

УДК 543.08+663.22

ХЕМОМЕТРИЧЕСКИЙ (ГЕОМЕТРИЧЕСКИЙ) ПОДХОД К РАНЖИРОВАНИЮ СУХИХ БЕЛЫХ ВИН ПО РЕЗУЛЬТАТАМ СЕНСОРНОЙ ОЦЕНКИ ИХ КАЧЕСТВА

© 2021 г. А. А. Халафян^а, З. А. Темердашев^{а, *}, А. Г. Абакумов^а, Ю. Ф. Якуба^б

^аКубанский государственный университет, факультет химии и высоких технологий
ул. Ставропольская, 149, Краснодар, 350040 Россия

^бСеверо-Кавказский федеральный научный центр садоводства, виноградарства, виноделия
ул. 40-летия Победы, 39, Краснодар, 350072 Россия

*e-mail: temza@kubsu.ru

Поступила в редакцию 24.02.2021 г.

После доработки 05.03.2021 г.

Принята к публикации 09.03.2021 г.

Рассматривается ранжирование белых сухих вин по сенсорной оценке их качества с позиций многомерного анализа, когда объекты экспертизы представляются в виде точек многомерного пространства с координатами, соответствующими экспертным баллам. Степень предпочтения между образцами вин выражается через сходство сенсорных оценок, оцениваемых посредством геометрического расстояния между ними. Помимо ранжирования вин данный подход позволил провести исследование их кластерной структуры, выявить наличие трех групп однородных вин по результатам совокупности выставленных им экспертных оценок. Установлена взаимосвязь кластерной структуры с местами вин в ранжированном рейтинге. Показана согласованность рейтингов вин, построенных по предложенному хеометрическому подходу, среднему арифметическому и медиане баллов. С позиции многомерного анализа рейтинг вин по геометрическому расстоянию является математически более обоснованным, так как строится в соответствии с евклидовой метрикой, а сумма координат точек, лежащая в основе расчета среднего арифметического, не соответствует ни одной из известных метрик. Еще одним преимуществом геометрического подхода является то, что применение среднего арифметического для итоговой оценки результатов дегустации обосновано при большом количестве экспертов.

Ключевые слова: многомерный анализ, ранжирование, вина, сенсорная оценка.

DOI: 10.31857/S0044450221080065

Сенсорные свойства являются основной характеристикой вина, определяющей успех у потребителей [1, 2]. Анализ текущих знаний о сенсорных признаках вина, важных для предпочтений и вкусов потребителей, показал наличие взаимосвязи между оценками качества экспертов и предпочтениями потребителей, однако определенного вида зависимости между этими двумя показателями не наблюдается [3]. Фрэнсис и Ньютон [4] описали предоставляемые возможности и трудности при оценке вклада, вносимого химическими компонентами в аромат и вкус вина, проанализировали взаимосвязь между сенсорными свойствами и химическим составом вина по данным, полученным методом количественной хроматографии-ольфактометрии. Важным аспектом такой взаимосвязи является установление перечня соединений, оказывающих наибольшее влияние на аромат вина, а также обеспечение сенсорного дескриптивного анализа и связанных с

ним статистических методологий, дополняющих данные о химическом составе ароматических соединений. По мнению Джексона [5], однако, установление качества вина по его компонентному составу не является в полной мере объективным. Химический состав вина влияет на происхождение вкуса и вкусовые качества, но не в полной мере ясно, каким образом он воспринимается чувственно, что приводит к трудностям оптимизации их сенсорного восприятия.

Невзирая на определенную субъективность при оценке потребительских качеств вин и высокий уровень развития инструментальных средств установления качества вин, основным способом сравнительной оценки их органолептических свойств является сенсорная оценка, проводимая специально подготовленными профессиональными экспертами [6–8]. Объяснение этого очевидно – сенсорные свойства вин являются основной характеристикой, которая напрямую влияет

на предпочтения потребителей [2, 9]. На результаты сенсорной оценки вин влияют состав экспертов, их количество, физиологические особенности на момент экспертизы, субъективизм в восприятии органолептических свойств вин и т.д. В связи с этим обработка экспертных оценок включает проверку согласованности мнений экспертов (или классификацию экспертов, если нет согласованности) и усреднение мнений экспертов внутри согласованной группы [10–13].

Экспертные оценки представляют собой эмпирические данные, в которых присутствует случайная составляющая, поэтому для анализа их согласованности используют статистические методы анализа: описательные статистики, дисперсионный анализ, метод главных компонент, анализ соответствия, кластерный, позиционный и регрессионный анализ, логит-модели [14–22], планирование экспериментов [8, 23–25]. Наряду с традиционными статистическими методами, используют нейронные сети [26], нечеткую логику [27], интеллектуальный анализ данных [17]. При этом применяют весьма разнообразный инструментарий – от статистических пакетов SPSS, STATISTICA, SAS, STATA и др. до современных средств анализа данных – среды программирования R [18, 21, 28].

Цель настоящей статьи – ранжирование сенсорной оценки качества вин с позиций многомерного анализа, когда объекты экспертизы представляются в виде точек многомерного пространства с координатами, соответствующими экспертным баллам.

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ЧАСТЬ

Объекты исследования. Выбрали 20 образцов сухих натуральных вин наименований “Рислинг”, “Шардоне” и “Мускат”, произведенных в 2010–2015 гг. на территории Краснодарского края винодельческими предприятиями ЗАО “Запорожское”, ООО “Кубань-Вино”, ОАО АПФ “Фанагория”, ЗАО АФ “Мысхако” и любезно предоставленных ими для исследования. Вина были налиты в темно-зеленые стеклянные бутылки с винтовыми крышками и хранились при 10°C. Все образцы вин были сухими, содержание алкоголя варьировало от 9 до 13 об. %. Значение pH варьировало от 3.61 до 3.79. Уровень растворенного кислорода в винах был ниже 1 мг/л, который измеряли обычным погружением зонда до розлива в бочонки.

Сенсорную оценку качества вин проводили специалисты федерального государственного бюджетного научного учреждения “Северо-Кавказский федеральный научный центр садоводства, виноградарства, виноделия” (Краснодар). В процедуре сенсорной оценки участвовали

11 человек возрастом от 32 до 66 лет. Все участники считаются экспертами в области вина, работают в винодельческой промышленности и обладают профессиональным опытом проведения сенсорного анализа.

Методика проведения сенсорной оценки: образец вина (50 мл) перед сенсорной оценкой наливали в бокал и накрывали чашкой Петри диаметром 5.7 см на 30 мин. Испытания проводили в хорошо освещенном дегустационном зале с контролируемым температурным режимом. Все образцы при 16–22°C подавали на столы с белыми салфетками. Во время сенсорной оценки экспертам было запрещено общаться. Вина подавали в прозрачных бокалах в форме тюльпанов объемом 220 мл. После сенсорной оценки каждого образца участников просили подождать 30 с и очистить вкусовые рецепторы водой и крекерами. Интервал между дегустацией образцов составлял 2 мин. Эксперты трижды оценивали каждый образец в течение рабочей недели. Сенсорную оценку качества вин, которая включала прозрачность, цвет, запах, аромат, вкус и типичность, проводили по известной 100-бальной рейтинговой системе Паркера [6]. Результаты сенсорной оценки вин представлены в табл. 1.

Статистический анализ данных сенсорной оценки вин проводили с привлечением методов древовидной классификации, многомерного шкалирования, коэффициентов корреляции Спирмена и конкордации Кендалла. Древовидную классификацию использовали для изучения кластерной структуры образцов вин в отношении предпочтений, выраженных экспертами по балльной шкале. Многомерное шкалирование применяли для визуализации соответствия сходств/различий между винами и их местами в рейтинге. При изучении согласованности различных рейтингов вин и экспертных оценок применяли коэффициенты корреляции Спирмена и конкордации Кендалла. Средние оценки экспертов в выделенных кластерах сравнивали с помощью однофакторного дисперсионного анализа. Все расчеты выполняли с использованием программы STATISTICA (v. 10) [29]. Для более наглядной демонстрации предлагаемого подхода и возможности визуализации результатов исследования ограничили данными дегустации 20 образцов вин.

Математическое обоснование предлагаемого подхода. Для сенсорного исследования вин применяют балльную оценку качества с последующим их ранжированием по среднему значению. В силу своих субъективных ощущений эксперты назначают объекту тот или иной балл в зависимости от анализируемого свойства объекта, например 0, 1, ..., 100. При этом разным образцам вин могут присваиваться одинаковые баллы. Предпочтительным будет тот образец, которому соответ-

ствует наибольший средний балл. Балльная оценка является наиболее информативным методом: она позволяет не только упорядочить вина по степени предпочтения, но и дает возможность оценить, насколько один объект предпочтительнее другого.

Визуализация экспертных оценок на диаграмме размаха позволяет увидеть ряд закономерностей в их изменчивости (рис. 1). Оценки для различных образцов вин меняются в широком диапазоне. Наибольший разброс экспертных оценок наблюдается для образца 11 со стандартным отклонением $\bar{s} = 7.321$, наименьший – для образца 12 ($\bar{s} = 1.72$). Определенным различием и изменчивостью обладают также оценки, выставленные образцам каждым экспертом. Наибольший их разброс наблюдается у эксперта 6 ($\bar{s} = 7.436$), наименьший – у эксперта 9 ($\bar{s} = 1.436$). При этом видно, что эксперт 1 при оценке вин проявил наибольшую лояльность с выставленным средним баллом 87.2, наименее лояльным оказался эксперт 6 со средним баллом 75.6. Поэтому, прежде чем переходить к изложению предлагаемого подхода, целесообразно проверить согласованность результатов экспертизы. Традиционно используемый в случаях, когда количество экспертов более 2, коэффициент конкордации Кендалла (W) принял статистически значимое ($p < 0.05$) в соответствии с критерием Пирсона χ^2 значение $W = 0.404$. К сожалению, в литературе нам не удалось найти интерпретацию степени согласованности экспертов в номинальной шкале (слабая, умеренная, сильная). Учитывая, что коэффициент конкордации Кендалла, равно как и коэффициент корреляции Спирмена, является ранговым критерием и в некотором смысле его обобщением, воспользуемся градацией, принятой для коэффициентов корреляции [30]: если $|r| \leq 0.25$, то корреляция слабая, если $0.25 < |r| \leq 0.75$ – умеренная, $|r| > 0.75$ – сильная. В таком случае можно говорить об умеренной согласованности экспертных оценок, приведенных в табл. 1, что является предпосылкой для проведения дальнейшего анализа результатов сенсорной оценки.

Из диаграммы, приведенной на рис. 1, казалось бы, следует, что эксперт 6 вносит больший по сравнению с экспертом 1 деструктивный вклад в согласованность экспертных оценок. Однако расчеты показали, что если исключить из экспертизы эксперта 6, то коэффициент конкордации уменьшится до значения $W = 0.395$. Если исключить эксперта 1, то коэффициент конкордации возрастет, приняв значение $W = 0.42$. Это означает, что эксперт 6 повышает согласованность, а эксперт 1 ее понижает. Объяснение такому противоречию простое: конкордация Кендалла представляет собой ранговый критерий, учитывающий только отношение порядка между оценками

Таблица 1. Результаты сенсорной оценки испытуемых образцов вин

Номер образца	Эксперт										
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11
1	77	80	80	80	81	82	77	85	85	83	81
2	83	83	79	79	79	63	82	79	83	78	78
3	89	79	81	83	82	76	83	79	86	77	85
4	90	85	82	78	82	78	85	76	85	84	78
5	90	87	79	85	85	82	84	83	85	85	85
6	90	84	80	84	83	76	77	86	83	81	84
7	85	87	82	85	84	78	83	86	84	86	87
8	90	86	80	83	84	84	83	87	82	82	79
9	95	92	85	84	86	80	88	88	84	84	80
10	88	86	82	79	81	64	85	80	83	79	86
11	83	79	79	78	77	58	77	72	86	74	81
12	82	86	82	82	84	84	84	82	87	85	84
13	88	85	87	80	82	72	84	73	84	83	86
14	88	87	80	79	82	72	80	90	85	80	83
15	94	88	80	86	84	80	88	81	83	79	82
16	82	90	82	80	83	82	82	78	86	82	83
17	84	79	78	79	79	72	78	78	82	77	83
18	87	83	79	79	81	74	88	77	83	80	81
19	84	82	79	78	79	71	77	72	83	86	82
20	95	89	82	86	86	84	89	83	85	79	86

(больше/меньше), но не их среднее или изменчивость.

Очевидно, что баллы X_i , описывающие отношение i -го эксперта к данному объекту, включают в себя как истинное значение α_i , так и частично неконтролируемую, случайную погрешность δ_i , т.е. $X_i = \alpha_i + \delta_i$. Так как δ_i – случайная составляющая оценки, то в совокупности оценок образца различными экспертами случайные составляющие будут взаимно подавлять друг друга. Тогда, если просуммировать оценки экспертов данного образца вина, суммарная погрешность по совокупности всех оценок будет близка к нулю. Для математической формализации сказанного сделано предположение, что если число экспертов равно n , т.е. $i = 1, \dots, n$; $\bar{X}$, $\bar{\alpha}$ – средние арифметические экспертных оценок и их истинных значений, то справедливо соотношение:

$$\bar{X} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n a_i + \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \delta_i.$$

За счет взаимного уничтожения (сокращения) случайных составляющих $\sum_{i=1}^n \delta_i \approx 0$, тогда

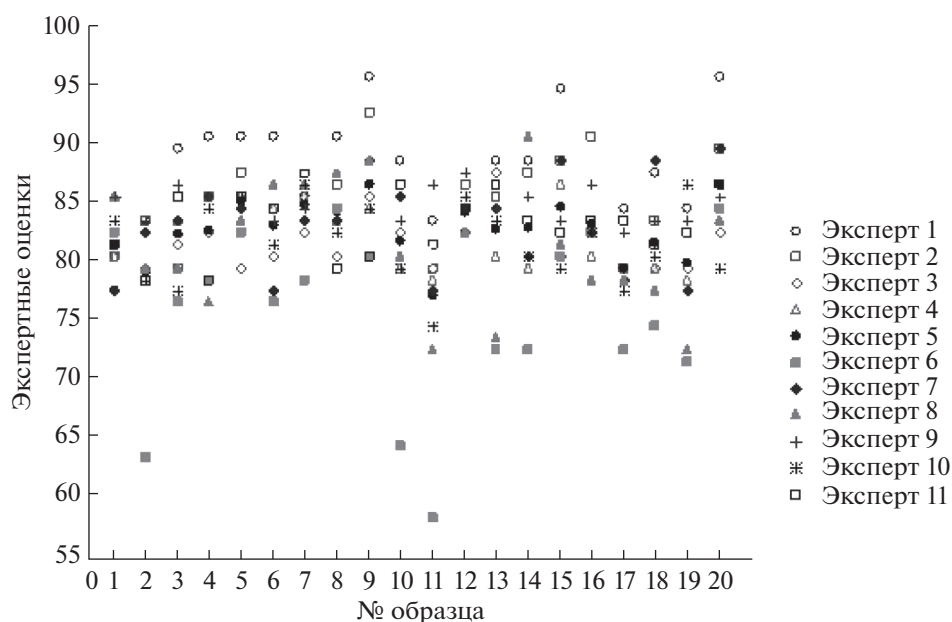


Рис. 1. Диаграмма рассеяния экспертных оценок.

$$\bar{X} \approx \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n a_i + \frac{1}{n} \cdot 0 \approx \bar{a},$$

т.е. среднее арифметическое экспертных оценок $\bar{X}$ в итоге будет равно среднему арифметическому их истинных значений $\bar{a}$. Из положений математической статистики известно, что $\lim_{n \rightarrow \infty} \sum_{i=1}^n \delta_i \approx 0$ при $n \rightarrow \infty$. Это означает, что среднее арифметическое приближается к среднему истинных значений только при большом количестве экспертов. Учитывая, что $\lim_{n \rightarrow \infty} \sum_{i=1}^n \delta_i$ стремится к нулю при бесконечном количестве экспертов, 11 экспертов недостаточно для хорошего приближения к истинному значению. При малом количестве экспертов доля случайной погрешности будет велика. Предлагаемый хемометрический (геометрический) подход позволяет устранить данный недостаток, так как ранжирование объектов не включает вычисление среднего арифметического, а осуществляется посредством оценки степени сходства объектов в многомерном пространстве через геометрическое расстояние между ними по принципу: чем меньше расстояние, тем больше сходство. Это означает, что в рейтинге рядом окажутся объекты, наиболее сходные друг с другом.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Достоинством предлагаемого подхода к ранжированию образцов вин является возможность получения значительно большей информации об

объектах экспертизы, чем при традиционном распределении образцов по средним значениям экспертных баллов. Вначале исследуется кластерная структура вин по результатам их сенсорной оценки. На дендрограмме, построенной модулем *иерархической классификации* (рис. 2), изображена структура последовательного объединения образцов вин в кластеры по мере увеличения расстояния между ними. Расстояние d_e между образцами вин X_i, X_j ($i, j = 1, \dots, 20$) как точками пространства размерности $m = 11$ измеряется при помощи евклидовой метрики (*Euclidean distances*), которую также называют геометрическим расстоянием, по формуле:

$$d_e(X_i, X_j) = \left(\sum_k (x_{im} - x_{jm})^2 \right)^{1/2}, \quad (1)$$

где x_{im}, x_{jm} — оценки, выставленные m экспертами ($m = 1, \dots, 11$) образцам X_i, X_j . На горизонтальной оси отмечены номера образцов вин, на вертикальной оси — расстояние объединения. Так, при изначально наименьшем расстоянии наибольшее сходство по совокупности 11 экспертных оценок наблюдается в случае образцов 15 и 20: при расстоянии 7 они образуют кластер или группу однородных (сходных) образцов вин. Далее, при расстоянии чуть более 7 новый кластер образуют образцы 12 и 16, а при расстоянии 8 кластер образуют образцы 5 и 7 и т.д. По мере увеличения расстояния к образованным кластерам присоединяются новые образцы вин. Например, при расстоянии 11 к кластеру образцов 15 и 20 присоединяется образец 9. Нетрудно заметить, что при расстоянии объединения не менее 20 и не более

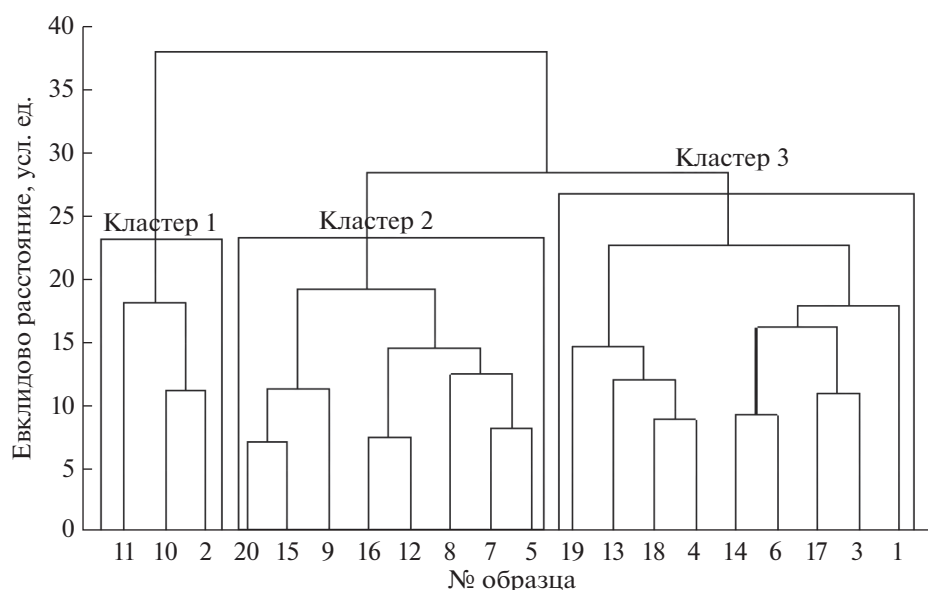


Рис. 2. Дендрограмма исследуемых образцов вин.

25 образцы вин образуют структуру, состоящую из трех групп однородности — кластеров 1, 2 и 3. При этом кластеры 2 и 3 также неоднородны и состоят из двух групп однородности. Кластерная структура вин имеет непосредственное отношение к их рейтингу, построенному в соответствии с принципами многомерного анализа данных, — однородные объекты в рейтинге займут, как было ранее отмечено, близкие места.

Суть геометрического подхода ранжирования вин по качеству состоит в следующем. Среди объектов экспертизы должен быть выделен объект “лидер” с наилучшими значениями показателей; в нашем случае это образец вина с наибольшими экспертными баллами. По выражению (1) вычисляется геометрическое расстояние между образцами и лидером как точками многомерного пространства в системе m координат — оценок m экспертов. Лидеру присваивается ранг 1, он занимает первое место в рейтинге. Второе место в рейтинге займет объект с наименьшим расстоянием от лидера. В случае отсутствия лидера создается виртуальный образец (*virtual sample*, *vs*), консолидирующий наилучшие значения показателей по всем объектам экспертизы, тогда места в рейтинге распределяются по степени близости к нему. Среди исследуемых 20 образцов вин отсутствует образец с наибольшими экспертными баллами, поэтому сформирован виртуальный образец со значениями экспертных баллов 95, 92, 87, 86, 86, 84, 89, 90, 87, 86, 87. Евклидовы расстояния от образцов вин до виртуального образца, вычисленные модулем *иерархической классификации*, приведены в столбце “*di*” табл. 2. Соответствующие расстояниям ранги отображены в столбце “РГР” (рейтинг по

геометрическому расстоянию). В столбцах табл. 2 также приведены исходные номера образцов (“№ образца”), средние арифметические (“Среднее”) и медианы (“*Me*”) баллов, рейтинги по медианам (“Р*Me*”) и средним арифметическим (“Р*СА*”), номера кластеров образцов вин (“Кластер”).

Приведенные в табл. 2 медианы и данные альтернативного рейтинга по медианам свидетельствуют о том, что распределения экспертных оценок образцов вин несимметричны относительно значений среднего арифметического. На рис. 3 и 4 в качестве иллюстрации приведены гистограммы распределений экспертных баллов образцов № 1 и 2. При несимметричных распределениях в качестве оценки среднего желательно использовать медиану — такой экспертный балл, когда 50% баллов, выставленных экспертами данному объекту, имеют значения больше медианы, а 50% — меньше.

Несмотря на математическую правомерность использования медианы, рейтинг по медиане из-за наличия большого количества образцов с одинаковыми значениями медиан неоднозначен при ранжировании вин. Так, медианы 83 и 85 встречаются у трех образцов вин, медианы 79, 81, 82, 84 — у двух, а значит, они могут занимать одно и то же место в рейтинге.

Модуль “Многомерное шкалирование” позволяет перенести объекты многомерного пространства в пространство меньшей размерности, например на плоскость, с сохранением порядка расстояний между объектами по принципу: объекты близкие/удаленные в многомерном пространстве останутся близкими/удаленными и на плоскости. Для визуализации соответствия сходства между

Таблица 2. Результаты ранжирования образцов вин различными методами

№ образца	Среднее	РСА	Me	РМе	di	РГР	Класс-тер
9	86.0	1	85.00	3	9.5	1	2
20	85.8	2	86.00	1	11.7	2	2
5	84.5	3	85.00	3	14.3	3	2
7	84.3	4	85.00	3	15.8	4	2
15	84.1	5	83.00	8	16.1	5	2
8	83.6	7	83.00	8	16.6	6	2
12	83.8	6	84.00	6	18.7	7	2
6	82.5	9	83.00	8	20.7	8	3
14	82.4	10	82.40	10	21.6	9	3
16	82.7	8	82.00	13	21.8	10	2
4	82.1	12	82.11	11	22.7	11	3
3	81.8	13	81.80	14	24.0	12	3
13	82.2	11	84.00	6	25.0	13	3
18	81.1	15	81.00	16	25.3	14	3
10	81.2	14	82.00	13	27.6	15	1
1	81.0	16	81.00	16	28.3	16	3
17	79.0	18	79.00	19	31.6	17	3
19	79.4	17	79.40	17	32.7	18	3
2	78.7	19	79.00	19	34.1	19	1
11	76.7	20	78.00	20	43.0	20	1

Примечание: среднее — средние арифметические баллы; РСА — рейтинги по средним арифметическим баллам; Me — медианы баллов; РМе — рейтинги по медианам; di — Евклидовы расстояния от образцов вин до виртуального образца; РГР — рейтинг по геометрическому расстоянию.

Таблица 3. Уровни значимости p -критерия “наименьшая значимая разность”

Кластер	Переменная: средний балл		
	кластер 1 $M = 78.9$	кластер 2 $M = 84.4$	кластер 3 $M = 81.3$
1	—	0.00002	0.017
2	0.00002	—	0.0003
3	0.017	0.0003	—

образцами вин и их расположением в рейтинге использована диаграмма рассеяния (рис. 5). В анализируемом случае осуществили перенос образцов вин как точек пространства размерности 11 на плоскость — пространство размерности 2 с новой системой координат “Размерность 1”, “Размерность 2”. Для большей наглядности соответствия места в рейтинге и кластерной структуры образцов вин образцы кластера 1 обозначены квадратиками, кластера 2 — ромбами, кластера 3 — треугольниками. На диаграмме видно,

что образцы вин преимущественно расположены на плоскости в соответствии с принадлежностью к кластерам. Образцы кластеров 1–3 локализованы соответственно в правой верхней, левой и средней частях плоскости. Виртуальный образец (vs) находится в верхней левой части плоскости. Наиболее близок к нему образец 9, занявший в рейтинге место 1, наиболее удаленный — образец 11, занявший последнее 20 место. Соответствие сходства между образцами и их расположением в рейтинге проявляется не только для отдельных образцов, но и для кластеров в целом. Так, наиболее близким к виртуальному образцу является кластер 2, далее кластер 3 и наиболее удаленный — кластер 1. Если обратиться к табл. 2, то можно заметить, что образцы кластера 2 в большинстве случаев занимают в рейтинге первые места, образцы кластера 1 — последние места, а образцы кластера 3 — расположены преимущественно в средней части рейтинга. Выделенные кластеры представляют собой группы вин, распределенные по сенсорным оценкам качества, кластер 2 представлен винами высокого качества, кластер 3 представлен винами среднего качества, а кластер 1 — винами низкого качества.

Еще одним подтверждением наличия кластерной структуры образцов вин являются результаты применения однофакторного дисперсионного анализа для сравнения средних значений баллов, выставленных 11 экспертами в трех кластерах. Как видно из табл. 3, наибольшее значение среднего $M = 84.4$ в кластере 2, наименьшее $M = 78.9$ в кластере 1, промежуточное значение $M = 81.3$ в кластере 3. Важно то, что даже при столь малых количествах образцов вин в кластерах отличие средних между всем тремя группами в соответствии с критерием наименьшей значимой разности статистически значимо — уровни значимости $p < 0.05$ в ячейках таблицы.

Графической иллюстрацией наличия кластерной структуры образцов вин может служить диаграмма размаха, на которой отображены существенно отличающиеся средние значения сенсорных оценок вин в кластерах и степени их разброса (рис. 6).

Таким образом, применение геометрического подхода позволило ранжировать вина и всесторонне проанализировать структуру их сходства и различия относительно совокупности экспертных сенсорных оценок.

Простое визуальное сравнение в табл. 2 трех рейтингов позволяет говорить об определенном сходстве между ними. Первые пять мест и последнее 20 место в рейтингах по среднему арифметическому и геометрическому расстоянию занимают одни и те же образцы — 9, 20, 5, 7, 15, 11. В рейтингах по среднему арифметическому и медиане образцы 14, 19, 11 заняли также одинаковые ме-

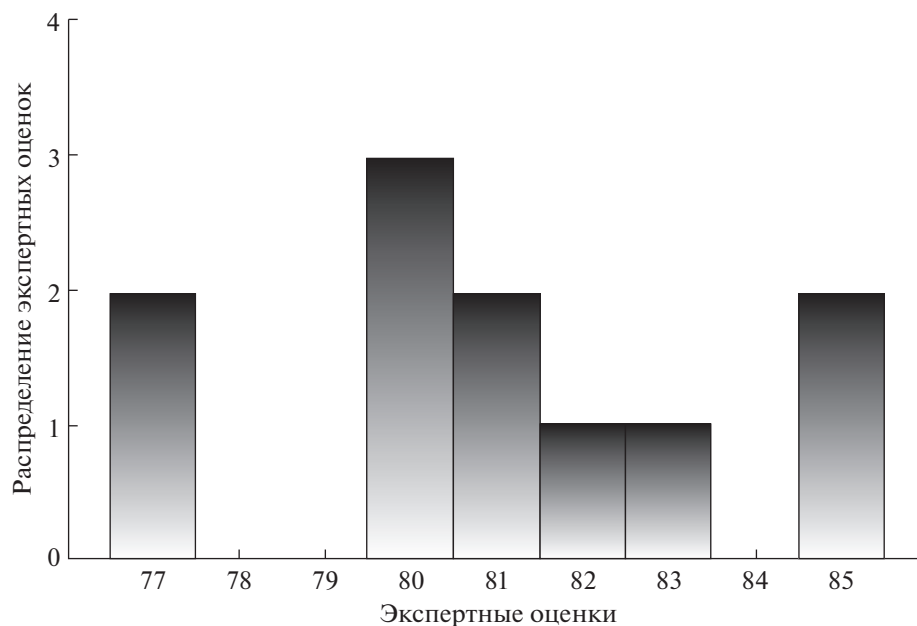


Рис. 3. Гистограмма распределений экспертных оценок образца № 1.

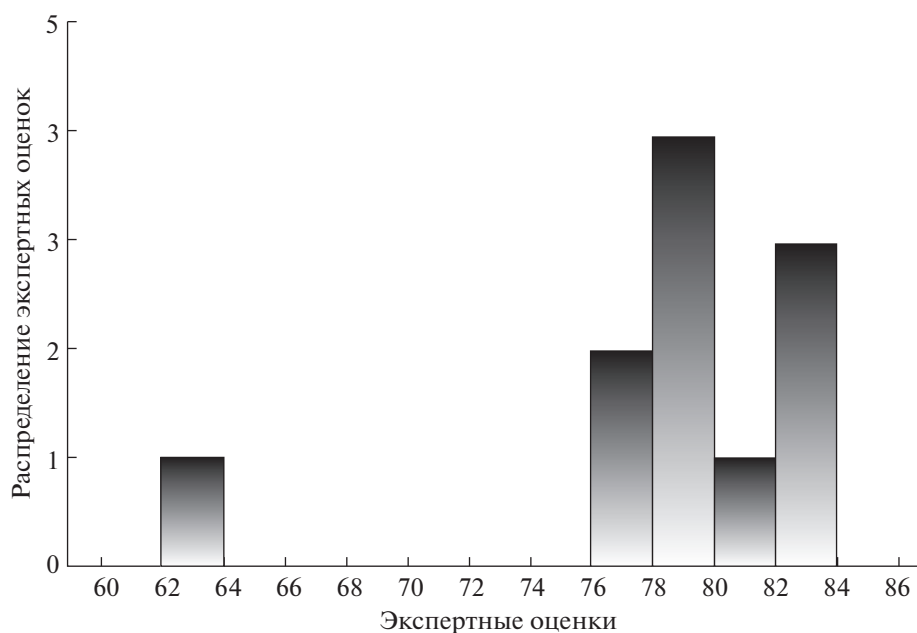


Рис. 4. Гистограмма распределений экспертных оценок образца № 2.

ста — соответственно 10, 17, 20. Для оценки парной согласованности рейтингов использован коэффициент ранговой корреляции Спирмена (R_s), который применяется для оценки согласованности показаний двух экспертов. Из табл. 4 следует, что наибольшая согласованность наблюдается между рейтингами РСА и РГР ($R_s = 0.986$), а наименьшая согласованность — между РГР и РМе ($R_s = 0.91$). Следует отметить, что между тремя

рейтингами РГР, РСА, РМе также наблюдается групповая согласованность, так как коэффициент конкордации Кендалла R_k , характеризующий согласованность показаний более чем двух экспертов, близок к 1 ($R_k = 0.961$).

Таким образом, используя статистические критерии, установлена парная и групповая согласованность или непротиворечивость рейтингов

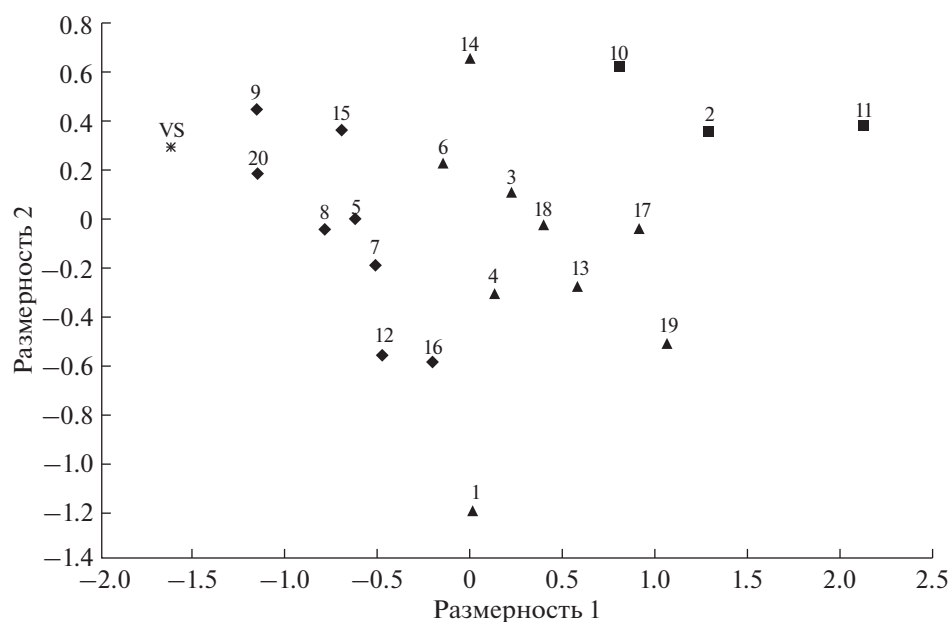


Рис. 5. Диаграмма рассеяния образцов вин.

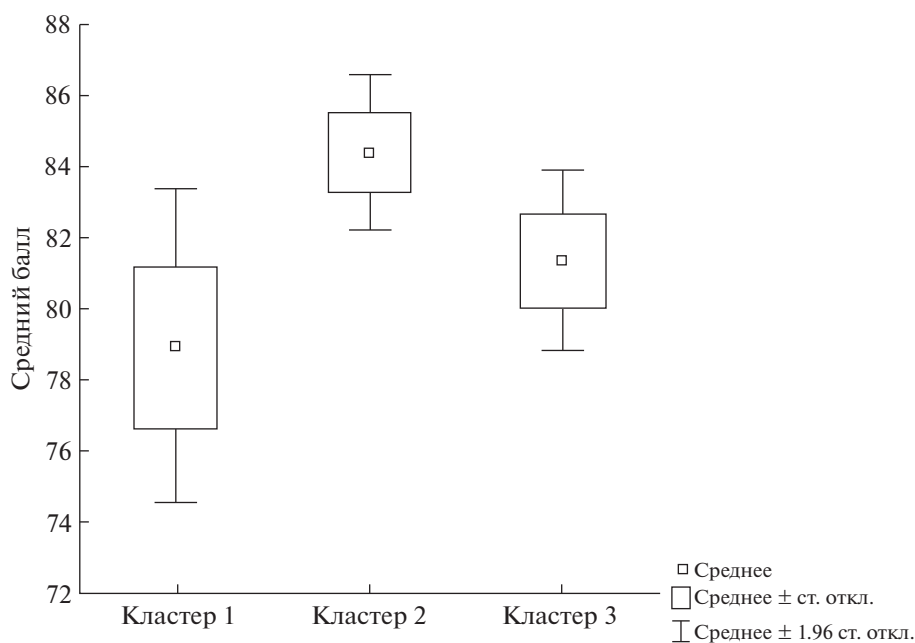


Рис. 6. Диаграмма размаха средней оценки вин в кластерах.

по среднему арифметическому, медиане и геометрическому подходу.

* * *

Предложенный геометрический подход ранжирования сухих белых вин по результатам сенсорной оценки экспертами их качества позволил исследовать их кластерную структуру, установить

наличие трех групп однородных вин. Многомерный анализ рейтинга вин с использованием геометрического подхода оказался математически более обоснованным, так как строится в соответствии с евклидовой метрикой без использования среднего арифметического, а сумма координат точек, которая лежит в основе расчета среднего арифметического, не соответствует ни одной из известных метрик. Предлагаемый подход являет-

Таблица 4. Парные коэффициенты корреляции Спирмена

Переменная	Все корреляции значимы при уровне $p < 0.050$		
	РМе	РГР	РСА
РМе	1.000	0.910	0.929
РГР	0.910	1.000	0.986
РСА	0.929	0.986	1.000

Примечание: РМе — рейтинг по медианам; РГР — рейтинг по геометрическому расстоянию; РСА — рейтинг по средним арифметическим баллам.

ся более информативным при анализе результатов сенсорной оценки вин, поскольку позволяет не только ранжировать вина по результатам их сенсорной оценки, но и комплексно анализировать структуру их сходства и различия относительно совокупности экспертных оценок с использованием методов классификационного анализа. Так, методом древовидной классификации проанализирована кластерная структура вин относительно предпочтений, выраженных экспертами в балльной шкале, и установлено наличие трех групп схожести вин по совокупности экспертных оценок и их взаимосвязь с распределением мест в рейтинге. Выделенные кластеры представляют собой группы вин, распределенные по качеству: кластер 2 представлен винами высокого качества, кластер 3 представлен винами среднего качества, а кластер 1 — винами низкого качества.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект № 20-33-90046) с использованием научного оборудования ЦКП “Эколого-аналитический центр” Кубанского государственного университета.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Jackson R.S. Wine Tasting: A Professional Handbook. 2nd Ed. San Diego, USA: Academic Press, 2009. 512 p.
2. Ribéreau-Gayon P., Glories Y., Maujean A., Dubourdieu D. The Chemistry of Wine: Stabilization and Treatments. Handbook of Enology. 2nd Ed. Chichester, England: John Wiley & Sons Ltd., 2006. 450 p.
3. Rolls E.T., Critchley H.D., Verhagen J.V., Kadohisa M. The representation of information about taste and odor in the orbitofrontal cortex // Chemosens. Percept. 2010. V. 3. P. 16.
4. Francis I.L., Newton, J.L. Determining wine aroma from compositional data // Aust. J. Grape Wine Res. 2005. V. 11. № 2. P. 114.
5. Jackson R.S. Oral Sensations (Taste and Mouthfeel). Wine Tasting: A Professional Handbook. 3rd Ed. San Diego, USA: Elsevier Inc., 2017. P. 103.
6. Parker R.M. Bordeaux: A Consumer's Guide to the World's Finest Wines. 4th Ed. London: Simon & Schuster, 2003. 1264 p.
7. Spence C. Perceptual learning in the chemical senses: A review // Int. Food Res. J. 2019. V. 123. P. 746.
8. Taladrid D., Lorente L., Bartolomé B., Moreno-Arribas M.V., Laguna L. An integrative salivary approach regarding palate cleansers in wine tasting // J. Texture Stud. 2019. V. 50. № 1. P. 75.
9. Rodrigues H., Parr W. Contribution of cross-cultural studies to understanding wine appreciation: A review // Int. Food Res. J. 2019. V. 115. P. 251.
10. Орлов А.И. Математические методы исследования и теория измерений // Заводск. лаборатория. Диагностика материалов. 2006. Т. 72. № 1. С. 67.
11. Барский Б.В., Соколов М.В. Средние величины, инвариантные относительно допустимых преобразований шкалы измерения // Заводск. лаборатория. Диагностика материалов. 2006. Т. 72. № 1. С. 59.
12. Цейтлин Н.А. Среднемедианный показатель положения выборки экспертных оценок // Заводск. лаборатория. Диагностика материалов. 2010. Т. 76. № 7. С. 69.
13. Стрижов В.В. Уточнение экспертных оценок, представленных в ранговых шкалах, с помощью измеряемых данных // Заводск. лаборатория. Диагностика материалов. 2011. Т. 77. № 7. С. 72.
14. Khalafyan A.A., Temerdashev Z.A., Akin'shina V.A., Yakuba Yu.F. Study of consistency of expert evaluations of wine sensory characteristics by positional analysis // Heliyon. 2021. V. 7. № 2. Article e06162.
15. Халафян А.А., Темердашев З.А., Якуба Ю.Ф., Киселева Н.В., Гугучкина Т.И., Антоненко М.В. Позиционный анализ как метод оценки согласованности экспертных оценок // Заводск. лаборатория. Диагностика материалов. 2015. Т. 81. № 12. С. 69.
16. Ruiz J., Kiene F., Belda I., Fracassetti D., Marquina D., Navascués E., Calderón F., Benito A., Rauhut D., Santos A., Benito S. Effects on varietal aromas during wine making: A review of the impact of varietal aromas on the flavor of wine // Appl. Microbiol. Biotechnol. 2019. V. 103. P. 7425.
17. Gardner D.M., Duncan S.E., Zoecklein B.W. Aroma characterization of petit manseng wines using sensory consensus training, SPME GC-MS, and electronic nose analysis // Am. J. Enol. Vitic. 2017. V. 68. P. 112.
18. Mirás-Avalos J.M., Bouzas-Cid Y., Trigo-Córdoba E., Orriols I., Falqué E. Effects of two different irrigation systems on the amino acid concentrations, volatile composition and sensory profiles of Godello Musts and wines // Foods. 2019. V. 8. Article 8040135.
19. Vilanova M., Genisheva Z., Masa A., Oliveira J. Correlation between volatile composition and sensory properties in Spanish Albarrío wines // Microchem. J. 2010. V. 95. P. 240.
20. Robinson A.L., Boss P.K., Solomon P.S., Trengove R.D., Heymann H., Ebeler S.E. Origins of grape and wine aroma. Part 1. Chemical components and viticultural impacts // Am. J. Enol. Vitic. 2014. V. 65. P. 1.
21. Versini G., Dellacassa E., Carlin S., Fedrizzi B., Magno F. Analysis of aroma compounds in wine. hyphenated tech-

- niques in grape and wine chemistry. Hoboken, NJ, USA: John Wiley & Sons, Ltd., 2008. P. 173.
22. *Temerdashev Z.A., Khalafyan A.A., Yakuba Yu.F.* Comparative assessment of amino acids and volatile compounds role in the formation of wines sensor properties by means of covariation analysis // *Heliyon*. 2019. V. 5. № 10. Article e02626.
23. *Wang Q.J., Spence C.* Wine complexity: An empirical investigation // *Food Qual. Prefer.* 2018. V. 68. P. 238.
24. *Халафян А.А., Якуба Ю.Ф., Темердашев З.А.* Применение классификационного анализа для оценки качества вин в номинальной шкале // *Журн. аналит. химии*. 2016. Т. 71. № 2. С. 212. (*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. V. 71. № 2. P. 205.)
25. *Халафян А.А., Якуба Ю.Ф., Темердашев З.А., Каунова А.А., Титаренко В.О.* Вероятностно-статистическое моделирование органолептических качеств виноградных вин // *Журн. аналит. химии*. 2016. Т. 71. № 11. С. 1196. (*Khalafyan A.A., Temerdashev Z.A., Kaunova A.A., Titarenko V.O., Yakuba Y.F.* Statistical-probability simulation of the organoleptic properties of grape wines // *J. Anal. Chem.* 2016. V. 71. № 11. P. 1138.)
26. *Халафян А.А., Темердашев З.А., Каунова А.А., Абакумов А.Г., Титаренко В.О., Акинъшина В.А., Ивановец Е.А.* Установление сортовой и региональной принадлежности белых вин с использованием нейросетевых технологий // *Журн. аналит. химии*. 2019. Т. 74. № 6. С. 464. (*Khalafyan A.A., Temerdashev Z.A., Kaunova A.A., Abakumov A.G., Titarenko V.O., Akin'shina V.A., Ivanovets E.A.* Determination of the wine variety and geographical origin of white wines using Neural Network Technologies // *J. Anal. Chem.* 2019. V. 74. № 6. P. 617.)
27. *Bouzas-Cid Y., Falqué E., Orriols I., Mirás-Avalos J.M.* Effects of irrigation over three years on the amino acid composition of Treixadura (*Vitis vinifera* L.) musts and wines, and on the aromatic composition and sensory profiles of its wines // *Food Chem.* 2018. V. 240. P. 707.
28. *Vilanova M., Escudero A., Graña M., Cacho J.* Volatile composition and sensory properties of *Vitis vinifera* red cultivars from North West Spain: Correlation between sensory and instrumental analysis // *Anal. Chim. Acta.* 2012. V. 720. P. 104.
29. *Hill T., Lewicki P.* Statistics Methods and Applications. Tulsa, OK: StatSoft, 2007. 719 p.
30. *Айвазян С.А., Мхитарян В.С.* Теория вероятностей и прикладная статистика. Т. 1. 2-е изд., испр. М.: ЮНИТИ-ДАНА, 2001. 656 с.