



Серия «Биология. Экология»
2025. Т. 54. С. 3–22
Онлайн-доступ к журналу:
<http://izvestiabio.isu.ru/ru>

ИЗВЕСТИЯ
Иркутского
государственного
университета

Научная статья

УДК 543.422:543.06:66.095.2
<https://doi.org/10.26516/2073-3372.2025.54.3>

Спектральные маркеры гидротермической переработки древесных отходов хвойных пород как инструмент экологически безопасных технологий

А. В. Новиков, Д. А. Ярыгин, В. Л. Михайленко, А. А. Приставка,
Г. В. Юринова, В. П. Саловарова*

Иркутский государственный университет, г. Иркутск, Россия
E-mail: artem.ru88@mail.ru

Аннотация. Исследована возможность использования УФ-видимой спектроскопии в сочетании с анализом главных компонент (РСА) для идентификации спектральных маркеров технологического контроля гидротермической переработки древесных отходов хвойных пород. С применением метода РСА в сочетании с девятью способами математической предобработки спектральных данных изучено влияние температурных режимов (20, 80 и 121 °С) и природы экстрагента на разделение образцов в пространстве главных компонент. Наилучший результат, обеспечивающий наиболее чёткую кластеризацию, показала нормировка по максимуму поглощения (Max Scaling), при этом первые две компоненты (PC1, PC2) описывают 79,40 % общей дисперсии. Установлено, что PC2 коррелирует с природой экстрагента и отражает селективность жидкостно-жидкостного фракционирования, тогда как PC1 демонстрирует систематическую температурную зависимость, связанную с изменением состава экстрактивных веществ. Анализ нагрузок дал возможность связать положительные значения PC1 с вкладом соединений, характерных для лигнанов (область 227–230 нм), отрицательные – со стильбенами и флавоноидами, а плато в нагрузках PC2 – с гидрофильной матрицей экстракта. Полученные результаты подтверждают принципиальную возможность использования УФ-спектрального профилирования как основы для разработки экспресс-методов технологического мониторинга переработки лигноцеллюлозного сырья. Впервые показана возможность использования положения образца в пространстве PC1–PC2 в качестве операционного индикатора эффективности гидротермической обработки и жидкостно-жидкостного фракционирования.

Ключевые слова: УФ-видимая спектроскопия, анализ главных компонент, древесные отходы, хеометрика, гидротермическая обработка, биорефайнинг.

Для цитирования: Спектральные маркеры гидротермической переработки древесных отходов хвойных пород как инструмент экологически безопасных технологий / А. В. Новиков, Д. А. Ярыгин, В. Л. Михайленко, А. А. Приставка, Г. В. Юринова, В. П. Саловарова // Известия Иркутского государственного университета. Серия Биология. Экология. 2025. Т. 54. С. 3–22. <https://doi.org/10.26516/2073-3372.2025.54.3>

© Новиков А. В., Ярыгин Д. А., Михайленко В. Л., Приставка А. А., Юринова Г. В., Саловарова В. П., 2025

*Полные сведения об авторах см. на последней странице статьи.
For complete information about the authors, see the last page of the article.

Spectral Markers of Hydrothermal Treatment of Coniferous Wood Waste as a Tool for Environmentally Sustainable Technologies

A. V. Novikov, D. A. Yarygin, V. L. Mikhailenko, A. A. Pristavka,
G. V. Yurina, V. P. Salovarova*

Irkutsk State University, Irkutsk, Russian Federation

Abstract. Lignocellulosic waste is a valuable resource for biologically active compounds in biotechnological processing. Hydrothermal extraction and subsequent fractionation represent key stages whose efficiency depends on temperature, time, and solvent type. Process optimization and quality control require objective reference points to assess extract composition at different stages. Traditional analytical methods (chromatography, mass spectrometry) are labor-intensive and unsuitable for operational control. UV-Vis spectroscopy (200–400 nm) offers a rapid alternative, as absorption spectra reflect aromatic and conjugated systems characteristic of lignans, flavonoids, and other wood-derived bioactives. However, spectral interpretation of complex mixtures is hindered by band overlap, necessitating data preprocessing and multivariate analysis such as principal component analysis (PCA) to extract informative spectral markers. This study evaluated UV-Vis spectroscopy for identifying reference points in wood waste processing—specifically, spectral markers correlating with technological parameters (extraction temperature, solvent type) and fraction bioactivity. Aqueous extracts from pine and larch sawdust were obtained at three temperatures (20°C, 80°C, 121°C) and fractionated with hexane and chloroform. UV-Vis spectra of all fractions were recorded, and fourteen normalization methods were compared; Max Scaling proved most effective for subsequent PCA. The first two principal components (PC1 and PC2) cumulatively explained 79.40% of total variance, enabling meaningful interpretation. Score analysis revealed that PC2 encodes the fundamental chemical difference determined by extractant nature: primary aqueous extracts clustered at high positive PC2 values, while hexane and chloroform fractions grouped in the negative region. Thus, PC2 serves as a reliable marker for monitoring liquid-liquid fractionation efficiency. PC1 proved sensitive to variations within solvent groups, particularly hydrothermal treatment temperature. A clear temperature-dependent trend in PC1 scores was observed for aqueous extracts. Notably, hexane fractions also exhibited pronounced temperature dependence along PC2, shifting from positive (+1.87 for W1.H) to sharply negative values (-2.80 for W3.H), suggesting a change in the prevailing extraction mechanism of lipophilic components with increasing severity. Loading analysis provided spectral interpretation: PC1 displayed a bipolar profile (positive at 200–215 nm, negative at 235–300 nm), likely reflecting distinct chromophore pools—hydrophilic lignans versus more lipophilic stilbenes or flavonoids. PC2 showed a broad positive plateau (210–260 nm), interpreted as a marker of the hydrophilic matrix retained after organic solvent extraction. The established correlations between technological parameters and spectral patterns in PC1-PC2 space form a basis for rapid control methods. A sample's position in this space enables operational assessment of both fractionation efficiency and hydrothermal treatment adequacy—critical for standardizing biotechnological processing of wood waste.

Keywords: UV-visible spectroscopy, principal component analysis, wood waste, chemometrics, hydrothermal treatment, biorefining.

For citation: Novikov A.V., Yarygin D.A., Mikhailenko V.L., Pristavka A.A., Yurina G.V., Salovarova V.P. Spectral Markers of Hydrothermal Treatment of Coniferous Wood Waste as a Tool for Environmentally Sustainable Technologies. *The Bulletin of Irkutsk State University. Series Biology. Ecology*, 2025, vol. 54, pp. 3-22. <https://doi.org/10.26516/2073-3372.2025.54.3> (in Russian)

Введение

Рациональное использование древесных отходов является актуальной задачей в условиях перехода к ресурсосберегающим технологиям. Древесные отходы рассматриваются как крупнотоннажный возобновляемый ресурс

для получения ценных продуктов в рамках концепции биорефайнинга [de Jong, Jungmeier, 2015; Petridis, Smith, 2018]. Гидротермическая экстракция и последующее фракционирование являются ключевыми стадиями переработки лигноцеллюлозного сырья, позволяющими извлекать фенольные и ароматические соединения. Эффективность этих процессов определяется температурой обработки, временем воздействия и природой экстрагента [Insight ... , 2016; Two ... , 2025]. Выбор оптимальных условий экстракции позволяет не только увеличить выход целевых компонентов, но и предотвратить образование ингибиторов последующих биотехнологических стадий [Halдар, Purkait, 2021; Inhibitor ... , 2022]. Однако для эффективного управления процессом и обеспечения стабильного качества продуктов требуются реперные точки – информативные показатели, позволяющие оперативно оценивать состав сырья на разных стадиях [Machine ... , 2021; Review ... , 2023].

Традиционные методы анализа (хроматография, масс-спектрометрия) обеспечивают высокую точность, но не всегда пригодны для оперативного технологического контроля [Visible/near ... , 2020; Systematic ... , 2024].

В этой связи методы молекулярной спектроскопии, в частности ультрафиолетовая-видимая спектроскопия (УФ-Вид), являются перспективной альтернативой. Спектры поглощения в области 200–400 нм несут информацию об ароматических и сопряженных системах, характерных для основных классов экстрактивных веществ древесины – лигнанов, флавоноидов, стильбенов [UV-visible ... , 2020]. Высокая скорость анализа и чувствительность к ароматическим хромофорным системам делают этот метод привлекательным для технологического контроля.

Однако прямое использование УФ-Вид спектров сложных природных смесей затруднено из-за сильного перекрытия индивидуальных полос поглощения. Преодолеть это ограничение позволяет сочетание спектроскопии с хемометрическими методами, такими как анализ главных компонент (Principal Component Analysis, PCA). Применение PCA позволяет снизить размерность исходных данных, выявить группировки образцов и интерпретировать скрытые спектральные паттерны, связанные с их химическим составом [Beattie, Esmonde-White, 2021]. Успешное применение подобного подхода продемонстрировано, например, для количественного определения лигнина в органических экстрактах [UV-Vis ... , 2018], классификации растительных танинов [dos Santos Grasel, Ferrão, Wolf, 2016] и прогнозирования выхода полигидроксиалканоатов [Online ... , 2015; Visible/near ... , 2020].

Следует отметить, что исследования, направленные на систематическую идентификацию специфических спектральных реперных точек, которые напрямую связывали бы УФ-Вид профили с ключевыми технологическими параметрами переработки древесных отходов (температура гидротермической обработки, природа экстрагента при фракционировании), остаются фрагментарными. Рабочая гипотеза нашего исследования состоит в том, что спектральные различия, обусловленные температурой и природой экстрагента, могут быть объективно идентифицированы в пространстве главных компонент и интерпретированы как маркеры технологического процесса.

Целью настоящей работы является исследование взаимосвязи между условиями гидротермической обработки, природой экстрагента и УФ-видимыми спектрами экстрактов древесных отходов с использованием РСА для выделения спектральных маркеров технологического контроля.

Материалы и методы

Общая схема исследования представлена на рис. 1.



Рис. 1. Схема исследования древесных отходов методом УФ-Вид спектроскопии

В качестве объекта исследования использовались отходы переработки древесины хвойных пород (опилки сосны или лиственницы), полученные на деревообрабатывающих предприятиях (ООО «Мануфактура Велес», ООО «Бипротакс», г. Иркутск).

Сырьё имело фракционный состав 0,5–10,0 мм и влажность $10,0 \pm 0,5$ %. Водную экстракцию проводили при трёх температурных режимах: 1) выдерживание в дистиллированной воде при 20 °C в течение 24 ч (низкотемпературный экстракт, серия W1); 2) при 20 °C в течение 24 ч с последующим нагреванием на водяной бане при 80 °C в течение 1 ч (среднетемпературный экстракт, серия W2); 3) при 20 °C в течение 24 ч с последующей обработкой в автоклаве при 121 °C (1 атм) в течение 1 ч (высокотемпературный экстракт, серия W3). Соотношение опилок и воды во всех случаях составляло 1:10 (масса/объём). После экстракции растворы фильтровали через стеклянный фильтр (пористость 160 мкм).

Полученные водные экстракты подвергали последовательному фракционированию органическими растворителями. В качестве экстрагентов использовали гексан и хлороформ в соотношении 1:1 ($V_{\text{орган. р-тель}}/V_{\text{вод. экстракт}}$). В результате для каждой температурной серии ($n = 1, 2, 3$) получали пять фракций (рис. 2).

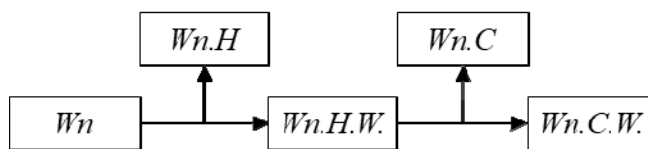


Рис. 2. Блок-схема последовательного фракционирования водного экстракта: W_n – исходный водный экстракт; $W_n.H$ – гексановая фракция; $W_n.H.W$ – водная фаза после гексана; $W_n.C$ – хлороформная фракция; $W_n.C.W$ – водная фаза после хлороформа

Спектры поглощения всех образцов регистрировали в кварцевой кювете с длиной оптического пути 10 мм на спектрофотометре NanoPhotometer P330 (Implen, Германия). Диапазон сканирования составлял 200–950 нм с шагом 1 нм. Анализ осуществляли в диапазоне 200–350 нм, где наблюдались наиболее информативные полосы поглощения. В качестве контроля использовали соответствующие растворители (дистиллированная вода, гексан, хлороформ), прошедшие ту же процедуру обработки. Каждое измерение проводили в трёх повторностях. Результаты представлены в виде среднего значения и стандартного отклонения ($M \pm SD$).

Для сравнения эффективности различных методов предобработки спектральных данных были применены и сопоставлены девять подходов математической обработки, направленных на устранение нерелевантных вариаций (сдвиги базовой линии, различия в оптической плотности, рассеяние) и выделение значимых спектральных паттернов: Standard Normal Variate (коррекция рассеяния) [Barnes, Dhanoa, Lister, 1989]; Multiplicative Scatter Correction [Isaksson, Næs, 1988]; Extended MSC [Afseth, Kohler, 2012]; Min-Max Scaling, Max Scaling (масштабирование) [FTIR-based ... , 2025]; Robust Scaling, Unit Vector [Chuen, Liong, Jemain, 2018], спектральные производные (первая и вторая, рассчитанные фильтром Савицкого – Голэя) [Zimmermann, Kohler, 2013]. В качестве контроля использовали исходные спектры без предобработки.

Для снижения размерности данных, визуализации группировок образцов и выявления скрытых паттернов применяли анализ главных компонент [Wold, Esbensen, Geladi, 1987]. Анализ выполняли отдельно для каждого из девяти наборов нормализованных данных. Для визуализации использовали две первые главные компоненты (PC1 и PC2), так как они объясняли максимальную долю дисперсии. Для интерпретации результатов PCA анализировали нагрузки двух первых компонент, отражающие вклад каждой длины волны в формирование новой координатной оси.

Для химической интерпретации выявленных спектральных маркеров была составлена сводная таблица, содержащая референсные спектральные характеристики (положение максимумов поглощения λ_{max} и молярные коэффициенты экстинкции ϵ) и физико-химические параметры (коэффициент распределения октанол/вода $\log P$, растворимость в воде) типичных экстрактивных веществ древесины хвойных пород. В таблицу включены представители трёх основных классов соединений: лигнаны (пинорезинол, ларицирезинол, секоизоларицирезинол), флавоноиды (дигидрокверцетин, кверцетин, нарингенин) и стильбены (пиносильвин). Данные были систематизированы из общедоступных химических баз (PubChem, ChemSpider, Human Metabolome Database) и профильных публикаций.

Расчёты, статистический анализ и визуализация выполнялись в среде Python 3.9.

Результаты и обсуждение

Спектры водных экстрактов (рис. 3, *a–з*) демонстрируют выраженную зависимость профилей поглощения (200–300 нм) от температуры экстракции и последующего разделения согласно схеме (см. рис. 2). Экстракт, полученный при 20 °С (W1), характеризуется монотонным спадом оптической плотности с максимумом 1,747 ед. (при $\lambda = 206$ нм). Повышение температуры до 80 °С (W2) приводит к увеличению общей плотности и появлению дополнительного максимума 2,466 ед. (при $\lambda = 227$ нм), указывающего на более полное извлечение или образование новых хромофоров. Высокотемпературная обработка (121 °С, W3) приводит к резкому снижению поглощения в коротковолновой области (до 0,06 ед. при $\lambda = 206$ нм), однако при переходе к более длинным волнам наблюдается значительный подъём спектральной кривой. Это может свидетельствовать о термодеструкции исходных компонентов и образовании новых светопоглощающих структур.

Последующее фракционирование органическими растворителями эффективно разделяет сложную смесь экстрактивных веществ с различными спектральными характеристиками, которые связаны с их химическим составом. Гексановые фракции, которые, как можно предположить, обогащены неполярными липофильными соединениями, демонстрируют высокое поглощение в УФ-области. Особенно выделяется образец W3.H, достигающий экстремальных значений оптической плотности (10,218 ед. при $\lambda = 239$ нм), что может свидетельствовать о переходе в гексановую фазу специфических термоиндуцированных липофильных компонентов [Jin, Zheng, Brash, 2013; Sequential ... , 2019].

Хлороформные фракции, которые, по-видимому, содержат соединения средней полярности (например, лигнаны), демонстрируют чётко выраженные максимумы поглощения в области 236–239 нм. Наибольшее значение оптической плотности в этой области (7,0 ед.) зарегистрировано для образца W2.C. Водные фазы, полученные после хлороформной экстракции, сохраняют значительную часть полярных хромофорных соединений. Так, для образцов W2.C.W и W3.C.W наблюдаются исключительно высокие значения оптической плотности в области 200–212 нм (до 19,0 ед. при $\lambda = 209$ нм для W3.C.W). Полученные данные позволяют предположить, что после удаления липофильных и среднеполярных компонентов, содержащихся в древесном растительном сырье, в водном растворе остаются соединения с высокой концентрацией полярных ароматических структур.

Повышение температуры водной экстракции приводит к закономерному росту оптической плотности и усложнению спектральных профилей, что может свидетельствовать об интенсификации извлечения и возможной трансформации компонентов древесины.

Для дальнейшего статистического анализа различными методами были выделены ключевые области поглощения растворов в УФ-диапазоне (200–212, 227–230, 236–239 и 290–299 нм), которые соответствуют различным классам соединений от простых фенолов до флавоноидов и лигнанов (табл. 1).

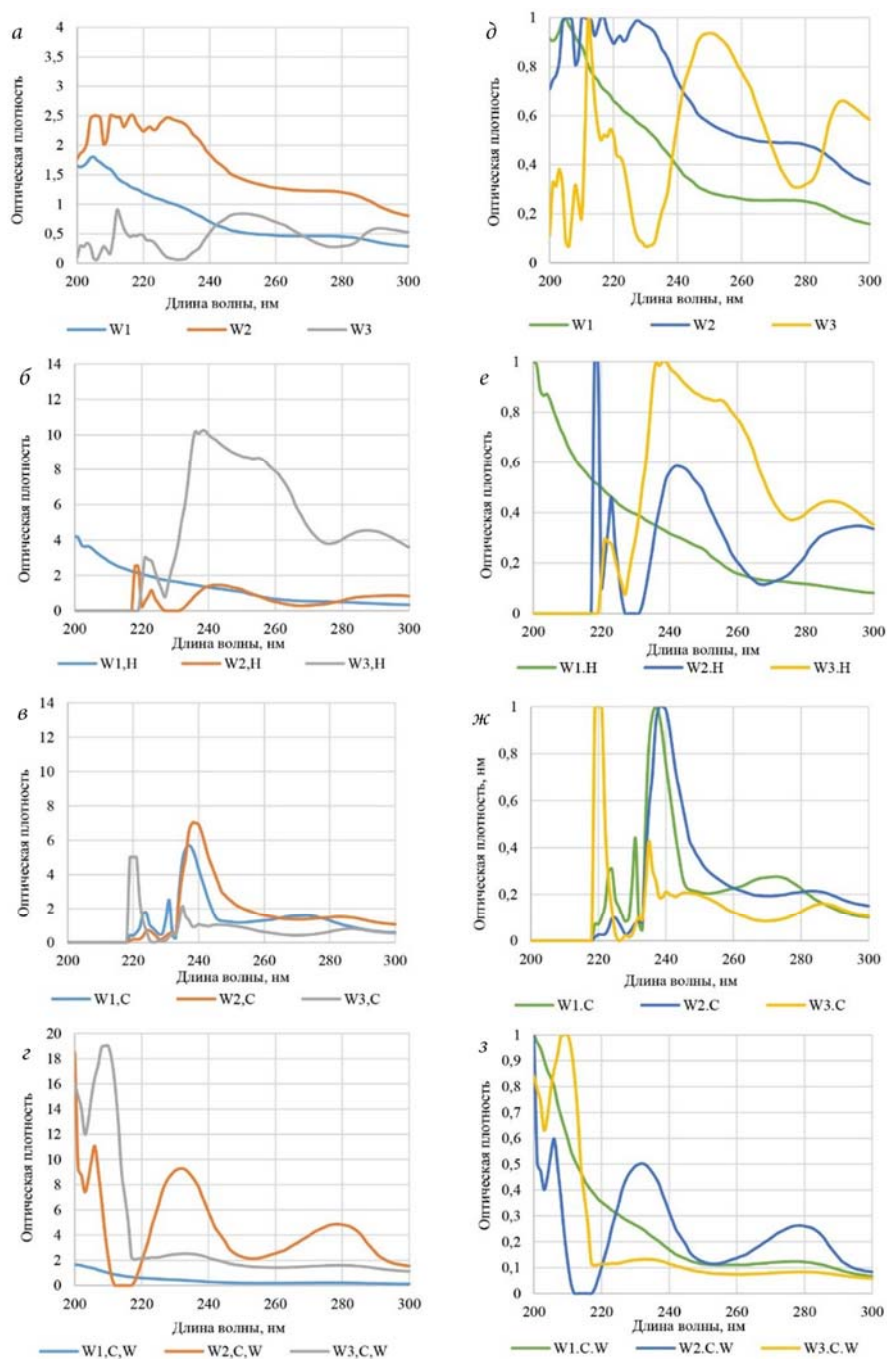


Рис. 3. УФ-видимые спектры поглощения: исходные (*a–г*) и нормированные по максимуму (*д–з*) водные экстракты древесины и продукты их фракционирования. *a, д* – исходный экстракт; *б, е* – гексановая фаза (WM.H); *в, ж* – хлороформная фаза (WM.C); *з, з* – водные остатки после экстракции (WM.H.W и WM.C.W)

Таблица 1

Характеристика наиболее типичных экстрактивных веществ
древесины хвойных пород

Экстрактивные вещества древесины [1]	Максимумы поглощения в УФ-видимой области, нм	Коэффициент экстинкции ϵ ($L/mol \cdot cm^{-1}$)	Растворимость			Обозна- чение источ- ника
			logP	logS	Растворимость в воде, мг/мл	
Лигнаны			3,4	-4,2	0,1	*а [30]
Кониендрин	227, 283 [2]	–	2,68(p)	-4,3(p)	–	*а
Пинорезинол	228, 277 [3] 240, 280 [4]	–	2,31(p)	-4,1(p)	0,031 (p)	**б
Ларицирезинол (диэтиловый эфир)	231, 282 [5] 230, 280 [6]	–	2,16(p)	-4,2(p)	–	*а
Секоизоларицире- зинол	229, 281[7]	3208 _{280nm} [8]	2,05(p)	-4,5(p)	0,012 (p)	*а
Секоизоларицире- зинол (дигликозид)	229, 281 [8]	3204 _{280nm} [8] 5838 _{280nm} [9]	–	–	–	
Гликозид феруловой кислоты****	291, 316 [9]	12133 [9]	–	–	–	
Гликозид п-кумаровой кислоты****	297 [9]	19474 [9]				
Матаирезинол	231, 283 [10] 230, 282 [6]	–	1,655	-4,5(p)	50,71	*а
Нортрахелогенин	283 [11]	–	0,920 1,88(p)	-4,1(p)	2,515 0,028 (p)	*а
Флавоноиды						
<i>Флавонолы</i>	250–280, 350–385 [12; 13]	15 000 _{350nm} [13]	–	–	–	
Дигидрокверцетин	290 (мономер), 320–350 (плечо, олигомер) [14] 289, 330 (плечо) [16]	26 300 _{270 nm} [15] 38 900 _{284 nm} [15] 17 380 _{308nm} [15]	1,07 1,82(p)	-2,4 (p)	–	*а
Дигидрокемпферол	294, 335 (плечо) [16]	5623 _{330 nm} , 19 500 _{292 nm} , 4070 _{252 nm} [17]	2,86	-2,5(p)	21,36	*а
Кемпферол	266, 367 [18] 265, 365 [20]	15 849 _{273nm} [19]	2,685	-3,2(p)	1,191	*а
Кверцетин	255, 370 [18] 365 [16]	20 892 _{373nm} [19] 17 400 _{360 nm} , 2,1·10 ² _{260 nm} [17]	0,579	-2,4(p)	2,47 4·10 ⁻⁴ -0,9	*а [31]
<i>Флаванон</i>	275–295, 310– 330 [12; 13]	–				
Эриодиктиол	288, 332 [21] 285, 360 [16]	16 800 _{290 nm} [22]	2,02	-2,9(p)	0,07	*а
Нарингенин	288 [23] 228, 289 [24]	15 500 _{290 nm} [22]	2,52	-3,1	0,21(p)	*а
<i>Флавоны</i>	250–280, 295– 350 [12; 13]					
Тектохризин	267 [18] 268, 311 [25]		3,13(p)	–	0,0341(p)	***с

Окончание табл. 1

Экстрактивные вещества древесины [1]	Максимумы поглощения в УФ-видимой области, нм	Коэффициент экстинкции ε (L/mol ⁻¹ /cm ⁻¹)	Растворимость			Обозначение источника
			logP	logS	Растворимость в воде, мг/мл	
Хризин	268, 313 [18]	10 ⁵ _{270 нм} 10 ⁴ _{285–330 нм} (петролейный эфир) [26]	3,520	–3,4(p)	0,084	*а
Стильбены						
Пиносилъвин	244, 280 [27] 296, 305 [28] 306 [29]	–	4,81 3,28(p)	–3,6(p)		*а [32]

Примечания. Все значения приведены для растворов в этаноле/метаноле, если растворитель не указан дополнительно; *p* – расчётное значение; «←» – данные в публикациях не найдены. *а – Human metabolome database (hmdb.ca); **b – Foodb Database (foodb.ca); ***с – Chempider Database (www.chemspider.com). Обозначения источников: 1 – [Определение ... , 2018]; 2 – [Afseth, Kohler, 2012]; 3 – [Identification ... , 2015]; 4 – [Lignans ... , 2004]; 5 – [New ... , 1976]; 6 – [Lignans ... , 2021]; 7 – [Zhang , Xu, 2007]; 8 – [Hoseinian, 2006]; 9 – [The chain ... , 2009]; 10 – [Lignan ... , 1972]; 11 – [Nishibe, Hisada, Inagak, 1971]; 12 – [Gabrieva, Simion, 2002]; 13 – [Andersen, Markham, 2005]; 14 – [Enzymatic ... , 2021]; 15 – [Lutoshkin, Kuznetsov, Levdansky, 2017]; 16 – [Phenolic ... , 2014]; 17 – [Mabry, Markham, Thomas, 1970]; 18 – [Markham, Mabry, 1975]; 19 – [Weast, 1972]; 20 – [Development ... , 2014]; 21 – [Rahman, Choudhary, Wahab, 2016]; 22 – [Flavonoid ... , 2001]; 23 – [Study ... , 2017]; 24 – [Coimmobilization ... , 2013]; 25 – [Effect ... , 2015]; 26 – Holiday, Jope, 1950]; 27 – [Weast, 1979]; 28 – [Budavari ... , 1996]; 29 – [Strategies ... , 2014]; 30 – [Pilkington ... , 2018]; 31 – [Abraham, Acree, 2014]; 32 – [Hansch, Leo, Hoekman, 1995].

Однако интерпретация сложных многокомпонентных спектральных профилей и установление надёжных корреляций между ними, технологическими параметрами и биологической активностью затруднительны при использовании исключительно классических подходов. Для выявления скрытых закономерностей, снижения размерности данных и объективного определения реперных точек нами был применён многомерный статистический анализ, данные которого интерпретированы с помощью PCA. В ходе предварительного анализа произведено сравнение девяти различных методов нормировки УФ-Вид спектров для оценки их влияния на разделение образцов в пространстве главных компонент. Установлено, что метод нормировки по максимуму (Max Scaling) обеспечивает наиболее чёткую визуализацию влияния ключевых технологических параметров на спектральный профиль экстрактов. При таком подходе PC1 и PC2 составляют в сумме 79,40 % общей дисперсии данных, что является достаточным для содержательной интерпретации. Анализ пространства счетов для выбранного метода нормировки позволил выявить две основные реперные точки, соответствующие фундаментальным этапам переработки.

Первой и наиболее значимой реперной точкой является вторая главная компонента, которая кодирует фундаментальное различие в химическом составе экстрактов, обусловленном природой экстрагента. Вдоль этой оси наблюдается разделение между первичными водными экстрактами (W1, W2, W3), образующими кластер с высокими положительными значениями PC2, и фракциями, полученными с использованием органических растворителей. Гексановые (Wn.H) и хлороформные (Wn.C, Wn.C.W) фракции группируются в области отрицательных значений PC2 (рис. 4, а). Такое распределение

позволяет утверждать, что PC2 служит спектральным маркером, или реперной точкой для контроля изменения состава на стадии жидкостно-жидкостного фракционирования. Положительное значение PC2 идентифицирует образец как полярную водную фракцию, богатую гидрофильными соединениями. Соответственно сдвиг в область отрицательных значений PC2 фиксирует успешность экстракции и удаления менее полярных (липофильных) компонентов в органическую фазу, что критически важно для стандартизации этой технологической операции (рис. 4, б).

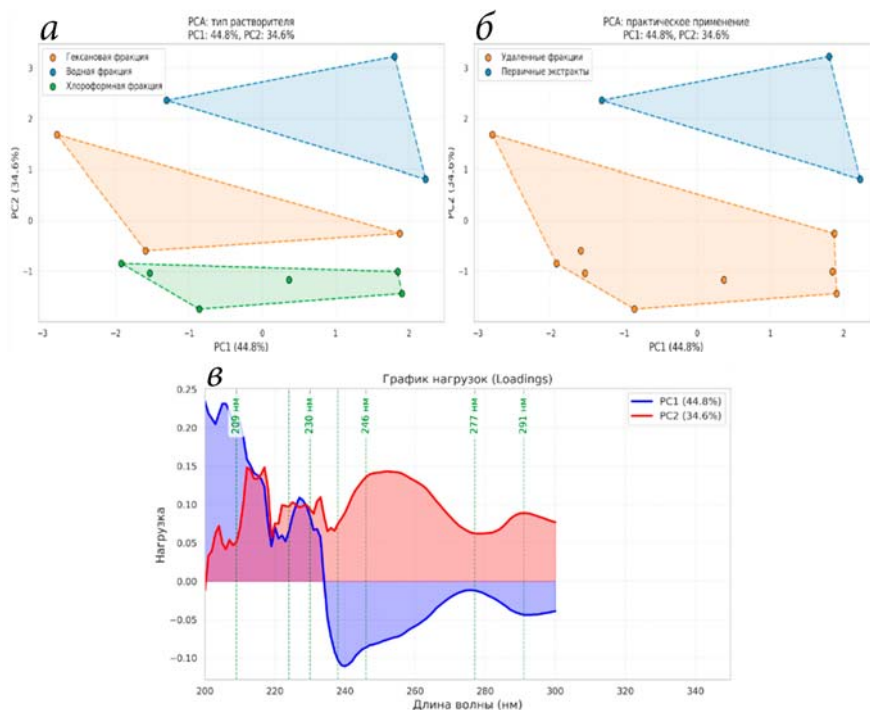


Рис. 4. Результаты анализа главных компонент (PC1–PC2) для УФ-Вид спектров водных экстрактов древесины после нормировки по максимуму: а – группировка образцов по типу растворителя/фракции, б – группировка по практическому применению (первичные экстракты и фракции, удалённые органической экстракцией), в – график нагрузок PCA

Первая главная компонента проявила себя как реперная точка, чувствительная к температуре гидротермической обработки внутри группы водных экстрактов. Выявлен тренд: значения PC1 последовательно снижаются с ростом температуры (2,23 для W1; 1,80 для W2; –1,30 для W3), что подтверждает её роль как индикатора температурно-зависимых изменений состава экстрактов.

В рамках анализа главных компонент PC1 отвечает за наибольшую долю общей дисперсии многомерных данных – 44,77 %. Это означает, что почти половина всех наблюдаемых различий между образцами экстрактов обу-

словлена именно тем фактором, который кодирует эта компонента. В данном случае таким фактором выступает температурный градиент обработки: вдоль оси PC1 образцы выстраиваются в строгом порядке от низкотемпературных (W1) к высокотемпературным (W3), формируя наиболее выраженный и систематический тренд по всему набору данных. Интересно поведение гексановых фракций вдоль оси PC1: их счёт изменяется от положительного (+1,87 для W1.H) к резко отрицательным значениям (-2,80 для W3.H) с ростом температуры. Такая динамика свидетельствует, что экстремальная термообработка не только меняет состав водной фазы (PC1), но и качественно влияет на спектр липофильных компонентов, экстрагируемых в гексановую фазу (см. рис. 4, а, б).

Однако для подтверждения данных гипотез и установления точной химической природы наблюдаемых изменений требуются дальнейшие исследования с применением дополнительных аналитических методов.

Для интерпретации спектральных признаков, лежащих в основе выявленных главных компонент, был проведён анализ профилей их нагрузок (loadings), что позволило установить связь между латентными факторами и конкретными диапазонами длин волн в УФ-спектрах. Нагрузки PC1 (см. рис. 4, б) демонстрируют биполярный профиль: высокие положительные значения в области 200–215 нм и устойчивые отрицательные значения в диапазоне 235–300 нм. Сопоставление с литературными данными позволяет предположить, что положительный вклад в PC1 вносят преимущественно соединения с максимумами поглощения в глубокой УФ-области, характерные для лигнанов хвойных пород, таких как конидендрин (λ_{\max} 227 нм) или пинорезинол (λ_{\max} 228 нм) (см. табл. 1). Таким образом, положительный полюс PC1, по-видимому, отражает относительное содержание соединений, спектрально сходных с лигнанами, и может рассматриваться как потенциальный спектральный маркер, требующий дальнейшей верификации. Отрицательный полюс PC1 связан с поглощением в более длинноволновой области, что может соответствовать вкладу стильбенов (пиносильвин) ($\lambda = 244$ нм) или некоторых флавоноидов ($\lambda = 250$ нм).

Нагрузки PC2 имеют существенно иной профиль с положительными значениями по всему диапазону длин волн 200–300 нм с широким положительным плато в области 210–260 нм. Положительное плато нагрузок PC2 в области, ассоциированное с водными фазами после органической экстракции, вероятно, отражает присутствие полярных фенольных гликозидов и окисленных фрагментов лигнина, остающихся в растворе. Авторами [UV-visible ... , 2020] показано, что гемицеллюлозные фракции, загрязнённые остаточным лигнином, демонстрируют характерное уширенное поглощение именно в этом диапазоне. Увеличение экстракции таких компонентов с ростом температуры, отмеченное в оценках PC1 для водных экстрактов, может дополнительно модулировать их вклад. Следовательно, плато в нагрузках PC2 можно предварительно рассматривать как интегральный спектральный паттерн, характерный для гидрофильной матрицы экстракта. Краткая характеристика областей поглощения, предполагаемых компонентов и нагрузок PCA представлена в табл. 2.

Таблица 2

Характеристика экстрактивных веществ древесины хвойных пород с учетом РСА

Класс соединений	Характеристические области поглощения (λ , нм)*	Относительная полярность	Предполагаемый вклад в главные компоненты (по данным нагрузок РСА)
Лигнаны (например, пинорезинол)	227–230, 275–285	Средняя/ умереннополярная	Положительные значения РС1 (область 200–215 нм и вклад в 227–230 нм)
Флавоноиды (например, дигидрокверцетин)	275–295, 310–350	Полярная/ средняя	Отрицательные значения РС1 (область 235–300 нм). Могут вносить вклад в плато РС2
Стильбены (например, пиносильвин)	240–245, 295–310	Неполярная/ липофильная	Отрицательные значения РС1. Ассоциированы с органическими фазами (отрицательные значения РС2)
Полярные фенольные гликозиды и окисленные фрагменты лигнина	Широкое поглощение 200–260	Гидрофильная/ высокополярная	Положительное плато РС2 (область 210–260 нм), характерное для водных фаз

Таким образом, РСА позволяет не только выявить связь технологических параметров со спектральным откликом, но и интерпретировать реперные точки. РС2 служит маркером селективности экстракции: его отрицательные значения указывают на удаление липофильных компонентов в органическую фазу, что подтверждается анализом нагрузок. Максимальные положительные нагрузки РС2 в областях 212–218 нм и 246–250 нм соответствуют высокополярным соединениям и стильбенам, в то время как вклад области при $\lambda=239$ нм характеризует липофильные фракции. Положительные значения РС1 отражают термоиндуцированные изменения в полярной фракции. Выделенные спектральные маркеры (напр., 246 и 291 нм) могут использоваться для экспресс-контроля фракционирования и прогнозирования биологической активности.

Заключение

Проведённое исследование демонстрирует, что УФ-видимая спектроскопия в сочетании с анализом главных компонент является информативным инструментом для выделения технологически значимых спектральных маркеров при переработке древесных отходов хвойных пород. Показано, что латентная структура данных в пространстве РС1–РС2 отражает два ключевых фактора процесса: природу экстрагента и температуру гидротермической обработки. Полученные данные позволяют рассматривать РС2 как потенциальный маркер для разграничения полярных и неполярных фракций, в то время как РС1 демонстрирует чувствительность к температуре гидротермической обработки.

Следует подчеркнуть, что химическая интерпретация выявленных спектральных маркеров носит вероятностный характер и требует дальнейшей

верификации хроматографическими и масс-спектрометрическими методами. Кроме того, для оценки устойчивости модели при масштабировании необходимо расширение выборки и внедрение процедур кросс-валидации. Несмотря на указанные ограничения, полученные результаты подтверждают принципиальную возможность перехода от лабораторного спектрального анализа к разработке протоколов экспресс-контроля процессов биорефайнинга древесных отходов. Предложенный подход формирует основу для интеграции УФ-спектроскопии в системы оперативного мониторинга переработки лигноцеллюлозного сырья.

Список литературы

- Определение количественного содержания экстрактивных веществ из древесины, коры и коры деревьев хвойных видов сибиря: лиственницы (*Larix sibirica* L.), сосны (*Pinus sylvestris* L.), пихты (*Abies sibirica* L.), ели (*Picea obovata* L.) и кедра (*Pinus sibirica* DU TOUR.) / Л. А. Остроухова, Т. Е. Федорова, Н. А. Онучина, А. А. Левчук, В. А. Бабкин // Химия растительного сырья. 2018. № 4. С. 185–195. <https://doi.org/10.14258/jcprm.2018044245>
- Abraham M. H., Acree W. E. On the solubility of quercetin // J. Mol. Liq. 2014. Vol. 197. P. 157–159. <https://doi.org/10.1016/j.molliq.2014.05.006>
- Afseth N. K., Kohler A. Extended multiplicative signal correction in vibrational spectroscopy, a tutorial // Chemometr. Intell. Lab. Syst. 2012. Vol. 117, P. 92–99. <https://doi.org/10.1016/j.chemolab.2012.03.004>
- Andersen O. M., Markham K. R. Flavonoids: chemistry, biochemistry and applications. Boca Raton, CRC Press, 2005. 1256 p. <https://doi.org/10.1201/9781420039443>
- Ayres D. C., Loike J. D. Lignans: chemical, biological and clinical properties. Cambridge Univ. Press, 1990.
- Barnes R. J., Dhanoa M. S., Lister S. J. Standard normal variate transformation and detrending of near-infrared diffuse reflectance spectra // Appl. Spectroscop. 1989. Vol. 43, N 5, P. 772–777. <https://doi.org/10.1366/0003702894202201>
- Beattie J. R., Esmonde-White F. W. L. Exploration of principal component analysis: deriving principal component analysis visually using spectra // Appl. Spectroscop. 2021. Vol. 75, Is. 4. P. 361–375. <https://doi.org/10.1177/0003702820987847>
- Budavari S. The Merck index – an encyclopedia of chemicals, drugs, and biologicals. Whitehouse Station, N. J. : Merck and Co., Inc., 1996. 1505 p.
- Chuen L. L., Liong C.-Y., Jemain A. A. Effects of data pre-processing methods on classification of ATR-FTIR spectra of pen inks using partial least squares-discriminant analysis (PLS-DA) // Chemometr. Intell. Lab. Syst. 2018. Vol. 182. P. 90–100. <https://doi.org/10.1016/j.chemolab.2018.09.001>
- Coimmobilization of naringinases on silk fibroin nanoparticles and its application in food packaging / M.-H. Wu, L. Zhu, Z.-Z. Zhou, Y.-Q. Zhang // J. Nanoparticl. 2013. Vol. 2013. P. 1–5. <https://doi.org/10.1155/2013/901401>
- Development and validation of UV spectrophotometric method for the estimation of kaempferol in kaempferol: hydrogenated soy phosphatidylcholine (HSPC) complex / D. R. Telange, A. T. Patil, A. A. Tatode, B. S. Bhojar // Pharmaceutical Methods. 2014. Vol. 5, N 1. P. 34–38. <https://doi.org/10.5530/phm.2014.1.6>
- de Jong E., Jungmeier G. Biorefinery concepts in comparison to petrochemical refineries // Industrial Biorefineries & White Biotechnology. Amsterdam : Elsevier, 2015. P. 3–33. <https://doi.org/10.1016/B978-0-444-63453-5.00001-X>
- dos Santos Grasel F., Ferrão M. F., Wolf C. R. Ultraviolet spectroscopy and chemometrics for the identification of vegetable tannins // Ind. Crop. Prod. 2016. Vol. 91. P. 279–285. <https://doi.org/10.1016/j.indcrop.2016.07.022>
- Effect of ethanol/water solvents on phenolic profiles and antioxidant properties of Beijing propolis extracts / C. Sun, Z. Wu, Z. Wang, H. Zhang // Evid. Based Complement. Alternat. Med. 2015. P. 1–9. <https://doi.org/10.1155/2015/595393>

Enzymatic polymerization of dihydroquercetin (taxifolin) in betaine-based deep eutectic solvent and product characterization / M. Khlupova, I. Vasil'eva, G. Shumakovich, E. Zaitseva, V. Chertkov, A. Shestakov, O. Morozova, A. Yaropolov // *Catalysts*. 2021. Vol. 11. Art. 639. <https://doi.org/10.3390/catal11050639>

Flavonoid 6-hydroxylase from soybean (*Glycine max* L.), a novel plant P-450 monooxygenase / A. O. Latunde-Dada, F. Cabello-Hurtado, N. Czittrich, L. Didierjean, C. Schopfer, N. Hertkorn, D. Werck-Reichhart, J. Ebel // *J. Biol. Chem.* 2001. Vol. 276, Is. 3. P. 1688–1695. <https://doi.org/10.1074/jbc.M006277200>

FTIR-based microplastic classification: a comprehensive study on normalization and ML techniques / O. Villegas-Camacho, I. Francisco-Valencia, R. Alejo-Eleuterio, E. E. Granda-Gutiérrez, S. Martínez-Gallegos, D. Villanueva-Vásquez // *Recycling*. 2025. Vol. 10, N 2. Art. 46. <https://doi.org/10.3390/recycling10020046>

Gabriela C., Simion G. Analysis of medicinal plants by HPLC: recent approaches // *J. Liq. Chromatogr. Relat. Technol.* 2002. Vol. 25, Is. 13–15. P. 2225–2292. <https://doi.org/10.1081/JLC-120014003>

Haldar D., Purkait M. K. A review on the environment-friendly emerging techniques for pretreatment of lignocellulosic biomass: Mechanistic insight and advancements // *Chemosphere*. 2021. Vol. 264. Art. 128523. <https://doi.org/10.1016/j.chemosphere.2020.128523>

Hansch C., Leo A., Hoekman D. Exploring QSAR: hydrophobic, electronic, and steric constants. Washington : Amer. Chem. Soc., 1995. 348 p.

Holiday E. R., Jope E. M. The ultraviolet spectral absorption of chrysene, its monomethoxy-derivatives and 1:2 dimethoxychrysene. *Spectrochim. Acta*. 1950. Vol. 4, Is. 2. P. 157–164. [https://doi.org/10.1016/s0371-1951\(50\)80008-5](https://doi.org/10.1016/s0371-1951(50)80008-5)

Hosseini F. F. H. Antioxidant properties of flaxseed lignans using *in vitro* model systems. Ph. D. Thesis. Univ. Saskatchewan. Saskatoon, 2006. 234 p.

Identification and quantitative determination of pinoselin in *Taxus media* Rehder needles, cell suspension and shoot cultures / P. Mistrzak, H. Celejewska-Marciniak, W. J. Szypuła, O. Olszowska, A. K. Kiss // *Acta Soc. Bot. Pol.* 2015. Vol. 84, N 1. P. 125–132. <https://doi.org/10.5586/asbp.2014.038>

Inhibitor formation and detoxification during lignocellulose biorefinery: A review / H. Guo, Y. Zhao, J.-S. Chang, D.-J. Lee // *Bioresour. Technol.* 2022. Vol. 361. Art. 127666. <https://doi.org/10.1016/j.biortech.2022.127666>

Insight into the solvent, temperature and time effects on the hydrogenolysis of hydrolyzed lignin / R. Shu, Q. Zhang, L. Ma, Y. Xu, P. Chen, C. Wang, T. Wang // *Bioresour. Technol.* 2016. Vol. 221. P. 568–575. <https://doi.org/10.1016/j.biortech.2016.09.043>

Isaksson T., Næs T. The effect of multiplicative scatter correction (MSC) and linearity improvement in NIR spectroscopy // *Appl. Spectroscop.* 1988. Vol. 42, N 7, P. 1273–1284. <https://doi.org/10.1366/0003702884429869>

Jin J., Zheng Y., Brash A.R. Demonstration of HNE-related aldehyde formation via lipoxygenase-catalyzed synthesis of a bis-allylic dihydroperoxide intermediate // *Chem. Res. Toxicol.* 2013. Vol. 26, N 6. P. 896–903. <https://doi.org/10.1021/tx4000396>

Lignan compounds from *Picea obovata* / L. D. Modonova, V. K. Voronov, V. G. Leont'eva, N. A. Tyukavkina // *Chem. Nat. Compd.* 1972. Vol. 8. P. 170–174. <https://doi.org/10.1007/BF00565293>

Lignans of *Rosa multiflora* roots / H. Yeo; Y.-W. Chin; S.-Y. Park, J. Kim // *Arch. Pharm. Res.* 2004. Vol. 27. P. 287–290. <https://doi.org/10.1007/bf02980061>

Lignans of sesame (*Sesamum indicum* L.): A comprehensive review / M. Andargie, M. Vinas, A. Rathgeb, E. Möller, P. Karlovsky // *Molecules*. 2021. Vol. 26, N 4. Art. 883. <https://doi.org/10.3390/molecules26040883>

Lutoshkin M. A., Kuznetsov B. N., Levdansky V. A. Spectrophotometric and quantum-chemical study of acid-base and complexing properties of (\pm)-taxifolin in aqueous solution // *Heterocycl. Commun.* 2017. Vol. 23, N 5. P. 395–400. <https://doi.org/10.1515/hc-2017-0075>

Mabry T. J., Markham K. R., Thomas M. B. The systematic identification of flavonoids. Berlin–Heidelberg : New York : Springer-Verlag, 1970. 354 p. <https://doi.org/10.1007/978-3-642-88458-0>

Markham K. R., Mabry T. J. Ultraviolet-visible and proton magnetic resonance spectroscopy of flavonoids // *The Flavonoids* / eds.: J. B. Harborne, T. J. Mabry, H. Mabry. Academic Press, 1975. P. 45–77.

Machine learning for biochemical engineering: A review / M. Mowbray, T. Savage, C. Wu, Z. Song, B. A. Cho, E. A. Del Rio-Chanona, D. Zhang // *Biochem. Engineer. J.* 2021. Vol. 172. Art. 108054. <https://doi.org/10.1016/j.bej.2021.108054>

New O-acyl derivatives of lariciresinol / V. G. Leont'eva, L. D. Modonova, V. K. Voronov, N. A. Tyukavkina // *Chem. Nat. Compd.* 1976. Vol. 12. P. 147–150. <https://doi.org/10.1007/BF00566332>

Nishibe S., Hisada S., Inagak I. The ether-soluble lignans of *Trachelospermum asiaticum* var. *intermedium*. 1971, Vol. 10, Is. 9. P. 2231–2232. [https://doi.org/10.1016/S0031-9422\(00\)97230-3](https://doi.org/10.1016/S0031-9422(00)97230-3)

Online monitoring of P(3HB) produced from used cooking oil with near-infrared spectroscopy / M. V. Cruz, M. C. Sarragaça, F. Freitas, J. A. Lopes, M. A. M. Reis // *J. Biotechnol.* 2015. Vol. 194. P. 1–9. <https://doi.org/10.1016/j.jbiotec.2014.11.022>

Petridis L., Smith J.C. Molecular-level driving forces in lignocellulosic biomass deconstruction for bioenergy // *Nat. Rev. Chem.* 2018. Vol. 2, N 11. P. 382–389. <https://doi.org/10.1038/s41570-018-0050-6>

Phenolic compounds and carotenoids from four fruits native from the Brazilian atlantic forest / N. Azevedo da Silva, E. Rodrigues, A. Z. Mercadante, V. V. de Rosso // *J. Agric. Food Chem.* 2014. Vol. 62, Is. 22, P. 5072–5084. <https://doi.org/10.1021/jf501211p>

Pilkington L. I. Lignans: A Chemometric Analysis // *Molecules.* 2018. Vol. 23, N 7. Art. 1666. <https://doi.org/10.3390/molecules23071666>

Rahman A.-U., Choudhary M. I., Wahab A.-T. Logical approach for solving structural problems // *Solving Problems with NMR Spectroscopy.* London : Academic Press, 2016. P. 431–494. <https://doi.org/10.1016/B978-0-12-411589-7.00010-3>

Review on machine learning-based bioprocess optimization, monitoring, and control systems / P. P. Mondal, A. Galodha, V. K. Verma, V. Singh, P. L. Show, M. K. Awasthi, B. Lall, S. Anees, K. Pollmann, R. Jain // *Biores. Technol.* 2023. Vol. 370. Art. 128523. <https://doi.org/10.1016/j.biortech.2022.128523>

Study of flavonoids present in Pomelo (*Citrus maxima*) by DSC, UV-VIS, IR, ¹H and ¹³C NMR and MS / L. M. Cordenonsi, R. M. Sponchiado, S. C. Campanharo, C. V. Garcia, R. P. Raffin, E. E. S. Schapoval // *Drug Anal. Res.* 2017. Vol. 1. P. 31–37. <https://doi.org/10.22456/2527-2616.74097>

Sequential extraction and characterization of lignin-derived compounds from thermochemically processed biorefinery lignins / L. A. Dodge, R. M. Kalinoski, L. Das, J. Bursavich, P. Muley, D. Boldor, J. Shi // *Energy & Fuels.* 2019. Vol. 33, N 5. P. 4322–4330. <https://doi.org/10.1021/acs.energyfuels.9b00376>

Strategies to improve the solubility and stability of stilbene antioxidants: A comparative study between cyclodextrins and bile acids / F. Silva, A. Figueiras, E. Gallardo, C. Nerín, F. C. Domingues // *Food Chem.* 2014. Vol. 145. P. 115–125. <https://doi.org/10.1016/j.foodchem.2013.08.034>

Systematic review of machine-learning techniques to support development of lignocellulose biorefineries / A. Jurinjak Tušek, A. Petrus, A. Weichselbraun, R. Mundani, S. Müller, I. Barkow, A. Bucić-Kojić, M. Planinić, M. Tišma // *Chem. Biochem. Engineer. Quart.* 2024. Vol. 38, N 3. P. 241–263. <https://doi.org/10.15255/CABEQ.2023.2273>

The chain length of lignan macromolecule from flaxseed hulls is determined by the incorporation of coumaric acid glucosides and ferulic acid glucosides / K. Struijs, J.-P. Vincken, T. G. Doeswijk, A. G. J. Voragen, H. Gruppen // *Phytochem.* 2009. Vol. 70, Is. 2. P. 262–269. <https://doi.org/10.1016/j.phytochem.2008.12.015>

Two step fractionation of oil palm empty fruit bunches integrating hydrothermal-organosolv pretreatment for enhanced lignin extraction and enzymatic hydrolysis efficiency / N. L. Sangadji, C. Wijaya, M. Muharja, E. Elaine, H. F. Sangian, R. Lau, A. Widjaja // *Case Stud. Chem. Environ. Engin.* 2025. Vol. 12. 101275. <https://doi.org/10.1016/j.csee.2025.101275>

UV-Vis spectroscopy and chemometrics for the monitoring of organosolv pretreatments / S. Beisl, M. Binder, K. Varmuza, A. Miltner, A. Friedl // *ChemEngineer.* 2018. Vol. 2, Is. 4. Art. 45. <https://doi.org/10.3390/chemengineering2040045>

UV-visible diffuse reflectance spectroscopy used in analysis of lignocellulosic biomass material / H. Zhang, X. Wang, J. Wang, Q. Chen, H. Huang, L. Huang, S. Cao, X. Ma // *Wood Sci. Technol.* 2020. Vol. 54. P. 837–846. <https://doi.org/10.1007/s00226-020-01199-w>

Visible/near infrared spectroscopy and machine learning for predicting polyhydroxybutyrate production cultured on alkaline pretreated liquor from corn stover / M. Li, N. K. Wijewardane, Y. Ge, Z. Xu, M. R. Wilkins // *Bioresour. Technol. Rep.* 2020. Vol. 9. Art. 100386. <https://doi.org/10.1016/j.biteb.2020.100386>

Wold S., Esbensen K., Geladi P. Principal component analysis. *Chemometr. Intell. Lab. Syst.* 1987. Vol. 2, Is. 1–3. P. 37–52. [https://doi.org/10.1016/0169-7439\(87\)80084-9](https://doi.org/10.1016/0169-7439(87)80084-9)

Weast R. C. *Handbook of chemistry and physics*. 52nd ed. Cleveland : The Chemical Rubber, 1972. 2313 p.

Weast R. C. *Handbook of Chemistry and Physics*. 60th ed. Boca Raton : CRC Press, 1979. 2450 p.

Zhang W., Xu S. Purification of secoisolariciresinol diglucoside with column chromatography on a sephadex LH-20 // *J. Chromatogr. Sci.* 2007. Vol. 45, Is. 4. P. 177–182. <https://doi.org/10.1093/chromsci/45.4.177>

Zimmermann B., Kohler A. Optimizing Savitzky–Golay parameters for improving spectral resolution and quantification in infrared spectroscopy // *Appl. Spectroscop.* 2013. Vol. 67, Is. 8. P. 892–902. <https://doi.org/10.1366/12-06723>

References

Ostroukhova L.A., Fedorova T.E., Onuchina N.A., Levchuk A.A., Babkin V.A. Opredelenie kolichestvennogo sodержaniya ekstraktivnykh veshchestv iz drevesiny, kornei i kory derev'ev khvoynykh vidov sibirii: listvennitsy (*Larix sibirica* L.), sosny (*Pinus sylvestris* L.), pikhty (*Abies sibirica* L.), eli (*Picea obovata* L.) i kedra (*Pinus sibirica* Du Tour) [Determination of quantitative content of extractive substances from wood, roots and bark of Siberian coniferous tree species: larch (*Larix sibirica* L.), pine (*Pinus sylvestris* L.), fir (*Abies sibirica* L.), spruce (*Picea obovata* L.) and cedar (*Pinus sibirica* Du Tour)]. *Khimija rastitel'nogo syr'ja* [*Chemistry of Plant Raw Materials*], 2018, no. 4, pp. 185–195. <https://doi.org/10.14258/jcprm.2018044245> (in Russian)

Abraham M.H., Acree W.E. On the solubility of quercetin. *J. Mol. Liq.*, 2014, vol. 197, pp. 157–159. <https://doi.org/10.1016/j.molliq.2014.05.006>

Afseth N.K., Kohler A. Extended multiplicative signal correction in vibrational spectroscopy, a tutorial. *Chemometr. Intell. Lab. Syst.*, 2012, vol. 117, pp. 92–99. <https://doi.org/10.1016/j.chemolab.2012.03.004>

Andersen O.M., Markham K.R. *Flavonoids: chemistry, biochemistry and applications*. Boca Raton, CRC Press, 2005. 1256 p. <https://doi.org/10.1201/9781420039443>

Ayres D. C., Loike J. D. *Lignans: chemical, biological and clinical properties*. Cambridge Univ. Press, 1990.

Barnes R.J., Dhanoa M.S., Lister S.J. Standard normal variate transformation and de-trending of near-infrared diffuse reflectance spectra. *Appl. Spectroscop.*, 1989, vol. 43, no. 5, pp. 772–777. <https://doi.org/10.1366/0003702894202201>

Beattie J.R., Esmonde-White F.W.L. Exploration of principal component analysis: deriving principal component analysis visually using spectra. *Appl. Spectroscop.*, 2021, vol. 75, is. 4, pp. 361–375. <https://doi.org/10.1177/0003702820987847>

Budavari S. *The Merck index – an encyclopedia of chemicals, drugs, and biologicals*. Whitehouse Station, NJ: Merck and Co., 1996. 1505 p.

Chuen L.L., Liong C.-Y., Jemain A.A. Effects of data pre-processing methods on classification of ATR-FTIR spectra of pen inks using partial least squares-discriminant analysis (PLS-DA). *Chemometr. Intell. Lab. Syst.*, 2018, vol. 182, pp. 90–100. <https://doi.org/10.1016/j.chemolab.2018.09.001>

Wu M.-H., Zhu L., Zhou Z.-Z., Zhang Y.-Q. Coimmobilization of naringinases on silk Fibroin nanoparticles and its application in food packaging. *J. Nanoparticl.*, 2013, art. 901401. <https://doi.org/10.1155/2013/901401>

Cruz M.V., Sarraguça M.C., Freitas F., Lopes J.A., Reis M.A.M. Online monitoring of P(3HB) produced from used cooking oil with near-infrared spectroscopy. *J. Biotechnol.*, 2015, vol. 194, pp. 1–9. <https://doi.org/10.1016/j.jbiotec.2014.11.022>

Telange D.R., Patil A.T., Tatode A.A., Bhojar B.S. Development and validation of UV spectrophotometric method for the estimation of kaempferol in kaempferol: Hydrogenated soy phosphatidylcholine (HSPC) complex. *Pharmaceutical Methods*, 2014, vol. 5, no. 1, pp. 34-38. <https://doi.org/10.5530/phm.2014.1.6>

de Jong E., Jungmeier G. Biorefinery concepts in comparison to petrochemical refineries. *Industrial Biorefineries & White Biotechnology*. Amsterdam, Elsevier, 2015, pp. 3-33. <https://doi.org/10.1016/B978-0-444-63453-5.00001-X>

dos Santos Grasel F., Ferrão M.F., Wolf C.R. Ultraviolet spectroscopy and chemometrics for the identification of vegetable tannins. *Ind. Crop. Prod.*, 2016, vol. 91, pp. 279-285. <https://doi.org/10.1016/j.indcrop.2016.07.022>

Sun C., Wu Z., Wang Z., Zhang H. Effect of ethanol/water solvents on phenolic profiles and antioxidant properties of beijing propolis extracts. *Evid. Based Complement. Alternat. Med.*, 2015, pp. 1-9. <https://doi.org/10.1155/2015/595393>

Khlopova M., Vasil'eva I., Shumakovich G., Zaitseva E., Chertkov V., Shestakova A., Morozova O., Yaropolov A. Enzymatic Polymerization of Dihydroquercetin (Taxifolin) in BetaineBased Deep Eutectic Solvent and Product Characterization. *Catalysts*, 2021, vol. 11, art. 639. <https://doi.org/10.3390/catal11050639>

Latunde-Dada A.O., Cabello-Hurtado F., Czittrich N., Didierjean L., Schopfer C., Hertkorn N., Werck-Reichhart D., Ebel J. Flavonoid 6-hydroxylase from soybean (*Glycine max* L.), a novel plant P-450 monooxygenase. *J. Biol. Chem.*, 2001, vol. 276, is. 3, pp. 1688-1695. <https://doi.org/10.1074/jbc.M006277200>

Villegas-Camacho O., Francisco-Valencia I., Alejo-Eleuterio R., Granda-Gutiérrez E. E., Martínez-Gallegos S., Villanueva-Vásquez D. FTIR-based microplastic classification: a comprehensive study on normalization and ML techniques. *Recycling*, 2025, vol. 10, no. 2, art. 46. <https://doi.org/10.3390/recycling10020046>

Gabriela C., Simion G. Analysis of medicinal plants by HPLC: recent approaches. *J. Liq. Chromatogr. Relat. Technol.*, 2002, vol. 25, is. 13-15, pp. 2225-2292. <https://doi.org/10.1081/JLC-120014003>

Haldar D., Purkait M.K. A review on the environment-friendly emerging techniques for pretreatment of lignocellulosic biomass: Mechanistic insight and advancements. *Chemosphere*, 2021, vol. 264, art. 128523. <https://doi.org/10.1016/j.chemosphere.2020.128523>

Hansch C., Leo A., Hoekman D. *Exploring QSAR: Hydrophobic, Electronic, and Steric Constants*. Washington, Am. Chem. Soc., 1995, 348 p.

Holiday E.R., Jope E.M. The ultraviolet spectral absorption of chrysene, its monomethoxyderivatives and 1:2 dimethoxychrysene. *Spectrochim. Acta*, 1950, vol. 4, is. 2, pp. 157-164. [https://doi.org/10.1016/s0371-1951\(50\)80008-5](https://doi.org/10.1016/s0371-1951(50)80008-5)

Hosseinian F.F.H. *Antioxidant properties of faxseed lignans using in vitro model systems*. Ph.D. Thesis. Univ. Saskatchewan. Saskatoon, 2006, 234 p.

Mistrzak P., Celejewska-Marciniak H., Szypuła W.J., Olszowska O., Kiss A.K. Identification and quantitative determination of pinosresinol in *Taxus media* Rehder needles, cell suspension and shoot cultures. *Acta Soc. Bot. Pol.*, 2015, vol. 84, no. 1, pp. 125-132. <https://doi.org/10.5586/asbp.2014.038>

Guo H., Zhao Y., Chang J.-S., Lee D.-J. Inhibitor formation and detoxification during lignocellulose biorefinery: A review. *Biores. Technol.*, 2022, vol. 361, art. 127666. <https://doi.org/10.1016/j.biortech.2022.127666>

Shu R., Zhang Q., Ma L., Xu Y., Chen P., Wang C., Wang T. Insight into the solvent, temperature and time effects on the hydrogenolysis of hydrolyzed lignin. *Biores. Technol.*, 2016, vol. 221, pp. 568-575. <https://doi.org/10.1016/j.biortech.2016.09.043>

Isaksson T., Næs T. The effect of multiplicative scatter correction (MSC) and linearity improvement in NIR spectroscopy. *Appl. Spectroscopy*, 1988, vol. 42, no. 7, pp. 1273-1284. <https://doi.org/10.1366/0003702884429869>

Jin J., Zheng Y., Brash A.R. Demonstration of HNE-related aldehyde formation via lipoxygenase-catalyzed synthesis of a bis-allylic dihydroperoxide intermediate. *Chem. Res. Toxicol.*, 2013, vol. 26, no. 6, pp. 896-903. <https://doi.org/10.1021/tx4000396>

Modonova L.D., Voronov V.K., Leont'eva V.G., Tyukavkina N. A.. Lignan compounds from *Picea obovata*. *Chem. Nat. Compd.*, 1972, vol. 8, pp. 170-174. <https://doi.org/10.1007/BF00565293>

- Yeo H., Chin Y.-W., Park S.-Y., Kim J. Lignans of *Rosa multiflora* roots. *Arch. Pharm. Res.*, 2004, vol. 27, pp. 287-290. <https://doi.org/10.1007/bf02980061>
- Andargie M., Vinas M., Rathgeb A., Möller E., Karlovsky P. Lignans of sesame (*Sesamum indicum* L.): A Comprehensive Review. *Molecules*, 2021, vol. 26, no. 4, art. 883. <https://doi.org/10.3390/molecules26040883>
- Lutoshkin M.A., Kuznetsov B.N., Levdansky V.A. Spectrophotometric and quantum-chemical study of acid-base and complexing properties of (\pm)-taxifolin in aqueous solution. *Heterocycl. Commun.*, 2017, vol. 23, no. 5, pp. 395-400. <https://doi.org/10.1515/hc-2017-0075>
- Mabry T.J., Markham K.R., Thomas M.B. *The systematic identification of flavonoids*. Berlin, Heidelberg, New York, Springer-Verlag, 1970, 354 p. <https://doi.org/10.1007/978-3-642-88458-0>
- Markham K.R., Mabry T.J. Ultraviolet-visible and proton magnetic resonance spectroscopy of flavonoids. *The Flavonoids* / J. B. Harborne, T. J. Mabry, H. Mabry (eds.). Academic Press, 1975, pp. 45-77.
- Mowbray M., Savage T., Wu C., Song Z., Cho B.A., Del Rio-Chanona E.A., Zhang D. Machine learning for biochemical engineering: A review. *Biochem. Engineer. J.*, 2021, vol. 172, 108054. <https://doi.org/10.1016/j.bej.2021.108054>
- Leont'eva V.G., Modonova L.D., Voronov V.K., Tyukavkina N. A. New O-acyl derivatives of lariciresinol. *Chem. Nat. Compd.*, 1976, vol. 12, pp. 147-150. <https://doi.org/10.1007/BF00566332>
- Nishibe S., Hisada S., Inagak I. The ether-soluble lignans of *Trachelospermum asiaticum* var. *intermedium*. *Phytochemistry*, 1971, vol. 10, is. 9, pp. 2231-2232. [https://doi.org/10.1016/S0031-9422\(00\)97230-3](https://doi.org/10.1016/S0031-9422(00)97230-3)
- Petridis L., Smith J.C. Molecular-level driving forces in lignocellulosic biomass deconstruction for bioenergy. *Nat. Rev. Chem.*, 2018, vol. 2, no. 11, pp. 382-389. <https://doi.org/10.1038/s41570-018-0050-6>
- Azevedo da Silva N., Rodrigues E., Mercadante A. Z., de Rosso V. V. Phenolic compounds and carotenoids from four fruits native from the Brazilian atlantic forest. *J. Agric. Food Chem*, 2014, vol. 62, is. 22, pp.5072-5084. <https://doi.org/10.1021/jf501211p>
- Pilkington L.I. Lignans: A chemometric analysis. *Molecules*, 2018, vol. 23, no. 7, 1666. <https://doi.org/10.3390/molecules23071666>
- Rahman A.-U., Choudhary M. I., Wahab A.-T. Logical approach for solving structural problems. *Solving Problems with NMR Spectroscopy*. London, Academic Press, 2016, pp. 431-494. <https://doi.org/10.1016/B978-0-12-411589-7.00010-3>
- Mondal P.P., Galodha A., Verma V.K., Singh V., Show P.L., Awasthi M.K., Lall B., Anees S., Pollmann K., Jain R. Review on machine learning-based bioprocess optimization, monitoring, and control systems. *Biores. Technol.*, 2023, vol. 370, 128523. <https://doi.org/10.1016/j.biortech.2022.128523>
- Cordenonsi L.M., Sponchiado R.M., Campanharo S.C., Garcia C.V., Raffin R.P., Schapoval E.E.S. Study of flavonoids present in Pomelo (*Citrus maxima*) by DSC, UV-VIS, IR, ¹H and ¹³C NMR and MS. *Drug Anal. Res.*, 2017, vol. 1, pp. 31-37. <https://doi.org/10.22456/2527-2616.74097>
- Dodge L.A., Kalinoski R.M., Das L., Bursavich J., Muley P., Boldor D., Shi J. Sequential extraction and characterization of lignin-derived compounds from thermochemically processed biorefinery lignins. *Energy & Fuels*, 2019, vol. 33, no 5, pp. 4322-4330. <https://doi.org/10.1021/acs.energyfuels.9b00376>
- Silva F., Figueiras A., Gallardo E., Nerin C., Domingues F. C. Strategies to improve the solubility and stability of stilbene antioxidants: A comparative study between cyclodextrins and bile acids. *Food Chem.*, 2014, vol. 145, pp. 115-125. <https://doi.org/10.1016/j.foodchem.2013.08.034>
- Jurinjak Tušek A., Petrus A., Weichselbraun A., Mundani R., Müller S., Barkow I., Bucić-Kojić A., Planinić M., Tišma M. Systematic review of machine-learning techniques to support development of lignocellulose biorefineries. *Chem. Biochem. Engineer. Quart.*, 2024, vol. 38, no. 3, pp. 241-263. <https://doi.org/10.15255/CABEQ.2023.2273>
- Struijs K., Vincken J.-P., Doeswijk T.G., Voragen A.G.J., Gruppen H. The chain length of lignan macromolecule from flaxseed hulls is determined by the incorporation of coumaric acid glucosides and ferulic acid glucosides. *Phytochem.*, 2009, vol. 70, is. 2, pp. 262-269. <https://doi.org/10.1016/j.phytochem.2008.12.015>
- Sangadji N.L., Wijaya C., Muharja M., Elaine E., Sangian H.F., Lau R., Widjaja A. Two step fractionation of oil palm empty fruit bunches integrating hydrothermal-organosolv pretreatment for

enhanced lignin extraction and enzymatic hydrolysis efficiency. *Case Stud. Chem. Environ. Engin.*, 2025, vol. 12, 101275. <https://doi.org/10.1016/j.cscee.2025.101275>

Beisl S., Binder M., Varmuza K., Miltner A., Friedl A. UV-Vis spectroscopy and chemometrics for the monitoring of organosolv pretreatments. *ChemEngineer.*, 2018, vol. 2, is. 4, 45. <https://doi.org/10.3390/chemengineering2040045>

Zhang H., Wang X., Wang J., Chen Q., Huang H., Huang L., Cao S., Ma X. UV-visible diffuse reflectance spectroscopy used in analysis of lignocellulosic biomass material. *Wood Sci. Technol.*, 2020, vol. 54, pp. 837-846. <https://doi.org/10.1007/s00226-020-01199-w>

Li M., Wijewardane N.K., Ge Y., Xu Z., Wilkins M.R.. Visible/near infrared spectroscopy and machine learning for predicting polyhydroxybutyrate production cultured on alkaline pretreated liquor from corn stover. *Biores. Technol. Rep.*, 2020, vol. 9, art. 100386. <https://doi.org/10.1016/j.biteb.2020.100386>

Wold S., Esbensen K., Geladi P. Principal component analysis. *Chemometr. Intell. Lab. Syst.*, 1987, vol. 2, is. 1-3, pp. 37-52. [https://doi.org/10.1016/0169-7439\(87\)80084-9](https://doi.org/10.1016/0169-7439(87)80084-9)

Weast R.C. *Handbook of Chemistry and Physics*. 52 th ed. Cleveland, The Chemical Rubber, 1972, 2313 p.

Weast R.C. *Handbook of Chemistry and Physics*. 60th ed. Boca Raton, CRC Press, 1979, 2450 p.

Zhang W., Xu S. Purification of Secoisolariciresinol Diglucoside with column chromatography on a sephadex LH-20. *J. Chromatogr. Sci.*, 2007, vol. 45, is. 4, pp. 177-182. <https://doi.org/10.1093/chromsci/45.4.177>

Zimmermann B., Kohler A. Optimizing Savitzky-Golay parameters for improving spectral resolution and quantification in infrared spectroscopy. *Appl. Spectroscop.*, 2013, vol. 67, is. 8, pp. 892-902. <https://doi.org/10.1366/12-06723>

Сведения об авторах

Новиков Артём Владимирович

аспирант

Иркутский государственный университет
Россия, 664003, г. Иркутск, ул. К. Маркса, 1
e-mail: artem.ru88@mail.ru

Ярыгин Дмитрий Андреевич

магистрант

Иркутский государственный университет
Россия, 664003, г. Иркутск, ул. К. Маркса, 1
e-mail: mr.dmitry.yarygin@gmail.com

Михайленко Валентина Львовна

кандидат химических наук, доцент

Иркутский государственный университет
Россия, 664003, г. Иркутск, ул. К. Маркса, 1
e-mail: mival63@gmail.com

Приставка Алексей Александрович

кандидат биологических наук, доцент

Юринова Галина Валерьевна

кандидат биологических наук, доцент

Иркутский государственный университет
Россия, 664003, г. Иркутск, ул. К. Маркса, 1

Information about the authors

Novikov Artem Vladimirovich

Postgraduate

Irkutsk State University
1, K. Marx st., Irkutsk, 664003,
Russian Federation
e-mail: artem.ru88@mail.ru

Yarygin Dmitriy Andreevich

Undergraduate

Irkutsk State University
1, K. Marx st., Irkutsk, 664003,
Russian Federation
e-mail: mr.dmitry.yarygin@gmail.com

Mikhailenko Valentina Lvovna

Candidate of Science (Chemistry),

Associate Professor
Irkutsk State University
1, K. Marx st., Irkutsk, 664003,
Russian Federation
e-mail: mival63@gmail.com

Pristavka Aleksey Aleksandrovich

Candidate of Sciences (Biology),
Associate Professor

Yurinova Galina Valerievna

Candidate of Sciences (Biology),

Associate Professor
Irkutsk State University

e-mail: yurinova@yandex.ru

*1, K. Marx st., Irkutsk, 664003,
Russian Federation
e-mail: yurinova@yandex.ru*

Саловарова Валентина Петровна
доктор биологических наук, профессор
заведующий кафедрой
Иркутский государственный университет
664003, г. Иркутск, ул. К. Маркса, 1
e-mail: vsalovarova@gmail.com

Salovarova Valentina Petrovna
Doctor of Sciences (Biology),
Professor, Head of Department,
Irkutsk State University
1, K. Marx st., Irkutsk, 664003,
Russian Federation
e-mail: vsalovarova@gmail.com

Статья поступила в редакцию **03.10.2025**; одобрена после рецензирования **17.11.2025**; принята к публикации **28.11.2025**
Submitted **October, 03, 2025**; approved after reviewing **November, 17, 2025**; accepted for publication **November, 28, 2025**