

## Химическая технология

## Chemical Technology

DOI: <http://doi.org/10.20914/2310-1202-2019-3-180-186>

Оригинальная статья/Research article

УДК 004.931

Open Access

Available online at [vestnik-vsuet.ru](http://vestnik-vsuet.ru)

## Автоматизация распознавания химических веществ с помощью электронной сенсорной технологии на основе нейросетевой обработки данных

Елена А. Балашова<sup>1</sup> [helbal@yandex.ru](mailto:helbal@yandex.ru)  0000-0002-9886-5402  
 Валерия В. Битюкова<sup>2</sup> [acusher.idpo@vsmaburdenko.ru](mailto:acusher.idpo@vsmaburdenko.ru)  
 Анатолий А. Хвостов<sup>3</sup> [khvtol1974@ya.ru](mailto:khvtol1974@ya.ru)  0000-0002-3836-9407

1 Воронежский государственный университет инженерных технологий, пр-т Революции, 19, г. Воронеж, 394036, Россия

2 Акушерство и гинекология ИДПО, Воронеж. гос. мед. ин-т им. Бурденко, пер. Здоровья, д. 2, г. Воронеж, 394024, Россия

3 ВУНЦ ВВС «Военно-воздушная академия им. проф. Н.Е. Жуковского и Ю.А. Гагарина», ул. Старых Большевиков, 54А, г. Воронеж, 394064, Россия

**Аннотация.** Определение состава исходного вещества выполнялось с помощью электронного сенсорного прибора «электронный нос», состоящего из 8 датчиков, на которые с помощью шприца подавался воздух с парами спирта, содержащего разного рода примеси. Сигнал с датчиков записывался с частотой дискретизации 1 с на протяжении 120 с. Выходные данные прибора были представлены в двух разных интерпретациях – в виде кривых, полученных от каждого датчика, либо площадей под кривыми. Цель работы – построение системы распознавания 11 примесей и воды в исходном веществе. Определение состава исходного вещества выполнялось с помощью «электронного носа», позволяющего получить по 120 значений с каждого из 8 датчиков в виде кривых либо значений площадей под кривыми. Большое количество классов (12), динамическое представление информации исходных данных делают целесообразным построение системы распознавания образов на основе нейронной сети – многослойного перцептрона, обучаемого на основе алгоритма обратного распространения ошибки. При обучении сети используются имеющиеся образцы, с указанием к какому классу они относятся. Свойства каждого анализируемого вещества представляются как вектор 120 значений 8 признаков, определяющих один из 12 классов. Для снижения размерности входных данных нейронной сети авторами предложено использование свертки имеющейся информации без существенной потери информационной емкости признаков путем построения 8 полиномиальных регрессий 19-го порядка, описывающих кривые с каждого из 8 датчиков «электронного носа». Полученная в результате свертки матрица входов состояла из 20 коэффициентов полиномиальной регрессии каждой из 8 кривых для 12 рассматриваемых классов. Была построена двухслойная нейронная сеть с 43 нейронами и сигмоидальной функцией активации в скрытом слое и 12 нейронами и линейной функцией активации в выходном слое. В результате обучения сети было получено 2 ошибки классификации образов, что позволяет использовать предлагаемый авторами подход для построения системы распознавания на основе предварительной свертки данных, динамически получаемых с «электронного носа».

**Ключевые слова:** электронный нос, свертка исходной информации, нейронная сеть, распознавание химических веществ

## Automation of recognition of chemicals using electronic sensor technology based on neural network data processing

Elena A. Balashova<sup>1</sup> [helbal@yandex.ru](mailto:helbal@yandex.ru)  0000-0002-9886-5402  
 Valeriya V. Bityukova<sup>2</sup> [acusher.idpo@vsmaburdenko.ru](mailto:acusher.idpo@vsmaburdenko.ru)  
 Anatoly A. Khvostov<sup>3</sup> [khvtol1974@ya.ru](mailto:khvtol1974@ya.ru)  0000-0002-3836-9407

1 Voronezh State University of Engineering Technologies, Revolution Av., 19 Voronezh, 394036, Russia

2 Obstetrics and Gynecology IAPE, Voronezh State Medical Institute named after Burdenko, Zdoroviya lane, 2, Voronezh, 394024, Russia

3 Military Research Center of the Air Force "Air Force Academy named after prof. N.E. Zhukovsky and Yu.A. Gagarina", Old Bolsheviks st., 54 A, Voronezh, 394064, Russia

**Abstract.** The composition of the initial substance was determined using an electronic sensor "electronic nose", consisting of 8 sensors, to which air was supplied with a syringe with alcohol vapor containing various kinds of impurities. The signal from the sensors was recorded with a sampling frequency of 1 s for 120 s. The output of the device was presented in two different interpretations - in the form of curves obtained from each sensor, or the areas under the curves. The purpose of the work is to build a recognition system for 11 impurities and water in the starting material. The composition of the initial substance was determined using an "electronic nose", which allows one to obtain 120 values from each of 8 sensors in the form of curves or the values of the areas under the curves. A large number of classes (12), the dynamic presentation of the source data information make it advisable to build a pattern recognition system based on a neural network - a multilayer perceptron trained on the basis of the error back propagation algorithm. When training the network, existing samples are used, indicating which

Для цитирования

Балашова Е.А., Битюкова В.В., Хвостов А.А. Автоматизация распознавания химических веществ с помощью электронной сенсорной технологии на основе нейросетевой обработки данных // Вестник ВГУИТ. 2019. Т. 81. № 3. С. 180–186. doi:10.20914/2310-1202-2019-3-180-186

For citation

Balashova E.A., Bityukova V.V., Khvostov A.A. Automation of recognition of chemicals using electronic sensor technology based on neural network data processing. *Vestnik VGUIT* [Proceedings of VSUET]. 2019. vol. 81. no. 3. pp. 180–186. (in Russian). doi:10.20914/2310-1202-2019-3-180-186

This is an open access article distributed under the terms of the Creative Commons Attribution 4.0 International License

class they belong to. The properties of each analyte are represented as a vector of 120 values of 8 attributes defining one of 12 classes. To reduce the dimensionality of the input data of the neural network, the authors proposed the use of convolution of the available information without significant loss of information capacity of signs by constructing 8 polynomial regressions of the 19th order that describe the curves from each of the 8 sensors of the "electronic nose". The input matrix obtained as a result of convolution consisted of 20 polynomial regression coefficients of each of 8 curves for 12 classes under consideration. A two-layer neural network with 43 neurons and a sigmoidal activation function in the hidden layer and 12 neurons and a linear activation function in the output layer was constructed. As a result of network training, 2 classification errors were obtained, which allows us to use the approach proposed by the authors to build a recognition system based on preliminary convolution of data dynamically obtained from the "electronic nose"

**Keywords:** electronic nose, initial information convolution, neural network, chemical recognition

## Введение

Одной из современных тенденций анализа состава химического вещества является использование электронной сенсорной технологии – «электронного носа» [1]. Для определения состава вещества используется группа датчиков, выдающих различные выходные сигналы как для разных концентраций одного и того же вещества, так и для разных веществ.

Используемый в работе анализатор запахов МАГ-08 состоял из 8 чувствительных сенсоров, представляющих собой пьезоэлементы на основе кварцевых резонаторов ОАВ-типа с базовой частотой колебаний 10 МГц. На электродах размещались различные пленочные сорбенты: полиэтиленгликоль фталат (ПЭГФ), полиэтиленгликоль (ПЭГ-2000), тритон X-100 (ТХ-100), полиэтиленгликоль себацинат (ПЭГСб), дициклогексан-18-Краун-6 (ДЦГ18К6), полиэтиленгликоль адипинат (ПЭГА), многослойные углеродные нанотрубки (МУНТ), пчелиный клей (ПЧК) [1].

Пробы каждого образца спиртосодержащей жидкости с примесями (ацетон, пропанол-1, пропанол-2, бутанол-1, бутанол-2, этанол, бутанон, ацетальдегид, этилацетат, бутилацетат, пентанол-2, вода) отбирались индивидуальным шприцем и вводились в ячейку детектирования. Величина выходного сигнала сенсорного элемента определялась сорбционной активностью применяемого сорбента [2, 3]. Сигнал с датчиков (максимальное изменение частоты колебания кварцевых пластин в результате сорбции компонентов) записывался с частотой дискретизации 1 с на протяжении 120 с. Агрегирование информации проводилось в форме «визуального отпечатка» – оценивания площади отклика сенсоров, пропорционального концентрации летучих веществ.

Полученные исходные данные сохранялись в базе данных и обрабатывались с помощью программного обеспечения анализатора «MAG Soft», реализующего факторный анализ (метод главных компонент). В силу того что число рассматриваемых классов соединений велико (12 разновидностей примесей), получить точные результаты классификации образцов указанным методом не представляется возможным. Разработка алгоритма обработки результатов исследования в этой связи является актуальной задачей.

На сегодняшний день для классификации объектов различной природы и сложности используются эвристические методы, методы кластерного, дискриминантного анализа, точность которых с ростом числа классов снижается [4], что вынуждает авторов строить многоуровневые иерархические системы классификации. Классификация объектов с помощью нейронных сетей дает [5-11] более точные результаты, а негативный эффект роста числа классов может быть нивелирован усложнением архитектуры сети.

Цель работы – построение автоматизированной нейросетевой системы классификации примесей в исходном веществе. В качестве исходного вещества, параметры которого составили обучающую выборку, выступали спирт и спиртосодержащие жидкости с заранее известным составом примесей. Анализировались спиртовые жидкости, содержащие 11 различных примесей и воду. Таким образом, поставлена задача – разделение обучающей выборки на 12 классов веществ.

## Материалы и методы

Задача классификации объектов может быть успешно решена с использованием как сверточных [8, 9], рекуррентных [9], так и многослойных нейронных сетей с прямым распространением сигнала и обратным распространением ошибки [5]. Классификация сигналов, представляющих собой длинный вектор (порядка 32 000 значений), успешно может быть выполнена с помощью сверточных нейронных сетей [8]. Однако успешное обучение глубоких нейронных сетей требует наличия параллельной обработки на специальных видеокартах и практически невозможно на персональном компьютере. Многослойные перцептроны напротив зарекомендовали себя как нейронные сети, не требующие больших ресурсов для создания и обучения [6].

Алгоритм обратного распространения ошибки представляет собой градиентный алгоритм обучения многослойного перцептрона, основанный на минимизации среднеквадратической ошибки выходов сети. При обучении нейронной сети на вход поочередно подаются

значения вектора входов  $p$ . Выходное значение нейронной сети  $y$  (расчетное значение) сравнивается с целевым  $t$  (заданное значение). Перенастройка весов  $W$  и смещений  $b$  производится для того, чтобы приблизить выходное значение  $a$  к целевому  $t$ . Цель обучения – уменьшить среднеквадратическую ошибку:

$$E = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^n e(i)^2 = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^n (y(i) - t(i))^2.$$

Процесс обучения прекращается, если реализовано предельное количество циклов обучения, целевая функция достигла заданной величины либо некоторого значения и перестала уменьшаться.

Многослойный перцептрон (рисунок 1) состоит из входного слоя, образованного входными векторами, одного скрытого слоя, состоящего из  $k$  нейронов, и выходного слоя из 12 нейронов, число которых определяется числом распознаваемых классов. Количество нейронов в скрытом слое определяется экспериментально и может быть увеличено либо уменьшено в зависимости от особенностей обучающей выборки. Функции активации  $f$ , используемые в нейронах скрытых слоев, – сигмоидальные,  $f(x) = \frac{1}{1 + e^{-\beta x}}$ , а в выходном слое – линейные  $f(x) = x$ .

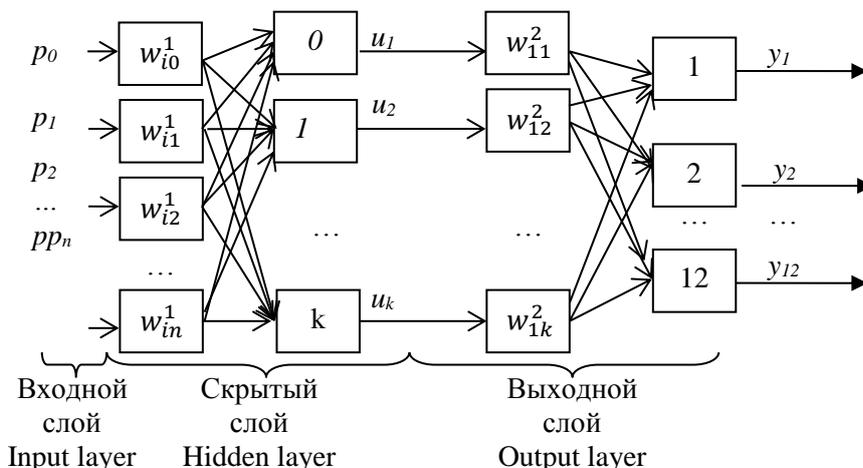


Рисунок 1. Многослойный перцептрон

Figure 1. Multilayer perceptron

Выходной сигнал  $j$ -го нейрона скрытого слоя определяется функцией активации от суммы взвешенных входов  $v_j = f\left(\sum_{j=0}^n w^1_{ij} p_j\right)$ , а выход нейронной сети (сигнал выходного слоя) – функцией активации от суммы взвешенных выходов скрытого слоя

$$y = f\left(\sum_{i=0}^k w^2_{ki} v_i\right) = f\left(\sum_{i=0}^k w^2_{ki} f\left(\sum_{j=1}^n w^1_{ij} p_j\right)\right).$$

Многослойный перцептрон имеет более мощное обучающее правило – разновидность градиентного спуска. Веса перестраиваются в направлении минимума ошибки  $E$ .

Веса связи между нейронами корректируются в обратном порядке – от выхода ко входу нейронной сети, поэтому алгоритм поиска весов получил название обратного распространения ошибки. Вес  $w^2_{ij}$  связи между нейроном выходного слоя и  $j$ -м нейроном скрытого слоя корректируется согласно следующему правилу:

$$w^2_{ij}(l+1) = w^2_{ij}(l) - \eta \frac{\partial E}{\partial w^2_{ij}},$$

где  $\eta$  – коэффициент скорости обучения сети, скорость изменения ошибки:

$$\frac{\partial E}{\partial w^2_{ij}} = (y - t) \frac{df(u^2_1)}{du^2_1} v_j, \quad u^2_1 = \sum_{j=0}^k w^2_{1j} v_j.$$

Ошибка на выходе скрытого слоя не имеет непосредственной связи с выходной ошибкой, так как неясно, каким должен быть эталонный выход скрытого слоя. Вес нейронов скрытого слоя корректируется в соответствии с их вкладом в величину ошибки выходного слоя. Чем больше ошибка на выходе сети и чем больше вес связи между скрытым и выходным нейроном, тем больше ошибка на выходе скрытого нейрона. Градиент ошибки относительно скрытого слоя определяется следующим образом:

$$\frac{\partial E}{\partial w^1_{ij}} = (y - t) \frac{df(u^2_1)}{du^2_1} w^2_{i1} \frac{df(u^1_1)}{du^1_1} p_j.$$

Вес  $w_{ij}^1$  нейронов скрытого слоя корректируется согласно следующему правилу:

$$w_{ij}^1(l+1) = w_{ij}^1(l) - \eta \frac{\partial E}{\partial w_{ij}^1}.$$

Алгоритм обучения сети работает следующим образом.

1. Задаются начальные значения весов связей между нейронами на всех слоях сети.

2. На вход сети подается значение текущего входного вектора. Осуществляется расчет в прямом направлении значений выходных сигналов нейронов скрытого слоя и выходного слоя.

3. Выполняется расчет градиента ошибки выходного слоя и осуществляется коррекция весов связей между нейронами скрытого и выходного слоев.

4. Рассчитывается градиент ошибки скрытого слоя и осуществляется коррекция весов связей между входами сети и нейронами скрытого слоя.

5. Алгоритм повторяется с пункта 2. Перенастройка весов и смещений производится до тех пор, пока норма градиента не станет ниже заданного значения погрешности  $\epsilon$ , определяющего точность процесса обучения.

Совокупность входных векторов для обучения сети представляет собой 120 значений, полученных с частотой 1 с с каждого из 8 сенсоров «электронного носа» для всех 12 рассматриваемых классов веществ. Таким образом, входы нейронной сети – матрица размерностью  $960 \times 12$ . Количество выходных нейронов определяется количеством рассматриваемых классов – 12.

### Результаты и обсуждение

Экспериментальным путем было установлено, что при таком большом числе входов максимальное количество слоев нейронной сети, доступное для обучения на персональном компьютере, – 2 с 10 нейронами на скрытом слое с сигмоидальными функциями активации и 12 нейронами с линейной функцией активации в выходном слое. Такого количества нейронов недостаточно для распознавания классов. Нейронная сеть может выделить из совокупности только один класс. Очевидно, что для построения

нейронной сети с большим количеством нейронов требуется уменьшение количества входов.

Поскольку максимальные изменения значений, полученных с большинства сенсоров, наблюдаются в первые 60 с измерений, матрица входных значений была уменьшена до  $480 \times 12$ . Это позволило создать и обучить нейронную сеть с 60 нейронами в скрытом слое и 12 – в выходном, однако не позволило получить надежных результатов классификации. Ряд веществ, например, ацетальдегид (рисунок 2) имеет низкую летучесть. Для их анализа «электронному носу» требуется больше времени. Указанный подход не позволяет не только классифицировать низколетучие вещества, но и не увеличивает точность классификации остальных веществ.

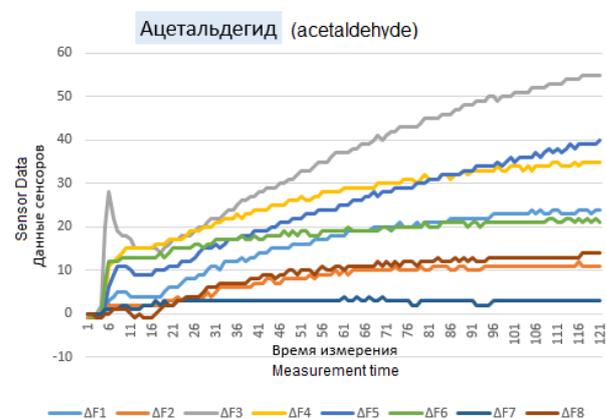


Рисунок 2. Показания прибора при распознавании ацетальдегида

Figure 2. Readings in the detection of acetaldehyde

В этой связи было предложено осуществить свертку исходных данных. Одним из путей уменьшения количества входов с минимальными потерями и искажением информации является аппроксимация полученных с сенсоров кривых полиномиальными зависимостями. В качестве входов нейронной сети при этом рассматриваются коэффициенты полиномов, описывающих изменение исходных данных. Для описания исходных кривых был выбран полином 19-го порядка, результаты аппроксимации для анализа ацетальдегида представлены на рисунке 3.

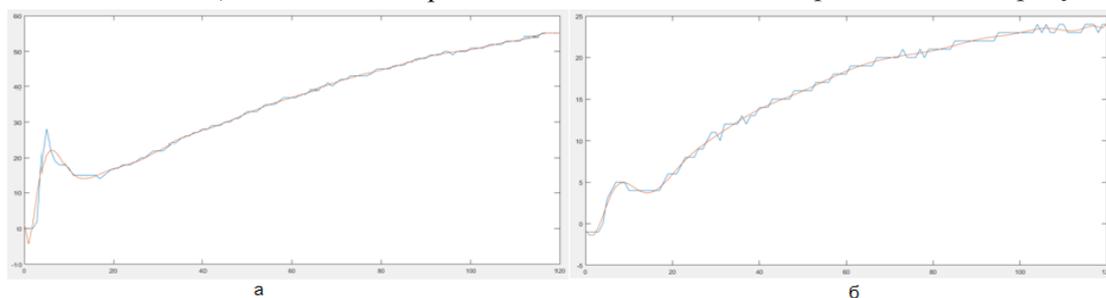


Рисунок 3. Аппроксимация данных анализа ацетальдегида: а – данные третьего сенсора; б – данные шестого сенсора

Figure 3. Approximation analysis of acetaldehyde: a third sensor data; b – data of the sixth sensor

После описания исходных данных с помощью полиномиальной регрессии количество входов значительно уменьшилось до 160, что позволило обучать нейронную сеть на матрице 160 x 12. Экспериментальным путем было установлено, что для успешной классификации обучающей выборки достаточно 32 нейронов в скрытом слое и 12 – в выходном. Ошибки классификации представлены на рис. 4, откуда видно, что их значения не превышают допустимой ошибки обучения 0,001.

	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
1	1.8264e-04	-2.2847e-04	-2.2173e-04	5.0440e-05	-1.0632e-04	-5.1579e-04	-4.4961e-04	1.2504e-04	5.7069e-04	-1.1263e-04	7.0088e-06	-3.7978e-04
2	-1.9041e-04	2.2106e-04	4.0006e-05	1.9489e-04	5.7803e-04	8.1967e-04	-1.9201e-04	-3.0382e-05	7.9681e-05	-2.7487e-05	-8.8330e-05	-3.0236e-04
3	-2.7487e-05	1.8264e-04	-8.9760e-05	-2.5425e-04	6.5298e-04	1.0611e-04	-7.1958e-04	1.0986e-04	2.9950e-05	2.2064e-05	2.5985e-04	1.4147e-04
4	1.5101e-04	-1.0369e-04	-3.5205e-04	2.2064e-05	2.6565e-05	-6.2882e-04	5.1300e-05	-2.9786e-04	-6.0539e-04	5.7803e-04	-1.5536e-04	6.0100e-04
5	1.9876e-04	-1.2446e-04	-4.7257e-05	5.7803e-04	8.1967e-04	5.8895e-04	8.8594e-04	2.9950e-05	4.3844e-04	6.5298e-04	-2.8114e-04	5.8895e-04
6	-9.5593e-04	-1.2368e-04	-1.1263e-04	6.5298e-04	1.0611e-04	-9.3686e-05	1.0525e-04	-4.0619e-05	3.5327e-04	2.6565e-05	3.4614e-04	1.5332e-04
7	-5.5933e-05	-1.1319e-04	-2.7487e-05	2.6565e-05	-6.2882e-04	5.8895e-04	5.8895e-04	3.5207e-05	2.2662e-04	1.2578e-05	-3.9359e-04	3.1716e-04
8	-6.3064e-04	1.1238e-04	1.5101e-04	-1.7256e-04	5.7069e-04	-3.6931e-04	-9.3686e-05	1.4329e-04	7.8697e-05	-1.8629e-04	5.9138e-05	-3.2660e-04
9	-2.4955e-04	-2.0743e-04	1.9876e-04	1.1279e-04	-2.0021e-04	-4.0619e-05	2.6912e-04	8.5035e-05	-1.5250e-04	-1.1319e-04	-2.5079e-04	-5.3013e-04
10	7.5720e-05	2.4028e-04	5.3614e-05	-3.6284e-04	7.4936e-04	3.5207e-05	-3.6931e-04	7.8697e-05	5.8895e-04	1.1238e-04	9.1215e-05	-8.9263e-04
11	1.1238e-04	-9.1411e-05	-1.7433e-04	1.2209e-04	7.8697e-05	1.4329e-04	-2.0154e-04	-1.5250e-04	2.5508e-04	3.5327e-04	1.2578e-05	4.7813e-04
12	-2.0743e-04	1.4688e-04	2.0414e-04	-6.8883e-04	7.9606e-05	8.5035e-05	-6.2689e-04	6.9125e-05	-5.5399e-04	2.6565e-05	-1.8629e-04	-1.8312e-04

Рисунок 4. Матрица ошибок обучения

Figure 4. The error matrix of training

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
1.748326e-39	1.139e-39	5.490e-40	7.812e-40	9.976e-40	4.176e-40	2.056e-39	3.612e-40	1.212e-39	2.812e-40
-2.018622e-26	-1.506e-26	-8.892e-27	-8.892e-27	-1.180e-26	-4.760e-27	-1.340e-26	-6.312e-27	-1.402e-26	-3.282e-26
1.073842e-23	8.932e-24	3.482e-24	4.782e-24	6.432e-24	2.492e-24	1.282e-23	2.492e-24	7.442e-24	1.742e-23
-8.49462e-21	-2.272e-21	-1.542e-21	-1.542e-21	-2.562e-21	-7.892e-22	-4.542e-21	-1.132e-21	-2.432e-21	-5.702e-21
7.78432e-19	3.052e-19	2.992e-19	3.502e-19	4.992e-19	3.322e-19	9.322e-19	3.322e-19	5.442e-19	1.282e-18
-1.254962e-16	-8.142e-17	-4.252e-17	-5.872e-17	-8.242e-17	-6.802e-17	-1.322e-16	-4.942e-17	-8.252e-17	-2.072e-16
1.512382e-14	9.702e-15	5.172e-15	8.852e-15	1.052e-14	2.892e-15	1.832e-14	4.832e-15	1.082e-14	2.522e-14
-1.392132e-12	-8.942e-13	-4.792e-13	-8.502e-13	-9.772e-13	-2.462e-13	-1.732e-12	-4.422e-13	-1.002e-12	-2.332e-12
9.834252e-11	6.282e-11	3.402e-11	4.432e-11	7.172e-11	1.522e-11	1.242e-10	3.092e-11	7.232e-11	1.872e-10
-5.30392e-09	-3.852e-09	-1.852e-09	-2.392e-09	-4.072e-09	-8.732e-10	-1.862e-09	-8.442e-09	-4.042e-09	-9.192e-09
3.237122e-07	1.382e-07	7.892e-08	9.792e-08	1.772e-07	1.862e-08	3.922e-07	6.812e-08	1.742e-07	3.902e-07
-7.19982e-06	-4.212e-06	-2.372e-06	-9.902e-06	-2.372e-06	-5.502e-06	-9.382e-06	-1.532e-06	-7.592e-06	-1.282e-05
0.00017139	9.392e-05	5.232e-05	6.472e-05	0.00014634	-4.822e-06	0.000235615	4.792e-05	0.000143187	0.00020452
-0.002957207	-0.00143038	-0.000799606	-0.000941259	-0.00283215	0.000426932	-0.000969996	-0.000712618	-0.000611809	-0.000951879
0.00194743	0.013418342	0.007238422	0.007492292	0.002743296	-0.011015794	0.044992196	0.008206944	0.003482182	0.085999629
-0.20998798	-0.04662343	-0.019943214	-0.000527745	-0.23797291	0.164314874	-0.345646771	-0.048293319	-0.131183351	-0.15197879
1.046813115	-0.290210037	-0.282117119	-0.576942194	1.074662699	-1.421839928	1.290612902	0.057477022	1.356833538	1.217475648
-1.188430087	3.528610075	2.735811844	4.390011657	-1.119230708	8.287080151	-0.805300904	0.811616359	-2.746701517	-3.898042671
-0.848054009	-5.300007657	-4.96893055	-7.184580897	-0.882694212	-7.207421846	-2.3351399	-1.309216944	1.495778356	1.069456465
-0.605978051	-0.169969902	1.483092738	0.847188569	1.431871767	-0.2635988	0.683429657	0.07279882	0.104472573	0.411332482
8.312e-30	1.222e-30	7.502e-30	7.782e-30	1.292e-30	1.292e-30	1.112e-30	1.042e-30	1.112e-30	1.112e-30
-9.842e-27	-1.592e-26	-8.242e-27	-9.082e-27	-1.452e-26	-3.882e-27	-1.502e-26	-8.462e-27	-1.242e-26	-1.302e-26
5.492e-24	7.372e-24	4.412e-24	4.902e-24	7.792e-24	2.072e-24	4.462e-24	4.462e-24	7.022e-24	7.022e-24
-1.862e-21	-2.582e-21	-1.442e-21	-1.422e-21	-2.542e-21	-6.722e-22	-2.392e-21	-1.432e-21	-2.212e-21	-3.212e-21
4.312e-19	3.262e-19	3.242e-19	3.682e-19	5.722e-19	1.482e-19	3.272e-19	3.272e-19	4.992e-19	5.242e-19
-7.242e-17	-8.402e-17	-5.282e-17	-3.972e-17	-9.302e-17	-2.342e-17	-8.892e-17	-4.892e-17	-8.372e-17	-8.392e-17
9.132e-15	1.002e-14	8.412e-15	7.812e-15	1.142e-14	7.732e-15	1.082e-14	1.082e-14	3.002e-14	1.082e-14
-8.792e-13	-9.132e-13	-9.392e-13	-8.422e-13	-1.082e-12	-1.392e-13	-9.992e-13	-9.842e-13	-5.232e-13	-9.822e-13
6.532e-11	6.592e-11	4.252e-11	4.802e-11	7.602e-11	1.572e-11	7.232e-11	3.622e-11	6.722e-11	7.192e-11
-3.732e-09	-3.442e-09	-3.552e-09	-2.712e-09	-4.222e-09	-7.822e-10	-4.042e-09	-1.902e-09	-3.732e-09	-4.052e-09
1.662e-07	1.422e-07	9.842e-08	1.132e-07	1.812e-07	2.672e-08	1.742e-07	7.842e-08	1.892e-07	1.742e-07
-5.622e-06	-4.432e-06	-3.192e-06	-3.702e-06	-5.902e-06	-8.122e-07	-5.902e-06	-1.232e-06	-5.322e-06	-7.592e-06
0.000142321	0.000202307	7.602e-05	8.822e-05	0.000144525	6.442e-06	0.000139416	4.722e-05	0.00013061	0.000142456
-0.002633111	-0.001297894	-0.001297894	-0.001501811	-0.002577487	9.732e-05	-0.001473349	-0.000469622	-0.001815883	-0.002375218
0.005919658	0.018889977	0.014896394	0.017133242	0.002028804	-0.009146013	0.000262957	0.005129138	0.026459969	0.051489708

Рисунок 5. Свертка исходных данных для 10 тестовых веществ

Figure 5. Convolution of input data for 10 test substances

Поочередная подача на вход исходных данных позволила оценить точность классификации тестовой выборки. Из 10 веществ неверно классифицировано было лишь 1.

### Заключение

1. Большое количество классов (12) и вид представления информации (динамические кривые), получаемой с «электронного носа», делают целесообразным построение системы распознавания образов на основе нейронной сети.

Для проверки корректности работы нейронной сети было использовано 10 тестовых веществ, содержащих один или несколько контрольных образцов, используемых для обучения нейронной сети.

Для свертки исходных данных для каждого из тестовых веществ была осуществлена аппроксимация выходов каждого из 8 сенсоров полиномиальной регрессией 19-го порядка. Полученные входные данные представлены на рисунке 5.

2. Искусственное уменьшение времени проведения анализа до 60 с не позволяет распознать тяжелолетучие компоненты, проявляющих себя на второй минуте анализа.

3. Для свертки имеющейся информации без существенной потери информационной емкости признаков предложено использовать полиномиальную регрессию, коэффициенты которой подаются на вход нейронной сети, что позволяет классифицировать вещества с высокой степенью точности.

## Литература

- 1 Omatu S., Mitsuaki Y. E-nose system by using neural networks // *Neurocomputing*. 2016. V. 172. P. 394–398.
- 2 Никитина С.Ю., Кучменко Т.А., Рудаков О.Б., Дроздова Е.В. Применение методики «электронный нос» для оценки качества пищевого этанола // *Вестник ВГУ. Серия: Химия. Биология. Фармация*. 2015. № 1. С. 26–35.
- 3 Проблемы аналитической химии. Том 14. Химические сенсоры: монография; под ред. Ю.Г. Власова. М.: Наука, 2011. 399 с.
- 4 Большакова Л.В., Примакин А.И., Яковлева А.Н. Применение кластерного и дискриминантного анализов в процессе обработки и интерпретации статистических данных при обеспечении экономической и информационной безопасности хозяйствующего субъекта // *Вестник Санкт-Петербургского университета МВД России*. 2014. № 2 (62). С. 148–156.
- 5 Аль-Хашеди А.А., Обадди А.А., Нуриев Н.К. Разработка математического и программного обеспечения задач распознавания образов на основе перцептрона // *Вестник Казанского технологического университета*. 2017. Т. 20. № 11. С. 85–88.
- 6 Карпов А.С. Сравнение методов обучения нейронной сети для задачи распознавания изображений // *Вестник современных исследований* 2017. № 6–1 (9). С. 122–123.
- 7 Vijayaditya P., Povey D., Khudanpur S. A time delay neural network architecture for efficient modeling of long temporal contexts // *Sixteenth Annual Conference of the International Speech Communication Association*. 2015.
- 8 Dai W., Dai C., Qu S., Li J. et al. Very deep convolutional neural networks for raw waveforms // *2017 IEEE International Conference on Acoustics, Speech and Signal Processing (ICASSP)*. IEEE, 2017. doi: 10.1109/ICASSP.2017.7952190
- 9 Sainath T.N., Vinyals O., Senior A., Sak H. Convolutional, long short-term memory, fully connected deep neural networks // *2015 IEEE International Conference on Acoustics, Speech and Signal Processing (ICASSP)*. IEEE, 2015. doi: 10.1109/ICASSP.2015.7178838
- 10 Szulczyński B. et al. Determination of odour interactions in gaseous mixtures using electronic nose methods with artificial neural networks // *Sensors*. 2018. V. 18. № 2. P. 519. doi: 10.3390/s18020519
- 11 Jing Y.-Q., Meng Q.-H., Qi P.-F., Cao M.-L. et al. A bioinspired neural network for data processing in an electronic nose // *IEEE Transactions on Instrumentation and Measurement* 2016. V. 65. № 10. P. 2369–2380. doi: 10.1109/TIM.2016.2578618

## References

- 1 Omatu S., Mitsuaki Y. E-nose system by using neural networks. *Neurocomputing*. 2016. vol. 172. pp. 394–398.
- 2 Nikitina S.Yu., Kuchmenko T.A., Rudakov O.B., Drozdova E.V. Application of the “electronic nose” technique to assess the quality of food ethanol. *Bulletin of the Voronezh State University. Series: Chemistry. Biology. Pharmacy*. 2015. no. 1. pp. 26–35. (in Russian).
- 3 Problems of analytical chemistry. Vol. 14. Chemical sensors: monograph; ed. Yu.G. Vlasov. Moscow, Nauka, 2011. 399 p. (in Russian).
- 4 Bolshakova L.V., Primakin A.I., Yakovleva A.N. The use of cluster and discriminant analyzes in the processing and interpretation of statistical data while ensuring economic and information security of an economic entity. *Bulletin of the St. Petersburg University of the Ministry of Internal Affairs of Russia*. 2014. no. 2 (62). pp. 148–156. (in Russian).
- 5 Al'-Khashedi A.A., Obadi A.A., Nuriev N.K. Development of mathematical and software for pattern recognition problems based on the perceptron. *Bulletin of Kazan Technological University*. 2017. vol. 20. no. 11. pp. 85–88. (in Russian).
- 6 Karpov A.S. Comparison of neural network training methods for image recognition. *Bulletin of modern studies* 2017. no. 6–1 (9). pp. 122–123. (in Russian).
- 7 Vijayaditya P., Povey D., Khudanpur S. A time delay neural network architecture for efficient modeling of long temporal contexts. *Sixteenth Annual Conference of the International Speech Communication Association*. 2015.
- 8 Dai W., Dai C., Qu S., Li J. et al. Very deep convolutional neural networks for raw waveforms. *2017 IEEE International Conference on Acoustics, Speech and Signal Processing (ICASSP)*. IEEE, 2017. doi: 10.1109/ICASSP.2017.7952190
- 9 Sainath T.N., Vinyals O., Senior A., Sak H. Convolutional, long short-term memory, fully connected deep neural networks. *2015 IEEE International Conference on Acoustics, Speech and Signal Processing (ICASSP)*. IEEE, 2015. doi: 10.1109/ICASSP.2015.7178838
- 10 Szulczyński B. et al. Determination of odour interactions in gaseous mixtures using electronic nose methods with artificial neural networks. *Sensors*. 2018. vol. 18. no. 2. pp. 519. doi: 10.3390/s18020519
- 11 Jing Y.-Q., Meng Q.-H., Qi P.-F., Cao M.-L. et al. A bioinspired neural network for data processing in an electronic nose. *IEEE Transactions on Instrumentation and Measurement* 2016. vol. 65. no. 10. pp. 2369–2380. doi: 10.1109/TIM.2016.2578618

## Сведения об авторах

**Елена А. Балашова** к.т.н., доцент, Воронежский государственный университет инженерных технологий, пр-т Революции, 19, г. Воронеж, 394036, Россия, helbal@yandex.ru  
 <https://orcid.org/0000-0002-9886-5402>

## Information about authors

**Elena A. Balashova** Cand. Sci. (Engin.), associate professor, Voronezh State University of Engineering Technologies, Revolution Av., 19 Voronezh, 394036, Russia, helbal@yandex.ru  
 <https://orcid.org/0000-0002-9886-5402>

**Валерия В. Битюкова** д.м.н., профессор, акушерство и гинекология ИДПО, Воронежский государственный медицинский университет им. Бурденко, пер. Здоровья, 2, г. Воронеж, 394024, Россия, acusher.idpo@vsmaburdenko.ru

**Valeriya V. Bityukova** Dr. Sci. (Med.), professor, obstetrics and gynecology IAPE, Voronezh State Medical University named after N.N. Burdenko, Zdoroviya lane, 2, Voronezh, 394024, Russia, acusher.idpo@vsmaburdenko.ru

**Анатолий А. Хвостов** д.т.н., профессор, кафедра математики, ВУНЦ ВВС «Военно-воздушная академия им. проф. Н.Е. Жуковского и Ю.А. Гагарина», ул. Старых Большевиков, 54А, г. Воронеж, 394064, Россия, khvtol1974@ya.ru

**Anatoly A. Khvostov** Dr. Sci. (Engin.), professor, math department, Military Research Center of the Air Force “Air Force Academy named after prof. N.E. Zhukovsky and Yu.A. Gagarina”, Old Bolsheviks st., 54 A, Voronezh, 394064, Russia, khvtol1974@ya.ru

<https://orcid.org/0000-0002-3836-9407>

<https://orcid.org/0000-0002-3836-9407>

#### Вклад авторов

#### Contribution

**Елена А. Балашова** провела расчеты, написала рукопись, корректировала её до подачи в редакцию и несёт ответственность за плагиат

**Elena A. Balashova** wrote the manuscript, correct it before filing in editing and is responsible for plagiarism, , performed computations

**Валерия В. Битюкова** обзор литературных источников по исследуемой проблеме

**Valeriya V. Bityukova** review of the literature on an investigated problem

**Анатолий А. Хвостов** консультация в ходе исследования

**Anatoly A. Khvostov** consultation during the study

#### Конфликт интересов

#### Conflict of interest

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

The authors declare no conflict of interest.

Поступила 14/07/2019	После редакции 31/07/2019	Принята в печать 09/08/2019
Received 14/07/2019	Accepted in revised 31/07/2019	Accepted 09/08/2019