

ОТЗЫВ официального оппонента
на диссертацию на соискание ученой степени
кандидата химических наук Абакумова Алексея Геннадьевича
на тему: «Установление сортовой и региональной принадлежности
сортовых вин на основе их многоэлементного «образа»»
по специальности 1.4.2 - Аналитическая химия (химические науки)

Одним из направлений развития современной аналитической химии является все более широкое применение классификационных методов анализа при установлении различия/сходства объектов сложного состава на основе внедрения методов многомерной обработки данных. Это обусловлено как разработкой новых аналитических подходов и методов, открывающих возможность получения многомерных данных, так и сложностью изучаемых объектов. Установление взаимосвязей между минеральным составом вина, винограда и почвы с места произрастания винограда, формирование его элементного «образа» лежит в основе решения задачи о сортовой и региональной принадлежности вин. Несмотря на значительное количество исследований в этой области систематический анализ взаимосвязей между элементным составом вин в цепочке почва-виноград-вино с учетом способов и условий выращивания винограда ранее не проводилось.

В связи с этим диссертационная работа Абакумова А.Г., посвященная развитию подходов к оценке качества, сортовой и региональной принадлежности вин по их компонентному составу является **актуальной**.

Научная новизна диссертационной работы состоит в том, что установлены критерии, позволяющие проводить комплексную идентификацию принадлежности виноградных вин к отдельным классам на основе их многоэлементного состава; выявлены маркеры региональной и сортовой принадлежности белых и красных сухих вин, произведенных в Краснодарском крае; показана возможность идентификации вин и региона их произрастания на основе моделирования данных многоэлементного состава

вин методами статистического моделирования (дискриминантного анализа, деревьями классификации, нейронными сетями); изучено влияние осветления и стабилизации виноматериалов бентонитовыми глинами на элементный образ вин и оценен вклад макро- и микроэлементов в формировании их элементного образа.

Практическая значимость диссертационной работы состоит в разработке математических моделей оценки качества вин, построении схемы идентификации сухих вин, произведенных в Краснодарском крае по различным критериям (географической, сортовой принадлежности, подлинности) и их реализации в виде новых программных продуктов для автоматизации определения географической, сортовой принадлежности и подлинности сухих вин; установлении влияния различных групп бентонитовых глин на формирование элементного состава красных виноматериалов, произведенных из сортов винограда Каберне Совиньон, Мерло и Молдова.

Работа изложена на 200 страницах текста, включает 45 таблиц и 22 рисунка. Работа состоит из введения и 2-х глав включая обзор литературы, главы, в которой представлена экспериментальная часть и обсуждение результатов исследований, а также заключения и списка литературы (319 источников).

Во введении сформулированы цель и задачи исследования, обоснованы актуальность, научная новизна и практическая значимость диссертационной работы. В обзоре литературы детально рассмотрен химический состав винограда и изготавливаемой из него винодельческой продукции, показано его качественное и количественное изменение в процессе винификации, созревания и выдержки вин. Проведен анализ литературы и нормативных документов, регламентирующей качество вин на территории России и стран Европейского союза, а также существующих подходов к определению их подлинности, в том числе комплексной идентификации и создания системы оценки качества винодельческой продукции. Рассмотрены основные

методические подходы к установлению региональной принадлежности вин, на основе сочетания возможностей современных методов анализа и методов математического моделирования.

В экспериментальной части приведено подробное описание использованных в работе объектов исследования, реагентов, аппаратуры, а также приведены методики исследования вин. Приведенные сведения позволяют полностью воспроизвести полученные результаты.

В диссертационной работе обсуждены интересные с научной и практической точек зрения результаты. Интерпретация и обсуждение экспериментальных данных выполнены на высоком научном уровне и с привлечением знаний в различных областях науки, что подтверждает высокую квалификацию диссертанта.

Наиболее интересными являются результаты классификации вин на основе взаимосвязей между минеральным составом в цепочке почва-виноград-вино и его территориальным происхождением и анализа диаграмм рассеяния канонических значений. Кроме того, отдельного внимания заслуживают предложенные подходы к автоматизации вычислений по разработанным многомерным моделям, позволяющие оценить сортовую принадлежность вина и регион его производства по содержанию выбранных для построения модели элементов. Перспективы разработанного подхода подтверждены на примере идентификации и классификации реальных образцов вин, произведенных в Краснодарском крае.

Достоверность результатов исследований и выводов, приведенных в диссертационной работе, подтверждается анализом литературных данных по теме работы, применением современных методов исследования и подходов к обработке данных. Выводы и научные положения, сформулированные в диссертации, **обоснованы**.

Результаты исследований Абакумова А.Г. прошли широкую апробацию. По теме диссертации опубликовано 17 печатных работ, в том

числе 9 статей в российских и зарубежных журналах, результаты работы представлены на российских и международных конференциях.

По диссертационной работе имеются следующие вопросы/замечания:

1. К какому типу относится использованный в работе метод нейронных сетей?
2. Какие методы использовали для валидации полученных математических моделей?
3. Какой размер матриц использовали при построении различных многомерных моделей?
4. Как можно оценить качество классификационных моделей (таблица 42 и 44)?
5. В работе использована ряд терминов, не принятых в аналитической химии, такие как головной и градуировочный растворы (стандартный и рабочий, соответственно), ацетатно-аммонийный буфер (ацетатно-аммиачный). Не указано как рассчитывали биологический коэффициент поглощения.
6. В экспериментальной части объекты исследования и их свойства целесообразней было бы представить в таблице.
7. Для лучшего понимания полученных результатов следовало более широко использовать графические методы визуализации данных. Например при сравнении взаимосвязи между концентрациями металлов в системе ягода-вино и почва-виноград, отнесение БТ к различным группам можно использовать представление данных в виде гистограмм.

Вместе с тем, указанные замечания не умаляют значимости диссертационного исследования. Диссертация Абакумова А.Г. является цельной и завершенной научно-квалификационной работой. По актуальности, научной новизне, теоретической и практической значимости, степени обоснованности положений и выводов диссертационная работа Абакумова А.Г. соответствует требованиям «Положения о присуждении ученых степеней», утверждённого Постановлением Правительства РФ от 24

сентября 2013 г. №842 (ред. от 11.09.2021), предъявляемым к кандидатским диссертациям, а ее автор, Абакумов Алексей Геннадьевич, заслуживает присуждения ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.2 – Аналитическая химия.

Официальный оппонент:

доктор химических наук, доцент

профессор кафедры общей и неорганической химии

Института химии ФГБОУ ВО «Саратовский национальный

исследовательский государственный университет имени

Н.Г. Чернышевского»

Бурмистрова Наталия Анатольевна

Контактные данные:

тел.: 7(927)1097944, e-mail: naburmistrova@mail.ru

Специальность, по которой официальным оппонентом
защищена диссертация: 02.00.02 – Аналитическая химия

Адрес места работы:

410025, г. Саратов, ул. Астраханская, д. 83,

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования «Саратовский национальный исследовательский
государственный университет имени Н.Г. Чернышевского», Институт
химии

Тел.: (9452)516953; e-mail: burmistrovana@info.sgu.ru

Подпись Бурмистровой Н.А. удостоверяю:

Ученый секретарь СГУ

к.х.н. доцент