

ЦИФРОВА ОБРОБКА КОЛОРИМЕТРИЧНОГО СЕНСОРНОГО МАСИВУ ДАНИХ МЕТОДОМ САММОНА

Зоряна Васюник, Віталій Мелешко

ІПММ, Львів, Україна, z-vasjunyk@ukr.net.

З кожним роком масштаби змін атмосферного повітря, спричинені людською діяльністю, неспинно зростають, набуваючи глобального характеру. З метою обмеження шкідливих викидів у атмосферу і запровадження сучасних високоефективних методів очищення повітря необхідно здійснювати постійний моніторинг його стану, що вимагає вдосконалення засобів вимірювання хімічного складу газових середовищ та створення нових більш ефективних і недорогих вимірювальних приладів.

Надзвичайно актуальним є створення малогабаритних ефективних наносенсорів, чутливих до широкого спектру газових сумішей [1,2], важливою частиною яких є цифрова обробка отриманих даних, так званого колориметричного сенсорного масиву.

В даній роботі при селекції газових сумішей в газосенсорних системах та обробці колориметричного сенсорного масиву даних застосовано метод Саммона [3], який є одним з найбільш розповсюджених методів аналізу багатовимірних даних. Головною метою цього методу є 1) зменшення вимірності даних; 2) візуалізація отриманих даних на площині; 3) визначення структури взаємозв'язків між змінними, тобто класифікація даних.

Метод візуалізації даних Саммона [3] полягає в наступному:

Нехай маємо n s -мірних векторів $x_i = (x_{i1}, \dots, x_{is})^T$, ($i = 1, 2, \dots, n$) в евклідовому просторі R^s . Для кожної точки x_i потрібно знайти її проєкцію $y_i: x_i \rightarrow y_i$, де R^m - m -мірний простір ($m = 2, 3$), $y_i = (y_{i1}, \dots, y_{im})^T$.

В обох просторах визначимо поняття відстані:

$$\rho_{ij} = \rho(y_i, y_j) = \sqrt{\sum_{r=1}^m (y_{ir} - y_{jr})^2}, \quad \rho_{ij}^* = \rho(x_i, x_j) = \sqrt{\sum_{r=1}^s (x_{ir} - x_{jr})^2} \quad (1)$$

При проєктуванні необхідно так визначити точки y_i , щоб мінімізувати функцію похибки E :

**Конференція молодих учених «Підстригачівські читання – 2021»,
26–28 травня 2021 р., Львів**

$$E = \frac{1}{c} \sum_{i < j}^n \left| \rho_{ij}^* - \rho_{ij} \right|^2 / \rho_{ij}^*, \quad \text{де } c = \sum_{i < j}^n \rho_{ij}^*. \quad (2)$$

З цією метою в методі Саммона [3] застосовано ітераційний оптимізаційний метод Нютона, який можна спростити до виразу:

$$y_{pq}(k+1) = y_{pq}(k) - \xi \Delta_{pq}(k), \quad (3)$$

де ξ - коефіцієнт навчання (з інтервалу [0.3; 0.4]), а $\Delta_{pk}(k)$ є частка від ділення відповідного складника градієнта і діагонального складника гессіану, визначених у k -ій ітерації:

$$\Delta_{pq}(k) = \frac{\delta E}{\delta y_{pq}} / \frac{\delta^2 E}{\delta^2 y_{pq}^2}. \quad (4)$$

Для визначення функції похибки, як у нашому випадку, відповідні складники градієнта і гессіана подаються формулами:

$$\frac{\delta E}{\delta y_{pq}} = -\frac{2}{c} \sum_{j=1, j \neq p}^n \left[\frac{\rho_{pj}^* - \rho_{pj}}{\rho_{pj} \rho_{pj}^*} \right] [y_{pq} - y_{jq}], \quad (5)$$

$$\frac{\delta^2 E}{\delta^2 y_{pq}^2} = -\frac{2}{c} \sum_{j=1, j \neq p}^n \frac{1}{\rho_{pj} \rho_{pj}^*} \left[(\rho_{pj}^* - \rho_{pj}) - \frac{(y_{pq} - y_{jq})^2}{\rho_{pj}} \left(1 + \frac{\rho_{pj}^* - \rho_{pj}}{\rho_{pj}} \right) \right].$$

Цифрова обробка колориметричного сенсорного масиву даних за допомогою вище описаного методу дає можливість значно підвищити селективність аналізу вимірювальних наносенсорних приладів.

1. Helwig A. Principles of gas sensing at semiconductor surfaces. Mu nchen: Hieronymus. 2008. 174p.
2. Gafiychuk V.V., Ostafiychuk B.K., Popovych D.I., Popovych I.D., Serebnytsky A.S. ZnO nanoparticles produced by reactive laser ablation // Applied Surface Science – 2011. – 257(20) – P. 8396-8401.
3. Sammon J. W. A nonlinear mapping for data structure analysis / J.Sammon // IEEE Nrans. On Computers. – 1969. – C-18(5). – P.401-409.

**DIGITAL PROCESSING OF A COLORIMETRIC SENSOR ARRAY
DATA BY THE SAMMON METHOD**

To study the selectivity of the analysis of measuring nanosensor devices vital question of approaches to colorimetric sensor array data and their classification. The Sammon method of data visualization used to digital processing of a colorimetric sensor array data, which proved to be quite effective.