

ICS 号
中国标准文献分类号

团体标准

T/CSRA XXX-XXXX
T/SGX XXX-XXXX

原生与再生塑料鉴别试验方法 紫外可见 分光光度法

Identification Method for Virgin and Recycled Plastic:

Uv-visible Spectrophotometry

(征求意见稿)

2025-XX-XX 发布

2025-XX-XX 实施

中国合成树脂协会
深圳市高分子行业协会

联合发布

前言

本文件按照 GB/T 1.1-2020 《标准化工作导则 第 1 部分：标准化文件的结构和起草规则》给出的规则起草。

本文件由中国合成树脂协会和深圳市高分子行业协会共同提出

本文件由中国合成树脂协会标准化技术委员会和深圳市高分子行业协会标准化技术委员会联合归口。

本文件起草单位：

本文件主要起草人：

本文件为首次发布。

1 范围

本文件规定了原生塑料与消费后机械回收塑料鉴别的紫外可见分光光度法。

本文件适用于通过物理法回收，经筛选、分类、破碎、熔融挤出造粒制成的颗粒状再生聚乙烯（PE）塑料材料（简称粒料或切片）。聚丙烯（PP）、聚对苯二甲酸乙二醇酯（PET）等再生塑料可参考使用。

本文件不适用于由边角料回收再生的塑料材料，也不适用于通过化学或半化学法生产的再生塑料。

2 规范性引用文件

下列文件中的内容通过文中的规范性引用而构成本文件必不可少的条款。其中，注日期的引用文件，仅该日期对应的版本适用于本文件；不注日期的引用文件，其最新版本（包括所有的修改单）适用于本文件。

GB/T 2035-2024 塑料 术语

GB/T 40006.1-2021 塑料 再生塑料 第1部分：通则

GB/T 40006.2-2021 塑料 再生塑料 第2部分：聚乙烯（PE）材料

GB/T 30102-2024 塑料废弃物的回收和再利用指南

3 术语和定义

GB/T 2035-2024、GB/T 40006.1-2021、GB/T 40006.2-2021 和 GB/T 30102-2024 界定的以及下列术语和定义适用于本文件。

3.1 原生塑料 virgin plastic

未经使用或加工（最初制造所需的加工除外）的塑料，其形态可以是颗粒、小粒、粉末或絮状等。

[GB/T 2035-2024, 3.1424]

3.2 再生塑料 recycled plastic

利用废弃的塑料加工而成的用作原用途或其他用途的塑料，但不包括能量回收。

注1：从广义上讲，塑料的再生包括边角料或废弃制品的任何再利用，包括热解以回收有用的有机化学品。

注2：再生塑料可以再配或不配填料、增塑剂、稳定剂、颜料等。

[GB/T 40006.1-2021, 3.1]

3.3 机械再生 mechanical recycling

将塑料废弃物转化成二次原材料或产品的加工过程,在这一过程中材料的化学结构没有发生显著变化。

[GB/T 30102 (等同采用 ISO15270), 定义 3.21。 原定义翻译为“机械再循环”, 本文件译为“机械再生”]

3.4 化学再生 chemical recycling

(塑料废弃物的回收)除能量回收和焚烧外,通过裂解、气化或解聚反应,使得塑料废弃物的化学结构发生改变,生成新的单体或原材料的加工过程。

[GB/T 2035-2024, 3.455]

3.5 半化学再生 paste-in recycling

将回收的聚合物直接添加到相同类型的原生聚合物聚合反应体系中,通过部分解聚和再聚合过程,制备含有回收成分的新材料。

3.6 随机森林 random forest

一种通过构建多个决策树并汇总其预测结果来进行分类或回归的机器学习算法。

3.7 基尼不纯度 gini impurity

一种衡量数据集不纯度的指标,即从数据集中随机筛选样本,所筛选样本具有不同分类的概率。

3.8 超参数 hyperparameter

一种在模型训练前设定,用于控制鉴别模型训练行为和性能的参数。

3.9 网格搜索 grid search

一种在预设的超参数组合范围内逐一训练模型并评估性能,以确定最优的超参数组合的优化方法。

3.10 受试者工作特征曲线 receiver operating characteristic curve,

一种评价分类模型性能的方法,通过绘制在不同分类阈值下假阳性率与真阳性率的关系曲线来衡量模型区分正负样本的能力,其曲线下面积(ROC-AUC)可以用来量化模型的总体性能。

4 方法原理

再生塑料生命周期中不同的阶段可能会引入或失去有机化合物,从而导致原生和再生塑料中出现差异性物质,因此可以基于原生和再生塑料中可提取小分子物质的光谱特征差异对

再生塑料进行鉴别。将试样按指定的样品提取和检测条件进行紫外可见分光光度法分析，通过建立基于原生塑料和再生塑料中可提取化合物光谱特征的随机森林二分类模型，预测未知塑料样品的分组情况，以确定其是否含有消费后物理再生塑料。

5 试剂和材料

正己烷：分析纯。

6 仪器和设备

6.1 紫外可见分光光度计：配备 1 cm 石英比色皿。

6.2 分析天平：感量 0.1 mg。

6.5 超声清洗仪：功率 240 W。

6.6 顶空瓶：20 mL，带密封盖垫。

7 试验步骤

7.1 样品提取

准确称量 1.0 g（精准至 0.01 g）试样于 20 mL 顶空瓶，移取加入 5 mL 正己烷，在 40 °C 下超声提取 2 小时。待超声结束后冷却至室温，使用 0.45 μm 有机相微孔滤膜过滤提取液于洁净顶空瓶，备用。

7.2 紫外可见光光度计参考条件

仪器开机后预热半小时，按以下参数进行设置：

- （1）波长扫描范围：200 ~ 800 nm。
- （2）采样间隔：1.0 nm。
- （3）数据采集模式：透过率。

7.3 分析步骤

7.3.1 向洁净石英比色皿内加入洁净正己烷，采用上述仪器参考条件（7.2）进行分析，作为空白参比样品，校正仪器基线。

7.3.2 向洁净石英比色皿内加入试样提取液（7.1），采用上述仪器参考条件（7.2）进行分析，至少独立测试 2 次。

注：校正后仪器基线的透过率应在 99%~101%之间。

8 数据处理

8.1 数据平滑

按照以下公式（1）和（2），对所采集的原始光谱的透过率数据进行平滑处理。

$$T_{smo} = \frac{\sum_{i=1}^n K\left(\frac{w-w_i}{h}\right) T_i}{\sum_{i=1}^n K\left(\frac{w-w_i}{h}\right)} \quad \dots\dots\dots (1)$$

$$K\left(\frac{w-w_i}{h}\right) = \begin{cases} 1, & \left|\frac{w-w_i}{h}\right| \leq \frac{1}{2} \\ 0, & \left|\frac{w-w_i}{h}\right| > \frac{1}{2} \end{cases} \quad \dots\dots\dots (2)$$

式中：

T_{smo} ——特定波长对应的平滑后透过率；

n ——采集的波长数量；

w ——当前波长值；

w_i ——第 i 个波长值；

h ——波长带宽；

T_i ——第 i 个波长对应的透过率。

8.2 标准化

按照以下公式（3），对平滑处理后的光谱透过率数据进行标准化。

$$T_{std} = \frac{T_{smo} - \mu}{\sigma} \quad \dots\dots\dots (3)$$

式中：

T_{std} ——标准化后的透过率；

T_{smo} ——当前波长的平滑后透过率；

μ ——所有样品中当前波长的透过率的平均值；

σ ——所有样品中当前波长的透过率的标准偏差。

9 鉴别模型的构建

9.1 建模软件要求

所使用的软件应能支持分层随机抽样、交叉验证、随机森林算法和超参数调优功能的实现，能够计算模型评估指标，包括基尼不纯度、准确率、受试者工作特征曲线下面积

(AUC-ROC)，并且支持结果可视化功能，包括绘制受试者工作特征曲线（ROC）曲线。

9.2 数据划分

9.2.1 训练集和测试集划分

按样品类别（原生/再生塑料）对处理和筛选后的标志性组分数据矩阵进行分层随机抽样，选取 80% 的数据作为训练集，其余 20% 作为测试集。在划分过程中，应确保每个样品类别在训练数据和测试数据中的比例一致，并且同一样品的平行数据不应同时出现在训练数据和测试数据中。

9.2.2 交叉验证数据划分

按样品类别（原生/再生塑料）对训练集数据（9.2.1）进行分层随机抽样，划分出 10 个互斥子集。在划分过程中，应确保每个样品类别在训练数据和测试数据中的比例一致，并且同一样品的平行数据不应同时出现在训练数据和测试数据中。

9.3 模型建立与优化

基于网格搜索构建随机森林模型的超参数组合及其范围，包括树的数量，每次节点分裂时随机选择的特征数量和每个节点的最小样本数。

在不同超参数组合下，采用 10 倍交叉验证，选取 1 个子集（9.2.2）作为验证集子集，其余 9 个子集（9.2.2）作为训练集子集对随机森林模型进行拟合，并对验证集子集进行预测。重复该过程 10 次，确保每个子集在过程中被用作一次验证子集后，计算每个超参数组合下 10 次验证结果的 ROC-AUC 值，并计算其平均值。

9.4 模型评估

选择 AUC-ROC 值最高的超参数组合作为最优模型参数，使用最优超参数组合、训练集数据（9.2.1）对随机森林模型进行重新拟合，得到最终鉴别模型。

将测试集（9.2.1）输入最终鉴别模型中进行鉴别，并计算分类准确率和 AUC-ROC。准确率不应低于 95%，且 AUC-ROC 不应低于 0.95。

注 1：为使得鉴别模型具有代表性，不同来源或批次的原生和再生塑料数量应各不少于 50 个。

注 2：可使用第三方提供的鉴别模型，使用前应分析各不少于 10 个的原生和再生塑料作为验证样品，并对其透过率数据进行汇总后输入模型进行预测。验证样品的鉴别准确率应不低于 95%。

10 未知样品鉴别

10.1 样品分析

10.1.1 按照 7.1 方法制备未知塑料试样的待测液。其中，未知样品应至少进行 3 次独立测试。

10.1.3 按照 7.2 仪器条件和 7.3 方法校正仪器基线后，对样品待测液进行分析。

10.1.4 按照 8 方法对未知样品的光谱透过率数据进行数据处理，并汇总形成数据矩阵。

10.2 鉴别分析

将处理后的光谱透过率数据矩阵输入到已建立和优化后的随机森林二分类模型（9.4）中进行判别分析：若模型预测结果为再生的概率 ≥ 0.5 ，则待测样品为再生塑料，反之则为原生塑料。依据多次独立测试结果中预测类型占多数的结果为待测样品的最终鉴别结果。

征求意见稿