

Contract nr. 651PED/2022
Cod proiect: PN-III-P2-2.1-PED-2021-1095

Recunoașterea amprentei vinului pe baza metodelor spectroscopice și a inteligenței artificiale (WineRec – AI)

Rezumatul Etapei 2: Dezvoltarea și optimizarea modelelor de recunoaștere a vinului cu ajutorul metodelor spectroscopice ^1H -NMR și Raman în coroborare cu Inteligența Artificială. Dezvoltarea și validarea aplicației web

Perioada de implementare: 01.01.2023 – 31.12.2023

1. Rezumat executiv al activităților realizate în perioada de implementare

În cadrul acestei etape au fost implementate modelele finale de recunoaștere a originii vinului pe baza datelor experimentale Raman, prin utilizarea unui set extins de date ilustrând o diversitate mai mare în ceea ce privește anul de producție și originea botanică (i.e. soiul strugurilor). Totodată, a fost investigat potențialul spectroscopiei $^1\text{H-NMR}$ în asociere cu diverse tehnici de învățare automată (e.g. Support Vector Machines, Logistic Regression, k-Nearest Neighbors) pentru dezvoltarea unor modele de predicție a anului producției, a originii geografice și a soiului, prin utilizarea unui set de 50 de probe de vin din România. În acest context, au fost testate și comparate diverse tehnici de preprocesare a datelor experimentale, dintre care aplicarea metodei de scalare a varianței, urmată de selecția variabilelor semnificative pe baza metodei celor mai mici pătrate a condus către obținerea celor mai precise rezultate, și anume scoruri de acuratețe mai mari de 94% în urma validării încrucișate efectuate pe 10 subseturi.

Pe baza acestor rezultate, a fost dezvoltată, optimizată și validată o nouă aplicație web pentru controlul autenticității vinului. Astfel, soluția software propusă în cadrul acestei etape de execuție reprezintă un instrument util și securizat pentru gestionarea bazei de date și pentru aplicarea modelelor de recunoaștere optimizate, bazate pe tehnici de învățare automată pentru a prezice originea probelor de vin necunoscute. Mai mult decât atât, aplicația web dezvoltată permite utilizatorilor autentificați să dezvolte noi modele de diferențiere bazate pe date experimentale de tip $^1\text{H-NMR}$ sau Raman, în funcție de opțiunile acestora, fără bariera expertizei tehnice, ci printr-o interfață intuitivă și prietenoasă.

Rezultatele obținute în această etapă de execuție a proiectului au fost diseminate astfel:

1. **2 articole ISI** publicate în jurnale aflate în prima quartilă (Q1) conform Web of Science.
2. **6 prezentări** la conferințe internaționale

2. Sumar al progresului

Nr. Crt.	Livrabile/indicatori planificați	Nr.	Livrabile/indicatori realizați	Nr.
1.	Articol ISI publicat	1	Articol ISI publicat	2
2.	Prezentări la conferințe internaționale	3	Prezentări la conferințe internaționale	6
3.	Modele de predicție optimizate pe baza datelor Raman	3	Modele de predicție optimizate pe baza datelor Raman	5
4.	Modele de recunoaștere pe baza datelor $^1\text{H-NMR}$	3	Modele de recunoaștere pe baza datelor $^1\text{H-NMR}$	3
5.	Modele de predicție optimizate pe baza datelor $^1\text{H-NMR}$	3	Modele de predicție optimizate pe baza datelor $^1\text{H-NMR}$	3
6.	Pagină web a proiectului actualizată	1	Pagină web a proiectului actualizată	1
7.	Bază de date	1	Bază de date	1
8.	Aplicație web optimizată și validată	1	Aplicație web optimizată și validată	1

Activitatea de diseminare a rezultatelor este prezentată, în detaliu, astfel:

I. Publicarea a două articole în jurnale aflate în prima quartilă (Q1 – Web of Science)

1. Pirnau, A., Feher, I., Sârbu, C., Hategan, A. R., Guyon, F., Magdas, D. A. (2022). Application of Fuzzy algorithms in conjunction with ^1H -NMR spectroscopy for alcoholic beverages differentiation. Journal of the Science of Food and Agriculture. 103(4), 1727–1735. <https://doi.org/10.1002/jsfa.12402>
2. Hategan, A. R., David, M., Berghian-Grosan, C., Magdas, D. A. (2023) Geographical and Varietal Origin Differentiation of Alcoholic Beverages through the Association between FT-Raman Spectroscopy and Advanced Data Processing Strategies, Food Chemistry: X, 100902. <https://doi.org/10.1016/j.fochx.2023.100902>

II. Participarea la conferințe internaționale

1. Hategan, A. R., Pirnau, A., Cozar, B., Cinta-Pinzaru, S., Guyon, F., Magdas, D. A. Fusing ^1H -NMR and Raman experimental data for a new wine recognition strategy. 3rd Food Chemistry Conference, 10-12 October 2023, Dresden, Germany.
2. Hategan, A. R., Pirnau, A., Magdas, D. A. Applications of Artificial Intelligence in recognizing the origin of wine based on ^1H -NMR spectroscopy. 14th International Conference PIM – Processes in Isotopes and Molecules, 19-22 September 2023, Cluj-Napoca, Romania.
3. Hategan, A. R., Pirnau, A., Magdas, D. A. Application of Machine Learning techniques for assessing the origin of wine based on ^1H -NMR spectroscopy. 25th International Conference Materials, Methods & Technologies, 17-20 August 2023, Burgas, Bulgaria.
4. Magdas, D. A., Hategan, A. R. Raman spectroscopy – an effective tool for wine differentiation. 44th World Congress of Vine and Wine, 5-9 June 2023, Jerez de la Frontera, Cadiz, Spain.

III. Lecții invitate

1. Magdas, D. A., Hategan, A. R., David, M., Berghian-Grosan, C. Application of Raman spectroscopy as a rapid tool for beverages and food authentication. International Bio-Inspiration N.I.C.E. Summer Event, 21-23 June 2023, Nice, France. The conference is endorsed by CNRS and IUPAC.
2. Magdas, D. A. Applications of Raman spectroscopy in wine differentiation, European Reference Centre for Control in the Wine Sector MSDL meeting, JRC-Geel, 7-8 February 2023, Geel, Belgium.

Director Proiect,
MAGDAS Dana-Alina

