

Válasz
Prof. Dr. Telcs Andrásnak, az MTA doktorának,
Ladányi Márta
Statisztikai modellezési módszerek az agrártudományi kutatásokban
c. akadémiai doktori (DSc) értekezéséről készített bírálatára

Köszönöm Opponensem, dr. Telcs András professzor úr idejét és szakértelmét, melyet doktori értekezésem bírálatára fordított. Köszönöm pozitív értékelését, méltatását, és a tézismegfogalmazásra vonatkozó értékes megjegyzését. Külön köszönöm, hogy értékelte publikációs tevékenységem, illetve a számomra oly kedves oktatói tevékenységemet is.

Bírálóm megjegyzi, hogy nem megfelelő egy tézis megfogalmazásánál, ha azt állítjuk, hogy az alkalmazott módszer alkalmas egy adott vizsgálat eredményes lefolytatására, ha ez egy ismert módszerről szól. Ez csak akkor lenne megalapozott, ha az alkalmazás nagyon szokatlan, a megalkotók elgondolásától, a szokásos alkalmazástól távoli, eddig nem eredményesen vizsgált területen hoz áttörést.

Az idézett bírálat a 7. tézisre vonatkozik.

Megmutattam, hogy a véletlen erdő, illetve a támogatóvektor-gépek alkalmas módszerek a borok 1H NMR-alapú metabolizmusadatai alapján a fajták és régiók szerinti magas szintű megkülönböztetésre. A kidolgozott modelleket Egerből és Villányból 2005-ből és 2006-ból származó Cabernet Sauvignon, Kékfrankos, Merlot és Pinot Noir borokra alkalmaztam. A módszerek segítségével azonosíthatóvá vált a borok megkülönböztetése szempontjából legfontosabb hét összetevő (Nyitrai Sárdy és mtsai, 2022, Q1).

Nyitrai Sárdy, Á. D., Ladányi, M., Varga, Z., Szövényi, Á. P., & Matolcsi, R. (2022). The Effect of Grapevine Variety and Wine Region on the Primer Parameters of Wine Based on 1H NMR-Spectroscopy and Machine Learning Methods. Diversity, 14(2), 74. <https://doi.org/10.3390/d14020074>

A bíráló megjegyzésével egyfelől messzemenően egyetértek, és ha szükségesnek látja, elfogadom a tézispont módosítását például olyan formában, hogy (kiegészítés aláhúzással)

“Megmutattam, hogy az általam fejlesztett véletlen erdő, illetve a támogatóvektor-gépek modellek alkalmasak módszerek a borok 1H NMR-alapú metabolizmusadatai alapján a fajták és régiók szerinti magas szintű megkülönböztetésre.”

Másfelől szeretném bemutatni, mennyiben volt újdonság a fajták és régiók szerinti, véletlenerdő-, illetve támogatóvektorgépek alkalmazásával fejlesztett 1H NMR-metabolizmusadatok-alapú klasszifikációnk.

Kiterjedt szakirodalmi keresésem során ugyan számos olyan publikációt találtam, amely borok klasszifikációjára irányult, de a véletlen erdő, valamint a támogatóvektor-gépek fajta és régió szerinti egy modellel való klasszifikációja nem tűnt elterjedtnak. A bírálatot kézhez véve a korábbi publikációk kiegészítésekként igyekeztem a legfrissebb bormintákon alapuló klasszifikációs kutatási eredményeknek is utána járni.

40 releváns publikációt listáztam, melyek egyike a saját munkánk volt.

A maradék 39 közül csak 5 esetben alkalmazták a véletlen erdő módszert (a többi túlnyomó többségben PLS-DA-t, vagy PCA-t), amelyek közül négy esetében a klasszifikáció nem 1H NMR-alapú metabolizmusadatok alapján történt, e négy közül három a dolgozatom benyújtását követően jelent meg.

Egy módszerünkhöz és eredményeinkhez leghasonlóbb, a tézisbeli eredményeinket közlő cikkünkben is hivatkozott publikáció (Mascellani és mtsai, 2020) 917 cseh eredetű bormintából származó ¹H NMR spektrum-metaadatot dolgoz fel. A borokat a maradék cukortartalmat is figyelembe vevő hat típusba (száraz, félszáraz és édes fehér (<12 g/L, <45 g/L, >45 g/L), rozé (<45 g/L), száraz vörös (<4 g/L), egyéb) sorolták. A borok négy régióból származtak, illetve 13 fajtát foglaltak magukba. A véletlenerdő-módszerrel először típusok szerinti osztályozást végeztek. Külön modellel választották szét a fajtákat. A nehezebben megkülönböztethető két fajtára (Chardonnay és Pinot blanc) egy harmadik modellel fejlesztettek. A régiókat nem véletlen erdővel, hanem parciális legkisebb négyzetek-diszkriminanciaanalízissel választották szét.

A mi munkánk annyiban különbözött a fentitől, hogy mi valamivel kisebb (és kiegyensúlyozatlan) adatsorral (861 mintaelem), csupán két év terméséből származó négy fajtával és két régióval dolgoztunk, de a fajta-régió klasszifikációt egyszerre végeztük. Ezen kívül nem csupán véletlenerdő-módszert, hanem három másikat is alkalmaztunk (támogatóvektor-gépek, neurális hálózatok, lineáris diszkriminancia analízis), ezek közül a két elsőt emeltük ki mint sikeres modelleket eredményező módszert.

A három, dolgozatomnál később megjelent publikációk közül Chen és munkatársai (2024) közleményében régiók szerinti klasszifikációt végeztek véletlen erdő, támogatatóvektor-gépek, illetve K-legközelebbi szomszéd módszerekkel, de nem ¹H NMR-alapú metabolizmusadatok, hanem a borok ásványianyag-tartalma alapján.

Hasonlóan, Ma és munkatársai (2025), valamint Tian és munkatársai (2025) is alkalmaztak gépi tanulási módszereket borok régiók szerinti klasszifikációjára (PCA, PLS-DA, RF, ANN, SVM, R-Pa), ám ők is az ásványianyag-tartalmuk, illetve stabil izotópok alapján. Az utóbbi szerzők kutatócsoportjának egy korábbi publikációjában is (Wu és munkatársai, 2019) már szerepeltek ásványianyag-tartalom, illetve stabil izotópokon alapuló régióklasszifikáció gépi tanulási módszerek alkalmazásával (ANN, DA és RF), de akkor az RF alulteljesített a neurális hálózatok teljesítményével való összehasonlításban.

1. Kexiang Chen, Hongtu Xue, Qi Shi, Fan Zhang, Qianyun Ma, Jianfeng Sun, Yaqiong Liu, Yiwei Tang, Wenxiu Wang (2024) Geographical identification of Chinese wine based on chemometrics combined with mineral elements, volatile components and untargeted metabonomics, *Food Chemistry: X*, 22 (101412) <https://doi.org/10.1016/j.fochx.2024.101412>
2. Ling Tian and Siheng Zheng and Henggang Zhou and Ying Yang and Hai Lu (2025) Mapping the Origins of Chinese Grape Wine: Unlocking Geographical Regions Through Chemometrics, Stable Isotopes, and Multielement Analysis. *Jurnal of Food Quality*. 2025(5556138) <https://doi.org/10.1155/jfq/5556138>
3. Ma, Y.; Li, Y.; Shao, F.; Lu, Y.; Meng, W.; Rogers, K.M.; Sun, D.; Wu, H.; Peng, X. Advancing Stable Isotope Analysis for Alcoholic Beverages' Authenticity: Novel Approaches in Fraud Detection and Traceability. *Foods* 2025, 14, 943. <https://doi.org/10.3390/foods14060943>
4. Mascellani, Gokce Hoca, Marek Babisz, P. Krška and P. Kloucek, J. Havlík (2020) ¹H NMR chemometric models for classification of Czech wine type and variety. *Food Chemistry*, 339(127852) <https://doi.org/10.1016/j.foodchem.2020.127852>
5. Wu H, Tian L, Chen B, Jin B, Tian B, Xie L, Rogers KM, Lin G. Verification of imported red wine origin into China using multi isotope and elemental analyses. *Food Chem.* 2019(301:125137) <https://doi.org/10.1016/j.foodchem.2019.125137>

További irodalom

6. Anastasiadi M, Zira A, Magiatis P, Haroutounian SA, Skaltsounis AL, Mikros E. ¹H NMR-based metabonomics for the classification of Greek wines according to variety, region, and vintage. Comparison with HPLC data. *J Agric Food Chem.* 2009 Dec 9;57(23):11067-74. doi: 10.1021/jf902137e. PMID: 19904930.
7. Bambina, P., Spinella, A., Lo Papa, G., Chillura Martino, D. F., Lo Meo, P., Cinquanta, L., & Conte, P. (2024). ¹H-NMR Spectroscopy Coupled with Chemometrics to Classify Wines According to Different Grape Varieties and Different Terroirs. *Agriculture*, 14(5), 749. <https://doi.org/10.3390/agriculture14050749>

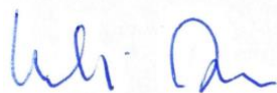
8. Barátossy, G., Berinkeiné Donkó, M., Csikorné Vásárhelyi, H., Héberger, K., & Rácz, A. (2021). Comprehensive Classification and Regression Modeling of Wine Samples Using ¹H NMR Spectra. *Foods*, 10(1), 64. <https://doi.org/10.3390/foods10010064>
9. Becchi PP, Lolli V, Zhang L, Pavanello F, Caligiani A, Lucini L. Integration of LC-HRMS and ¹H NMR metabolomics data fusion approaches for classification of Amarone wine based on withering time and yeast strain. *Food Chem X*. 2024 Jul 2;23:101607. doi: 10.1016/j.fochx.2024.101607. PMID: 39071933; PMCID: PMC11279979.
10. Boran Hu B, Yaqing Yue, Yong Zhu, Wen Wen, Fengmin Zhang, Jim W. Hardie (2015) Proton Nuclear Magnetic Resonance- Spectroscopic Discrimination of Wines Reflects Genetic Homology of Several Different Grape (V. vinifera L.) Cultivars. *PLOS ONE* PMID: 22397579. <https://doi.org/10.1371/journal.pone.0142840>
11. Caruso M, Galgano F, Castiglione Morelli MA, Viggiani L, Lencioni L, Giussani B, Favati F. Chemical profile of white wines produced from 'Greco bianco' grape variety in different Italian areas by nuclear magnetic resonance (NMR) and conventional physicochemical analyses. *J Agric Food Chem*. 2012 Jan 11;60(1):7-15. doi: 10.1021/jf204289u. Epub 2011 Dec 30. PMID: 22148282.
12. Denchai, S., Sasomsin, S., Prakitchaiwattana, C., Phuenpong, T., Homyog, K., Mekboonsonglarp, W., & Settachaimongkon, S. (2023). Influence of Different Types, Utilization Times, and Volumes of Aging Barrels on the Metabolite Profile of Red Wine Revealed by ¹H-NMR Metabolomics Approach. *Molecules*, 28(18), 6716. <https://doi.org/10.3390/molecules28186716>
13. García-Aguilera, M. E., Delgado-Altamirano, R., Villalón, N., Ruiz-Terán, F., García-Garnica, M. M., Ocaña-Ríos, I., Rodríguez de San Miguel, E., & Esturau-Escofet, N. (2023). Study of the Stability of Wine Samples for ¹H-NMR Metabolomic Profile Analysis through Chemometrics Methods. *Molecules*, 28(16), 5962. <https://doi.org/10.3390/molecules28165962>
14. Gerginova D, Simova S. Chemical Profiling of Wines Produced in Bulgaria and Distinction from International Grape Varieties. *ACS Omega*. 2023 May 16;8(21):18702-18713. doi: 10.1021/acsomega.3c00636. PMID: 37273597; PMCID: PMC10233681.
15. Godelmann R, Fang F, Humpfer E, Schütz B, Bansbach M, Schäfer H, Spraul M. Targeted and nontargeted wine analysis by (1)h NMR spectroscopy combined with multivariate statistical analysis. Differentiation of important parameters: grape variety, geographical origin, year of vintage. *J Agric Food Chem*. 2013 Jun 12;61(23):5610-9. doi: 10.1021/jf400800d. Epub 2013 May 29. PMID: 23682581.
16. Gougeon, L., Da Costa, G., Le Mao, I. et al. Wine Analysis and Authenticity Using ¹H-NMR Metabolomics Data: Application to Chinese Wines. *Food Anal. Methods* 11, 3425–3434 (2018). <https://doi.org/10.1007/s12161-018-1310-2>
17. Hategan AR, David M, Pirnau A, Cozar B, Cinta-Pinzaru S, Guyon F, Magdas DA (2024) Fusing ¹H NMR and Raman experimental data for the improvement of wine recognition models, *Food Chemistry*, 458(140245) <https://doi.org/10.1016/j.foodchem.2024.140245>.
18. Hategan, A. R., Pirnau, A., & Magdas, D. A. (2025). Applications of Machine Learning for Wine Recognition Based on ¹H-NMR Spectroscopy. *Beverages*, 11(2), 45. <https://doi.org/10.3390/beverages11020045>
19. Herbert-Pucheta JE, Paz Austin-Quñones, Francisco Rodríguez-González, Cristina Pino-Villar, Guadalupe Flores-Pérez, Santiago José Arguello-Campos and Victor Villalobos Arámbula. (2023) Current trends in ¹H-NMR based metabolomics. *BIO Web Conf.* 56(02001), 43rd World Congress of Vine and Wine. <https://doi.org/10.1051/bioconf/20235602001>
20. Herbert-Pucheta, J. E., Lozada-Ramírez, J. D., Ortega-Regules, A. E., Hernández, L. R., & Anaya de Parrodi, C. (2021). Nuclear Magnetic Resonance Metabolomics with Double Pulsed-Field-Gradient Echo and Automatized Solvent Suppression Spectroscopy for Multivariate Data Matrix Applied in Novel Wine and Juice Discriminant Analysis. *Molecules*, 26(14), 4146. <https://doi.org/10.3390/molecules26144146>
21. Herbert-Pucheta, J. E., Lozada-Ramírez, J. D., Ortega-Regules, A. E., Hernández, L. R., & Anaya de Parrodi, C. (2021). Nuclear Magnetic Resonance Metabolomics with Double Pulsed-Field-Gradient Echo and Automatized Solvent Suppression Spectroscopy for Multivariate Data Matrix Applied in Novel Wine and Juice Discriminant Analysis. *Molecules*, 26(14), 4146. <https://doi.org/10.3390/molecules26144146>
22. Hu, B., Gao, J., Xu, S. et al. Quality evaluation of different varieties of dry red wine based on nuclear magnetic resonance metabolomics. *Appl Biol Chem* 63, 24 (2020). <https://doi.org/10.1186/s13765-020-00509-x>
23. Imparato G, Di Paolo E, Braca A, Lamanna R. Nuclear magnetic resonance profiling of wine blends. *J Agric Food Chem*. 2011 May 11;59(9):4429-34. doi: 10.1021/jf200587n. Epub 2011 Apr 1. PMID: 21425876.
24. Jiangyu Z, Hu, Boran, Lu, Jie and Xu, Shaochen. "Analysis of Metabolites in Cabernet Sauvignon and Shiraz Dry Red Wines from Shanxi by ¹H NMR Spectroscopy Combined with Pattern Recognition Analysis" *Open Chemistry*, vol. 16, no. 1, 2018, pp. 446-452. <https://doi.org/10.1515/chem-2018-0052>
25. Le Mao I, Grégory Da Costa, Guillaume Leleu, Tristan Richard (2024) Monitoring red wine maturation in oak barrels using ¹H NMR-based metabolomics *OENO One* 58(2) <https://doi.org/10.20870/oeno-one.2024.58.2.7465>

26. Le Mao, I., Da Costa, G., & Richard, T. (2023). *¹H-NMR metabolomics for wine screening and analysis*. *OENO One*, 57(1), 15–31. <https://doi.org/10.20870/oeno-one.2023.57.1.7134>
27. Le Mao, I., Martin-Pernier, J., Bautista, C., Lacampagne, S., Richard, T., & Da Costa, G. (2021). *¹H-NMR Metabolomics as a Tool for Winemaking Monitoring*. *Molecules*, 26(22), 6771. <https://doi.org/10.3390/molecules26226771>
28. Le Mao I, Grégory Da Costa, Guillaume Leleu, Tristan Richard (2024) Monitoring red wine maturation in oak barrels using ¹H NMR-based metabolomics. *OENO One* 58(2) <https://doi.org/10.20870/oeno-one.2024.58.2.7465>
29. Lee JE, Hong YS, Lee CH. Characterization of fermentative behaviors of lactic acid bacteria in grape wines through ¹H NMR- and GC-based metabolic profiling. *J Agric Food Chem*. 2009 Jun 10;57(11):4810-7. doi: 10.1021/jf900502a. PMID: 19441818.
30. López-Rituerto E, Savorani F, Avenzoza A, Busto JH, Peregrina JM, Engelsens SB. Investigations of La Rioja terroir for wine production using ¹H NMR metabolomics. *J Agric Food Chem*. 2012 Apr 4;60(13):3452-61. doi: 10.1021/jf204361d. Epub 2012 Mar 21.
31. Mazzei P, Spaccini R, Francesca N, Moschetti G, Piccolo A. Metabolomic by ¹H NMR spectroscopy differentiates "Fiano di Avellino" white wines obtained with different yeast strains. *J Agric Food Chem*. 2013 Nov 13;61(45):10816-22. doi: 10.1021/jf403567x. Epub 2013 Oct 30. PMID: 24117410.
32. Papotti G, Bertelli D, Graziosi R, Silvestri M, Bertacchini L, Durante C, Plessi M. Application of one- and two-dimensional NMR spectroscopy for the characterization of Protected Designation of Origin Lambrusco wines of Modena. *J Agric Food Chem*. 2013 Feb 27;61(8):1741-6. doi: 10.1021/jf302728b. Epub 2012 Sep 18. PMID: 22967082.
33. Pereira, G. E., Gaudillère, J.-P., van Leeuwen, C., Hilbert, G., Maucourt, M., Deborde, C., Moing, A., Rolin, D. (2007). *¹H-NMR metabolic profiling of wines from three cultivars, three soil types and two contrasting vintages*. *OENO One*, 41(2), 103–109. <https://doi.org/10.20870/oeno-one.2007.41.2.850>
34. Ranaweera, R. K. R., Capone, D. L., Bastian, S. E. P., Cozzolino, D., & Jeffery, D. W. (2021). *A Review of Wine Authentication Using Spectroscopic Approaches in Combination with Chemometrics*. *Molecules*, 26(14), 4334. <https://doi.org/10.3390/molecules26144334>
35. Son HS, Hwang GS, Kim KM, Ahn HJ, Park WM, Van Den Berg F, Hong YS, Lee CH. Metabolomic studies on geographical grapes and their wines using ¹H NMR analysis coupled with multivariate statistics. *J Agric Food Chem*. 2009 Feb 25;57(4):1481-90. doi: 10.1021/jf803388w. PMID: 19192969.
36. Son HS, Kim KM, van den Berg F, Hwang GS, Park WM, Lee CH, Hong YS. ¹H nuclear magnetic resonance-based metabolomic characterization of wines by grape varieties and production areas. *J Agric Food Chem*. 2008 Sep 10;56(17):8007-16. doi: 10.1021/jf801424u. Epub 2008 Aug 16. PMID: 18707121.
37. Viskić, M., Bandić, L. M., Korenika, A.-M. J., & Jeromel, A. (2021). *NMR in the Service of Wine Differentiation*. *Foods*, 10(1), 120. <https://doi.org/10.3390/foods10010120>
38. Xu, Shaochen, Zhu, Jiangyu, Zhao, Qi, Gao, Jin, Zhang, Huining and Hu, Boran. "Quality evaluation of Cabernet Sauvignon wines in different vintages by ¹H nuclear magnetic resonance-based metabolomics" *Open Chemistry*, vol. 19, no. 1, 2021, pp. 385-399. <https://doi.org/10.1515/chem-2020-0126>
39. 杜媛媛 and 白国允 and 张许 and 刘买利 (2007) Classification of Wines Based on Combination of ¹H NMR Spectroscopy and Principal Component Analysis. <https://api.semanticscholar.org/CorpusID:93723154>

Remélem, sikerült Opponensemét meggyőzőn munkánk újdonságáról, illetve amennyiben eredeti formájában nem, a javasolt átfogalmazással elfogadja tézisemet.

Még egyszer tisztelettel köszönöm Opponensem véleményét.

Budapest, 2025. szeptember 8.



Ladányi Márta
egyetemi tanár
Magyar Agrár- és Élettudományi Egyetem
Matematika és Természettudományi Alapok Intézet
Alkalmazott Statisztika Tanszék