

<https://doi.org/10.3176/chem.1985.4.10>EESTI NSV TEADUSTE AKADEEMIA TOIMETISED. KEEMIA
ИЗВЕСТИЯ АКАДЕМИИ НАУК ЭСТОНСКОЙ ССР. ХИМИЯ
PROCEEDINGS OF THE ACADEMY OF SCIENCES OF THE ESTONIAN SSR. CHEMISTRY

1985, 34, 4

УДК 543.541

Э. КЮЛЛИК, М. КОЭЛЬ, М. КАЛЮРАНД, Ю. БОГОСЛОВСКИЙ**ОБРАБОТКА ДАННЫХ ИССЛЕДОВАНИЯ ЛАКОКРАСОЧНЫХ
ПОКРЫТИЙ ПИРОЛИЗНОЙ ГАЗОВОЙ ХРОМАТОГРАФИЕЙ**E. KÜLLIK, M. KOEL, M. KALJURAND, J. BOGOSLOVSKI. VÄRVKATETE PÜROLOUSGAAS-
KROMATOGRAAFILISTE ANDMETE TÖÖTLEMINEE. KÜLLIK, M. KOEL, M. KALJURAND, Y. BOGOSLOVSKI. PROCESSING OF PYROLYSIS
GAS CHROMATOGRAPHIC DATA OF PAINTS

(Представил О. Эйзен)

Пиролизная газовая хроматография широко применяется для сравнительного исследования разных природных и полимерных материалов [1]. Аналитические качественные и количественные данные о компонентном составе продуктов пиролиза (их времена удерживания и относительное содержание) являются при этом начальными. Обычно такие массивы данных не наглядны даже для опытного специалиста, а их ручная обработка весьма трудоемка.

В настоящей работе обработаны данные исследований продуктов пиролиза лакокрасочных покрытий (ЛКП) с однотипным связующим для выявления внутривидовой дифференциации [2]. Исследованные автоэмали имели в основном одинаковый качественный состав продуктов пиролиза, однако существенно различались по содержанию ряда компонентов. Для сравнительного анализа этих материалов были рассчитаны относительные количественные содержания компонентов, соответствующих пикам на хроматограмме с индексами Ковача 850, 970, 1070, 1130.

В дальнейшем был использован математический подход, при котором объекты, обладающие совокупностью признаков, рассматриваются как образы, охарактеризованные многомерным вектором (в данном случае 4-мерным). Для изображения совокупности векторов (103 образа) на плоскости их проецировали на оси, соответствующие двум главным компонентам данной совокупности, вторую проекцию на плоскости получали нелинейным картографированием [3]. Для этих методов изображения характерно то, что близкие по свойствам объекты локализуются на плоскости в определенной области, что дает возможность классифицировать и идентифицировать их (рис. 1, 2). Цель такого подхода — облегчение решения проблемы, представление получаемой информации в более наглядной форме (в виде графиков и картин) и более адекватная идентификация неизвестных объектов.

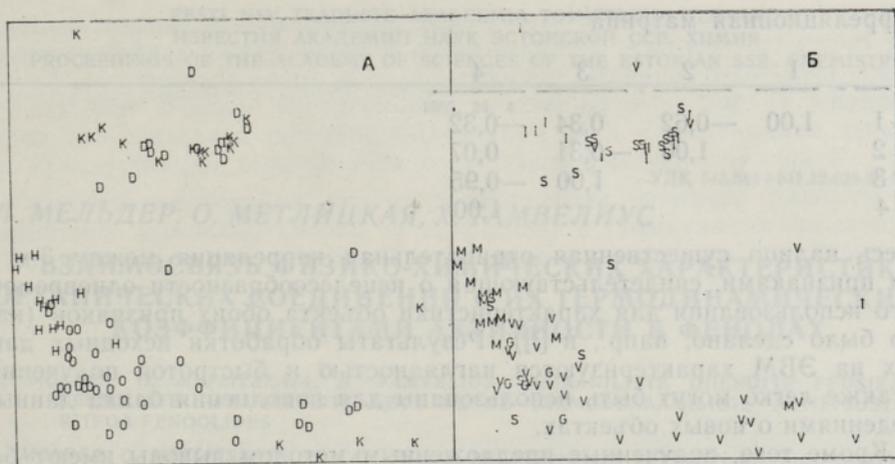


Рис. 1. Проекция данных на оси, соответствующие двум главным компонентам. На проекции отражается 90% дисперсии всей совокупности.

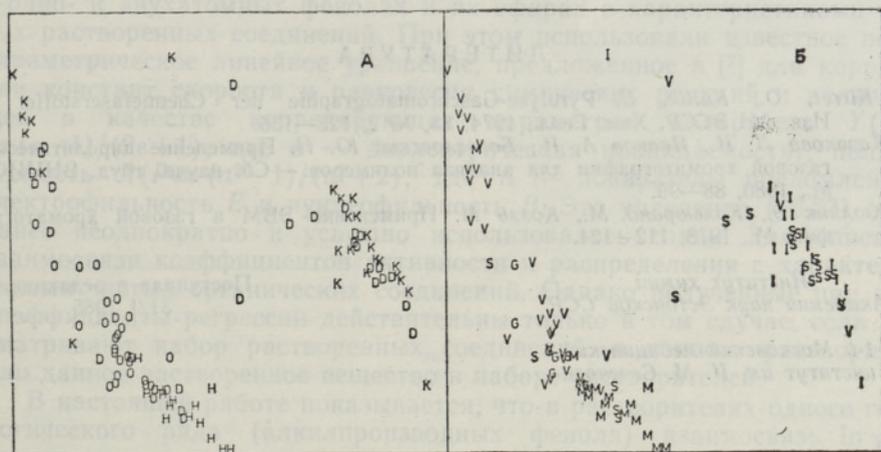


Рис. 2. Нелинейное картографирование. Ошибка при проектировании 5%.

А — данные по источнику изготовления материала, Б — данные по источнику изготовления покрытия.

Обозначения: О — отечественное, Н — «Хелиос», К — «Хромое», D — «Дуга»; V — ВАЗ, S — ЗАЗ, G — ГАЗ, I — ИжАЗ, M — АЗЛК.

Вычисления проводили на ЭВМ СМ-3, пакет программ химометрического анализа составлен авторами данной работы. Результаты выдавались непосредственно на плоттер НР 7224А.

Оба метода двумерного представления пирогамм дали одинаковые результаты, т.е. образцы ЛКП с однотипным связующим можно дифференцировать как по источнику изготовления лакокрасочного материала (отечественные и импортные материалы различных фирм), так и по источнику изготовления покрытия (автомобильный завод). Кроме того, по корреляционной матрице, вычисляемой при проецировании на главные компоненты, можно устанавливать корреляционные отношения между признаками, характеризующими объект.

Корреляционная матрица

	1	2	3	4
1	1,00	-0,62	0,34	-0,32
2		1,00	-0,31	0,07
3			1,00	-0,95
4				1,00

Здесь налицо существенная отрицательная корреляция между 3-м и 4-м признаками, свидетельствующая о нецелесообразности одновременного использования для характеристики объекта обоих признаков (как это было сделано, напр., в [2]). Результаты обработки исходных данных на ЭВМ характеризуются наглядностью и быстротой получения, а также легко могут быть использованы для пополнения банка данных сведениями о новых объектах.

Кроме того, полученные предложенным методом выводы имеют более общий характер, чем при простом сопоставлении, при котором возможно рассмотрение красок только одного цвета.

ЛИТЕРАТУРА

1. Kirret, O., Küllik, E. Pyrolyse-Gaschromatographie der Chemiefaserstoffe. — Изв. АН ЭССР. Хим. Геол., 1974, 23, № 2, 125—136.
2. Казакова Л. И., Иванов А. И., Богословский Ю. Н. Применение пиролитической газовой хроматографии для анализа полимеров. — Сб. научн. труд. ВНИИСЭ. М., 1980, 88—99.
3. Кюлик Э., Кальюранд М., Коэль М. Применение ЭВМ в газовой хроматографии. М., 1978, 112—124.

Институт химии
Академии наук Эстонской ССР

Поступила в редакцию
31/I 1985

1-й Московский медицинский
институт им. И. М. Сеченова