

МЕТОД МНОГОМЕРНОЙ КАЛИБРОВКИ ДЛЯ СЕЛЕКТИВНОГО АНАЛИЗА ГАЗОВ ЕДИНИЧНЫМ СЕНСОРОМ С ТЕМПЕРАТУРНОЙ МОДУЛЯЦИЕЙ

Шапошник А.В., Москалев П.В.¹, Васильев А.А.²

Воронежский государственный аграрный университет им. Императора Петра I, РФ, 394087, г. Воронеж, ул. Мичурина, д. 1, a.v.shaposhnik@gmail.com

¹ Московский государственный технологический университет «СТАНКИН», РФ, 127055, г. Москва, Вадковский пер. д. 1, moskaleff@mail.ru

² Государственный университет «Дубна», РФ, 141982, Московская обл., г. Дубна, ул. Университетская, д. 19, a-a-vasiliev@yandex.ru

Рассматривается задача селективного газового анализа с использованием единичного полупроводникового сенсора на основе диоксида олова, модифицированного оксидом палладия ($\text{SnO}_2\text{--PdO}$). В отличие от подходов, требующих массивов сенсоров и ресурсоемких преобразований данных, авторы предлагают метод многомерной калибровки для селективного анализа (MCSA) как модификацию многомерной калибровки, для количественного и качественного анализа газов. Идея MCSA заключается в том, что при циклическом нагреве сенсора временной ряд его сопротивлений рассматривается как многомерный вектор, для выбранных элементов которого строятся регрессионные модели вида $\hat{\phi}_i = aR_i^b$, связывающие прогнозируемую концентрацию целевого газа $\hat{\phi}_i$ с сопротивлением сенсора R_i .

В качестве метрики для качественного анализа газа используется относительное стандартное отклонение S_r множества оценок концентрации, полученных для разных концентраций и составов газа. Если сенсор находится в среде того газа, для которого была построена модель, то прогнозируемые значения концентраций $\hat{\phi}_i$ оказываются согласованными с наблюдаемыми, а $S_r < S_0$. Для других газов модель дает несогласованные оценки, и $S_r \geq S_0$. Критическое значение $S_0 = 0,45$ позволило безошибочно классифицировать примеси сероводорода H_2S , угарного газа CO , водорода H_2 и этанола $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$ в воздухе для концентраций от 0,5 до 200 ppm.

С точки зрения машинного обучения, метод MCSA реализует интерпретируемый и эффективный алгоритм бинарной классификации, основанный на сравнении эмпирической дисперсии прогнозируемого и порогового значений. Его сложность на несколько порядков ниже, чем у классификации с помощью нейросетей, что делает его пригодным для автономных IoT-устройств. Таким образом, MCSA представляет собой решение задачи идентификации газа единичным сенсором, сочетающее минимальные аппаратные требования с высокой точностью распознавания, и может быть адаптирован для других задач, где требуется оценка принадлежности сигнала к заданному семейству.

Работа выполнена при финансовой поддержке Минобрнауки РФ (госзадание в области научной деятельности FSFS-2024-0007).

Литература

1. Shaposhnik A., Moskalev P., Vasiliev A. [et al.] Multivariate Calibration for Selective Analysis of Hydrogen Sulfide and Carbon Monoxide with Thermal Modulation of the $\text{SnO}_2\text{--PdO}$ Sensor // Chemosensors. – Vol. 13, No. 9. – 2025. – Pp. 323.