

УДК 303.7

Применение регрессионного анализа для идентификации полиэтилена высокой и низкой плотности посредством ИК-спектроскопии

Афонин Д.Н.

Санкт-Петербургский филиал Российской таможенной академии

The use of regression analysis for the identification of high and low density polyethylene by means of IR spectrometry

Afonin D.N.

St. Petersburg Branch of the Russian Customs Academy

Аннотация

В статье рассмотрена возможность применения регрессионного анализа для идентификации полиэтилена высокой и низкой плотности посредством инфракрасной спектроскопии. Предложенная технология может применяться для идентификации практически любых органических соединений.

Ключевые слова: инфракрасная спектроскопия, таможенный контроль, полиэтилен, регрессионный анализ.

Abstract

The article considers the possibility of using regression analysis to identify high and low density polyethylene by infrared spectrometry. The proposed technology can be used to identify virtually any organic compounds.

Keywords: infrared spectrometry, customs control, polyethylene, regression analysis.

Приоритетным направлением таможенного контроля при выявлении занижения таможенной стоимости при перемещении полиэтилена через таможенную границу ЕАЭС является проверка кода ТН ВЭД ЕАЭС товара. Достоверно зная код ТН ВЭД ЕАЭС товара можно более обоснованно проводить контроль метода определения таможенной стоимости, а также базы ее формирования. Более обоснованным может быть и анализ описания товара в 1

графе ДТ, а также анализ весовых характеристик товарной партии изделий из полиэтилена.

Для идентификации полимеров высокой и низкой плотности мы использовали регрессионный анализ. При проведении ИК-спектроскопии на приборе FT-801 все анализируемые образцы изображаются в виде спектрограммы [1, 2] Рис. 1.

Для проведения регрессионного анализа необходимы числовые значения, для

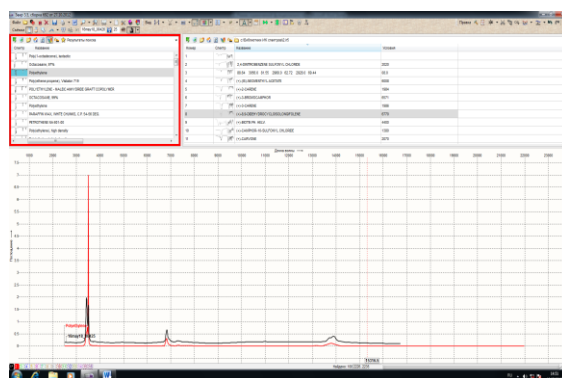


Рис. 1 Спектрограмма ИК-спектроскопии исследованного образца

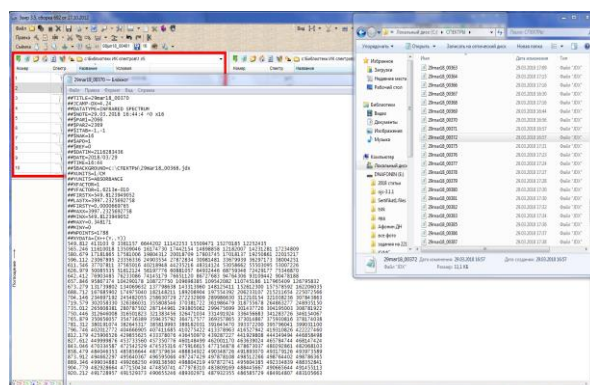


Рис. 2. Файл с результатами ИК-спектроскопии исследованного образца

этого преобразовываем данные прибора в обычном текстовом файле с расширением .jdx.

Основу исследования составили 8 образцов полиэтилена высокой плотности и 8 образцов полиэтилена низкой плотности. Для исследования использовалась приставка МНПВО с элементом из селенида цинка. Полученные результаты были экспортированы в файл MSEXcel для последующего анализа рис. 3.

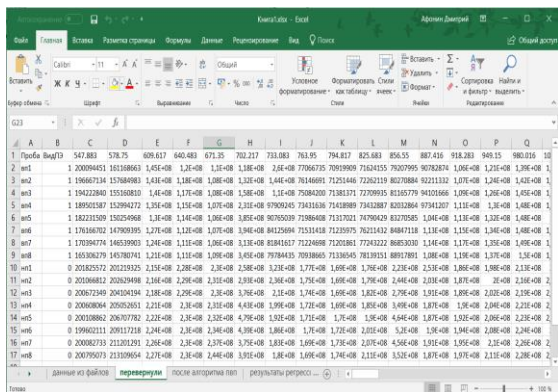


Рис. 3. Результаты экспорта данных ИК-спектрометрии в MSEXcel

Регрессионный анализ проводился в программе Statistica 12. При этом использовался алгоритм последовательного включения признаков. Применение данного алгоритма позволило выявить, что наиболее значимые отличия спектров полиэтилена высокой плотности от полиэтилена низкой плотности находятся на длинах волн 671.36, 3109.82, 3727.15, 3819.75 нм рис. 4. Данные длины волн и использовались нами при последующем анализе.

В результате проведенного исследования была получена регрессионная модель:

$$Y = 2.415 + X_{671.35} \times 3.613 \times 10^{-10} - X_{3109.82} \times 5.153 \times 10^{-9} - X_{3727.15} \times 2.041 \times 10^{-10} + X_{3819.75} \times 2.549 \times 10^{-10}$$

где $X_{671.35}$, $X_{3109.82}$, $X_{3727.15}$, $X_{3819.75}$ – амплитуды спектра на соответствующих длинах волн.

Данная модель имеет характеристики, представленные в таблице 1.

Список литературы

1. Ежеская Т.Б., Бубликов А.В. Пробоподготовка и методы исследования различных объектов на ИК фурье-спектрометре

Parameter Estimates (Kovar1)												
Sigma-restricted parameterization												
Effect	Comment	Beta(T)	Std Err	Beta(T)	t	p	-95.00% Cnf Lmt	+95.00% Cnf Lmt	Beta(T)	St Err	-95.00% Cnf Lmt	+95.00% Cnf Lmt
3109.82		-0.000000	0.000000	-42.3950	6.000000	0.000000	-6.000000	-0.000000	-1.05639	0.024811	-1.11257	-1.004
3140.68												
3171.55												
3202.42												
3233.28												
3264.15												
3295.02												
3325.88												
3356.75												
3387.62												
3418.48												
3449.35												
3480.22												
3511.08												
3541.95												
3572.82												
3603.68												
3634.55												
3665.42												
3696.28												
3727.15		-0.000000	0.000000	-2.3807	0.036453	-0.000000	-0.000000	-0.04793	0.019753	-0.09051	-0.003	
3758.02												
3788.88												
3819.75		0.000000	0.000000	3.7781	0.003057	0.000000	0.000000	0.05999	0.015877	0.02504	0.094	
3850.62												
3881.48												
3912.35												
3943.22												

Univariate Tests of Significance for Beta(T) (Kovar1)					
Forward stepwise selection					
Effective hypothesis decomposition: Std. Error of Estimate: .0007163					
Effect	SS	Degr. of Freedom	MS	F	p
3017.22	0				
3048.08	0				
3078.95	0				
3109.82	0.000949	1	0.000949	1848.6	0.000000
3140.68	0				
3171.55	0				
3202.42	0				
3233.28	0				
3264.15	0				
3295.02	0				
3325.88	0				
3356.75	0				
3387.62	0				
3418.48	0				
3449.35	0				
3480.22	0				
3511.08	0				
3541.95	0				
3572.82	0				
3603.68	0				
3634.55	0				
3665.42	0				
3696.28	0				
3727.15	0.000003	1	0.000003	5.7	0.036453
3758.02	0				
3788.88	0				
3819.75	0.000007	1	0.000007	14.3	0.003057
3850.62	0				
3881.48	0				
3912.35	0				

Рис. 4. Результаты применения алгоритма последовательного включения признаков

Таблица 1

Результаты регрессионного анализа данных спектрометрии

Множественный R	0,999999294
R-квадрат	0,999998589
Нормированный R-квадрат	0,999998076
Стандартная ошибка	0,000716339
Наблюдения	16

Таким образом, построенная модель позволяет с очень высокой точностью идентифицировать полиэтилен высокой и низкой плотности. И это может быть использовано для проверки кода ТН ВЭД ЕАЭС изделия из полиэтилена, что является первым этапом разработанного ранее алгоритма. Следует заметить, что такой метод идентификации в последующем может быть применен не только к полиэтилену, но и к другим полимерам.

2. Таскаев В.И., Диденко Н.А., Громовенко В.В. Проблемы идентификации и классификации линейного полиэтилена низкой плотности // Таможенная политика России на дальнем востоке. 2016. № 1 (62). С. 91–108.

Поступила в редакцию 22.07.2018

Сведения об авторе:

Афонин Дмитрий Николаевич – доктор медицинских наук, профессор кафедры технических средств таможенного контроля и криминалистики Санкт-Петербургского филиала Российской таможенной академии, e-mail: tstk@sbrta.ru