

Применение хемометрики в таможенной экспертизе

А.Л. Померанцев, О.Е. Родионова

*Федеральный исследовательский центр химической физики РАН (ФИЦ ХФ РАН)
Российская Федерация, 119991, Москва, ул. Косыгина, 4*

Адрес для переписки: Померанцев Алексей Леонидович, E-mail: forecast@chph.ras.ru

Поступила в редакцию 13 декабря 2023 г.

В сообщении представлены сведения об опубликованных в этом номере журнала статьях экспертов таможенных служб Российской Федерации, которые явились результатом успешного прохождения ими курса по хемометрике, проведенного авторами сообщения.

Ключевые слова: хемометрика, курсы повышения квалификации, таможенная экспертиза

For citation: Analitika i kontrol' [Analytics and Control], 2023, vol. 27, no. 4, pp. 265-266

DOI: 10.15826/analitika.2023.27.4.007

Application of chemometrics in customs expertise

A.L. Pomerantsev, O.E. Rodionova

*Federal Research Center for Chemical Physics of the Russian Academy of Sciences (FITC HF RAS)
4 Kosygina Str., Moscow, 119991, Russian Federation*

*Corresponding author: Alexey L. Pomerantsev, E-mail: forecast@chph.ras.ru

Submitted 13 December 2023

The short communication provides information about the papers published in this issue of the journal by the experts of customs services of the Russian Federation, which resulted from their successful completion of the course in chemometrics conducted by the authors of the communication.

Keywords: chemometrics, advanced training courses, customs expertise

Хемометрика – это очень практическая дисциплина, которая нашла свое применение в самых разных областях человеческой деятельности: от защиты культурного наследия до аграрного производства [1]. В последнее время одно направление развивается особенно быстро – это подтверждение аутентичности, т.е. соответствия товара его сопроводительной документации [2]. Такая постановка встречается в задачах проверки еды [3], лекарств [4], в судебной экспертизе [5] и еще много где. Но в таможенной экспертизе аналогичные работы нам не известны. Поэтому мы с интересом приняли предложение провести курс по хемометрике для таможенных экспертов.

Обучение проходило в октябре 2022 года, на базе Саратовского национального исследовательского государственного университета имени Н. Г. Чернышевского. В курсе участвовали 13 экспертов, представляющих всю страну – от Владивостока до Калининграда. Должны скромно признаться, что у нас накопился большой опыт проведения такого обучения, как в очном формате, так и дистанционно. За последние 15 лет мы провели более 100 курсов для специалистов из разных стран – от Финляндии до

Новой Зеландии. Так что, нам было с чем сравнивать, как проходило обучение таможенных экспертов. Мы высоко оцениваем их работу – как очную, так и заочную. Это была самая способная и организованная группа, заинтересованная в получении знаний и практических навыков. И, заметьте, что это были не молодые специалисты, а зрелые эксперты, мужчины и женщины, от 30 до 50 лет.

Курс завершился, но история на этом не закончилась. Через небольшое время наши слушатели-эксперты решили применить полученные знания на практике. Они самостоятельно выделили из своей практики пять задач, разработали и провели все необходимые эксперименты, построили хемометрические модели, и обратились к нам с вопросом – а можно ли опубликовать полученные результаты? Мы посмотрели на их наброски, удивились, и поняли, что результаты достойны опубликования в научном журнале. Для публикации был выбран журнал «Аналитика и контроль»

Вниманию читателей предлагается пять работ, объединенных одной общей идеей – быстро проверить достоверность декларирования соответствия, используя простые инструменты с минимальной



Слушатели курса по хемометрике для таможенных экспертов
Attendees of the course on chemometrics for customs experts

пробоподготовкой, потому что «математика дешевле химии» [6].

П.Н. Березов, В.Е. Гольева представляют экспресс-методику определения группы нефтяных топлив с помощью ИК спектроскопии и дискриминантного анализа на основе регрессии на латентные структуры (PLS-DA). Д.В. Лякаев, М.О. Пастухов различают минеральные, синтетические и полусинтетические моторные масла по результатам хромато-масс-спектрометрии с помощью регрессии на главные компоненты (PCR). Е.С. Огородникова использует ИК спектроскопию для установления наличия в составе битумных продуктов блок-сополимера стирола с бутадиеном с помощью метода одноклассовой классификации – формального независимого моделирования аналогий классов (DD-SIMCA). А.С. Мухаметганеева, А.Р. Байгузина применяют дискриминантный анализ (Hard- и Soft PLS-DA) для идентификации нефтепродуктов по результатам газовой хроматографии. С.И. Азаренко, И.О. Кузнецов также используют ИК спектроскопию для исследования сополимеров с помощью DD-SIMCA и PLS-DA.

В заключение хотим еще раз подчеркнуть, что авторы этой заметки не участвовали в постановках этих задач, не проводили эксперименты, не анализировали данные. Все что мы сделали – это провели пятидневный курс по хемометрике, снабдили удобным математическим обеспечением и дали авторам простые советы по оформлению их работ.

ЛИТЕРАТУРА

1. Pomerantsev A.L., Rodionova O.Ye. Process analytical technology: a critical view of the chemometricians // *J. Chemom.*, 2012. V. 26. № 6. P. 299-310.
2. Rodionova O.Ye., Titova A.V., Pomerantsev A.L. Discriminant analysis is an inappropriate method of authentication // *Trends Anal. Chem.*, 2016. V. 78, № 4. P. 17-22.

3. Trends in Chemometrics: Food Authentication, Microbiology, and Effects of Processing / D. Granato [et al.] // *Comp. Rev. Food Sc. Food Saf.* 2018. V. 17, № 3. P. 663-677.
4. Noninvasive detection of counterfeited ampoules of dexamethasone using NIR with confirmation by HPLC-DAD-MS and CE-UV methods / O.Ye. Rodionova [et al.] // *Anal. Bioanal. Chem.* 2010. V. 397, № 5. P. 1927-1935.
5. Sauzier G., Van Bronswijk W., Lewis S.W. Chemometrics in forensic science: Approaches and applications // *Analyst.* 2021. V. 146, № 8. P. 2415-2448.
6. Borman S.A Math Is Cheaper than Physics. *Anal. Chem.* 1982. V. 54, № 13. P. 1379A-1380A.

REFERENCES

1. Pomerantsev A.L., Rodionova O.Ye. Process analytical technology: a critical view of the chemometricians. *J. Chemom.*, 2012, vol. 26, no. 6, pp. 299-310. doi: 10.1002/cem.2445.
2. Rodionova O.Ye., Titova A.V., Pomerantsev A.L. Discriminant analysis is an inappropriate method of authentication. *Trends Anal. Chem.*, 2016, vol. 78, no. 4, pp. 17-22. doi: 10.1016/j.trac.2016.01.010.
3. Granato D., Putnik P., Kovacevic D.B., Santos J. S., Calado V., Rocha R.S., Da Cruz A.G., Jarvis B., Rodionova O. Ye., Pomerantsev A. Trends in Chemometrics: Food Authentication, Microbiology, and Effects of Processing. *Comp. Rev. Food Sc. Food Saf.*, 2018, vol. 17, no. 3, pp. 663-677. doi: 10.1111/1541-4337.12341
4. Rodionova O.Ye., Pomerantsev A.L., Houmøller L.C., Shpak A.V., Shpigun O.A. Noninvasive detection of counterfeited ampoules of dexamethasone using NIR with confirmation by HPLC-DAD-MS and CE-UV methods. *Anal. Bioanal. Chem.*, 2010, vol. 397, no. 5, pp. 1927-1935. doi: 10.1007/s00216-010-3711-y
5. Sauzier G., Van Bronswijk W., Lewis S.W. Chemometrics in forensic science: Approaches and applications. *Analyst*, 2021, vol. 146, no. 8, pp. 2415-2448. doi: 10.1039/d1an00082a
6. Borman S.A., Math Is Cheaper than Physics, *Anal. Chem.*, 1982, vol. 54, no. 13, pp. 1379A-1380A. doi: 10.1021/ac00250a731