

Научная конференция НИИЯФ МГУ по итогам 2024 года
24 февраля 2025 г., online

Основные результаты ЛАМОД за 2024 год: АНАЛИЗ ДАННЫХ ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ ГАЗОВЫХ СЕНСОРОВ.*

Исаев И.В.^{1,2,3}, Чернов К.⁴, Щуров Н.О.^{1,4}, Доленко С.А.¹, Кривецкий В.В.^{3,5}

¹ НИИ ядерной физики, МГУ, Москва, Россия

² ИРЭ РАН, Москва, Россия

³ НПК «Технологический центр», Зеленоград, Москва, Россия

⁴ Физический факультет, МГУ, Москва, Россия

⁵ Химический факультет, МГУ, Москва, Россия

* Исследование выполнено за счёт гранта Российского Научного Фонда № 22-19-00703,
<https://rscf.ru/en/project/22-19-00703/>.

Определение состава газовых смесей

Области применения

- ❑ Промышленность
 - Безопасность технологических процессов
 - Средства индивидуальной защиты персонала
- ❑ Экологический мониторинг
 - Оценка качества воздуха городов, промышленных зон, транспорта, жилых и рабочих помещений
- ❑ Медицина
 - Неинвазивная медицинская диагностика и контроль течения болезней
 - Контроль эффективности спортивных тренировок
- ❑ Экспресс - анализ качества, оригинальности, свежести продуктов питания и напитков на основе их запаха.



Определение состава газовых смесей

Существующие технические решения

Принципы работы газоаналитических датчиков:

Термокаталитический

- Измерение количества тепла выделяемого при сгорании газа на катализаторе

Термокондуктивный

- Измерение разницы теплопроводности

Электрохимический и гальванический

- Измерение силы тока, возникающего при химических процессах в электролите

Оптический

- Инфракрасный (ИК-поглощение), интерферометрический, фотоионизационный (УФ)

Полупроводниковый

- Измерение изменения сопротивления полупроводника при абсорбции газов

Определение состава газовых смесей

Существующие технические решения

Преимущества полупроводниковых сенсоров:

- ❑ Возможность длительной непрерывной работы
 - Не имеют расходующихся частей в отличие от электрохимических сенсоров
- ❑ Более низкий предел обнаружения газов
 - По сравнению с оптическими и термокatalитическими сенсорами
- ❑ Широкий спектр детектируемых веществ
- ❑ Низкая стоимость
 - Возможность использования масштабируемых технологий изготовления
- ❑ Низкое энергопотребление
- ❑ Миниатюрность

Определение состава газовых смесей

Направление работ

Общее направление работ: разработка мультidetекторного прибора, содержащего как один, так и массив сенсорных элементов, для одновременного выявления нескольких веществ в воздухе, а также определения качественного и количественного состава газовых смесей.

Определение состава газовых смесей

Возможные постановки задач ММО

Общее направление работ: разработка мультidetекторного прибора, содержащего как один, так и массив сенсорных элементов, для одновременного выявления нескольких веществ в воздухе, а также определения качественного и количественного состава газовых смесей.

Возможные постановки задач, при использовании методов машинного обучения:

Регрессия

- Определение концентрации конкретного газа в воздухе,

Бинарная классификация, многоклассовая классификация

- Определение наличия/отсутствия конкретного газа в воздухе, содержащим примесь одного газа

Многометочная классификация

- Определение качественного состава газовой смеси из нескольких газов

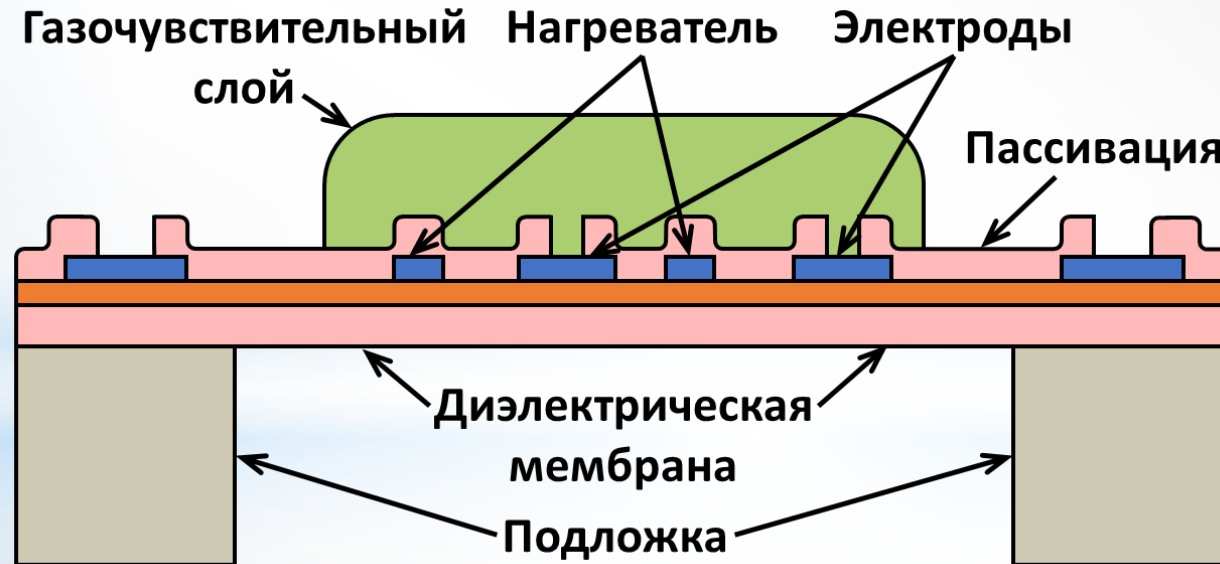
На этапе
набора
данных

Планируется

Физический эксперимент

Полупроводниковый газовый сенсор

Схематическое устройство полупроводникового газового сенсора

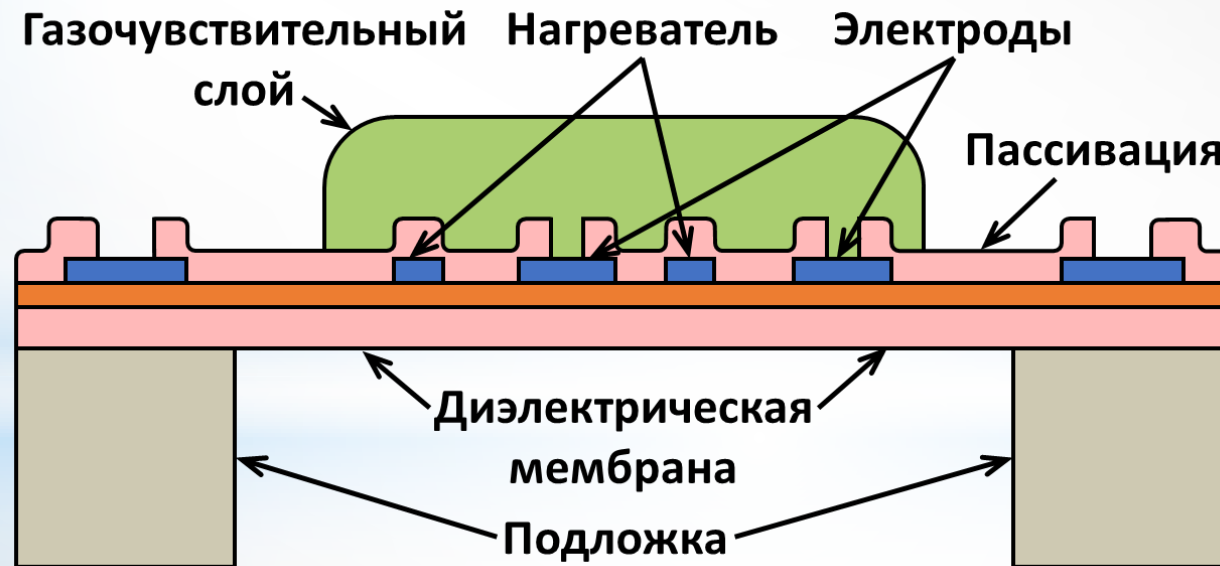


Принцип работы полупроводникового газового сенсора основан на том, что молекулы газа, связывающиеся с материалом сенсора, влияют на его проводимость (электрическое сопротивление).

Физический эксперимент

Полупроводниковый газовый сенсор

Схематическое устройство полупроводникового газового сенсора



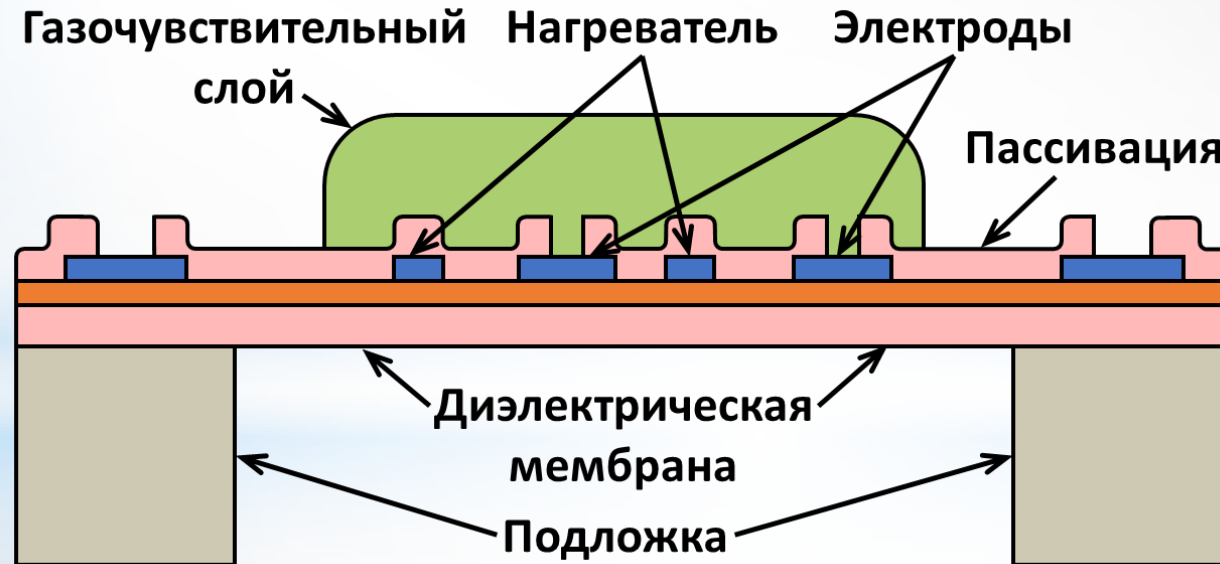
Факторы, влияющие на степень связывания:

- Тип газа и его концентрация
- Материал датчика
- Температура

Физический эксперимент

Полупроводниковый газовый сенсор

Схематическое устройство полупроводникового газового сенсора



Факторы, влияющие на степень связывания:

- Тип газа и его концентрация
- Материал датчика
- Температура

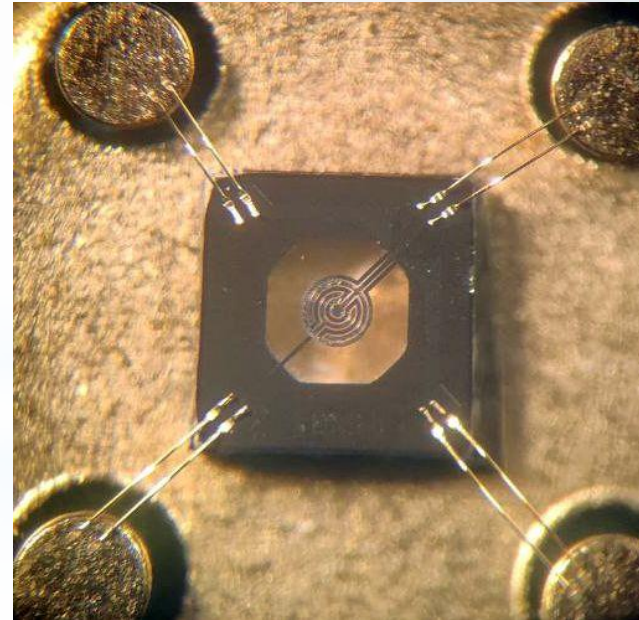
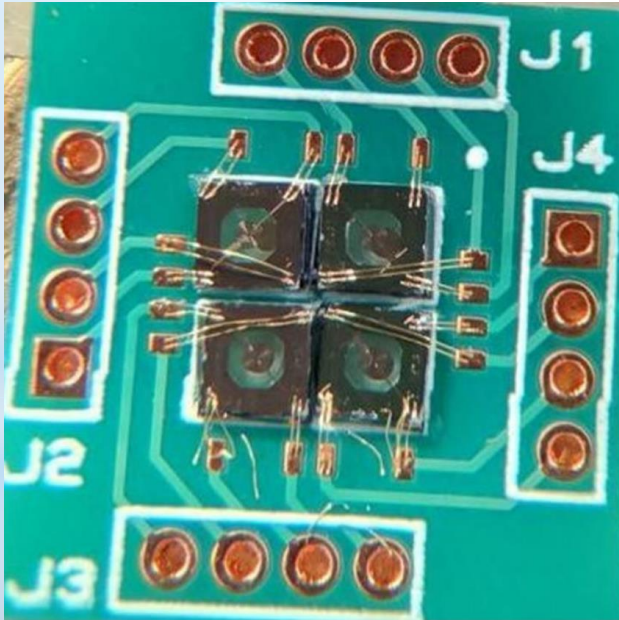


Для достижения **селективности** при определении конкретных газов используется **комплект сенсоров** с различными **легирующими добавками**

Физический эксперимент

Полупроводниковый газовый сенсор

Комплект сенсорных элементов



Факторы, влияющие на степень связывания:

- Тип газа и его концентрация
- Материал датчика
- Температура

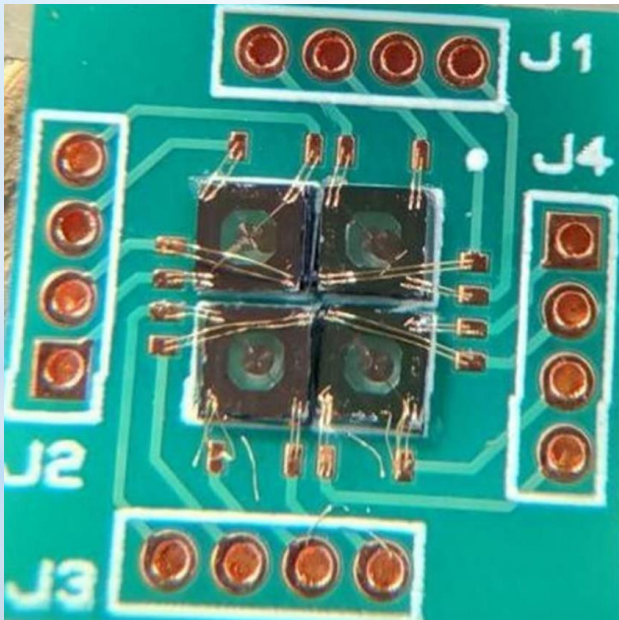


Для достижения **селективности** при определении конкретных газов используется **комплект сенсоров** с различными **легирующими добавками**

Физический эксперимент

Полупроводниковый газовый сенсор

Комплект сенсорных элементов



Факторы, влияющие на степень связывания:

- Тип газа и его концентрация
- Материал датчика
- Температура

SnO₂

1. SnO₂;
2. SnO₂ – Ru;
3. SnO₂ – Au;
4. SnO₂ – Pt;
5. SnO₂ – Pd;
6. SnO₂ – Cr – Nb;
7. SnO₂ – Si;
8. SnO₂ – Si – Au;

TiO₂

9. TiO₂ – Cr;
10. TiO₂ – Cr – Au;
11. TiO₂ – Nb – Au;
12. TiO₂ – Nb

Для достижения **селективности** при определении конкретных газов используется **комплект сенсоров** с различными **легирующими добавками**

Физический эксперимент

Полупроводниковый газовый сенсор

Динамики нагрева

Факторы, влияющие на степень связывания:

- Тип газа и его концентрация
- Материал датчика
- Температура



- Степень связывания молекул газа уменьшается с повышением температуры.
- **Необходим** нагрев для приведения датчика в **исходное состояние**.
- Для обеспечения **временного разрешения** необходимо использовать **циклический нагрев и охлаждение**.

Физический эксперимент

Полупроводниковый газовый сенсор

Динамики нагрева

Факторы, влияющие на степень связывания:

- Тип газа и его концентрация
- Материал датчика
- Температура



- **Электрическое сопротивление** полупроводниковых материалов **также зависит от температуры.**



Для **повышения селективности** определения газов использовались различные температурные режимы работы: т. н. **динамики нагрева.**



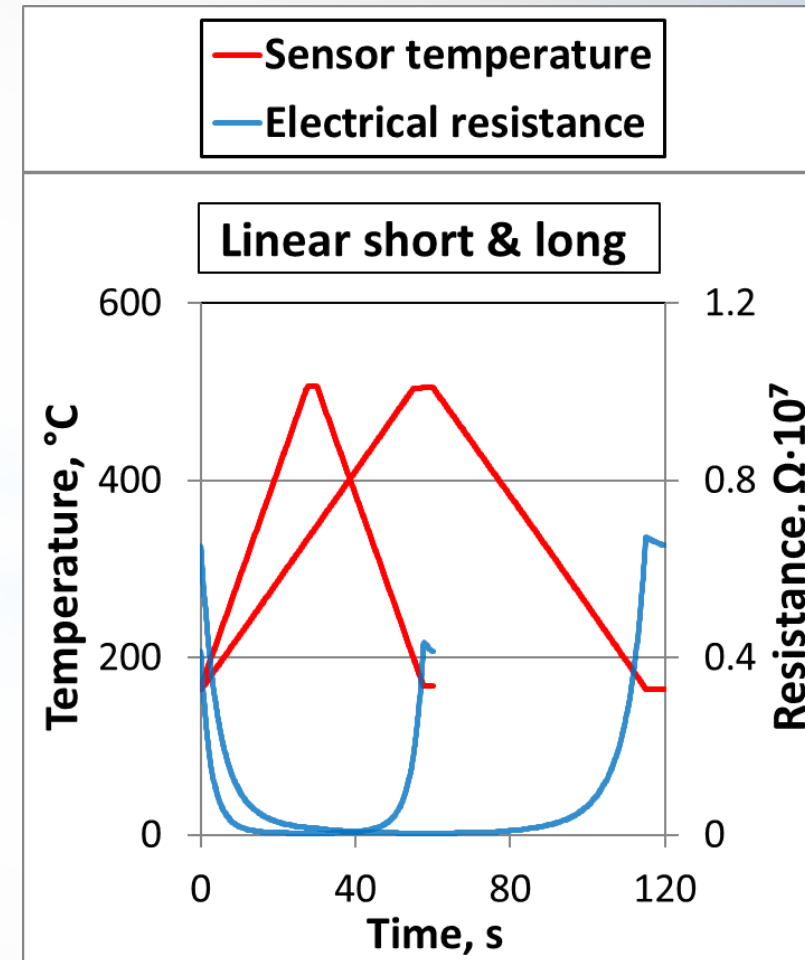
- Степень связывания молекул газа уменьшается с повышением температуры.
- Необходим нагрев для приведения датчика в исходное состояние.
- Для обеспечения временного разрешения необходимо использовать **циклический нагрев и охлаждение.**



Физический эксперимент

Динамики нагрева

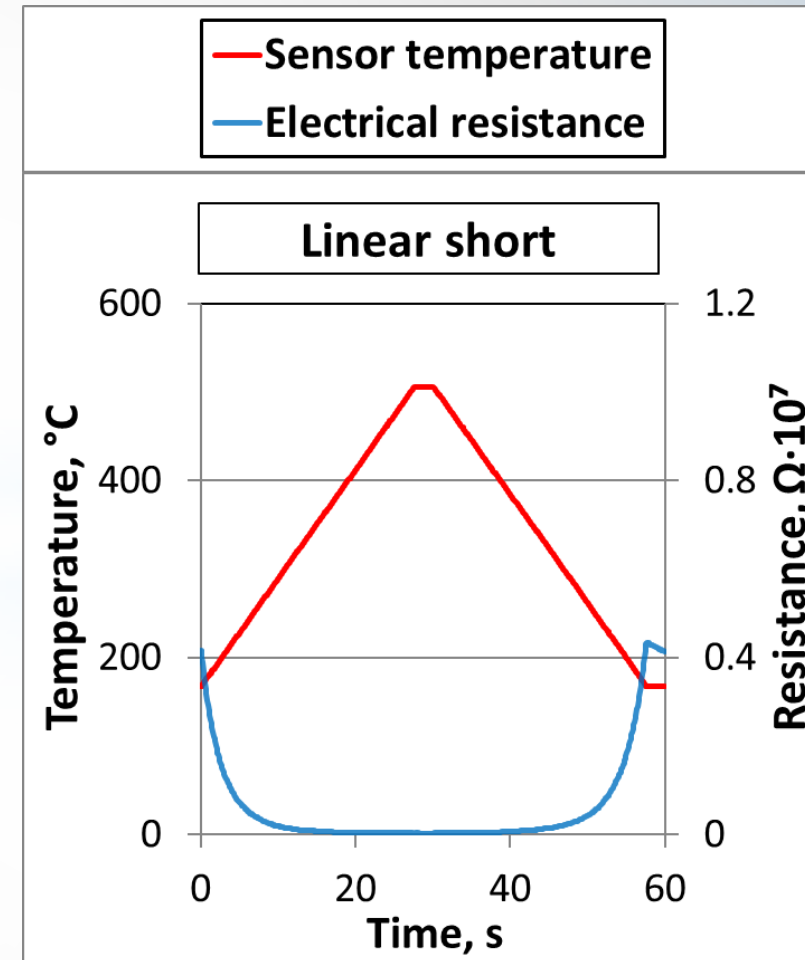
- ❑ Линейный нагрев и охлаждение
 - Линейный длинный
 - Линейный короткий
- ❑ Ступенчатое плавное повышение или понижение температуры
 - Пошаговый вверх
 - Пошаговый вниз
- ❑ Ступенчатое плавное повышение или понижение температуры с кратковременными импульсными скачками температуры до максимума.
 - Импульсный вверх
 - Импульсный вниз



Физический эксперимент

Динамики нагрева

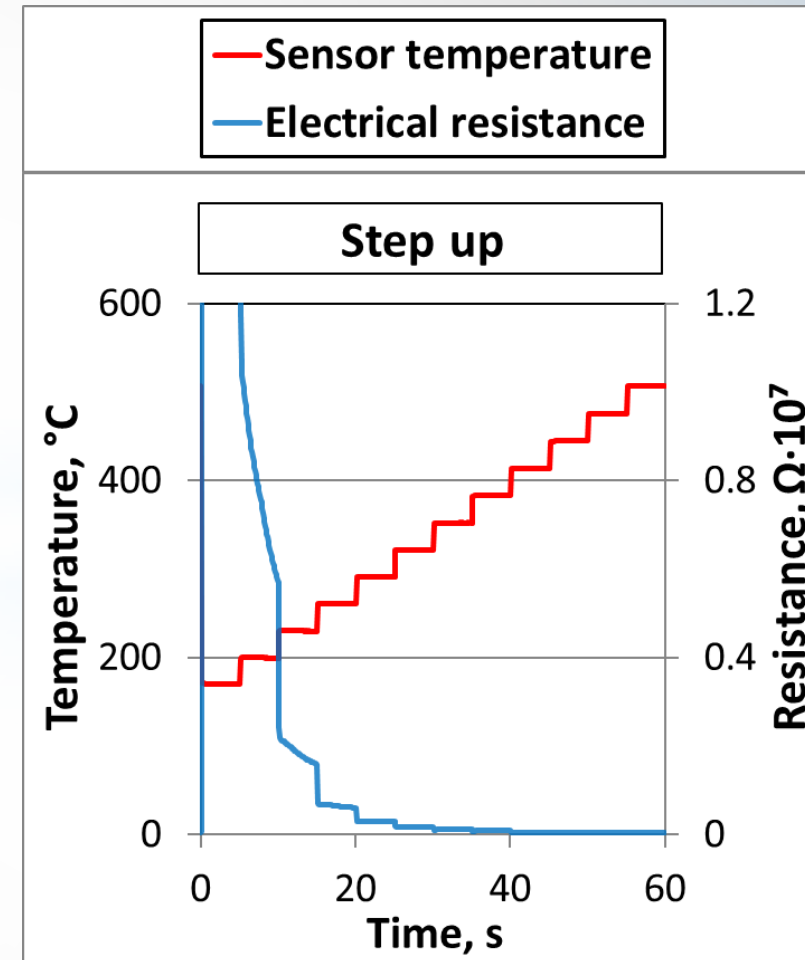
- ❑ Линейный нагрев и охлаждение
 - Линейный длинный
 - **Линейный короткий**
- ❑ Ступенчатое плавное повышение или понижение температуры
 - Пошаговый вверх
 - Пошаговый вниз
- ❑ Ступенчатое плавное повышение или понижение температуры с кратковременными импульсными скачками температуры до максимума.
 - Импульсный вверх
 - Импульсный вниз



Физический эксперимент

Динамики нагрева

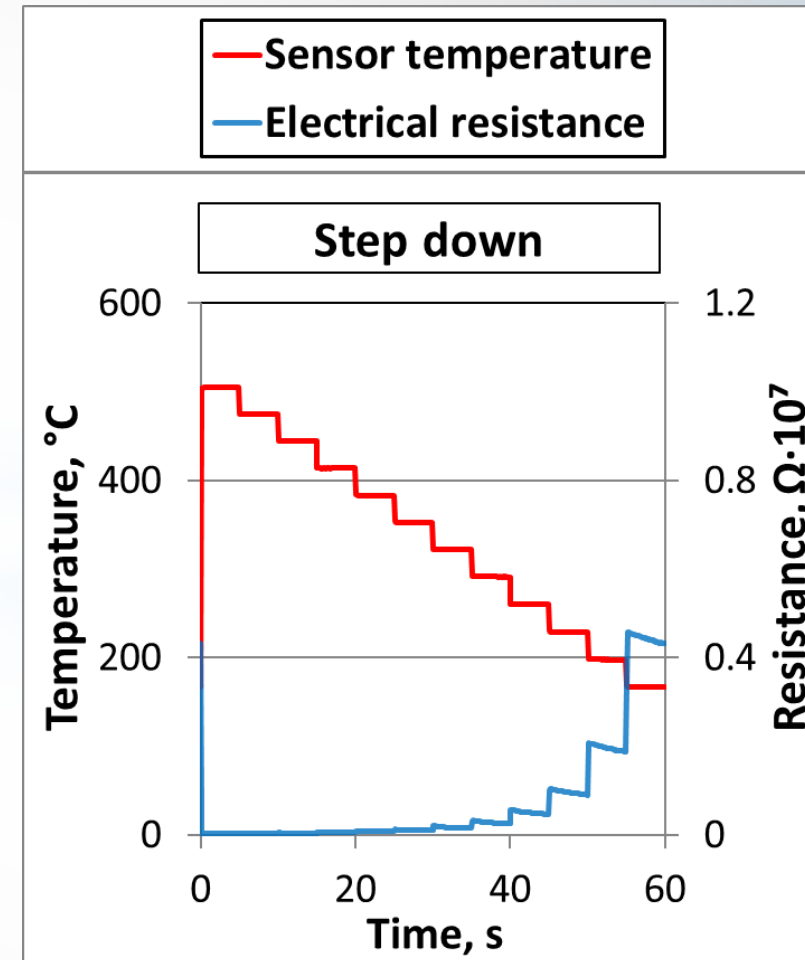
- ❑ Линейный нагрев и охлаждение
 - Линейный длинный
 - Линейный короткий
- ❑ Ступенчатое плавное повышение или понижение температуры
 - Пошаговый вверх
 - Пошаговый вниз
- ❑ Ступенчатое плавное повышение или понижение температуры с кратковременными импульсными скачками температуры до максимума.
 - Импульсный вверх
 - Импульсный вниз



Физический эксперимент

Динамики нагрева

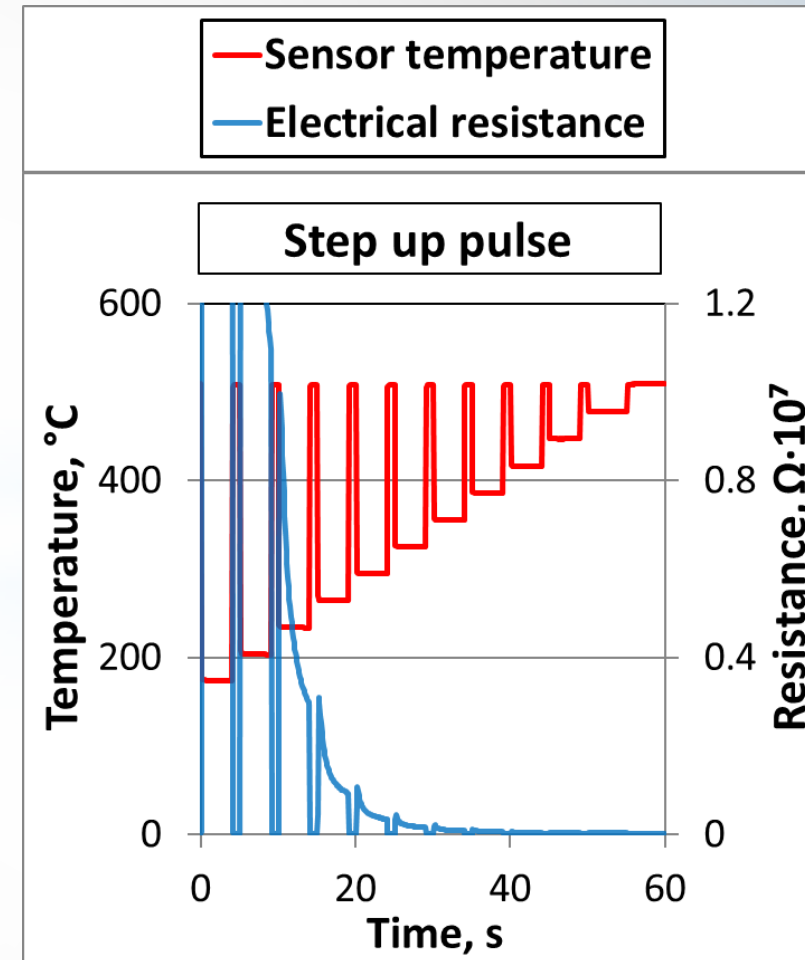
- ❑ Линейный нагрев и охлаждение
 - Линейный длинный
 - Линейный короткий
- ❑ Ступенчатое плавное повышение или понижение температуры
 - Пошаговый вверх
 - Пошаговый вниз
- ❑ Ступенчатое плавное повышение или понижение температуры с кратковременными импульсными скачками температуры до максимума.
 - Импульсный вверх
 - Импульсный вниз



Физический эксперимент

Динамики нагрева

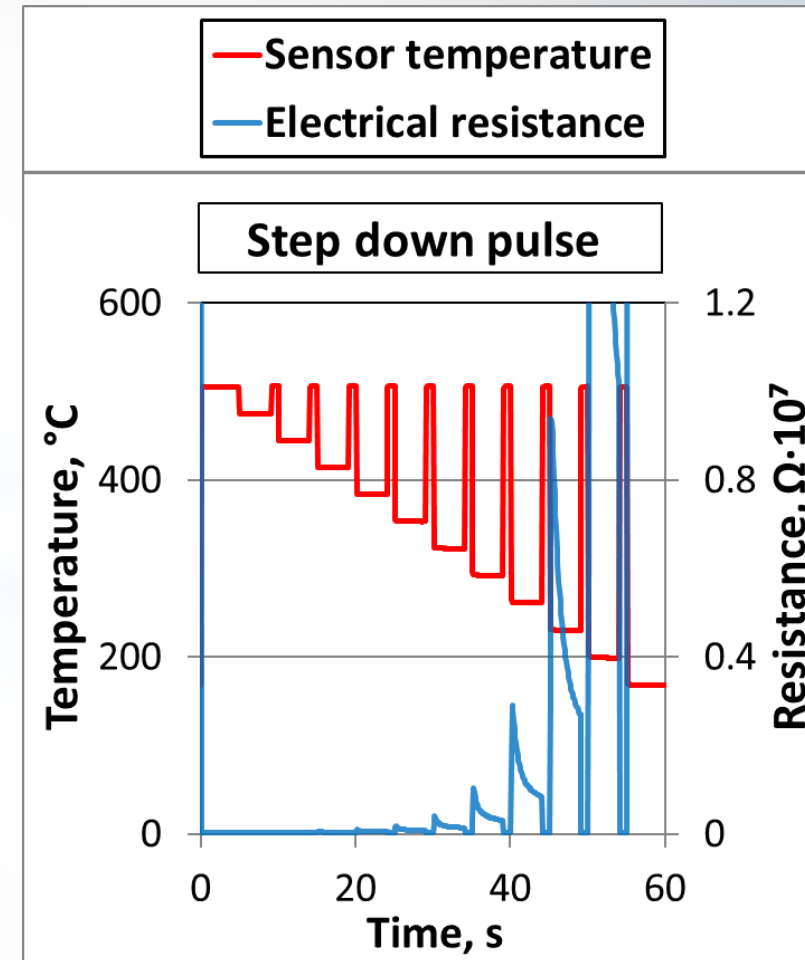
- ❑ Линейный нагрев и охлаждение
 - Линейный длинный
 - Линейный короткий
- ❑ Ступенчатое плавное повышение или понижение температуры
 - Пошаговый вверх
 - Пошаговый вниз
- ❑ Ступенчатое плавное повышение или понижение температуры с кратковременными импульсными скачками температуры до максимума.
 - Импульсный вверх
 - Импульсный вниз



Физический эксперимент

Динамики нагрева

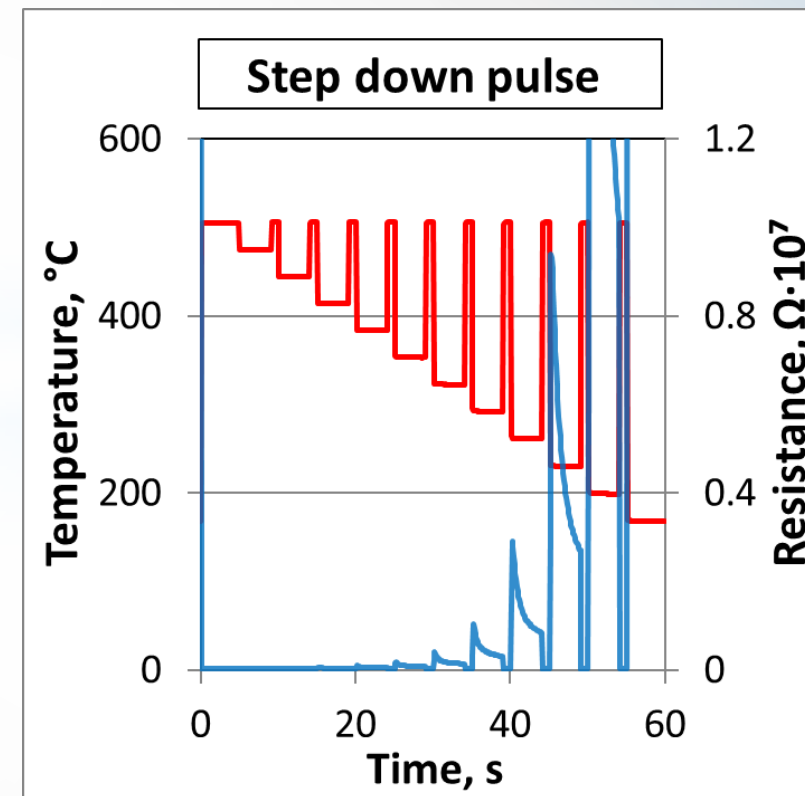
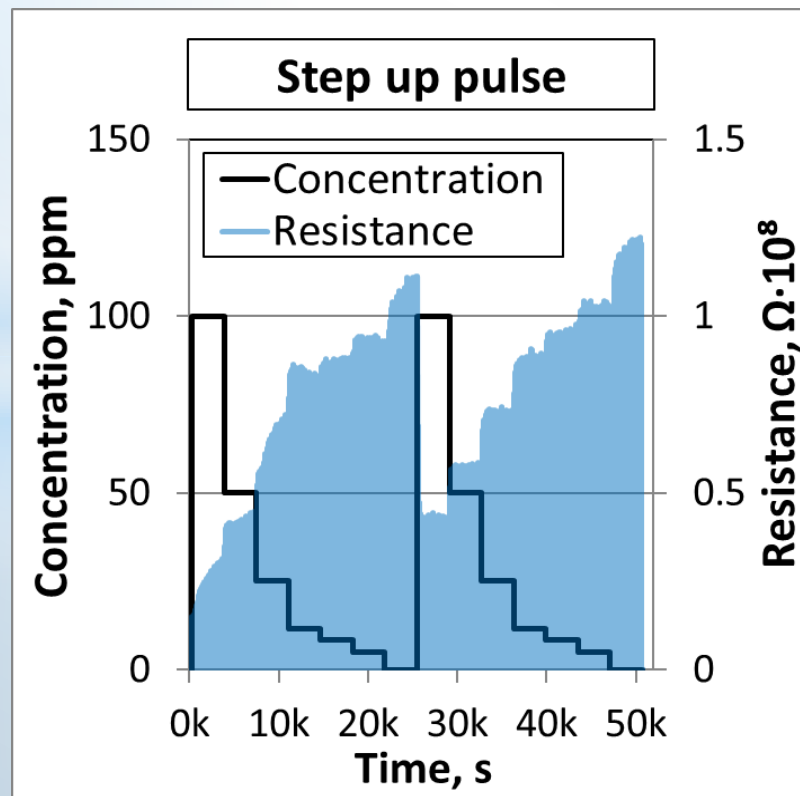
- ❑ Линейный нагрев и охлаждение
 - Линейный длинный
 - Линейный короткий
- ❑ Ступенчатое плавное повышение или понижение температуры
 - Пошаговый вверх
 - Пошаговый вниз
- ❑ Ступенчатое плавное повышение или понижение температуры с кратковременными импульсными скачками температуры до максимума.
 - Импульсный вверх
 - Импульсный вниз



Физический эксперимент

Концентрации газов

В ходе эксперимента были собраны формы сенсорного отклика от **12 датчиков** при **6 различных динамиках нагрева** и **6 различных концентрациях газа**. Несколько серий.



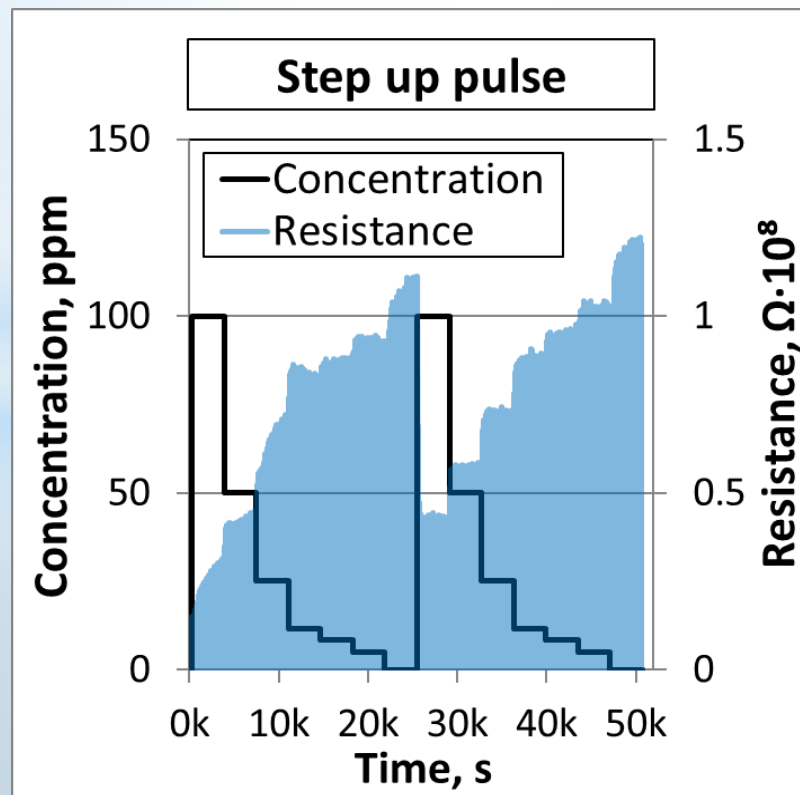
в атмосфере чистого воздуха, а также в воздухе с примесью газов:

CO , H_2 , CH_4 , NH_3 , NO , NO_2 , H_2S , SO_2 , HCOH (только один газ в каждом эксперименте)

Вычислительный эксперимент

Подготовка и предобработка данных

Этапы подготовки и предобработки данных:

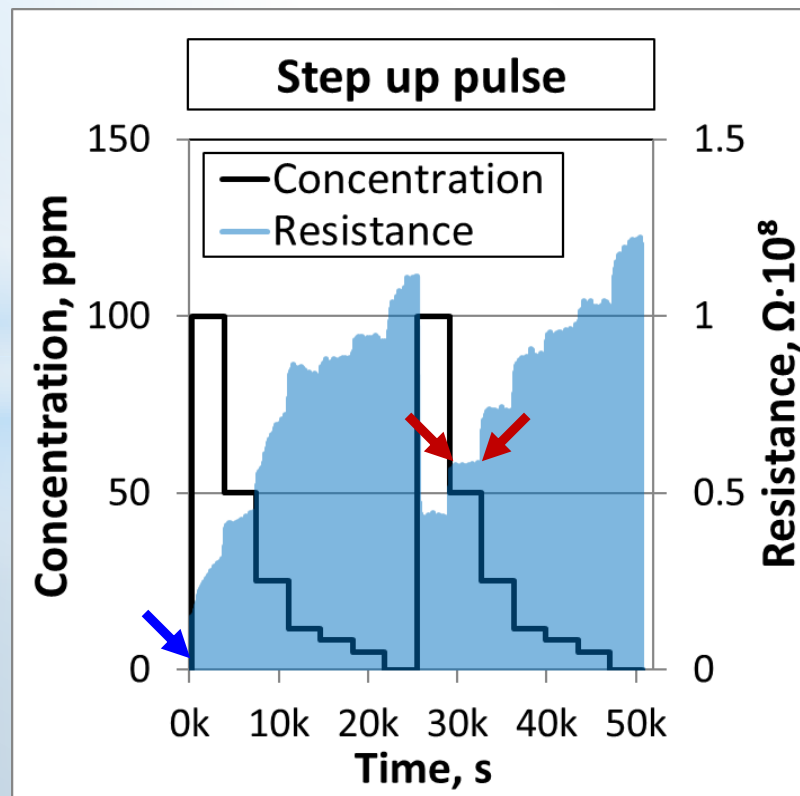


1. Преобразование данных в формат:
1 цикл динамики нагрева –
1 пример набора данных.
2. Замена значений сенсорного отклика
выше 10^{10} Ом
на фиксированное значение 10^{10} Ом,
и ниже 10 Ом
на фиксированное значение 10 Ом.

Вычислительный эксперимент

Подготовка и предобработка данных

Этапы подготовки и предобработки данных:

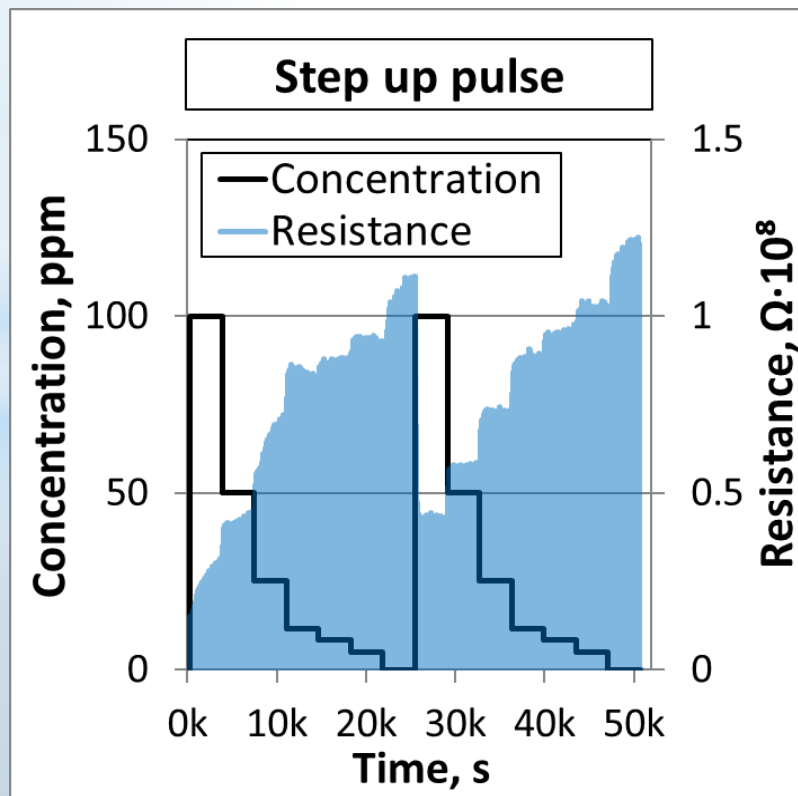


3. **Исключение** участков данных, где производилась продувка экспериментальной установки: **первые несколько циклов** в каждом отдельном эксперименте.
4. Исключение первых нескольких **циклов** **после изменения концентрации** и нескольких циклов непосредственно **перед изменением концентрации.**

Вычислительный эксперимент

Подготовка и предобработка данных

Этапы подготовки и предобработки данных:

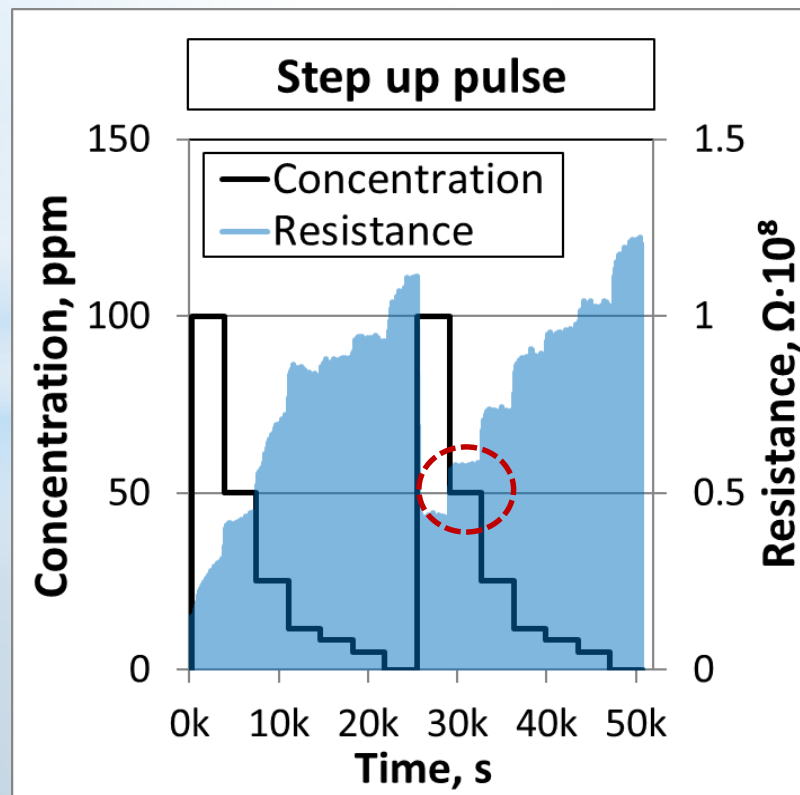


5. Логарифмирование значений сенсорного отклика.
6. Масштабирование значений концентрации газов на диапазон минимума-максимума.

Вычислительный эксперимент

Подготовка и предобработка данных

Этапы подготовки и предобработки данных:



7. Стратифицированное деление на поднаборы

Из каждой области

с фиксированной концентрацией газа:

- В тренировочный набор отбирались первые n циклов,
- Последующие m циклов – в валидационный набор,
- Последующие k циклов – в тестовый набор

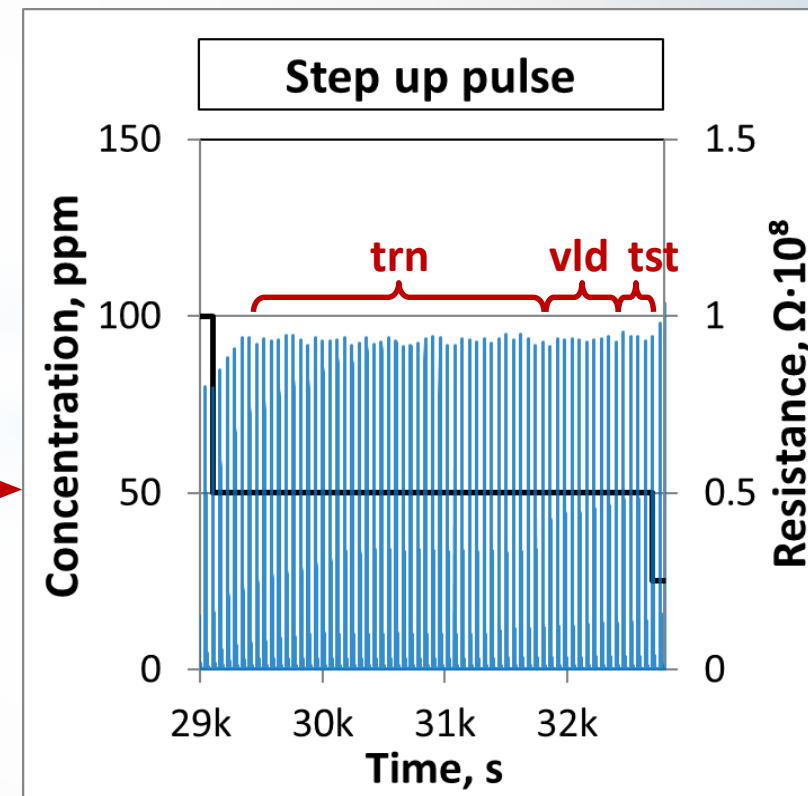
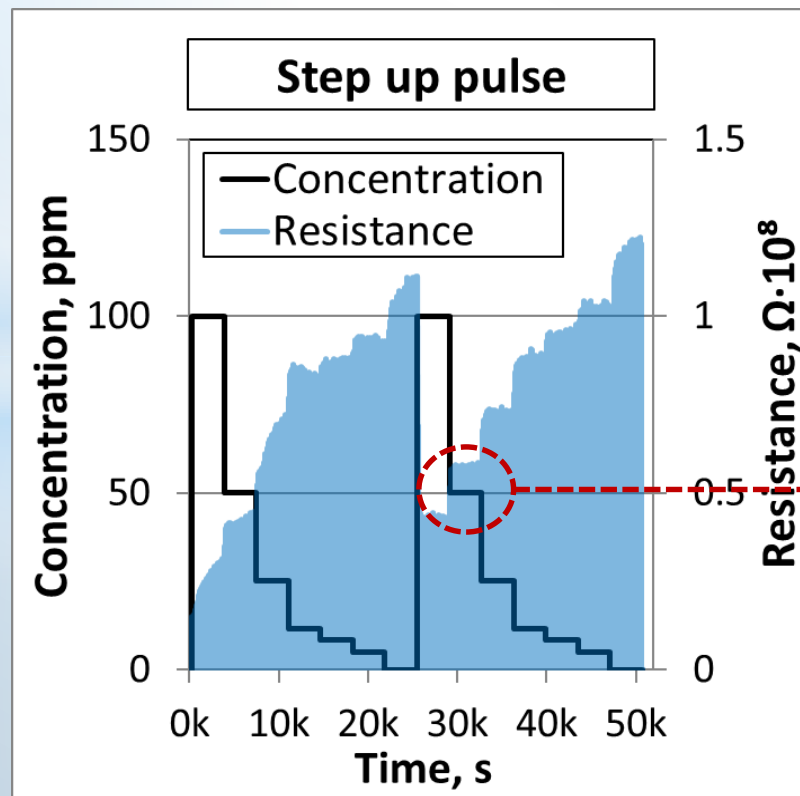
Затем процедура повторялась для остальных участков с фиксированной концентрацией.

Вычислительный эксперимент

Подготовка и предобработка данных

Этапы подготовки и предобработки данных:

7. Стратифицированное деление на поднаборы



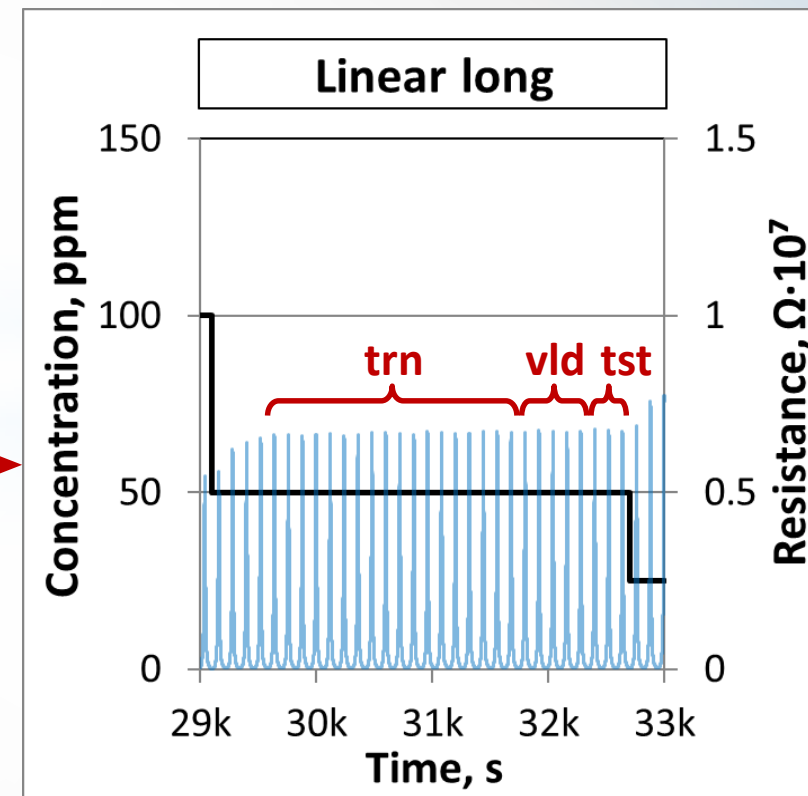
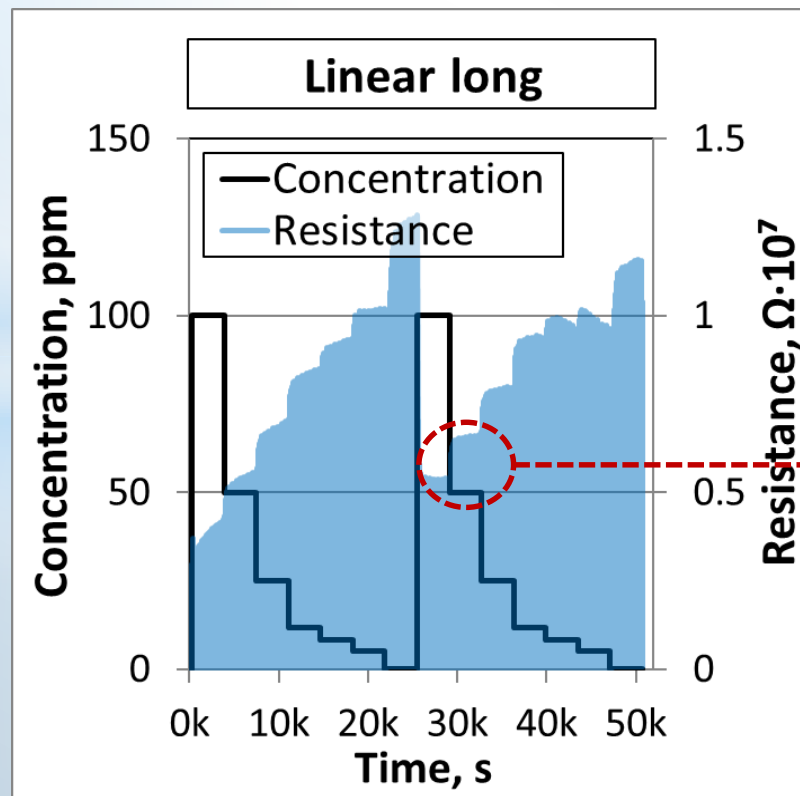
$$n:m:k = 40:10:5$$

Вычислительный эксперимент

Подготовка и предобработка данных

Этапы подготовки и предобработки данных:

7. Стратифицированное деление на поднаборы



$$n:m:k = 18:5:3$$

Вычислительный эксперимент

Методы машинного обучения

- ❑ Линейная и логистическая регрессия
 - Без регуляризации
 - С L1 или L2 регуляризацией
- ❑ Деревья решений
 - Случайный лес
 - Градиентный бустинг
- ❑ Многослойный персептрон

Все методы показали
качественно похожие результаты

Результаты

Задача бинарной классификации

Качество решения (F1) задачи бинарной классификации (тривиальная модель F1=0.923)
для различных методов машинного обучения на 1-й серии данных

LR-L0

Gas	Sensor No											
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
CH ₄	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	0.981	1.000	1.000	0.926	0.944	0.985	0.983
CO	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	0.999	1.000	1.000	0.962	0.972	0.994	0.999
H ₂	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	0.997	1.000	1.000	0.950	0.996	1.000	0.971
H ₂ S	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	0.999
HCOH	1.000	1.000	1.000	1.000	0.999	1.000	1.000	1.000	0.990	0.978	0.976	0.999
NH ₃	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	0.996	0.994	1.000	0.990
NO	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	0.999	1.000	1.000	1.000	1.000	0.996	0.993
NO ₂	1.000	1.000	1.000	1.000	0.996	0.981	1.000	1.000	0.973	0.987	0.956	0.977
SO ₂	0.990	0.987	0.996	0.980	1.000	0.971	0.983	1.000	0.971	0.957	0.931	0.984

LR-L2

Gas	Sensor No											
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
CH ₄	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	0.871	1.000	1.000	0.817	0.797	0.930	0.985
CO	0.999	0.997	1.000	1.000	1.000	0.967	0.997	1.000	0.861	0.908	0.977	0.997
H ₂	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	0.804	0.909	1.000	0.943
H ₂ S	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	0.991	0.996	1.000	0.997
HCOH	1.000	1.000	1.000	1.000	0.997	0.979	1.000	1.000	0.923	0.921	0.871	0.957
NH ₃	0.994	0.999	0.999	0.996	0.997	0.982	0.996	0.997	0.975	0.983	0.991	0.983
NO	1.000	1.000	1.000	0.993	0.999	0.997	1.000	0.999	0.999	1.000	0.965	0.988
NO ₂	0.987	0.999	1.000	0.993	0.991	0.935	1.000	0.999	0.911	0.925	0.883	0.944
SO ₂	0.934	0.928	0.961	0.925	0.967	0.888	0.930	0.959	0.866	0.855	0.807	0.902

RF

Gas	Sensor No											
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
CH ₄	0.993	0.976	0.967	0.993	0.993	0.874	0.993	0.986	0.934	0.906	0.979	0.930
CO	1.000	1.000	1.000	0.992	1.000	0.954	0.999	0.997	0.944	0.959	0.975	0.972
H ₂	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	0.994	1.000	1.000	0.924	0.993	1.000	0.908
H ₂ S	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	0.978
HCOH	1.000	0.998	0.999	0.996	1.000	0.943	0.999	1.000	0.978	0.981	0.821	0.883
NH ₃	0.995	0.999	1.000	1.000	0.997	0.993	0.995	0.994	0.977	0.980	0.995	1.000
NO	0.985	0.979	0.991	0.989	0.990	0.950	0.966	0.968	1.000	1.000	0.956	0.961
NO ₂	0.953	0.964	0.961	0.950	0.990	0.928	0.985	0.969	0.967	0.981	0.935	0.833
SO ₂	0.885	0.902	0.892	0.914	0.900	0.891	0.844	0.858	0.948	0.919	0.826	0.903

GB

Gas	Sensor No											
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
CH ₄	1.000	1.000	0.993	1.000	1.000	0.956	1.000	1.000	0.972	0.970	0.992	0.967
CO	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	0.992	0.998	0.990	0.999
H ₂	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	0.976	1.000	1.000	0.988
H ₂ S	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	0.999
HCOH	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	0.987	1.000	1.000	1.000	0.999	0.959	0.976
NH ₃	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	0.999	1.000	1.000	0.997	0.999	1.000	1.000
NO	0.992	0.998	0.999	0.991	0.985	0.981	0.980	0.991	1.000	1.000	0.985	0.982
NO ₂	0.980	0.993	0.987	0.984	0.989	0.979	0.989	0.988	0.981	0.994	0.964	0.949
SO ₂	0.981	0.972	0.978	0.999	0.983	0.976	0.981	0.976	0.977	0.979	0.977	0.969

Результаты

Задача бинарной классификации

Качество решения (F1) задачи бинарной классификации (тривиальная модель F1=0.923)
для градиентного бустинга с кросс-применением для 1-й и 2-й серии данных

Обучение: 1-я серия

2-я серия

Gas	Sensor No											
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
CH ₄	1.000	1.000	0.993	1.000	1.000	0.956	1.000	1.000	0.972	0.970	0.992	0.967
CO	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	0.992	0.998	0.990	0.999
H ₂	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	0.976	1.000	1.000	0.988
H ₂ S	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	0.999
HCOH	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	0.987	1.000	1.000	1.000	0.999	0.959	0.976
NH ₃	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	0.999	1.000	1.000	0.997	0.999	1.000	1.000
NO	0.992	0.998	0.999	0.991	0.985	0.981	0.980	0.991	1.000	1.000	0.985	0.982
NO ₂	0.980	0.993	0.987	0.984	0.989	0.979	0.989	0.988	0.981	0.994	0.964	0.949
SO ₂	0.981	0.972	0.978	0.999	0.983	0.976	0.981	0.976	0.977	0.979	0.977	0.969

Gas	Sensor No											
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
CH ₄	0.260	0.460	0.699	0.509	0.615	0.707	0.569	0.783	0.154	0.215	0.923	0.886
CO	0.484	0.590	0.912	0.787	0.743	0.730	0.804	0.877	0.000	0.026	0.852	0.885
H ₂	0.572	0.747	0.914	0.621	0.714	0.710	0.871	0.885	0.061	0.000	0.915	0.865
H ₂ S	0.794	0.979	0.949	0.921	0.842	0.880	0.658	0.714	0.083	0.083	0.933	0.949
HCOH	0.737	0.878	0.945	0.937	0.831	0.835	0.764	0.913	0.074	0.212	0.923	0.892
NH ₃	0.501	0.682	0.849	0.782	0.682	0.758	0.794	0.848	0.287	0.236	0.949	0.919
NO	0.905	0.626	0.624	0.893	0.729	0.923	0.669	0.858	0.344	0.362	0.000	0.324
NO ₂	0.460	0.824	0.584	0.892	0.768	0.923	0.626	0.791	0.615	0.584	0.431	0.863
SO ₂	0.622	0.615	0.744	0.643	0.615	0.832	0.618	0.676	0.154	0.277	0.923	0.615

Gas	Sensor No											
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
CH ₄	0.923	0.923	0.308	0.308	0.311	0.615	0.923	0.447	0.923	0.923	0.293	0.697
CO	0.887	0.830	0.438	0.467	0.308	0.308	0.889	0.751	0.892	0.923	0.305	0.603
H ₂	0.964	0.981	0.969	0.321	0.721	0.308	0.993	0.982	0.862	0.923	0.854	0.923
H ₂ S	0.949	0.963	0.886	0.319	0.468	0.319	0.968	0.987	0.923	0.923	0.667	0.546
HCOH	0.843	0.898	0.265	0.237	0.310	0.308	0.743	0.387	0.923	0.923	0.160	0.629
NH ₃	0.923	0.912	0.679	0.308	0.375	0.308	0.924	0.864	0.926	0.936	0.444	0.530
NO	0.866	0.300	0.504	0.936	0.308	0.308	0.847	0.711	0.923	0.923	0.923	0.898
NO ₂	0.707	0.852	0.663	0.923	0.923	0.736	0.831	0.753	0.923	0.923	0.929	0.919
SO ₂	0.923	0.769	0.474	0.462	0.462	0.462	0.731	0.467	0.923	0.923	0.358	0.526

Gas	Sensor No											
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
CH ₄	0.992	1.000	1.000	0.949	0.991	0.925	0.986	0.996	0.966	0.956	1.000	0.987
CO	0.989	0.987	0.989	0.957	0.988	0.942	0.983	0.987	0.979	0.971	0.993	0.975
H ₂	1.000	1.000	1.000	0.949	1.000	0.944	1.000	1.000	0.981	0.995	1.000	0.978
H ₂ S	1.000	1.000	1.000	0.949	1.000	0.949	1.000	1.000	0.997	1.000	1.000	1.000
HCOH	0.992	1.000	0.999	0.949	1.000	0.944	0.990	1.000	0.990	0.976	0.999	0.976
NH ₃	0.988	0.986	0.988	0.946	0.997	0.951	0.988	0.983	0.982	0.980	0.988	0.992
NO	0.999	1.000	0.996	0.949	0.999	0.943	0.992	0.992	0.988	0.994	1.000	0.976
NO ₂	0.972	0.982	0.976	0.932	0.973	0.934	0.975	0.985	0.989	0.984	0.982	0.965
SO ₂	0.959	0.962	0.965	0.949	0.961	0.949	0.962	0.953	0.972	0.975	0.955	0.954

Применение

1-я серия

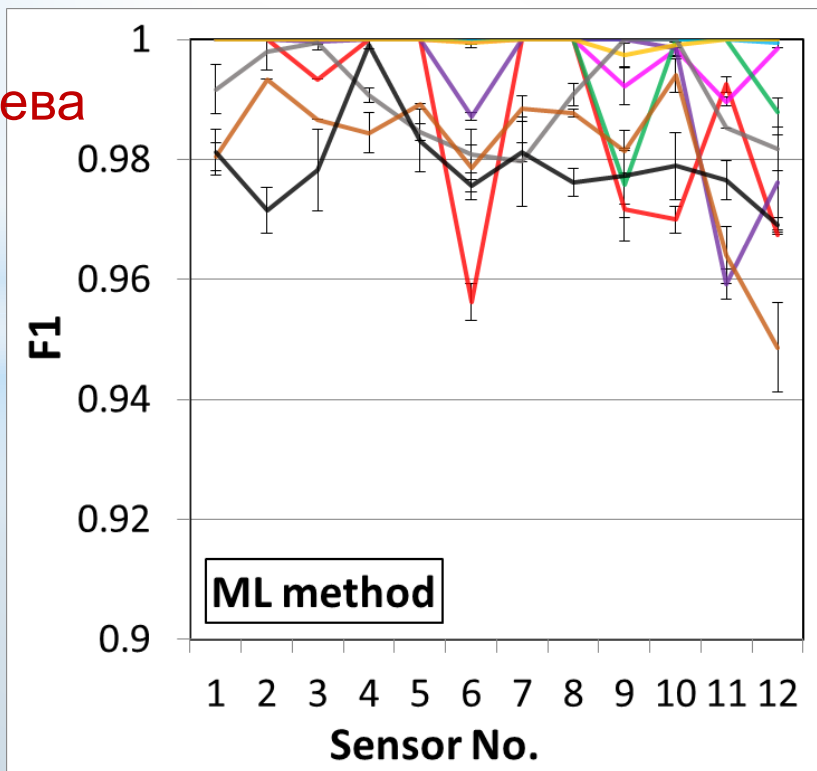
2-я серия

Результаты

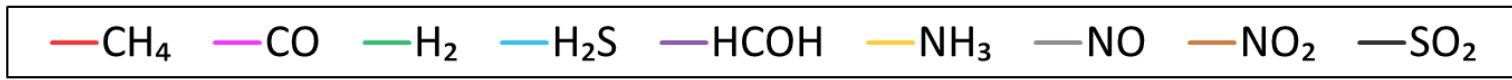
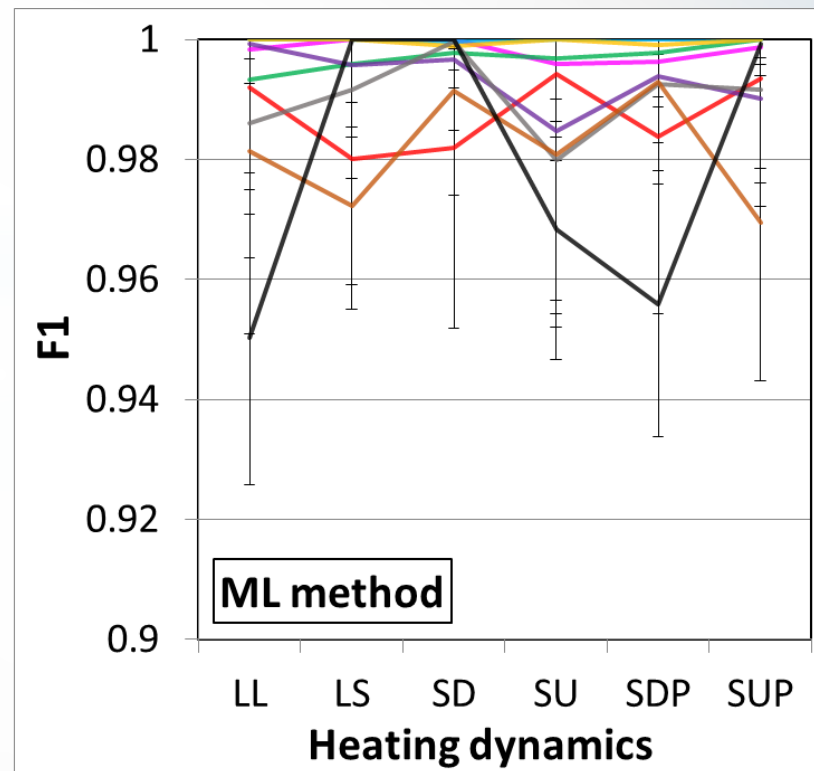
Задача бинарной классификации

Усредненное качество решения (F1) по различным сенсорам и динамикам нагрева для градиентного бустинга на 1-й серии данных

Усреднение по
динамикам нагрева



Усреднение по
сенсорам



Результаты

Задача регрессии

Качество решения (R^2) задачи регрессии (тривиальная модель $R^2=0$)

для различных методов машинного обучения на 1-й серии данных

LR-L1

Gas	Sensor No											
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
CH ₄	0.922	0.942	0.923	0.907	0.939	0.585	0.921	0.946	0.258	0.357	0.855	0.833
CO	0.961	0.966	0.965	0.959	0.967	0.933	0.951	0.972	0.945	0.956	0.976	0.853
H ₂	0.984	0.978	0.968	0.938	0.943	0.935	0.957	0.938	0.317	0.930	0.917	0.755
H ₂ S	0.987	0.992	0.984	0.972	0.985	0.905	0.969	0.993	0.971	0.985	0.901	0.820
HCOH	0.943	0.949	0.957	0.943	0.963	0.937	0.960	0.962	0.953	0.951	0.811	0.887
NH ₃	0.926	0.967	0.957	0.923	0.933	0.853	0.960	0.962	0.967	0.961	0.656	0.804
NO	0.788	0.795	0.866	0.837	0.837	0.808	0.897	0.890	0.861	0.862	0.529	0.678
NO ₂	0.817	0.840	0.856	0.831	0.801	0.837	0.851	0.857	0.641	0.655	0.410	0.545
SO ₂	0.644	0.658	0.661	0.657	0.730	0.496	0.678	0.681	0.503	0.508	0.545	0.560

MLP

Gas	Sensor No											
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
CH ₄	0.977	0.983	0.978	0.972	0.977	0.647	0.981	0.983	0.408	0.466	0.883	0.793
CO	0.980	0.986	0.989	0.983	0.978	0.964	0.990	0.987	0.953	0.977	0.981	0.803
H ₂	0.994	0.991	0.986	0.984	0.968	0.985	0.988	0.984	0.469	0.919	0.938	0.708
H ₂ S	0.991	0.995	0.995	0.993	0.993	0.955	0.994	0.996	0.982	0.993	0.900	0.685
HCOH	0.980	0.989	0.984	0.985	0.978	0.966	0.990	0.991	0.973	0.974	0.880	0.913
NH ₃	0.982	0.992	0.985	0.984	0.985	0.959	0.987	0.991	0.988	0.989	0.816	0.629
NO	0.929	0.926	0.949	0.948	0.948	0.888	0.964	0.954	0.931	0.933	0.785	0.718
NO ₂	0.909	0.890	0.921	0.878	0.863	0.838	0.903	0.896	0.819	0.824	0.609	0.091
SO ₂	0.794	0.818	0.812	0.782	0.849	0.688	0.833	0.846	0.592	0.621	0.581	0.606

RF

Gas	Sensor No											
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
CH ₄	1.000	1.000	0.999	0.999	1.000	0.844	1.000	1.000	0.994	0.983	0.966	0.921
CO	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	0.984	1.000	1.000	0.999	1.000	0.996	0.960
H ₂	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	0.993	0.998	1.000	0.972
H ₂ S	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	0.954	1.000	1.000	1.000	1.000	0.998	0.938
HCOH	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	0.999	1.000	1.000	1.000	0.999	0.888	0.931
NH ₃	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	0.994
NO	0.886	0.891	0.934	0.886	0.937	0.861	0.870	0.926	0.988	0.967	0.554	0.487
NO ₂	0.876	0.966	0.885	0.946	0.914	0.972	0.934	0.863	0.956	0.955	0.594	0.623
SO ₂	0.822	0.856	0.836	0.894	0.908	0.715	0.812	0.774	0.965	0.959	0.539	0.664

GB

Gas	Sensor No											
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
CH ₄	1.000	1.000	0.999	0.995	0.999	0.832	1.000	0.998	0.981	0.971	0.977	0.911
CO	1.000	1.000	1.000	1.000	0.999	0.967	1.000	1.000	0.998	0.999	0.994	0.946
H ₂	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	0.984	0.995	1.000	0.947
H ₂ S	1.000	1.000	0.999	1.000	1.000	0.948	1.000	1.000	1.000	1.000	0.999	0.935
HCOH	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	0.999	1.000	1.000	0.999	0.999	0.885	0.913
NH ₃	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	0.992
NO	0.850	0.851	0.917	0.871	0.901	0.818	0.767	0.861	0.984	0.960	0.550	0.439
NO ₂	0.806	0.927	0.853	0.922	0.883	0.955	0.883	0.795	0.933	0.946	0.523	0.594
SO ₂	0.791	0.834	0.806	0.883	0.872	0.683	0.792	0.748	0.931	0.934	0.511	0.623

Результаты

Задача регрессии

Качество решения (R^2) задачи регрессии (тривиальная модель $R^2=0$)

для градиентного бустинга с кросс-применением для 1-й и 2-й серии данных

Обучение: 1-я серия

2-я серия

Gas	Sensor No											
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
CH ₄	1.000	1.000	0.999	0.995	0.999	0.832	1.000	0.998	0.981	0.971	0.977	0.911
CO	1.000	1.000	1.000	1.000	0.999	0.967	1.000	1.000	0.998	0.999	0.994	0.946
H ₂	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	0.984	0.995	1.000	0.947
H ₂ S	1.000	1.000	0.999	1.000	1.000	0.948	1.000	1.000	1.000	1.000	0.999	0.935
HCOH	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	0.999	1.000	1.000	0.999	0.999	0.885	0.913
NH ₃	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	0.992
NO	0.850	0.851	0.917	0.871	0.901	0.818	0.767	0.861	0.984	0.960	0.550	0.439
NO ₂	0.806	0.927	0.853	0.922	0.883	0.955	0.883	0.795	0.933	0.946	0.523	0.594
SO ₂	0.791	0.834	0.806	0.883	0.872	0.683	0.792	0.748	0.931	0.934	0.511	0.623

Gas	Sensor No											
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
CH ₄	-0.666	-0.026	-2.968	-0.677	-2.982	-1.340	0.208	-2.179	-0.759	-0.695	-3.777	-1.216
CO	-0.030	0.283	-1.956	-4.277	-1.949	-1.993	0.323	0.315	-0.691	-0.689	-3.012	-1.770
H ₂	-0.257	0.074	0.047	-2.527	-1.413	-0.906	0.111	-0.037	-0.776	-0.805	0.579	-1.861
H ₂ S	0.188	0.500	-0.059	-1.218	-1.273	-0.418	-0.036	0.143	-0.681	-0.651	-1.015	-1.063
HCOH	-0.094	0.122	-2.504	-0.447	-1.411	-0.172	0.093	-1.230	-0.668	-0.604	-3.843	-2.039
NH ₃	-0.277	0.408	-1.008	-0.443	-2.760	-0.331	0.574	0.392	-0.542	-0.554	-2.110	-1.197
NO	-0.525	-2.048	-2.138	-0.823	-1.622	-3.617	-1.038	-1.266	-2.136	-1.164	-0.750	-0.945
NO ₂	-1.794	-1.797	-2.393	-3.970	-2.505	-2.527	-0.983	-2.031	-1.107	-0.733	-4.791	-3.080
SO ₂	-0.995	-1.210	-1.781	-0.854	-1.858	-3.925	-0.741	-1.576	-0.730	-0.672	-6.663	-2.552

Gas	Sensor No											
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
CH ₄	-3.524	-1.832	-1.236	-1.402	-1.942	-1.504	-0.613	-0.896	-4.703	-4.672	-0.650	-1.568
CO	-1.975	-1.229	-0.228	-0.895	-1.244	-1.775	-0.358	0.123	-4.629	-4.625	-0.801	-0.583
H ₂	-1.494	-0.494	0.368	-1.162	-0.953	-1.477	-0.714	-0.742	-4.741	-4.686	0.697	-1.183
H ₂ S	-0.839	0.015	0.448	-0.428	-0.159	-0.892	-1.235	-0.646	-4.250	-4.173	0.045	0.020
HCOH	-1.005	-0.460	-0.476	-0.479	-0.809	-1.040	0.156	-0.238	-4.572	-4.136	-0.605	-1.442
NH ₃	-1.608	0.148	0.107	-0.888	-1.533	-1.704	0.506	0.415	-3.282	-3.223	-0.076	-0.164
NO	-1.321	-0.857	-1.312	-1.334	-0.546	-1.770	-0.495	-0.709	-4.169	-3.698	-4.828	-4.366
NO ₂	-2.859	-2.611	-1.873	-1.685	-2.366	-3.353	-2.172	-1.555	-4.664	-4.671	-2.877	-1.463
SO ₂	-4.656	-5.493	-1.761	-1.736	-1.978	-1.406	-5.009	-1.918	-4.667	-4.706	-0.915	-1.638

Gas	Sensor No											
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
CH ₄	0.998	0.997	0.999	0.247	0.991	0.305	0.998	0.997	0.916	0.925	0.950	0.851
CO	0.999	0.990	0.985	0.370	0.995	0.326	0.996	0.986	0.947	0.978	0.995	0.936
H ₂	1.000	1.000	1.000	0.222	0.984	0.327	1.000	1.000	0.810	0.955	1.000	0.568
H ₂ S	1.000	1.000	1.000	0.362	1.000	0.432	1.000	1.000	0.998	0.944	1.000	0.943
HCOH	0.996	1.000	0.985	0.135	0.991	0.282	0.993	0.977	0.987	0.979	0.896	0.798
NH ₃	0.999	0.999	0.999	0.462	0.997	0.460	0.999	0.999	0.997	0.953	0.999	0.988
NO	0.923	0.826	0.896	0.226	0.901	0.325	0.878	0.924	0.859	0.837	0.590	0.354
NO ₂	0.864	0.913	0.975	0.339	0.926	0.292	0.881	0.904	0.869	0.908	0.863	0.793
SO ₂	0.785	0.810	0.672	0.252	0.812	0.359	0.558	0.667	0.866	0.852	0.714	0.632

Применение

1-я серия

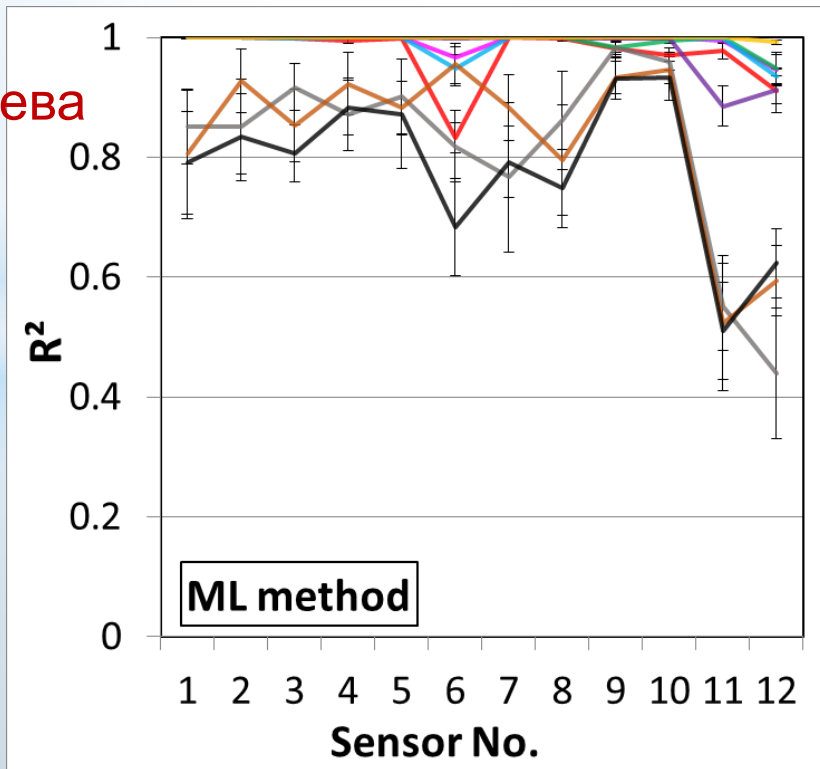
2-я серия

Результаты

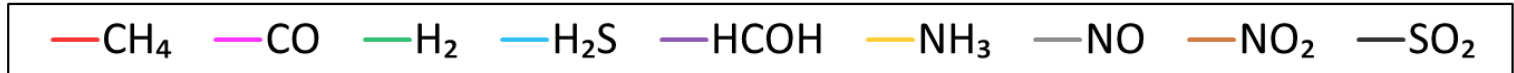
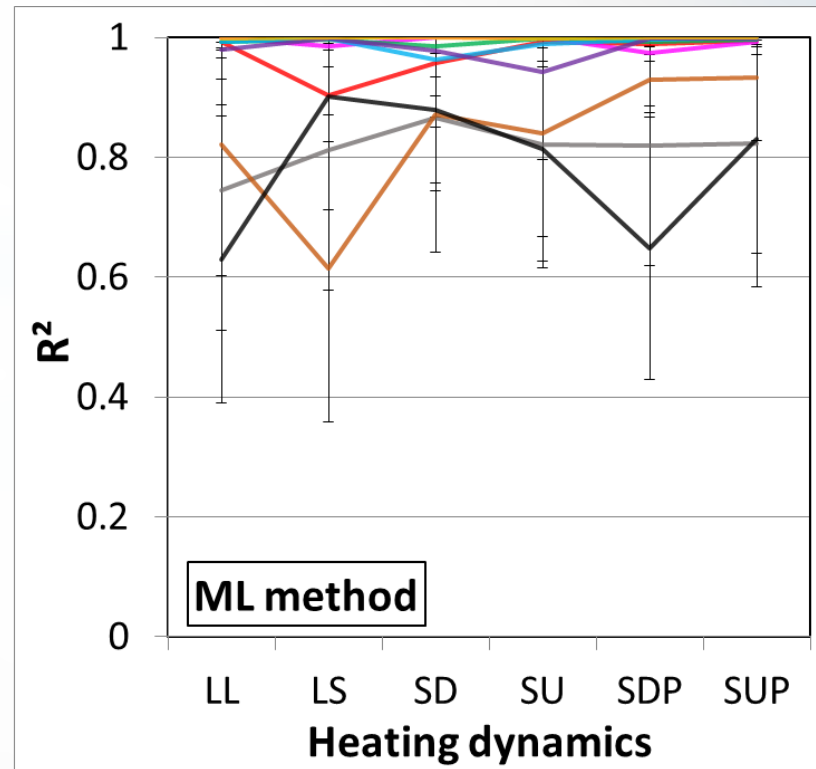
Задача регрессии

Усредненное качество решения (R^2) по различным сенсорам и динамикам нагрева для градиентного бустинга на 1-й серии данных

Усреднение по
динамикам нагрева



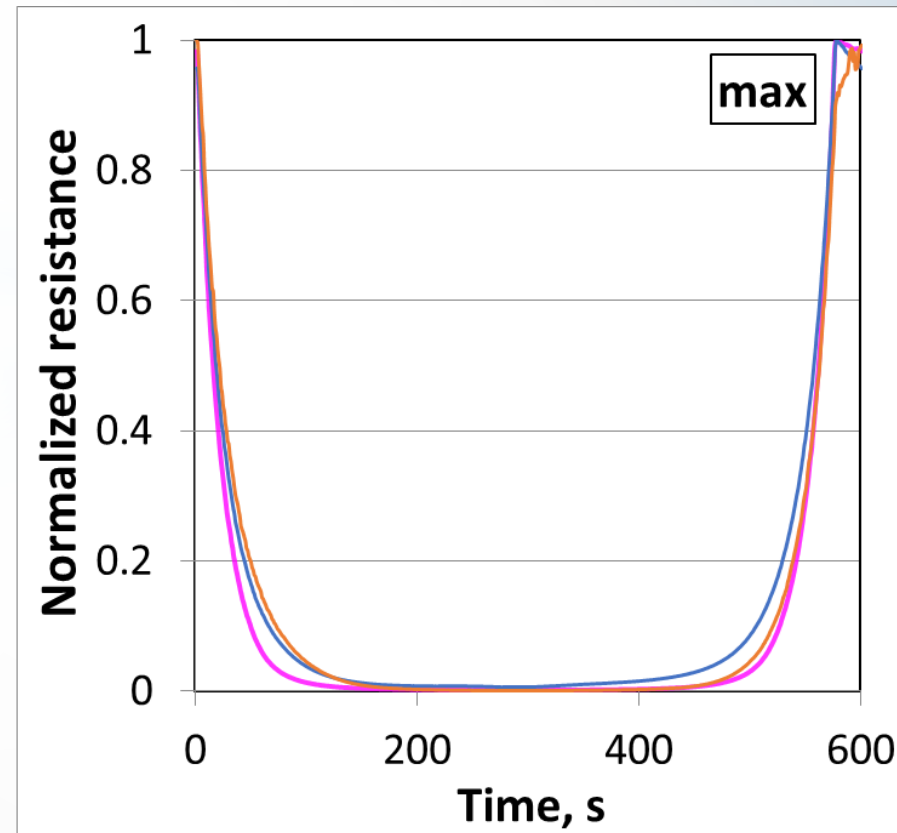
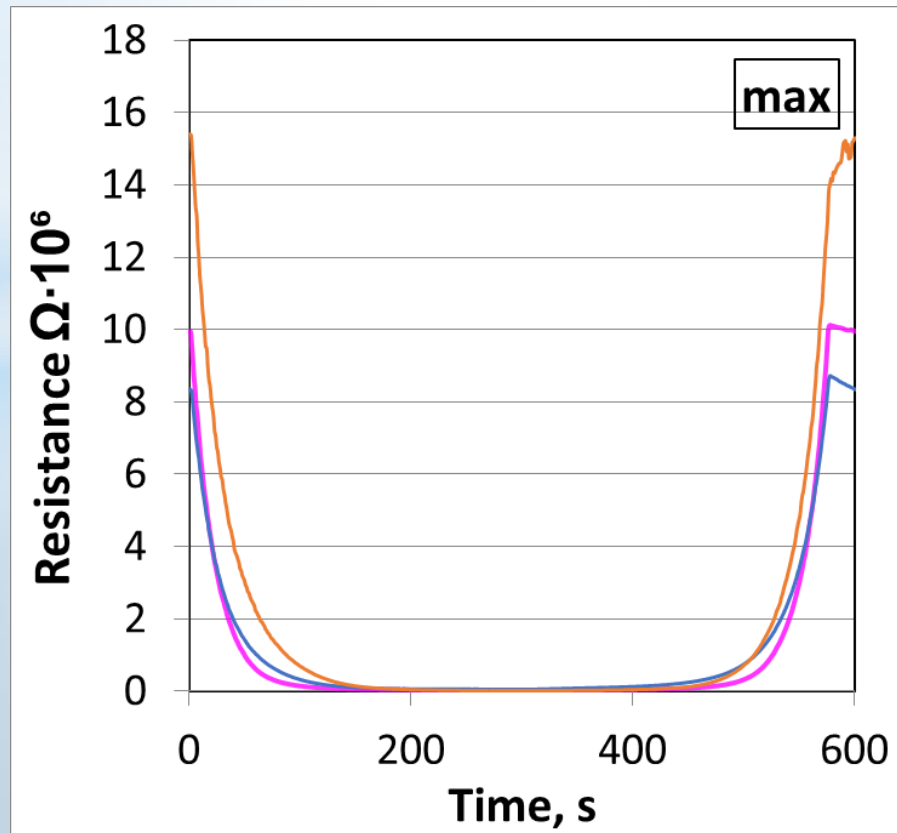
Усреднение по
сенсорам



Результаты

Сравнение статистик отклика сенсоров

Максимальные значения отклика сенсора для каждого участка цикла динамики нагрева линейная короткая динамика, сенсор №1, CH_4 , 3 серии физического эксперимента.



Заключение

Выводы

- ❑ Наилучшая динамика нагрева – линейная длинная
 - ✓ Уменьшение длины (линейная короткая) динамики нагрева приводит к ухудшению качества решения.
- ❑ Динамики нагрева с повышением температуры показывают лучшие результаты, чем с понижением температуры.
- ❑ Сенсоры на основе SnO_2 в среднем показывают лучшие результаты, чем сенсоры на основе TiO_2 .
- ❑ Применение обученных моделей к данным повторных измерений, проведенных через некоторое время, приводит к полной поломке решения!!!

Заключение

Направления дальнейших работ

- ❑ Решение задачи многоклассовой классификации
- ❑ Сбор данных и решение задачи многометочной классификации
 - Использование смесей, содержащих нескольких газов
- ❑ Использование данных нескольких сенсоров одновременно
- ❑ Разработка процедуры нормировки данных, устойчивой к смене серии физических экспериментов

Спасибо за внимание!