нм) позволяет анализировать такие параметры, как содержание этанола, сахаров и органических кислот, основываясь на характерных колебательных частотах молекул [23–25]. Следует отметить, что в настоящее время это наиболее бурно развивающаяся ветвь спектроскопии ввиду доступности средств и методов обработки спектральных данных, в том числе с применением нейросетевых технологий [26–28].

Для обеспечения гибкости мониторинга и снижения совокупных затрат (капитальных и эксплуатационных) в винодельческом производстве приоритет следует отдавать низкочастотным системам на основе распределенных датчиков, осуществляющих измерения физических параметров (например, плотности, температуры, показателя преломления для определения содержания этанола и экстрактивных веществ) и передающих данные по защищенным каналам связи на центральные серверы. Такой подход позволяет отказаться от дорогостоящих систем локальной индикации и обработки информации в каждой точке контроля, снижая стоимость единичного измерительного блока. Агрегация и централизованная обработка данных с применением стандартизированных калибровок и алгоритмов позволяет формировать интегральное представление о состоянии производственного процесса и оперативно поддерживать состав продукции на заданном уровне. Эта концепция успешно реализуется в ряде современных исследований. Например, Willa [29] описывает систему мониторинга содержания сахаров и этанола на основе беспроводных сенсоров с передачей данных на центральный узел, где происходит оценка параметров по данным измерений показателя преломления и последующая аналитическая обработка.

При проектировании состава винодельческой продукции методом купажа предполагается, что при смешивании купажных материалов химические превращения не происходят. В этом случае так же применима линейная модель, которая позволяет установить строгую детерминированную связь между химическим составом купажных материалов и свойствами итогового продукта. Классической моделью при составлении купажей является подход, основанный на использовании систем уравнений материального и показательного балансов, которые по структуре очень напоминают выражение (1).

Например, уравнение материального баланса можно записать в следующем виде:

$$\sum_{i=1}^n x_i = M, \quad (7)$$

где x_i – масса или объем i -го компонента в купаже; %, n – количество компонентов; M – общая масса или объем конечного продукта.

И показательного баланса, который учитывает концентрации или свойства компонентов:

$$\sum_{i=1}^n x_i p_i = P \cdot M, \quad (8)$$

где p_i – показатель (например, содержание сахара, спирта или кислотность) i -го компонента, P – целевое значение показателя в купаже.

В более общем виде задача моделирования состава напитка методом купажа с учетом нескольких свойств (например, содержания спирта, сахаров, титруемых кислот и т.д.) может быть описана матричным уравнением: $A \cdot X = B$, где A – матрица показателей компонентов ($m \times n$), при этом m – количество свойств, например, содержание сахара, спирта и др.), а n – количество компонентов входящих в купаж; X – вектор-столбец долей компонентов ($n \times 1$); B – вектор-столбец целевых значений свойств ($m \times 1$). Добавив систему уравнений в выражение для учета материального баланса (7), мы получим математическую модель купажа, удобную для решения задач моделирования и проектирования напитков путем смешивания купажных материалов.

Касаясь вопросов моделирования состава и свойств методом купажа в рамках линейных моделей, будет уместно коснуться двух вопросов: 1 – перечня показателей и свойств продукции виноделия, поддающегося моделированию и проектированию в рамках линейных моделей состав-свойство; 2 – учета изменения объема купажа вследствие смешивания компонентов с разной объемной долей этилового спирта.

Если допустить, что при смешивании купажных материалов не происходит химических превращений, то в рамках линейных моделей существует жесткая детерминация между химическим составом и свойствами купажных компонентов и купажа по следующим показателям: концентрации технологически важных веществ (этиловый спирт, сахара, органические кислоты, фенольные соединения, красящие вещества). Так как оптическая плотность пропорциональна концентрации светопоглощающих веществ, а, с другой стороны, цветовые характеристики продукции определяются нашим восприятием, то это дает возможность прогнозировать и моделировать состав в рамках линейных моделей оптических свойств и концентраций компонентов купажа и купажных материалов. Некоторые параметры, такие как активная кислотность (рН), не обладают линейной зависимостью от количества внесенного компонента из-за буферной емкости компонентов, составляющей купаж, что делает классическую линейную модель неприменимой. Однако произведение $pH \cdot A$, где A – буферная емкость продукта, уже обладает свойством аддитивности пропорционально количеству внесенного компонента при смешивании.

вании, что можно записать в виде выражения:

$$pH \cdot A \cdot M = \sum_{i=1}^n pH_i \cdot A_i \cdot x_i. \quad (9)$$

Для учета изменения объема купажа вследствие смешивания компонентов с разной объемной долей этилового спирта можно использовать тот же подход, который был описан выше при моделировании плотности спиртосодержащего продукта из допущения, что этиловый спирт занимает в напитке 92% объема безводного спирта, содержащегося в продукте. Этот факт можно учесть путем составления соответствующего уравнения материального баланса.

Можно выделить три категории задач, к суперпозиции которых сводятся все возможные основные технологические расчеты в виноделии.

Прямая задача – расчет объема и состава купажа при заданных соотношениях исходных компонентов. Это позволяет определить параметры конечного продукта, исходя из состава виноматериалов составляющих купаж.

Обратная задача – определение необходимого соотношения компонентов купажа для получения продукции с заданными свойствами. Это позволяет создать купаж с точным составом, соответствующим требуемым характеристикам.

Задача оптимизации, которая заключается в корректировке состава купажа с какой-либо целью. Например, такая задача, как получение купажа заданных кондиций с наименьшей возможной себестоимостью; получение купажа с оптимальным содержанием какого-либо компонента или группы веществ, полезных с технологической точки зрения, который возможно сформировать из имеющихся в наличии купажных материалов.

При этом обратную задачу по составлению купажа, с точки зрения постановки задачи и методов ее решения, можно рассматривать как задачу оптимизации для получения купажа, максимально приближенного по составу к требуемому составу продукта, который возможно получить из имеющихся в наличии купажных материалов. Наиболее полное исследование посвященное данному вопросу можно увидеть в работе Vismara P., Coletta R. и др. [4], которая посвящена классической методологии оптимизации купажирования базовых вин для создания вин целевого качества. Также представляют интерес пионерская работа Ferrier J.G. и др. [30], связанная с использованием искусственных нейронных сетей для оптимизации состава купажа.

Современные методы обработки информации, посвященные неразрушающему анализу химического состава винопродукции и подходы к математическому моделированию купажей, основаны на едином принципе решения обратных задач: либо восстановления состава по измеренным физико-химическим параметрам среды, либо подбора смеси компонентов, обеспечивающей заданные свойства продукта. С концептуальной точки зрения, задача купажирования может быть формализована анало-

гично процедуре реконструкции состава по данным неразрушающего анализа, если рассматривать компоненты купажа как чистые или репрезентативные вещества с известными характеристиками. Это методологическое сходство открывает возможности для интеграции обеих задач в единую информационно-аналитическую систему, предназначенную для мониторинга и управления качеством винопродукции на всех этапах технологического цикла.

Ключевым этапом моделирования состава напитков для оптимизации купажа математическими методами, а также для анализа продуктов с применением хемометрических подходов, является предварительная обработка данных. Этот процесс включает трансформацию исходных значений для повышения надежности моделирования и стабильности численных алгоритмов. Основные методы обработки включают: *центрирование* — сдвиг данных таким образом, чтобы их среднее значение равнялось нулю. Это устраняет систематические смещения и обеспечивает корректное представление переменных; *нормирование* — приведение значений переменных к сопоставимым масштабам, что позволяет уравновесить вклад каждой переменной в модель. Подобные приемы стабилизируют численные алгоритмы и снижают влияние различий в масштабах переменных. Это позволяет минимизировать влияние шума и фона, а также компенсировать сдвиги базовой линии, возникающие при измерении концентраций компонентов; улучшить точность и устойчивость моделей при оценке состава напитков в рамках калибровочных процедур, а также стабилизировать работу алгоритмов оптимизации состава купажа.

В настоящее время существует огромное количество концепций мониторинга состава винопродукции неразрушающими методами [31-33], однако, на наш взгляд, наиболее доступными и готовыми для ос-

Таблица. Перспективные параметры процесса и методы измерений в рамках мониторинга и управления технологическим процессом виноделия

Table. Promising process parameters and measurement methods in the framework of monitoring and control of the winemaking technological process

Параметр	Метод измерения	Физическое свойство	Роль в модели
Концентрация этанола, экстракта	денсиметрия, рефрактометрия	плотность, показатель преломления	оценка объемной доли этилового спирта, экстракта, сахаров, материальный учет продукции
Содержание сахаров	спектрофотометрия, БИК-спектрофотометрия	оптическая плотность	оценка содержания сахаров, прогнозирование вкуса
Концентрация органических кислот, катионов	потенциометрия	pH, буферная емкость	прогнозирование кислотности, вкуса и стабильности
Фенольные соединения	УФ-спектрофотометрия + спектрофотометрия в видимой области	оптическая плотность	моделирование вкусовых и цветовых характеристик
Красящие вещества	спектрофотометрия	оптическая плотность	прогнозирование цвета и восприятия напитка

воения в отрасли для решения задач мониторинга состава винодельческой продукции и ее учета являются следующие параметры процесса и методы измерений.

Как видно из представленной таблицы, прослеживается принцип взаимного дополнения физических измерений (плотность, показатель преломления, оптическая плотность, pH) и их функционального значения в моделировании состава напитка. Например, рефрактометрия и денсиметрия обеспечивают быстрый расчёт объемной доли этанола и экстракта, что важно для учёта материального баланса спирта на производстве. Для концентрации фенольных соединений, красящих веществ и сахаров основным источником информации выступает оптическая плотность, измеряемая с помощью спектрофотометрии.

Вместе с тем в ультрафиолетовой области спектра (200–400 нм) наблюдается высокая абсорбция, индуцируемая фенольными соединениями, что существенно ограничивает возможности спектрофотометрии: при онлайн-мониторинге состав винопродукции осложняется не только насыщением сигнала и необходимостью уменьшения оптического пути, но и наличием взвесей, характерных для полупродуктов виноделия. Эти факторы затрудняют создание промышленных оптических датчиков и накладывают ограничения на их применение. В то время как большинство спектрофотометрических подходов эффективно работает для истинных растворов (очищенных проб), в случае реальных технологических сред требуется поиск альтернативных методов. Наиболее перспективными направлениями здесь являются ИК-спектроскопия, отражательная спектроскопия и родственные подходы, позволяющие получать достоверную информацию без предварительного осветления образцов.

Таким образом, выявляется значимость мульти-спектральных подходов, формирующих основу для хемометрического анализа вин, а также возможность моделирования цветовых и вкусовых характеристик купажа исходя из его состава. Потенциометрические измерения позволяют контролировать pH и буферную ёмкость, что напрямую связано со стабильностью вина, его окислительной стойкостью и восприятием вкуса. Каждая группа параметров в таблице не рассматривается изолированно, а встроена в функциональную модель, где одно измерение (например, показатель преломления) может быть использовано для оценки нескольких веществ одновременно — сахаров, экстракта, спирта. Это подтверждает аддитивную природу свойств и целесообразность использования математических моделей линейного типа.

Выводы

Установлено методологическое и математическое сходство постановки задач проектирования состава вин методом купаживания и задач анализа состава винодельческой продукции по данным неразрушающих физических измерений в рамках методов хемометрии и линейной алгебры. Показано, что такие физико-химические характеристики, как плотность, показатель преломления и оптическая

плотность, обладают аддитивной природой и могут быть использованы для количественной оценки компонентного состава винопродукции. Обоснована целесообразность перехода к архитектурам распределённого мониторинга с использованием дешёвых сенсорных узлов и централизованной аналитики. Это позволяет реализовать экономически эффективные системы контроля с возможностью масштабирования и адаптации к условиям конкретного предприятия. Уточнены ограничения методов спектрофотометрии в УФ-области, обусловленные высокой абсорбцией фенольных соединений и наличием взвесей в полупродуктах виноделия; обоснована перспектива использования альтернативных спектроскопических подходов (ИК, отражательная спектроскопия и др.) для задач онлайн-контроля.

Источник финансирования

Работа выполнена в рамках государственного задания № FNZM-2024-0001.

Financing source

The work was conducted under public assignment No. FNZM-2024-0001.

Конфликт интересов

Не заявлен.

Conflict of interests

Not declared.

Список литературы / References

1. 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.
2. Koak J.H., Kang B.S., Hahm Y.T., Park C.S., Baik M.Y., Kim B.Y. Blending of different domestic grape wines using mixture design and optimization technique. *Food Sci. Biotechnol.* 2010;19(4):1011–1018. DOI 10.1007/s10068-010-0142-7.
3. Nandorfy D.E., Likos D., Lewin S., Barter S., Kassara S., Wang S., Kulcsar A., Williamson P., Bindon K., Bekker M., Gledhill J., Siebert T., Shellie R.A., Keast R., Francis L. Enhancing the sensory properties and consumer acceptance of warm climate red wine through blending. *OENO One*. 2023;57(4):1–18. DOI 10.20870/oenone.2023.57.3.7651.
4. Vismara P., Coletta R., Trombettoni G. Constrained global optimization for wine blending. *Constraints*. 2016;21:597–615. DOI 10.1007/s10601-015-9235-5.
5. Тимофеев Р.Г. Проектирование и оптимизация состава вин и алкогольных напитков методом купажа. *Магарах. Виноградарство и виноделие*. 2022;24(2):186–192. DOI 10.35547/IM.2022.20.77.014. EDN: JITYRK.
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. DOI 10.35547/IM.2022.20.77.014. EDN JITYRK (*in Russian*).
6. Тимофеев Р.Г., Еременко С.А. Системный подход к учету и мониторингу состава и количества винопродукции. *Виноградарство и виноделие: Сборник научных трудов ФГБУН «ВНИИВиВ «Магарах» РАН»*. 2024;53:70–72. EDN DYEAKX.
Timofeev R.G., Eremenko S.A. System approach to accounting and monitoring the composition and quality of wine products. *Viticulture and Winemaking: Collection of Scientific Papers of the Institute Magarach*. 2024;53:70–72. EDN DYEAKX (*in Russian*).

7. Wang X., Feng Y., Wang Y., Zhu H., Song D., Shen C., Luo Y. Enhancing optical non-destructive methods for food quality and safety assessments with machine learning techniques: A survey. *J. Agric. Food Res.* 2025;19:101734. DOI 10.1016/j.jafr.2025.101734.
8. Littarru E., Modesti M., Alfieri G., Pettinelli S., Florida G., Bellincontro A., Sanmartin C., Brizzolara S. Optimizing the winemaking process: NIR spectroscopy and e-nose analysis for the online monitoring of fermentation. *J. Sci. Food Agric.* 2025;105:1465–1475. DOI 10.1002/jsfa.13336.
9. Basalekou M. Using IR spectroscopy as a holistic monitoring approach in winemaking: A review. *OENO One.* 2025;59(3). DOI 10.20870/oenone.2025.59.3.7824.
10. Varivoda A.A., Temerbaeva M.V., Uryumtseva T.I., Gerashchenko L.A., Svirina A.G. Mathematical modeling of multicomponent beverages with a balanced composition of nutrients. *IOP Conf. Ser.: Earth Environ. Sci.* 2021;677(2):022104. DOI 10.1088/1755-1315/677/2/022104.
11. Pomerantsev A.L. *Chemometrics in Excel*. Hoboken: John Wiley & Sons; 2014:1–336. DOI 10.1002/9781118873212.
12. Родионова О.Е. Хемометрический подход к исследованию больших массивов химических данных. *Российский химический журнал.* 2006;50(2):128–144. EDN HTUUSZ.
Rodionova O.E. Chemometric approach to the study of large arrays of chemical data. *Russian Chemical Journal.* 2006;50(2):128–144. EDN HTUUSZ (in Russian).
13. Vyas A.J., Jha S.A., Patel A.B., Patel A.I., Shah S.R., Sheth D.B. Review on simultaneous equation method (Vierordt's Method). *Asian J. Pharm. Anal.* 2022;12(2):149–156. DOI 10.52711/2231-5675.2022.00026.
14. Kunkee R.E., Eschnauer H.R. Wine, 2. Chemical and physical composition. *Comprehensive Food Fermentation Biotechnology*. Elsevier. 2017:427–452. DOI 10.1002/14356007.u28_u01.
15. Тимофеев Р.Г. Разработка рефрактоденсиметрического метода определения содержания этилового спирта и общего экстракта вин на ЭВМ. *Научный журнал НИУ ИТМО. Серия: Процессы и аппараты пищевых производств.* 2020;4:3–11. DOI 10.17586/2310-1164-2020-10-4-3-11.
Timofeev R.G. Development of a refractodensimetric method for determining the content of ethyl alcohol and total wine extract by a computer. *Scientific Journal. Processes and Food Production Equipment.* 2020;4:3–11. DOI 10.17586/2310-1164-2020-10-4-3-11 (in Russian).
16. Moldover M.R., Marsh K.N., Barthel J., Buchner R. Relative permittivity and refractive index. *Exp. Thermodyn.* 2003;6:433–473. DOI 10.1016/S1874-5644(03)80012-7.
17. Иоффе Б.В. Рефрактометрические методы химии. Л.: Химия, 1983:1–352.
Ioffe B.V. *Refractometric methods in chemistry*. Leningrad: Khimiya. 1983:1–352 (in Russian).
18. Вечер А.С. К применению прецизионной рефрактометрии в виноделии. *Труды Краснодарского института пищевой промышленности.* 1958;18:176–196.
Vechev A.S. On the application of precision refractometry in winemaking. *Proceedings of the Krasnodar Institute of Food Industry.* 1958;18:176–196 (in Russian).
19. Фоменко Н.К., Баранов А.И. Ускоренный рефрактометрический метод определения спирта и экстракта в коньяке. *Виноделие и виноградарство СССР.* 1961;4:12–17.
Fomenko N.K., Baranov A.I. Accelerated refractometric method for determining alcohol and extract in cognac. *Winemaking and Viticulture of the USSR.* 1961;4:12–17 (in Russian).
20. Skoog D.A., Holler F.J., Crouch S.R. *Principles of instrumental analysis*. 7th ed. Boston: Cengage Learning. 2017:167–171.
21. Sánchez H.R. Seven derivations of the Beer-Lambert law. *Spectroscopy Letters.* 2021;54(2):133–139. DOI 10.1080/00387010.2021.1873149.
22. Vierordt K. *Die anwendung des spectralapparates zur photometrie der absorptionsspectren*. Tübingen: H. Laupp. 1873:1–199 (in German).
23. Patel D., Bhise S., Kapdi S.S., Bhatt T. Non-destructive hyperspectral imaging technology to assess the quality and safety of food: a review. *Food Prod. Process. Nutr.* 2024;6:69. DOI 10.1186/s43014-024-00246-4.
24. Feng Y.Z., Sun D.W. Application of hyperspectral imaging in food safety inspection and control: a review. *Crit. Rev. Food Sci. Nutr.* 2012;52(11):1039–1058. DOI 10.1080/10408398.2011.651542.
25. Basalekou M. Using IR spectroscopy as a holistic monitoring approach in winemaking: A review. *OENO One.* 2025;59(3). DOI 10.20870/oenone.2025.59.3.7824.
26. Chen J., Liao S., Yao L., Pan T. Rapid and simultaneous analysis of multiple wine quality indicators through near-infrared spectroscopy with twice optimization for wavelength model. *Front. Optoelectron.* 2021;14:329–340. DOI 10.1007/s12200-020-1005-3.
27. Teklemariam T.A., Chou F., Kumaravel P., Van Buskrik J. ATR-FTIR spectroscopy and machine/deep learning models for detecting adulteration in coconut water with sugars, sugar alcohols, and artificial sweeteners. *Spectrochim. Acta A.* 2024;322:124771. DOI 10.1016/j.saa.2024.124771.
28. Jiang H., Deng J., Chen Q. Monitoring of simultaneous saccharification and fermentation of ethanol by multi-source data deep fusion strategy based on near-infrared spectra and electronic nose signals. *Eng. Appl. Artif. Intell.* 2024;127:107299. DOI 10.1016/j.engappai.2023.107299.
29. Willa V. Brix and alcohol content monitoring using wireless sensor network. *MSc Thesis. NM-AIST*; 2023:1–72. DOI 10.58694/20.500.12479/2571.
30. Ferrier J.G., Block D.E. Neural-network-assisted optimization of wine blending based on sensory analysis. *Am. J. Enol. Vitic.* 2001;52:386–395. DOI 10.5344/ajev.2001.52.4.386.
31. Ferrer-Gallego R., Rodriguez-Pulido F.J. Phenolic composition, quality and authenticity of grapes and wines by vibrational spectroscopy. *Food Rev. Int.* 2022;38(1):1–20. DOI 10.1080/87559129.2020.1752231.
32. Chen Q., Lin H., Zhao J. *Advanced nondestructive detection technologies in food*. Singapore: Springer Nature. 2021:1–347.
33. Segura-Borrego M.P., Azcarate S.M., Amigo J.M., Morales M.L., Callejón R.M., Ríos-Reina R. Analysis of beverages. Non-invasive and non-destructive methods for food integrity. *Cham: Springer.* 2024:359–388. DOI 10.1007/978-3-031-76465-3_1.

Информация об авторе

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

Information about the author

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

Статья поступила в редакцию 29.07.2025, одобрена после рецензии 20.08.2025, принята к публикации 20.08.2025.