

ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДОВ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ В МАСС-СПЕКТРОМЕТРИЧЕСКОМ ЭКСПРЕСС-АНАЛИЗЕ МОЛОЧНОЙ ПРОДУКЦИИ

Чередникова А.А. (Институт аналитического приборостроения РАН), **Мазинг М.С.**
(Институт аналитического приборостроения РАН)

Научный руководитель – кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник, заведующий лабораторией, Зайцева А.Ю.

(Институт аналитического приборостроения РАН)

Научный руководитель – кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник, Кузьмин А.Г.

(Институт аналитического приборостроения РАН)

В работе рассматривается возможность анализа молочной продукции экспрессным методом газовой масс-спектрометрии с применением методов машинного обучения.

Введение. Проблема идентификации и подтверждения подлинности молочных продуктов остается актуальной в том числе потому, что фальсификация молока как пастеризованного, так и сырого не является редким явлением. В связи с чем возникает необходимость разработки и внедрения новых экспресс-методов анализа и идентификации молочной продукции [1].

Основная часть. В работе были исследованы 18 образцов молочной продукции: 10 образцов промышленного производства, 8 – индивидуальных фермерских хозяйств. Анализ образцов был произведен при помощи квадрупольного масс-спектрометра MS7-200 с прямым вводом газовой пробы [2]. Забор пробы газового состава исследуемых образцов происходил с использованием специально подготовленных медицинских шприцов, не имеющих фоновых примесей и не влияющих на результирующий спектр масс. Масс-спектрометрический анализ позволил сформировать индивидуальный масс-спектр, иными словами, «цифровой отпечаток» каждого образца, который идентифицирует образец.

Сравнительный анализ полученных масс-спектров выявив значительные различия в интенсивности массовых пиков в диапазоне 49-71 а.е.м. Дальнейший анализ проводился с участием выделенных массовых пиков и ближайших к ним значений.

В результате последующей обработки данных методом главных компонент было выявлено четкое разделение на кластеры двух исследуемых групп: образцов молока промышленного производства и индивидуальных фермерских хозяйств.

Выводы. Рассмотрена возможность качественного анализа молочной продукции экспресс-методом газовой масс-спектрометрии с применением машинного обучения. Были получены индивидуальные «цифровые отпечатки» каждого образца и выявлена тенденция к их кластеризации по степени схожести. Результаты свидетельствуют о перспективности предлагаемой методики и возможности ее внедрения в производственный цикл изготовления молочной продукции.

Список использованных источников:

1. Nadia M. Bogatko, Natalia V. Bukalova, Vasil P. Lyasota, et al., (2019). Some indices' determination of raw and pasteurized cow milk by ukrainian manufacturers using unique express methods. *Journal of Microbiology, Biotechnology and Food Sciences*, 9(1), 9–14. <https://doi.org/10.1134/S1061934816140094>

2. Manoilov V.V., Kuzmin A.G., Titov U.A. Extraction of information attributes from the massspectrometric signals of air. *J. Anal. Chem.*, 2016, 71(14), 1301–1308. <https://doi.org/10.1134/S1061934816140094>