

**ИСПОЛЬЗОВАНИЕ МЕТОДА PLS-ДИСКРИМИНАЦИЙ ДЛЯ КЛАССИФИКАЦИИ  
ИСХОДНОГО И МОДИФИЦИРОВАННОГО ТОРФА**

А.Г. Зарубин

Научный руководитель: доцент, к.х.н. Н.В. Чухарева

Национальный исследовательский Томский политехнический университет,

Россия, г. Томск, пр. Ленина, 30, 634050

E-mail: [zagtpuru@gmail.com](mailto:zagtpuru@gmail.com)**THE USE OF PLS-DISCRIMINANT ANALYSIS FOR CLASSIFICATION OF INITIAL AND  
MODIFIED PEAT**

A.G. Zarubin

Scientific Supervisor: Assoc. prof., PhD. N.V. Chukhareva

Tomsk Polytechnic University, Russia, Tomsk, Lenin str., 30, 634050

E-mail: [zagtpuru@gmail.com](mailto:zagtpuru@gmail.com)

***Annotation.** The use of partial least squares projections to latent structures with discriminant analysis (PLS-DA) in classification of initial and modified peat by a set of properties is presented. Modification of peat is achieved by heating. The set of peat properties such as component composition, concentration of paramagnetic centers and IR-spectra was used. It is shown that a developed PLS-DA classification model allows estimating peat class (initial or modified) by a set of properties without prediction errors by using two or three latent variables.*

Свойствам торфа как исходного, так и модифицированного уделяется большое внимание из-за ценности его органической части [1–2]. Материалы на основе торфа находят широкое применение для решения различных задач в отраслях сельского хозяйства, промышленности, а так же для решения ресурсоэффективных экологических задач [3–4]. Использование термического модифицирования торфа позволяет изменить его свойства. Поэтому существует необходимость идентификации исходных и модифицированных торфов, т.е. необходимо решить математическую задачу классификации объектов исследования по набору свойств. Для решения подобных задач широко используются проекционные методы, основанные на статистическом подходе к обработке информации. Одним из таких методов является метод PLS-дискриминаций (PLS-DA). Метод PLS-DA является развитием метода главных компонент (PCA), который позволяет понизить размерность многомерных данных, выдвигая на первый план главные компоненты (PC) и представляя свойства исследуемых объектов в новом пространстве главных компонент [5].

Цель данной работы состоит в оценке применимости метода PLS-DA для классификации исходного и термически модифицированного торфа на основе набора физико-химических свойств.

В соответствии с целью были поставлены следующие задачи:

- вычислить матрицу счетов по набору свойств исходного и модифицированного торфа;
- построить и проверить PLS-модель.

Объекты исследования: двадцать образцов двух классов (исходного и термически обработанного при 250 °С) торфа Томской области (Россия) были исследованы на ряд свойств, таких как ботанический состав, элементный состав, групповой состав, функциональный состав методом ИК-спектроскопии и методом электронного парамагнитного резонанса. Набор физико-химических параметров был представлен в матрице исходных данных четырнадцатью переменными.

Структура данных двух классов торфа (исходного – Класс1 и термически обработанного при 250 °С – Класс2) представлена на рис. 1 и разделена на набор калибровки (XCal) и набор проверки (XVal).



Рис. 1. Структура данных

Реализация метода PLS-DA в редакторе электронных таблиц Excel описана А.Л. Померанцевым [6]. На основании набора данных в Excel была построена и проверена PLS-модель классификации. Результаты были получены для трех латентных переменных, две из которых представлены на рис. 2.

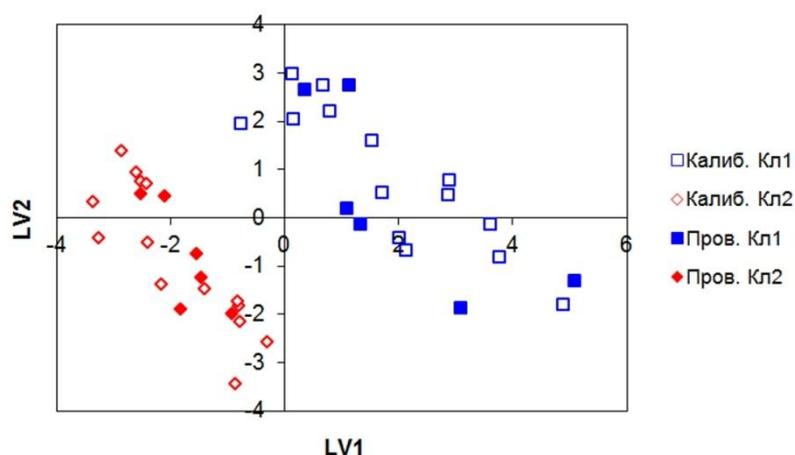


Рис. 2. Счета латентной переменной 1 (LV1) и латентной переменной 2 (LV2)

Установлено, что построенная PLS-модель с уровнем дискриминации 0,5 позволяет классифицировать исходный и термически модифицированный торф при отсутствии ошибок предсказания класса, используя как две, так и три латентные переменные.

Построение PLS-предсказаний трех латентных переменных представлено на рис. 3.

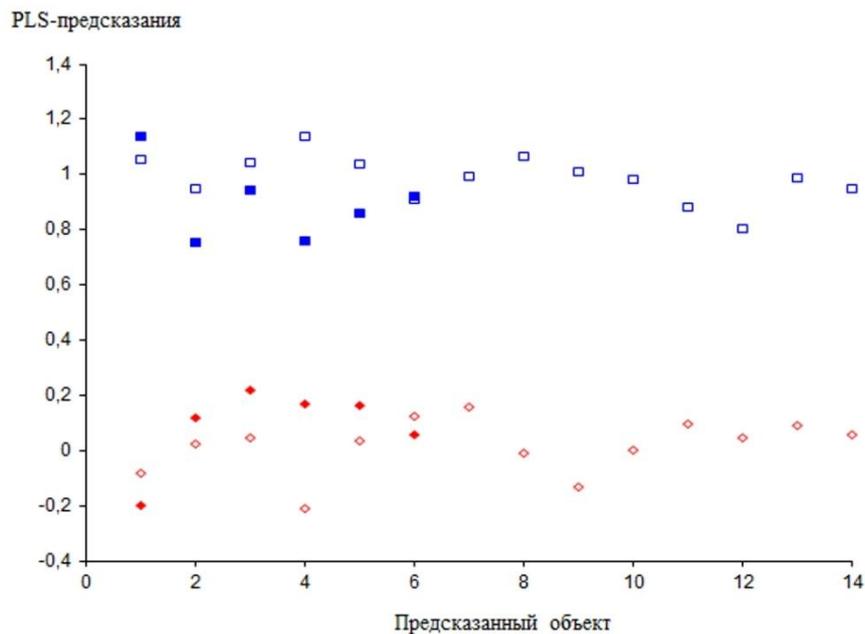


Рис. 3. PLS-предсказания трех латентных переменных

Метод PLS-DA был применен для двух классов (исходного и термически обработанного при 250 °C) торфа. PLS-модель была построена и проверена, ошибки предсказания отсутствовали при использовании двух или трех латентных переменных. В работе показано, что применение метода PLS-DA позволяет идентифицировать исходные и модифицированные торфа Томской области по набору физико-химических свойств. Дискриминационный анализ ясно показывает, что термически модифицированный торф отличается по физико-химическим свойствам от исходного торфа, а термическая модификация ведет к получению новых торфяных материалов на основе исходного торфа. Необходимо также отметить, что PLS-модель, представленная в статье, построена только для Сибирского торфа, но она может быть применена для других типов торфов при определенной коррекции.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Архипов В.С., Прейс, Ю.И., Бернатонис, В.К. Битуминозные торфа Томской области / В.С. Архипов, Ю.И. Прейс, В.К. Бернатонис [и др.]; Том. политехн. ун-т, Ин-т мониторинга климат. и экол. систем СО РАН. – Томск: STT, 2008. – 238 с.
2. Лиштван И. И., Король Н. Т. Основные свойства торфа и методы их определения // Минск: Наука и техника. – 1975. – Т. 320. – С. 12.
3. Sokolov B.N., Yampolski A.L. Socio-economic consequences of industrial development of peat deposits in the USSR // Socio-economic impacts of the utilization of peatlands in industry and forestry: proceedings of the IPS Symposium, Oulu, Finland, June 9-13, 1986. – International Peat Society, Finnish National Committee, 1986. – С. 69.
4. Shishmina L.V. Influence of peat humates on flotation of coal / L.V. Shishmina, N.V. Chukhareva, A.V. Kravtsov // Кокс и химия. – 2002. – № 2. – С. 7–9.
5. Brereton R.G. Applied Chemometrics for Scientists. – Wiley, Chichester, UK, 2007. – 379 p.
6. Померанцев А.Л. Хемометрика в Excel: учебное пособие. – Томск: Из-во ТПУ, 2014. – 435 с.