

## **Streszczenie**

### **Tytuł pracy: Zastosowanie spektroskopii FT-IR do identyfikacji oraz wykrywania zafalszowań wybranych napojów spirytusowych**

Celem badań przeprowadzonych w ramach niniejszej pracy było zdefiniowanie statystycznie istotnych zależności pomiędzy danymi spektralnymi próbek różnych napojów spirytusowych typu wódka i whisky oraz pomiędzy danymi spektralnymi, a wynikami oznaczeń standardowych wykonanych dla danej próbki. Przeprowadzone pomiary spektralne i referencyjne dostarczyły danych do opracowania dwóch rodzajów modelowych korelacji: dyskryminacyjnej i referencyjnej. Skonstruowano statystyczne modele dyskryminacyjne pozwalające na identyfikację surowca z jakiego wyprodukowano wódkę oraz modele umożliwiające ustalenie pochodzenia whisky. Opracowano również statystyczne modele referencyjne pozwalające na analizę jakościowo-ilościową (etanol, metanol, aldehydy, fuzle, estry) handlowych wódek i whisky w oparciu wyłącznie o dane spektralne zawarte w widmach IR dowolnych, nieznanych próbek tych napojów. Najwyższe współczynniki korelacji i zdolności predykcyjne uzyskano dla zawartości etanolu, estrów oraz fuzli.

Słowa kluczowe: spektroskopia FT-IR, wódka, whisky, model dyskryminacyjny, model referencyjny, PLS, PCR, zafalszowania, identyfikacja, jakość napojów spirytusowych

## **Summary**

### **Title: Identification and determination of adulterations of selected spirit beverages by FT-IR spectroscopy**

The aim of this study was to determine statistically significant cause-effect relationship between spectral data itself and spectral data and the results of standard analysis conducted for spirit beverages e.g. vodkas and whiskies. Results obtained allowed construction of two type of models: discriminant and reference. Constructed discriminant models allowed identification of the raw material from which vodka was produced and models for determining the origin of whisky. Reference models allowed quality-quantitative analysis (ethanol, methanol, aldehydes, fusels, esters) of commercial vodkas or whiskies based exclusively on the spectral data contained in the IR spectra of unknown samples of these beverages. The highest coefficients of correlation and predictive capacities were obtained for the content of ethanol, esters and fuzels.

Key-words: FT-IR spectroscopy, vodka, whisky, discriminant model, reference model, PLS, PCR, adulteration, identification, quality of alcoholic beverages