

См. обсуждения, статистику и профили авторов для этой публикации по адресу: <https://www.researchgate.net/publication/298897291>.


# Архитектуры динамических нейронных сетей для стохастической калибровки ориентировочных недорогих систем измерения качества воздуха в полевых условиях

Статья в Датчики и актуаторы В Chemical · март 2016 г.


DOI: 10.1016/j.snb.2016.03.038

ЦИТАТЫ  
85

6 авторов, в том числе:




**Елена Эспозито**  
ВДНХ, Портичи, Италия  
48 ПУБЛИКАЦИИ 686 ЦИТАТОВ  
[СМОТРЕТЬ ПРОФИЛЬ](#)




**Мария Сальвато**  
ВДНХ  
39 ПУБЛИКАЦИИ 357 ЦИТАТОВ  
[СМОТРЕТЬ ПРОФИЛЬ](#)

ЧИТАЕТ  
1048





**Саверио Де Вито**  
ВДНХ  
137 ПУБЛИКАЦИИ 1602 ЦИТАТЫ  
[СМОТРЕТЬ ПРОФИЛЬ](#)



**Вивьен Брайт**  
Метеорологический офис  
12 ПУБЛИКАЦИИ 349 ЦИТАТОВ  
[СМОТРЕТЬ ПРОФИЛЬ](#)

Некоторые авторы этой публикации также работают над следующими родственными проектами:

- 

ComBoNDT - Концепции обеспечения качества для клеевого соединения авиационных композитных конструкций с помощью передовых методов неразрушающего контроля [Посмотреть проект](#)
- 

CITI-SENSE [Посмотреть проект](#)

# Архитектуры динамических нейронных сетей для стохастической калибровки ориентировочных недорогих систем измерения качества воздуха в полевых условиях

Э. Эспозито<sup>a</sup>\*, С. Де Вито<sup>a</sup>, М. Сальвато<sup>a</sup>, В. Брайт<sup>b</sup>, Р.Л. Джонс<sup>b</sup>, О. Попула<sup>b</sup>

<sup>a</sup> UTTP-MDB, ENEA, P.le E. Fermi, 1, 80055 Portici (NA), Италия;

(\*) Электронная почта для корреспонденции автора: elena.esposito@enea.it

<sup>b</sup> Кафедра химии, Кембриджский университет, Ленсфилд Роуд, Кембридж, Великобритания

---

## Абстрактный

За последние несколько лет значительно вырос интерес к разработке новых широко распространенных или мобильных устройств с мультисенсорными датчиками качества воздуха. Новые возможности приложений появились вместе с новыми проблемами из-за ограничений в работе с быстрыми переходными процессами концентрации загрязняющих веществ как для стационарных, так и для мобильных установок. В этой работе мы предлагаем подход динамической нейронной сети (DNN) к стохастическому прогнозированию концентраций загрязнителей воздуха с помощью химических мультисенсорных устройств. Архитектуры DNN были разработаны и протестированы для решения проблем перекрестной чувствительности и присущих датчикам динамических ограничений. Тестирование проводилось с использованием набора данных, записанных в полевых условиях из повсеместного развертывания в Кембридже (Великобритания), в течение нескольких недель. Результаты, полученные с помощью динамической модели, сравниваются с реакцией статической нейронной сети, и анализ производительности указывает на способность динамической многомерной калибровки в полевых условиях улучшать статическую производительность подхода к калибровке в этом реальном сценарии мониторинга качества воздуха. Интересно, что анализ результатов также показывает, что улучшения более значительны, когда концентрация загрязняющих веществ меняется быстрее.

Ключевые слова: машинное обучение, мониторинг качества воздуха, многомерная калибровка, динамические нейронные сети.

---

## 1. Введение

В последнее время разрабатываются новые сенсорные технологии и системы для достижения действительно повсеместного мониторинга качества воздуха (AQ) в городах [1]. Основной движущей силой на самом деле является текущая крупнозернистая и разреженная сетка измерения AQ, которая основана на дорогостоящих и громоздких традиционных анализаторах. Это осложняется необходимостью получения подробной и репрезентативной карты истинных концентраций загрязняющих веществ в городе. На самом деле существующий подход явно не справляется с локальными комплексными химическими и гидродинамическими воздействиями, возникающими в городском ландшафте. Выбросы загрязняющих веществ в атмосферу обусловлены различными антропогенными процессами, которые можно разделить на группы источников, такие как автомобильный транспорт, промышленность, электростанции и бытовое топливо. Выбрасываемые загрязнители воздуха рассеиваются и растворяются в атмосфере [2]. Происходят химические реакции с образованием, например, фотохимического озона. часто [3, 4]. На рассеивание и растворение загрязнителей воздуха сильно влияют метеорологические условия, особенно направление и скорость ветра, турбулентность и стабильность атмосферы. Топографические характеристики и городские структуры, такие как уличные каньоны, например, оказывают значительное влияние на эти метеорологические параметры.

В конечном итоге, наряду с химическими реакциями, процессы диспергирования и разбавления приводят к распределению загрязнения атмосферного воздуха, которое показывает, что концентрации различных веществ существенно различаются во времени и пространстве. Недорогие химические мультисенсорные устройства кажутся многообещающим ответом на эти потребности; однако их производительности мешают несколько проблем, включая специфичность и стабильность преобразователей. На самом деле, химические микросенсоры, как правило, подвергаются воздействию мешающих газов, которые либо усиливают, либо ослабляют их реакцию на целевой газ [5]. По этой причине любая попытка полагаться на процедуру одномерной калибровки, пренебрегая влиянием интерференции, обречена на неудачу [6]. Информация о мешающих газах должна использоваться в процедуре калибровки для решения этой проблемы. Реакция химических микросенсоров обычно изменяется во времени из-за нескольких эффектов, включая отравление и отравление.

чувствительность к переменным среды [7]. Как следствие, долгосрочная стабильность является серьезной проблемой, учитывая необходимость снижения нагрузки на обширную сеть анализаторов AQ.

Хотя лабораторный подход к калибровке позволяет полностью контролировать диапазон и соотношение концентраций загрязняющих веществ, которым подвергается массив датчиков, точное воспроизведение в полевой атмосфере на самом деле невозможно из-за его сложной природы. Количество различных концентраций загрязняющих веществ и мешающих веществ, которые необходимо учитывать, чтобы охватить экспериментальное пространство, может легко увеличиться. Использование полевых зарегистрированных данных может позволить решить эту проблему. С другой стороны, диапазоны концентраций в этом случае находятся вне контроля исследователя.

Более того, это может, в принципе, отражать локальную ситуацию, ограничивающую использование данных для развертывания в разных местах. Тем не менее, многомерная калибровка с полевыми данными в настоящее время считается эффективным инструментом [6], [8].

На самом деле, машинное обучение (МО) является многообещающим подходом для получения многомерной калибровки [8]. Гибкость инструментов машинного обучения может быть решающим преимуществом по сравнению с параметрическими методами, которые требуют допущения конкретной жесткой формы модели.

Нелинейность в наборе данных может быть обнаружена графическими методами, но определить ее источник сложнее, а иногда и невозможно. Благодаря своей способности изучать и выводить отношения ввода-вывода из представления набора обучающих выборок, инструменты машинного обучения позволяют избежать трудоемкой и, возможно, дорогостоящей задачи идентификации жесткой модели. Обобщающие свойства инструментов ML, то есть способность модели давать достоверную оценку правильных результатов при представлении совершенно новых входных данных, являются еще одним аргументом в пользу ее использования с данными, записанными в полевых условиях. Однако основным недостатком является возможность переобучения данных калибровки, что отрицательно сказывается на возможности обобщения. Большая часть машинного обучения может работать, по крайней мере, так же хорошо, как и любая другая техника с точки зрения прогнозирования, но основная критика остается за их природу черного ящика. Интерпретация модели для нейронной сети, например, по-прежнему считается намного более сложной, чем для моделей PLS или PCR. Это связано с тем, что операции (суммирование и проецирование на передаточную функцию), выполняемые последовательно в скрытом и выходном слое, не позволяют получить простые аналитические выражения между входными и выходными переменными.

Обычно предлагаемые методологии, однако, обучены производить мгновенную калибровку, которая не учитывает обычно медленное и иногда нелинейное (во времени) динамическое поведение химических датчиков [6] [9]. В нашем конкретном сценарии это означает, что значительные, но относительно короткие всплески загрязнения, вызванные, например, выбросами движущихся автомобилей или грузовиков, остановками, связанными со светофорами, прохождением шлейфов, возникающих при стационарном развертывании, или пересечением шлейфа мобильными датчиками, могут быть отфильтрованы, маскируя реальный масштаб явлений. Это, в свою очередь, может повлиять на средние по времени показатели, используемые для оценки загрязнения. Конечно, эти ограничения становятся чрезвычайно важными для мобильных приложений, таких как оценка экспозиции личного загрязнения. Фактически мобильные платформы при движении относительно источника могут несколько раз пересекать шлейф загрязняющих веществ, испытывая внезапные и быстрые изменения концентрации газа [10].

Следовательно, быстрое обнаружение изменений концентрации имеет первостепенное значение для количественной оценки индивидуального воздействия.

С этой точки зрения быстрый анализ переходных характеристик чрезвычайно актуален. Чтобы зафиксировать информацию, содержащуюся в динамике газовых датчиков, специалисты по искусственному обонянию полагаются на фиксированный, заранее определенный и контролируемый экспериментальный протокол. Как правило, до и после предъявления образца массив датчиков подвергается воздействию эталонного газа (чистого воздуха) для захвата нарастающих и затухающих переходных процессов сигнала [5, 11]. Затем полный набор полученных временных рядов или набор признаков, извлеченных из самого временного ряда [7, 12–15], используется для обучения калибровочной модели [16, 17]. В обоих случаях такая методология калибровки требует захвата сигналов датчиков в течение времени измерения, определенного заранее, во время контролируемого изменения концентраций загрязняющих веществ и переменных окружающей среды. В результате прогноз модели для нового образца может быть предоставлен только после завершения такого измерения. Однако этот процесс чрезвычайно трудно воспроизвести при работе в полевых условиях, требующих сложных систем доставки. Это

необходимо чередовать пробу газа с эталонной базовой линией, а состав пробы газа должен оставаться постоянным в течение всего представления пробы. В открытых системах отбора проб массив датчиков подвергается непосредственному воздействию окружающей среды без измерительной испытательной камеры, что делает систему чувствительной к турбулентности потока [18].

Метод, способный обеспечить непрерывное и точное прогнозирование в соответствии с настоящим и прошлым состоянием массива датчиков, лучше подходит для таких приложений. Только в нескольких работах изучались алгоритмы количественного прогнозирования для непрерывной оценки концентрации газа с быстро меняющимися входными данными о концентрации. Обычно они были основаны на регрессоре с вводом с задержкой по нажатию, чтобы обеспечить систему конечной и фиксированной памятью.

В частности, предикторы с отводной задержкой были исследованы с помощью линейных (фильтры с конечной импульсной характеристикой) и полиномиальных регрессоров (регрессоры Винера) [19], нейронных сетей [20-22] или регрессоров опорных векторов [21].

В [19] С. Марко и др., в числе первых, предложили и сравнили различные нелинейные обратные динамические модели газозондирующих систем для количественных измерений. Что касается нашего сценария, то для получения показаний датчика газа используется измерительная камера, что неявно изменяет динамические свойства измеряемых сигналов, а частота сбора данных слишком низкая (одна выборка в минуту), чтобы отражать быстрые и высокочастотные изменения концентрации газа в открытых системах отбора проб. Во всяком случае, мы не смогли найти работу, основанную на использовании более быстрого анализатора поля.

В [16] Vergara et al. предложили подход к ускорению обработки запахов с использованием переходных признаков. Записывая отклик массива металлооксидных датчиков, подвергнутых воздействию определенного аналита в постоянном потоке, они рассчитали корреляцию между переходными характеристиками и стационарным сопротивлением. Эта корреляция использовалась для ускорения стандартной количественной оценки и классификации аналитов.

Опять же, в [23] группа Д'Амико и С. Марко предложила так называемую ARMA (авторегрессивную скользящую среднюю) системные и многоэкспоненциальные модели для сокращения времени, необходимого для калибровки массива датчиков, с учетом поведения полупроводникового датчика газа на основе оксида металла (МОХ). Вводится и обсуждается динамическая модель, основанная на многоэкспоненциальных распадах, позволяющая сократить время калибровки. Тем не менее, поскольку основное внимание уделяется калибровке датчиков МОХ, динамические модели применяются только к нарастанию переходных сигналов, регистрируемых в закрытых системах отбора проб в течение длительных периодов времени (более 800 с). Подходы к идентификации модели скользящего среднего и линейной системы сравниваются Vembu et al. с машинами опорных векторов, использующими специально разработанные ядра временных рядов [42]. Были проведены испытания путем регистрации оптимизированных по температуре откликов МОХ-топлива в смоделированной аэродинамической трубе. Результаты подчеркнули преимущество предлагаемого подхода в производительности.

Де Вито и др. в [21] предложили динамическую калибровку, основанную на архитектуре нейронной сети с отводной задержкой, работающей с мгновенными и прошлыми выборками отклика датчика. В своих экспериментальных условиях обучающие образцы были получены путем быстрого изменения концентрации нескольких газов и условий окружающей среды. Тесты проводились в тех же лабораторных условиях, подтверждая способность таких архитектур улучшать производительность количественного анализа при наличии медленных динамических характеристик датчиков. Однако в таких архитектурах память фиксируется длиной линии TD (или длительностью задержки) и должна быть оптимизирована на этапе калибровки. Пригодность такой методологии калибровки в условиях реального мира, в которых продолжительность и динамические характеристики переходного стимула не поддаются контролю и непредсказуемость, по крайней мере, спорна и никогда не была доказана.

В [24, 25] авторы предложили использовать алгоритмы резервуарных вычислений (RC) для преодоления медленной временной динамики массивов химических датчиков, что позволяет непрерывно идентифицировать и количественно определять интересующие химические вещества и сокращать задержки измерений. Кроме того, предлагаемая архитектура позволяет автоматически «узнавать» длину и плотность линии задержки, уменьшая необходимые усилия по оптимизации. Предоставленные результаты были основаны на двух наборах данных: один сгенерирован с помощью синтетических данных, а другой получен с реальных газовых датчиков. Они записали временные ряды датчиков МОХ-топлива при воздействии бинарных газовых смесей, где уровни концентрации менялись случайным образом с течением времени.

В рамках робототехники было предпринято несколько усилий для газового картирования и количественной калибровки с использованием частично контролируемых сред. Недавно Дж. Г. Монрой и др. описали интересную многоцентровую попытку обеспечить вероятностный подход к количественной оценке, основанный на гауссовском процессе [41]. Они проверяют подход в моделируемой полевой среде, в которой этанол выбрасывается и переносится воздушным потоком к датчикам МОХ.

находится в комнате. В качестве эталона используется датчик фотоионизационного устройства (ФИД).

Подводя итог, насколько нам известно, подходы динамической калибровки, известные для лабораторных измерений, никогда не проверялись для развернутых в полевых условиях химических мультисенсорных устройств, где им приходится иметь дело с неконтролируемым воздействием различных концентраций аналита в течение нескольких недель.

По нашему мнению, отсутствие высокоскоростных проверенных эталонных измерений является одним из основных факторов, ограничивающих это развитие. На самом деле, большинство референтных станций предоставляют подтвержденные показания среднечасовых концентраций, что ограничивает проверку устройств с высокой частотой отбора проб. Кроме того, чтобы уменьшить проблемы и ошибки, связанные с воздействием турбулентного потока как на ориентировочные, так и на эталонные измерительные системы, обе системы должны анализировать один и тот же воздух почти одновременно.

В этом вкладе мы можем проанализировать результаты откалиброванного мультисенсорного устройства, которое было совмещено с обычным анализатором с частотой дискретизации 1 мин, развернутым в полевых условиях в городе Кембридж (Великобритания) в течение нескольких недель. Мы предлагаем и тестируем подход динамической нейронной сети в качестве инструмента динамической многомерной калибровки в реальных условиях, тем самым расширяя результаты, доступные для статических многомерных подходов в полевых условиях. Раздел 2 описывает экспериментальные установки и результаты предварительного анализа данных. Раздел 3 описывает предлагаемую методологию калибровки, результаты которой представлены в разделе 4. Наконец, в разделе 5 делаются выводы.

## 2. Экспериментальные настройки

Используемый здесь набор данных был извлечен из конкретного развертывания мультисенсорных устройств (системы SnaQ, см. [26] для подробного описания развертывания), разработанного партнерством под руководством Центра атмосферных наук (CAAS) Кембриджского университета (Великобритания). Мультисенсорный прибор оснащен следующими блоками датчиков:

- два разных блока датчиков NO<sub>2</sub> EC (Alphasense NO<sub>2</sub>-B4, обозначаемые далее как NO<sub>2</sub>(A) и NO<sub>2</sub>(B));
- один NO сенсорный блок Alphasense EC (Alphasense NO-B4);
- два разных датчика O<sub>3</sub> Alphasense EC (Alphasense O<sub>3</sub>-B4 далее обозначаются как O<sub>3</sub>(A) и O<sub>3</sub>(B));
- Блоки датчиков T, RH;
- единица измерения скорости и направления ветра.

Одно из устройств, развернутое в центре Кембриджа, располагалось на крыше химического отдела вместе с обычной референсной станцией, управляемой CAAS. Эта станция использует анализаторы на основе хемилюминесценции и спектрометра. В то время как период выборки системы SnaQ был установлен на 20 секунд, эталонная станция обеспечивает наземные измерения целевых газов с интервалом в 60 секунд. Обычными целевыми газами станции были газы CO, NO, NO<sub>2</sub>, NO<sub>x</sub>, O<sub>3</sub>, SO<sub>2</sub> и общие окислители. Стоит отметить, что электрохимические датчики при работе с низкими уровнями миллиардных долей также подвержены помехам. В частности, для сенсоров SnaQ сообщается об известной перекрестной чувствительности соответственно для O<sub>3</sub> и NO<sub>2</sub> [27, 28].

Были рассмотрены две различные экспериментальные методологии, касающиеся процедур гармонизации временных рамок. А предварительная работа была проведена путем усреднения трех экземпляров необработанных показаний датчика, относящихся к 60-секундному интервалу перед каждым образцом обычного анализатора. В этой работе вместо этого мы рассматривали все необработанные мгновенные показания датчиков для целей калибровки, сравнивая результаты оценок с образцами обычного анализатора, когда они были доступны (одно из трех показаний датчика).

Реализована базовая и температурная коррекция по процедуре таблицы данных. Кроме того, был проведен этап предварительной обработки для удаления периодов калибровки опорной станции в ночное время.

Для создания подходящего набора данных из доступных записей были извлечены пять недель непрерывных измерений. Первая неделя измерений (10 тыс. выборок) была выделена в качестве обучающего набора для инструментов статистического машинного обучения, а оставшиеся четыре недели данных использовались для проверки (10 тыс. выборок) и целей тестирования (30 тыс. выборок). Этот раздел позволяет оценить производительность обученной модели, включая возможные среднесрочные эффекты дрейфа датчиков.

### 2.1. Предварительный анализ данных

Анализ ранних данных показал, что в контролируемой зоне наблюдаются значительные суточные колебания относительной влажности и температуры воздуха. В частности, часто наблюдались суточные колебания относительной влажности от 20% до 80% и температуры от 10°C до 25°C (см. 1, а). Конечно, это оказывается сложной задачей для массива микросенсоров, подверженного различным условиям окружающей среды. В этот же период минимальная зарегистрированная температура была менее 8°C, а максимальная – около 30°C.

Набор данных обычного анализатора Roof (рис. 1, б) в целом показывает высокую чувствительность датчиков SnaQ и значительную корреляцию между необработанными значениями датчиков и целевыми газами, за исключением датчиков O<sub>3</sub> (рис. 2, а и рис. 2, б).

Однако имеются свидетельства дрейфа понятий (рис. 2, в). Кроме того, взаимосвязь между некоторыми датчиками и их целевым газом, по-видимому, указывает на упомянутую выше перекрестную чувствительность. Действительно, на рис. 3, а можно наблюдать положительный сдвиг отклика датчика NO<sub>2</sub>(A) в присутствии относительно высоких концентраций NO. В присутствии различных концентраций O<sub>3</sub> NO<sub>2</sub>(A) и NO<sub>2</sub>(B), по-видимому, очень по-разному модифицируют свою реакцию.

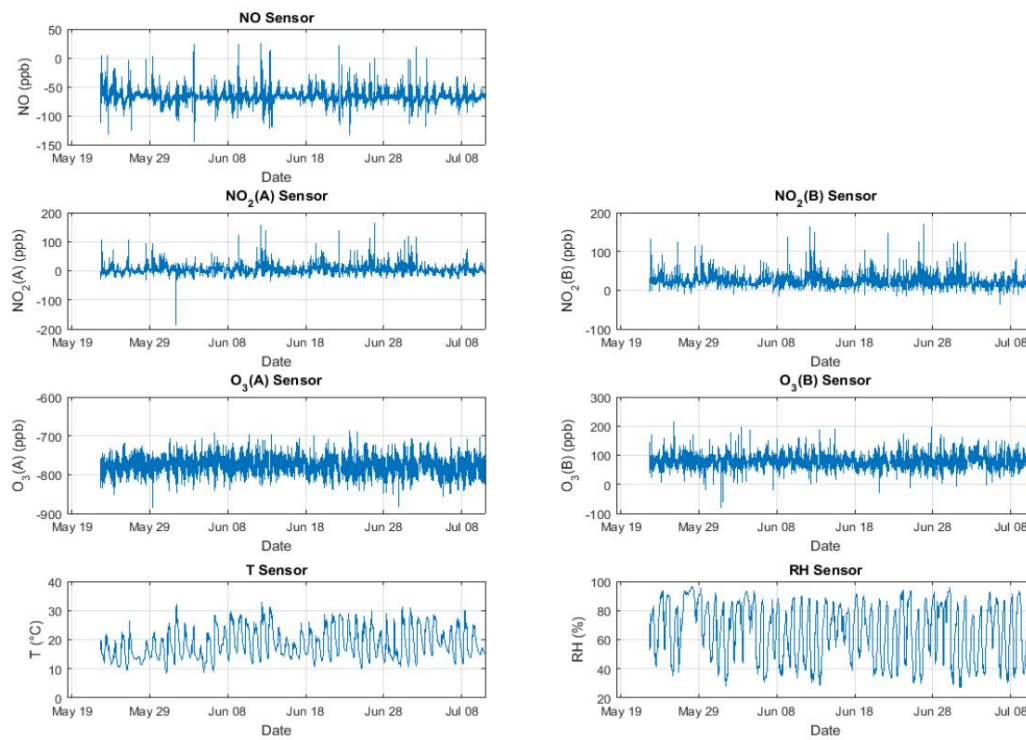


Рис. 1 (а): График зависимости данных некалиброванных датчиков SnaQ EC (с поправкой на температуру) от времени (секунды), плюс датчики температуры (T) и влажности (RH). Характер суточных колебаний очевиден.

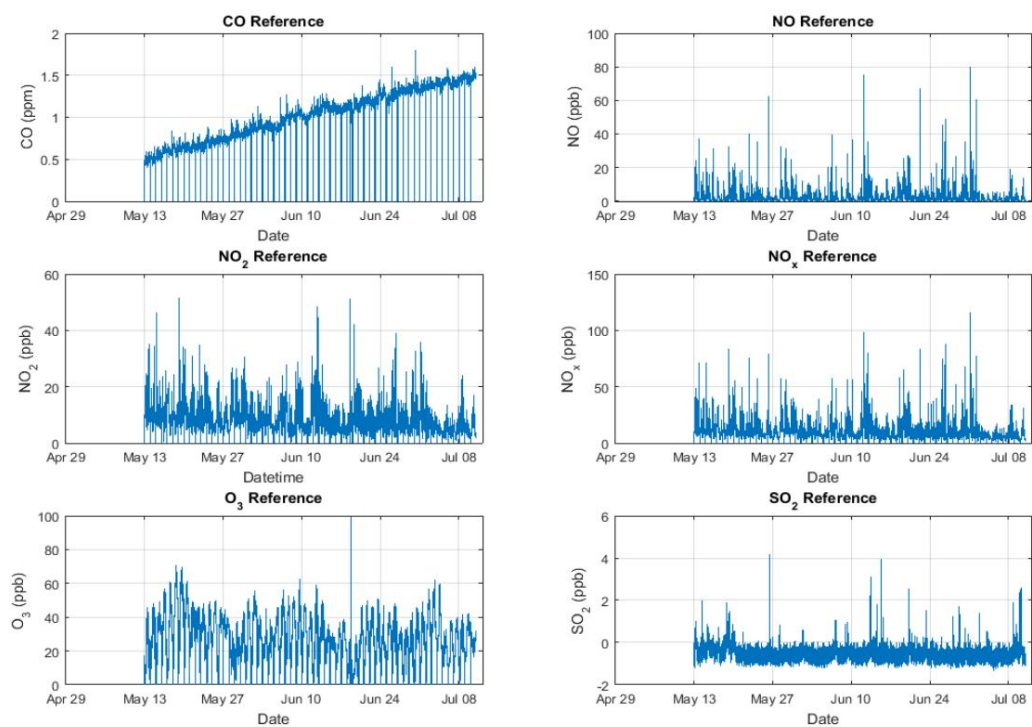


Рис. 1 (b): График данных эталонной концентрации (набор данных Roof). Данные о концентрации CO представляют собой линейное время дрейфа (c) и не используются в данной работе.

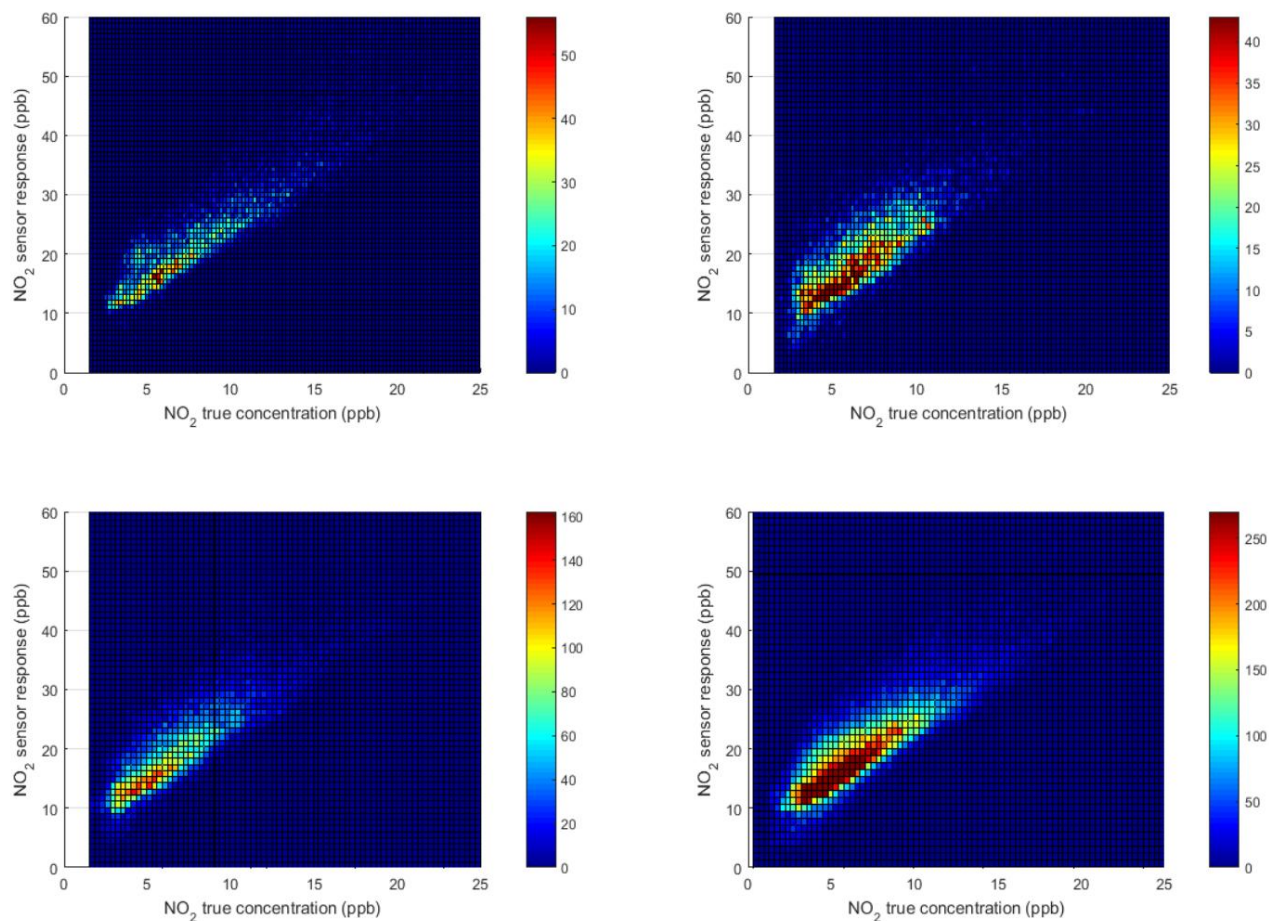


Рис. 2 (а): Распределение данных показывает значительную корреляцию между заданной концентрацией газа и необработанными значениями датчика для концентрации газа NO<sub>2</sub> (цветовой код представляет собой гистограмму показаний). На первом рисунке показана диаграмма разброса на первой неделе ( $R=0,88$ ), на втором – зависимость, рассчитанная на четвертой неделе ( $R=0,81$ ). Третье изображение относится к третьей и четвертой неделе, ниже используется в качестве тестового набора ( $R = 0,82$ ). Наконец, на четвертом изображении показан график корреляции по всему набору данных ( $R = 0,85$ ).



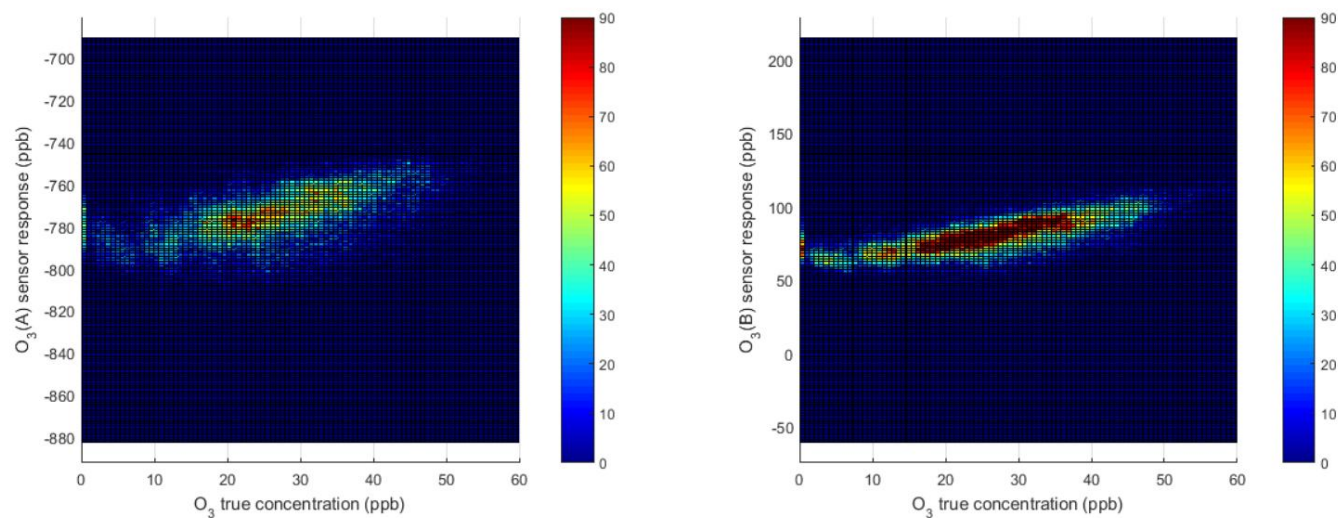


Рис. 2 (b): Распределение данных показывает более низкую корреляцию между заданной концентрацией газа и необработанными значениями датчика для концентрации газа  $O_3$  (цветовой код отражает гистограмму показаний). На первом рисунке показана корреляция между целевым газом и откликом датчика  $O_3$  (A). ( $R=0,51$ ), второй учитывает отклик датчика  $O_3$  (B) ( $R=0,67$ ).

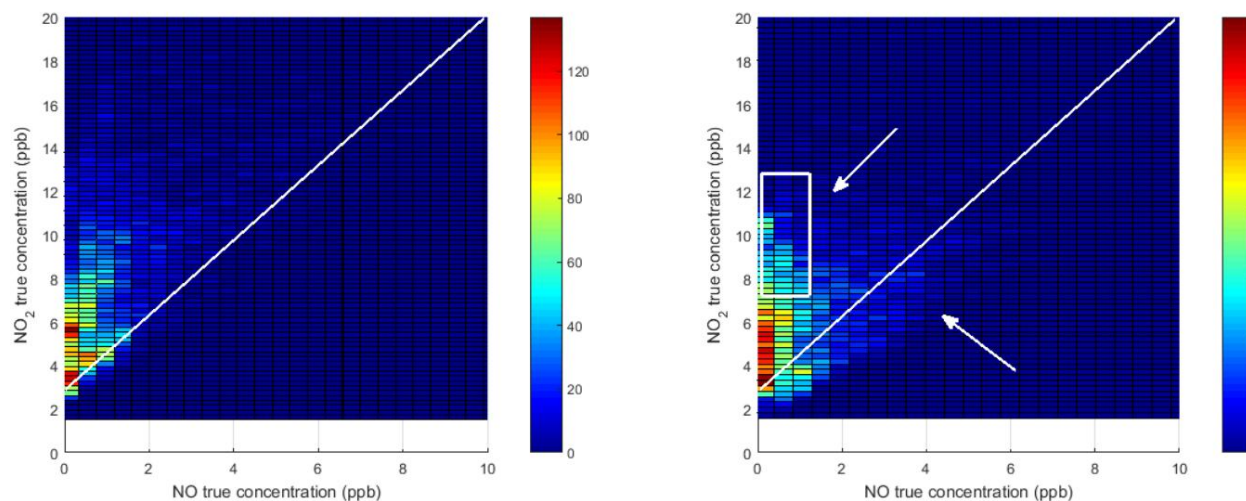


Рис. 2 (c): Взаимное распределение справочных данных для  $NO$  и  $NO_2$ . Доказательства сложной взаимосвязи между двумя газами наблюдаются в разные недели с низкими данными корреляции ( $R=0,55$  на первой и  $R=0,52$  на четвертой неделе). В частности, в течение четвертой недели на картинке видны значительные различия с появлением ряда вхождений в двух выделенных областях (область внутри белого прямоугольника и под белой линией), которые были едва заселены в первую неделю.

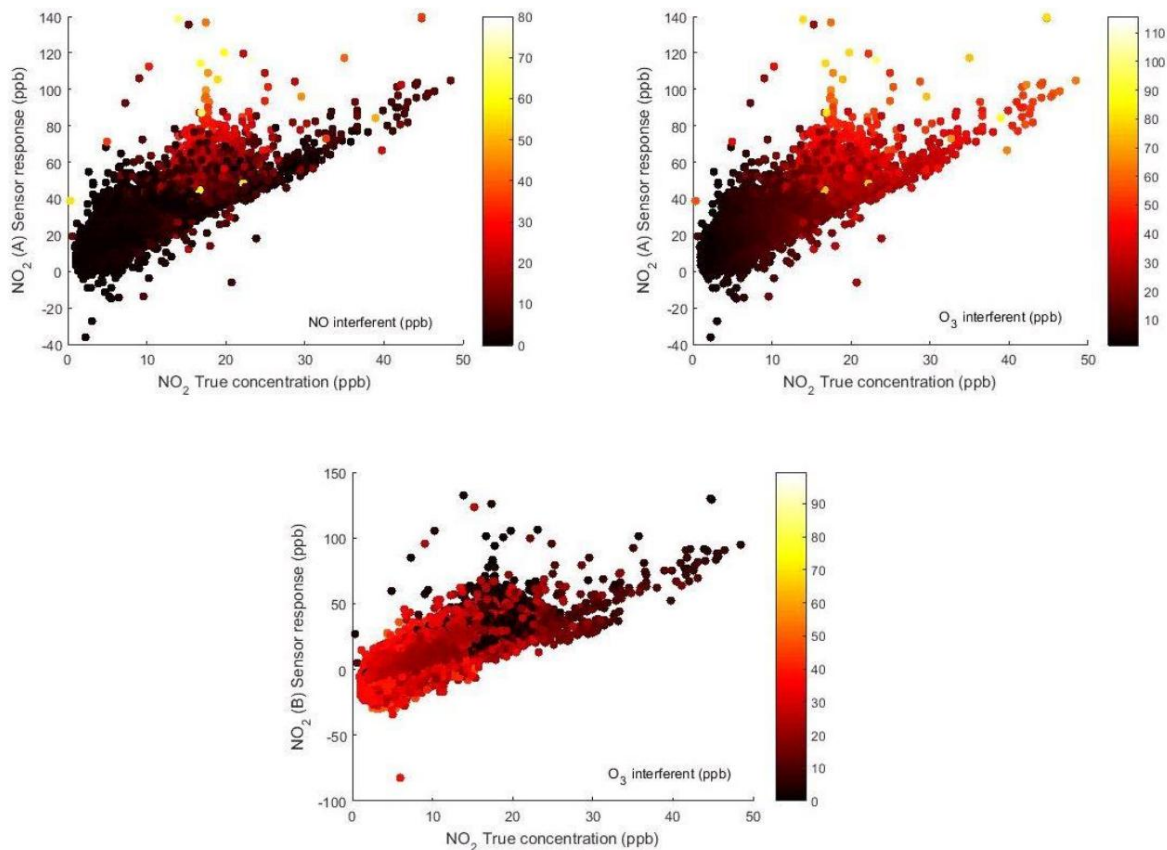


Рис. 3: Диаграмма рассеяния концентрации NO<sub>2</sub> с учетом:  
 (а) NO как помеха (показания датчика NO<sub>2</sub> (А));  
 (б) O<sub>3</sub> как мешающий (показания датчика O<sub>3</sub> (А));  
 (с) O<sub>3</sub> как мешающий (показания датчиков NO<sub>2</sub> (В) и O<sub>3</sub> (В)).  
 Цвет точек кодирует концентрацию мешающего газа (ppb).

### 3. Динамическая многомерная калибровка

Рассматриваемый метод многомерной калибровки включает использование динамических и нелинейных средств машинного обучения с учителем. Мы сосредоточили наше внимание на DNN, чтобы использовать их возможности для построения динамической многомерной модели отклика датчика. Фактически, наша цель состоит в том, чтобы использовать их для преодоления ограничений статической сети при оценке высокоскоростных переходных процессов, одновременно занимаясь перекрестными спецификациями датчиков. Поскольку DNN могут быть разработаны для работы в качестве многомерной регрессии, чтобы обеспечить оценки концентрации загрязняющих веществ на основе необработанных показаний датчиков. В этой работе мы протестировали производительность двух конкретных архитектур, сравним полученные результаты с широко используемой статической нейронной сетью с прямой связью (FFNN). Первой выбранной динамической архитектурой была нейронная сеть с временной задержкой (TDNN); Второй была нелинейная авторегрессия с экзогенными входами сети (NARX) [30]. Архитектуры DNN включают в себя линию задержки с ответвлениями, которая позволяет использовать в качестве входных данных как прошлые показания датчиков, так и прошлые выходные значения. Таким образом, они могут использовать информационное содержание как датчиков, так и динамику процесса.

#### 3.1. Нейронная сеть с прямой связью

FFNN — самая популярная и наиболее широко используемая нейронная модель во многих практических приложениях. Он состоит из (возможно, большого) количества простых нейроноподобных процессорных единиц, организованных слоями. Каждая единица в слое связана со всеми единицами в предыдущем слое. Эти соединения не все равны: каждое соединение может иметь

различной прочности или веса. Веса этих соединений кодируют знание сети. Часто блоки в нейронной сети также называют узлами. Структура нейронной сети прямого распространения представлена на рис.4, а.

В этой работе мы рассмотрели модель FFNN с сигмовидной функцией активации для нейронов скрытого слоя.

Ядро сети было основано на скрытом слое нейронов Matlab® tansig с одним выходным слоем, предназначенным для обеспечения оценки одного загрязняющего вещества каждую 1 минуту [29]. Сложность модели в основном определяется количеством нейронов скрытого слоя. В наших экспериментах мы позволили ему варьироваться в наборе  $HN=[3, 5, 10]$ .

### 3.2. Нейронная сеть с задержкой с постукиванием

TDNN состоит из сети прямой связи с отводной линией задержки на входе [30]. Это позволяет сети иметь конечный динамический отклик на данные датчиков временных рядов. В нашей структуре его можно использовать для анализа и использования динамики датчиков. TDNN обычно описывается как многоуровневая сеть, в которой вход слоя буферизуется на несколько временных шагов, а затем подается на входной уровень (см. рис. 4, б). При введении временных задержек  $T$  каждый нейрон имеет доступ к  $n$  входным значениям, соответствующим мгновенным откликам массива различных датчиков  $x(t-nT), \dots, x(t)$ .

Подводя итог, сложность модели контролируется как длиной линии TD (TDL), так и количеством скрытых слоев. В этой статье мы позволили им варьироваться в множествах  $TDL=[3,6,9]$  и  $HN=[3,5,10]$  соответственно.

### 3.3. Нелинейная авторегрессия с экзогенной входной сетью

Сеть NARX представляет собой нелинейную авторегрессионную нейронную модель с экзогенными входными данными. Эти системы моделируют динамику переменной (временной ряд) в зависимости от ее прошлых значений, а также от текущих и прошлых значений внешних управляющих воздействий (экзогенных воздействий).

На практике сеть NARX представляет собой рекуррентную динамическую сеть с обратной связью, влияющей на несколько уровней сети. Модель основана на модели линейной авторегрессии с экзогенным вводом (ARX) и хорошо подходит для моделирования нелинейных динамических систем. Он обычно используется в моделировании временных рядов. Что касается обучения сети NARX, следует отметить, что истинный результат доступен во время обучения сети.

Следовательно, это значение можно использовать вместо предполагаемого результата на этапе обучения. Эта архитектура проиллюстрирована на рис.4, в. Подводя итог, сложность модели наших сетей NARX контролируется задержкой ввода (TDL).

длинам линий обратной связи (FDL) и количеству скрытых слоев. В этой статье мы позволили им варьироваться в множествах  $TDL=[3,6,9]$ ,  $FDL=[2,5]$  и  $HN=[3,5,10]$  соответственно.

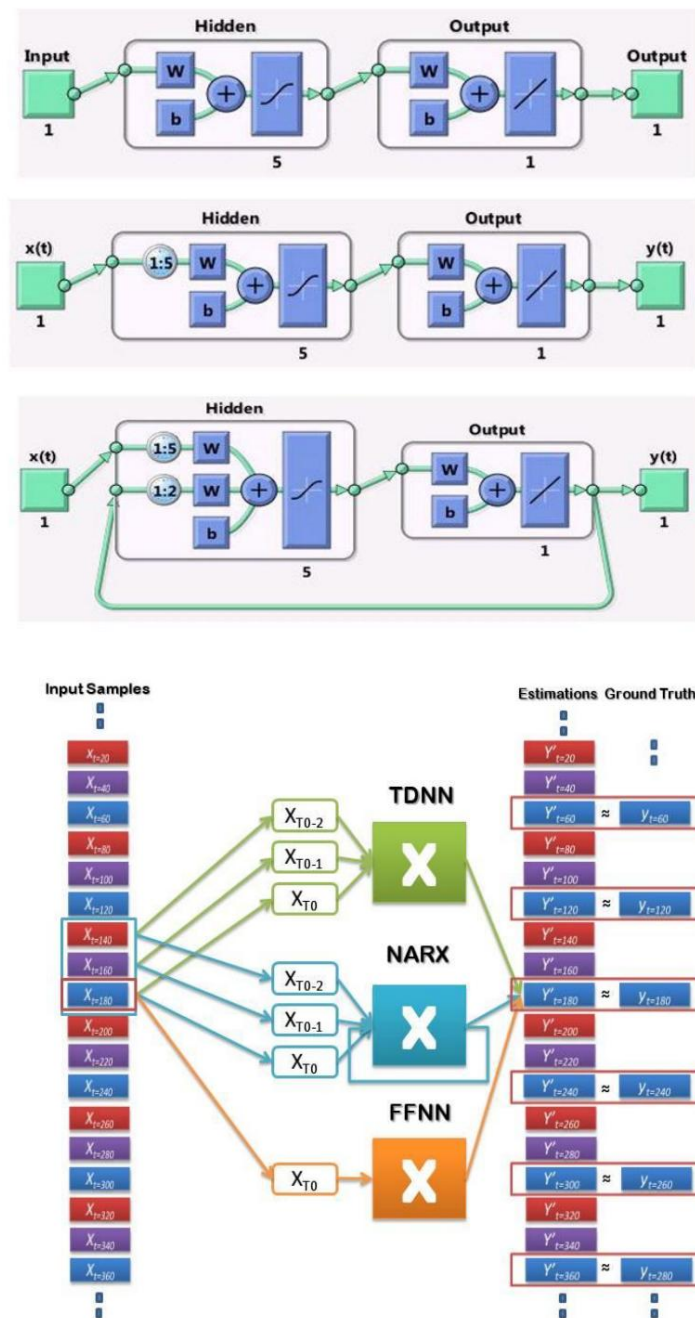


Рис. 4: Соответствующие примеры архитектуры сетей FFNN (а), TDNN с TDL=5 (b), NARX с TDL=5, FDL=2 (c). (d) изображает способ работы трех архитектур при оценке  $y_t$  с  $y'_t$  с использованием входных выборок  $x_t$  с развернутой временной шкалой. В частности, изображенные сети TDNN и NARX имеют TDL=3 и FDL=1. Обратите внимание, что наземное сравнение и, следовательно, оценка производительности возможны только при частоте выборки опорной станции (1 минута), в то время как в принципе сети могут оценивать концентрацию загрязняющих веществ каждый раз, когда становится доступным новый входной образец (20 секунд).

3.4. Процедура оценки эффективности

Три вышеупомянутые архитектуры были протестированы на их способность моделировать и обобщать реакцию датчиков на зависимости концентраций заданного газа. Набор данных был разделен на обучение (1 неделя), проверку (1 неделя) и тестовый набор (3 недели), как описано в разделе 2. Процедура обучения сети была основана на обратном распространении с помощью алгоритма Левенберга-Марквардта [40]. Проверочный набор использовался для оптимизации сложности модели, например, для выбора наиболее эффективного количества нейронов скрытого слоя, длины задержки с ответвлением и длины линии задержки обратной связи. Оптимизация была проведена путем грубого исследования пространств сложности модели, описанных наборами гиперпараметров сложности модели, для трех архитектур. По этой причине было создано, обучено и протестировано в общей сложности 30 различных архитектур NN (3FFNN+9TDNN+18NARX). Средняя относительная ошибка (MRE), определяемая как выборочное среднее отношение между абсолютной ошибкой прогнозирования и истинным значением концентрации, средняя абсолютная ошибка (MAE), определяемая как выборочное среднее абсолютной ошибки прогнозирования, стандартное отклонение (STD) абсолютной ошибки прогнозирования и коэффициент корреляции (KK) был использован в качестве показателей эффективности. Набор тестов использовался для извлечения показателей эффективности обобщения. Каждая тренировка и процедура повторялись 30 раз. Таким образом, для уменьшения неопределенности в расчете показателей эффективности, вызванной случайным выбором начальных весов сетей, используется усреднение. Для сравнения были выбраны наиболее эффективные сетевые архитектуры для сетей FFNN, TDNN и NARX, определенные их гиперпараметрами t-uple.

Полученные различия между показателями были проверены на статистическую значимость при доверительной вероятности 0,05. В частности, использовался двухвыборочный t-критерий с неравной дисперсией для вычисленных MAE, предполагая нормальное распределение вычисленных совокупностей MAE. Этот t-критерий возвращает тестовое решение для нулевой гипотезы о том, что индикаторы получены из независимых случайных выборок из нормальных распределений с равными средними значениями и неизвестными и неравными дисперсиями. Необходимое предположение о нормальности было положительно подтверждено с использованием критерия нормальности Колмогорова-Смирнова с доверительной вероятностью 0,01 для всех полученных оценок MAE (FFNN, TDNN и NARX) по выполненным 30 повторениям.

3.5. Анализ неопределенности

Наша цель состоит в том, чтобы предоставить сенсорному узлу методологию для локального или удаленного извлечения точной и точной оценки целевой концентрации газа, однако наличие оценок неопределенности предоставит пользователю более полную информацию. На самом деле нейронные сети не предоставляют прямой методологии для оценки неопределенности, но ее можно оценить эмпирически с помощью процедуры оценки распределения ошибок, выполняемой с использованием проверочного набора. К Для этого путем разбиения диапазона соответствующих значений целевого газа на равные интервалы  $a_i$ , для каждого выполнения процедуры обучения-проверки-тестирования мы вычислили распределение эмпирической прогнозирующей ошибки (ошибки) с учетом оценки целевой концентрации  $y'$ :

$$( \quad | \quad ' e ), \tag{1}$$

по проверочным образцам. В данной работе мы выбрали количество интервалов равным 30. Для каждого соответствующего значения  $a_i$ , такое эмпирическое распределение соответствует модели Гаусса (см. рис. 5). Затем выбранное оценка среднего значения  $\mu$  и стандартного распределение использовалось для получения смещенных столбцов неопределенности для отклонения, выполненная в момент времени  $t$ , с использованием коэффициента охвата  $1\sigma$ :

$$\mu_{\text{мод}}, \sigma_{\text{мод}} ( \quad , \quad ) \square ( \quad ' ( \quad , \quad ) \square \mu \quad , \quad + ( \quad , \quad ), \tag{2}$$

куда  $' ( \quad , \quad )$  – выход сети,  $( \quad )$  – целевая реальная концентрация газа и  $\square$  массив датчиков мгновенный отклик.

Таким образом, пользователю могут быть предоставлены как оценка концентрации, так и неопределенность прогноза. С этой целью в дальнейшем диаграммы оценок были наложены на полученные столбцы смещенной неопределенности.

Наконец, мера плотности предсказания отрицательного логарифма (NLPD) использовалась для проверки эффективности полученных оценок доверительных интервалов. NLPD - это индекс производительности регрессии, предназначенный для оценки оценок неопределенности для генеративных моделей или, в целом, для всех подходов к машинному обучению, обеспечивающих апостериорные условные распределения. Действие индекса двоякое, поскольку он наказывает как за , так и за недоверительные оценки, т. е. оценки со слишком узкими и слишком широкими апостериорными распределениями и их относительными доверительными интервалами, разбросанными по отношению к фактическим величинам ошибок оценки. В предположении Гаусса это может быть вычислено как

$$-\frac{1}{2} \left\{ \ln \left( \frac{\sigma^2}{2\pi} \right) + \frac{(\hat{y} - y)^2}{\sigma^2} \right\} \quad (3)$$

куда  $\sigma^2$  прогнозная апостериорная дисперсия,  $\hat{y}$  является прогностическим средним значением, т.е. ожидаемым значением а апостериорное распределение. Константа  $\frac{1}{2}$  не зависит от и  $\frac{1}{2}$  а здесь установлено  $\frac{\ln(2)}{2}$ .

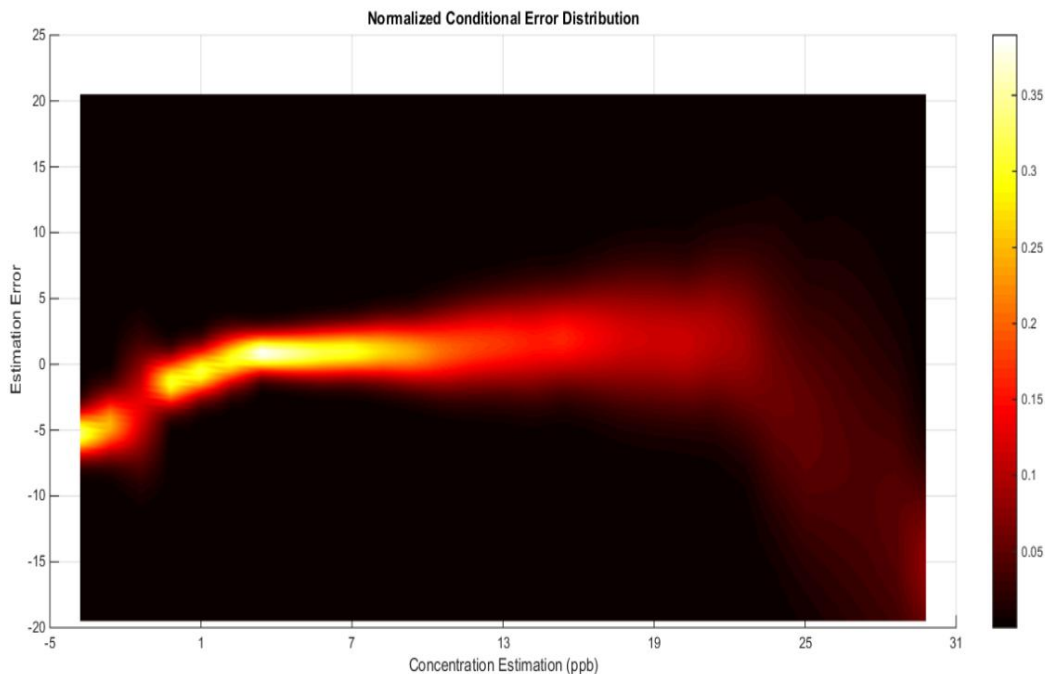


Рис. 5: Пример нормализованного эмпирического условного распределения ошибок для TDNN. Распределение вероятности ошибки  $e=(y-y')$  при заданной оценке концентрации  $y'$  аппроксимировано профилями распределения Гаусса для каждого интервала  $\Delta_i$ . Смещение ошибки прогноза не равно нулю на обоих крайних значениях расчетного распределения концентрации, в то время как стандартное отклонение становится заметно шире при высоких расчетных значениях концентрации. Предположение о нормальности было положительно проверено тестом Колмогорова-Смирнова.

4. Результаты

В этой работе мы специально сообщаем о результатах тестирования архитектур DNN (TDNN и NARX) с упором на целевую оценку концентрации NO2, сравнивая их с результатами, полученными статической FFNN, работающей над той же проблемой с теми же входными данными. Мы используем измерения отклика высокоскоростных датчиков NO, NO2, O3, RH и T в качестве входных переменных для заполнения линий задержки протестированных динамических архитектур ( $T_s = 20$  секунд), в то время как в FFNN подавались образцы ответов, полученные с  $T_s = 1$  мин . . Показатели ошибок для всех архитектур были рассчитаны на мгновенные наземные истинные показания при  $T_s=1$  минута, для которых эталонные значения были получены с помощью обычных станций-анализаторов (см. рис. 4-d).



Результаты оптимизации модели позволили выбрать наиболее эффективные гиперпараметры t-uple для каждого класса сети. Удивительно, но было обнаружено, что наилучшее количество нейронов скрытого слоя равно 5 для всех трех классов сетей. Было обнаружено, что для сетей TDNN наилучшая длина TD равна 6, поэтому лучшей TDNN была сеть HN=5, TDL=6. Наконец, для класса NARX наилучшая длина входной линии задержки также была равна 6, в то время как линия задержки обратной связи для сети NARX лучше всего работала при длине 5, поэтому лучшей сетью NARX была HN=5, TDL=6, FDL. =5 (см. рис. 6).

Производительность набора проверки (MAE) — NARX FDL = 2			
ХН	MAE (частей на миллиард)		
10	1,36	1,28	1.30
5	1,24	1,26	1,23
3	1,31	1,32	1,22
TDL	3	6	9

Производительность набора проверки (MAE) — NARX FDL = 5			
ХН	MAE (частей на миллиард)		
10	1,32	1,22	1.19
5	1.30	1,18	1,27
3	1,26	1,33	1,25
TDL	3	6	9

Рис. 6: Проверочный набор MAE, усредненный по 30 повторениям, рассчитанный для архитектуры NARX с длиной линии задержки обратной связи, равной 2 (слева) и 5 (справа). Значения, выделенные жирным шрифтом, обозначают наиболее эффективную комбинацию гиперпараметров.

Полученные в результате наилучшие характеристики сетевых архитектур были выбраны и сравнены с использованием результатов, полученных на тестовом наборе с описанной процедурой 30-кратного усреднения. В таблице 1 представлены результаты сравнительных тестов выбранных моделей. Результаты показывают значительное преимущество динамического подхода по сравнению со статическим FFNN, при этом TDNN становится наиболее эффективным подходом. Результаты теста значимости наблюдаемых различий на уровне 0,05 подтверждают этот вывод. В частности, полученное значение  $p (<10^{-5})$  дало достаточно доказательств, чтобы отклонить нулевую гипотезу (равное усреднение MAE) для сравнения рассчитанных FFNN и NARX MAE. То же самое, а fortiori, применялось для сравнения FFNN и TDNN ( $p<10^{-10}$ ). Результаты теста не позволяют считать наблюдаемую разницу между TDNN и NARX в среднем значимой на уровне 0,05.

Преимущество TDNN лучше всего выражается в процентном увеличении среднего значения абсолютной ошибки на  $16 \pm 4\%$  за трехнедельный период испытаний, полученного с помощью FFNN. Преимущество NARX более ограничено: было установлено, что оно составляет  $13 \pm 5\%$  по сравнению с вычисленной FFNN MAE. Кроме того, для сетей TDNN и NARX мы получили коэффициент корреляции  $r$ , равный 0,91 и 0,88 соответственно, тогда как FFNN сообщил о  $r$ , равном 0,84. Кроме того, стоит отметить, что динамические сети также способны выражать лучший доверительный интервал, о чем свидетельствует более низкое значение функции потерь NLPD.

Все эти данные в совокупности подтверждают численно и статистически значимое преимущество динамического архитектуры поверх статической FFNN для калибровки химических мультисенсорных узлов в этих условиях.

В таблице 1 мы также показываем результаты, полученные при игнорировании информации, поступающей от датчиков окружающей среды (датчиков RH и T). Удивительно, но они показывают, что, несмотря на выполненную процедуру коррекции температуры в таблице данных, показания условий окружающей среды по-прежнему несут важную информацию для уменьшения ошибки оценки. Фактически, многомерная калибровка, включающая показания относительной влажности и температуры, всегда работает лучше, чем соответствующая архитектура, экологически неосведомленная система.

В таблице 2 мы дополнительно сообщаем об аналогичных условиях, возникающих для оценок других целевых газов, включая O3 и NOx. Для всех целевых газов динамическая многомерная калибровка с TDNN всегда дает наилучшие результаты по сравнению со статическим многомерным подходом (FFNN) и статическим нелинейным одномерным подходом, полученным при подаче FFNN только с откликом датчика, связанным с целевым газом.

С точки зрения визуализации на рис. 7 показана улучшенная корреляция между истинными значениями NO2 и многомерными оценками по отношению к графику корреляции необработанных данных датчика NO2 (см. рис. 2). Кроме того, на рис.8 показан пример стохастической оценки концентрации NO2, выполненной архитектурой TDNN. Он показывает точные оценки выводимые сетью, а также доверительные интервалы, рассчитанные с помощью подхода, описанного в предыдущем

разделы. В предлагаемой архитектуре каждая оценка завершается доверительным интервалом, связанным с оценочным значением.

Наконец, на рис. 9 и рис. 10 мы обращаемся к способности DNN отслеживать значительно быстрые переходные процессы с ограниченными потерями точности. В частности, на рис. 10 мы изображаем значения средних абсолютных ошибок (ось y), полученных при разбиении тестовой выборки по отношению к аппроксимации абсолютного значения первой производной целевого газа (ось x):

$$\frac{|y(0)|}{n} \dots \frac{|y(+\Delta t)|}{n} \dots \frac{|y(-\Delta t)|}{n} \quad (4)$$

где  $\Delta t = 0, 1, \dots, n$  = количество образцов в тестовом наборе,  $y(t)$  = целевая концентрация газа (NO<sub>2</sub>, в нашем случае).

Мы сравниваем статическую FFNN и динамическую реакцию сети TDNN на быстрые переходные процессы, возникающие при разных частотах. абсолютные значения первой производной. Можно заметить, что TDNN значительно точнее, чем FFNN, в отслеживании высокоскоростных изменений целевых явлений (концентрации NO<sub>2</sub>). В частности, чем быстрее изменяется целевая переменная, тем более значительным является повышение точности оценки концентрации, которое может быть достигнуто с помощью этой динамической архитектуры.

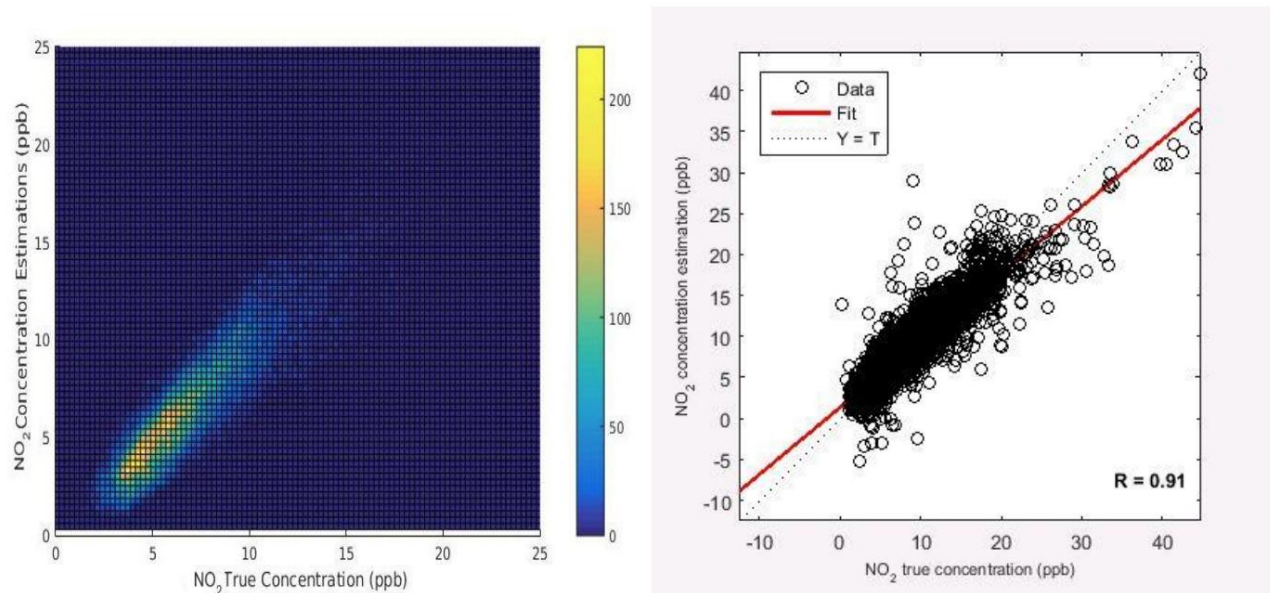


Рис. 7: Оценка концентрации NO<sub>2</sub> в зависимости от графика наземной корреляции (TDNN). На рисунке видно компактное распределение оценок вокруг истинных концентраций (слева) и высокая степень корреляции ( $R=0,91$ ) между ними (справа). При сравнении этих результатов с рис. 2(a) очевидно улучшение по сравнению с показаниями некалиброванного датчика. Слева цвет указывает количество вхождений пары  $(y, y')$ .



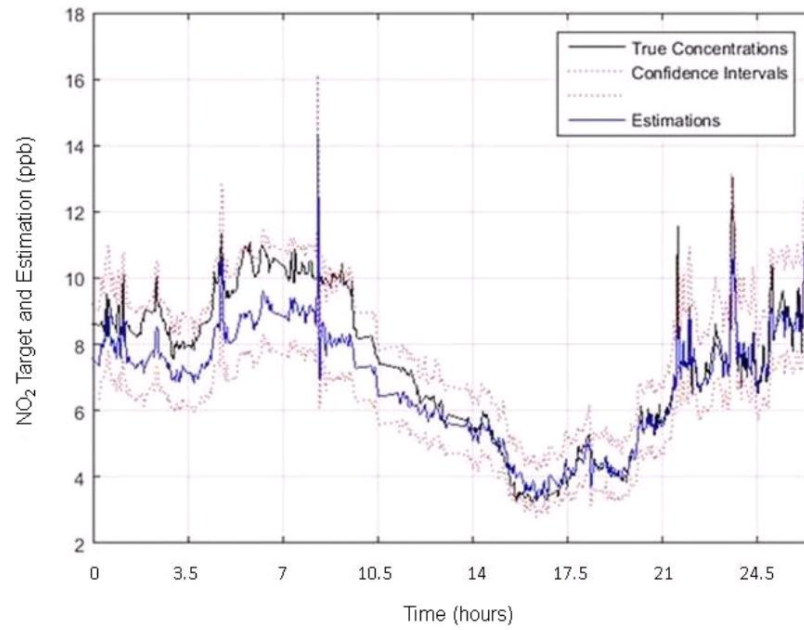


Рис. 8: Оценка концентрации NO<sub>2</sub>, выполненная TDNN по временному подмножеству данных тестового набора (26 часов) с доверительными интервалами.

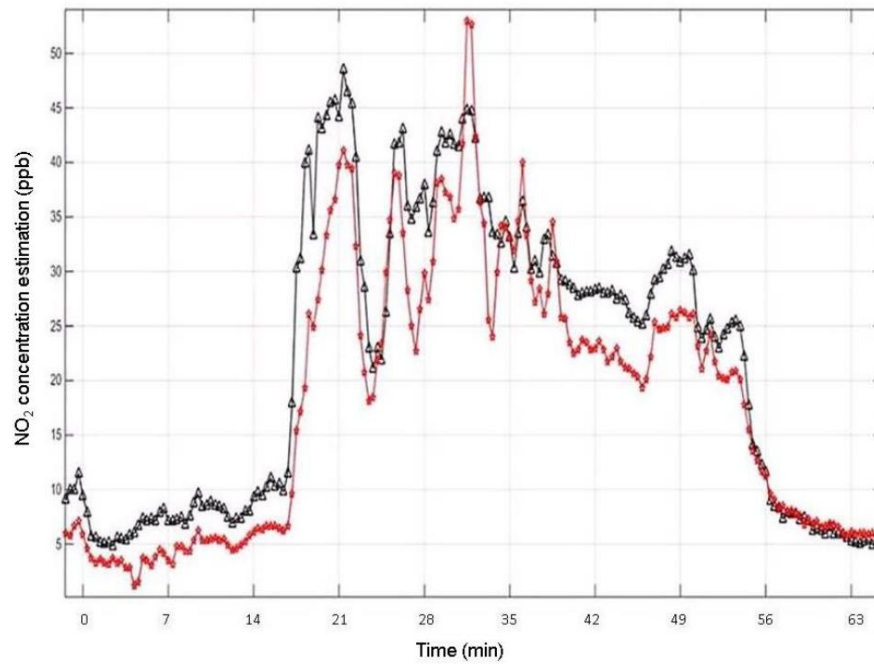


Рис. 9: Сеть демонстрирует очень быструю реакцию на очень быстрые переходные процессы, которые бросают вызов динамическим характеристикам датчиков (черный = истинная концентрация, красный = оценка TDNN).

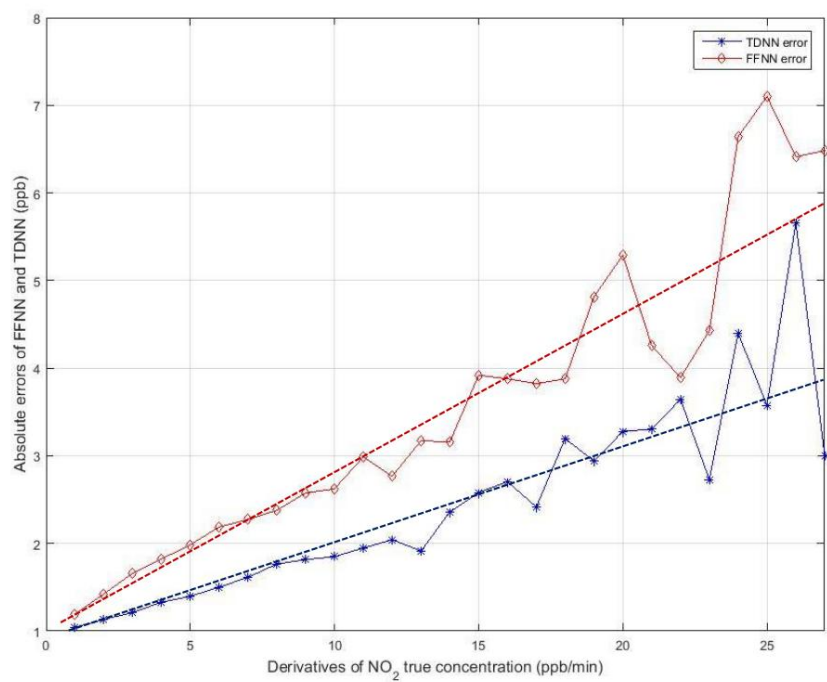


Рис. 10: Сравнение тенденций распределения средней абсолютной ошибки с учетом абсолютной производной целевой концентрации газа NO2 (млрд/млрд/мин) для динамической и статической сети. Сеть TDNN способна добиться значительного снижения ошибки оценки по сравнению с статической сетью FFNN. Это поведение усиливается, когда концентрация целевого газа изменяется быстро и могут быть измерены высокие значения абсолютной производной.

В связи с этим можно заметить, что абсолютная ошибка TDNN всегда меньше, чем ошибка FFNN, но различия увеличиваются с увеличением значений абсолютной производной. Это подтверждает, что динамическая модель способна улучшить динамический отклик на быстрые переходные процессы по сравнению со статической моделью.

ТАБЛИЦА 1: РЕЗУЛЬТАТЫ СРАВНИТЕЛЬНЫХ ИСПЫТАНИЙ ДЛЯ ОЦЕНКИ КОНЦЕНТРАЦИИ NO2 (ЗНАЧЕНИЯ ДЛЯ ИСПЫТАНИЙ).

Нейронная сеть	Вход (датчики)	Гипер параметры	MAE (ppb) 1,50	MRE	НЛПД
FFNN	NO, NO2, O3, Rh, T	HN=5	(стандартное значение =	0,25	2,15 (стандартное значение = 0,03)
	HET, HO2, O3	HN=5	0,06) 1,58 (стандартное значение = 0,04)	0,28	1,98 (стандартное значение = 0,01)
ТДНН	NO, NO2, O3, Rh, T	ГН=5, ТДЛ=0:6	1,27 (стандартное значение = 0,10)	0,22	1,78 (стандартное значение = 0,05)
	HET, HO2, O3	ГН=5, ТДЛ=0:6	1,33 (стандартное значение = 0,05)	0,24	1,78 (стандартное значение = 0,02)
NARXNN	NO, NO2, O3, Rh, T	HN=5, TDL=0:6, FDL=1:5	1,30 (стандартное значение = 0,15)	0,21	1,82 (стандартное значение = 0,10)
	HET, HO2, O3	HN=5, TDL=0:6, FDL=1:5	1,40 (стандартное значение = 0,10)	0,24	1,87 (стандартное значение = 0,21)

Таблица 1: Результаты, полученные при 30 различных исполнениях предложенной архитектуры с использованием полной матрицы химических датчиков (+ переменные среды). HN = скрытое число, TDL = длина задержки с ответвлениями и FDL = длина задержки обратной связи. Значения, выделенные жирным шрифтом, указывают на лучшую производительность.

ТАБЛИЦА 2: СРАВНЕНИЕ РАЗЛИЧНЫХ МЕТОДОЛОГИЙ КАЛИБРОВКИ ДЛЯ ОЦЕНКИ КОНЦЕНТРАЦИИ NO<sub>2</sub>, O<sub>3</sub>, NO<sub>x</sub> НА ИСПЫТАТЕЛЬНОМ КОМПЛЕКТЕ.

Цель	Методология калибровки	MAE (частей на миллиард)	STDERR (частей на миллиард)	CC	MRE (проц)
NO <sub>2</sub>	Статический одномерный	1,68	1,75	0,80	31%
NO <sub>2</sub>	Статический многомерный анализ (FFNN)	1,50	1,69	0,84	25%
NO <sub>2</sub>	Динамический многомерный анализ (TDNN)	1,27	1,32	0,91	22%
O <sub>3</sub>	Статический одномерный	8,30	6,87	0,50	90%
O <sub>3</sub>	Статический многомерный анализ (FFNN)	7,90	5,21	0,82	70%
O <sub>3</sub>	Динамический многомерный анализ (TDNN)	7,45	5,10	0,83	42%
NO <sub>x</sub>	Статический одномерный	2,14	2,65	0,82	31%
NO <sub>x</sub>	Статический многомерный анализ (FFNN)	1,95	2,39	0,85	29%
NO <sub>x</sub>	Динамический многомерный анализ (TDNN)	1,37	1,61	0,94	20%

Таблица 2: Сравнение результатов, полученных соответственно при одномерной, многомерной и динамической многомерной калибровке (TDNN).

Значения, выделенные жирным шрифтом, указывают на лучшую производительность.

5. Выводы

В этой работе мы предложили подход динамических нейронных сетей для улучшения стохастической оценки концентраций загрязняющих веществ с помощью химических мультисенсорных сетевых устройств в реальном сценарии развертывания. Две различные динамические архитектуры были обучены и протестированы с использованием данных о многонедельном развертывании и по сравнению с современным статическим подходом FFNN. Процедура эмпирической оценки неопределенности предсказания концентрации также была описана и использовалась для повышения семантической ценности предсказания. Эта процедура не зависит от конкретного подхода к вычислительному интеллекту и может применяться к различным подходам к калибровке. Результаты, подтверждающие лабораторные данные (см. [21, 24]), показывают, что динамические нейронные сети, фиксируя динамическое поведение массива датчиков, улучшают результаты, получаемые статическими нейронными сетями, по сравнению с данными, записанными в полевых условиях. Это улучшение влияет как на точность, так и на оценки неопределенности. Это улучшение может оказаться решающим для достижения Целевого показателя качества данных для ориентировочных измерений, как указано в Директиве ЕС по качеству воздуха 2008 г. (см. Таблицу 2 для NO<sub>2</sub> и NO<sub>x</sub>). Насколько нам известно, это при полевой валидации показано впервые в литературе. Кроме того, динамическая калибровка в полевых условиях представляется возможным подходом к новым проблемам, возникающим в мобильных и широкомасштабных развертываниях мониторинга качества воздуха в отношении быстрых переходных процессов. В этих случаях наши результаты показывают, что преимущество в производительности особенно очевидно и фактически увеличивается, когда концентрация целевого газа быстро меняется. В качестве вторичного результата наши данные предполагают, что процедуры коррекции показаний датчиков на окружающую среду для электрохимических датчиков должны быть дополнительно улучшены, чтобы полностью устранить остаточное влияние окружающей среды на отклики датчиков, которые мы косвенно измеряли. Стоит отметить, что это было достигнуто с относительно простой архитектурой, которая имеет интересно эффективное представление знаний, допускающее встроенные реализации. Анализ производительности при долгосрочном развертывании в настоящее время находится на стадии оценки, и будущие работы будут сосредоточены на влиянии динамического анализа датчиков на возможности противодействия дрейфу нелинейных методов калибровки в полевых условиях.

Благодарности

Эта работа была поддержана грантом STSM (краткосрочная научная миссия) от COST Action TD1105 EuNetAir.

использованная литература

[1] EuNetAir COST Action TD1105 Отчеты о ходе мониторинга, 2012–2015 гг., доступны на веб-сайте действия [www.euairnet.it](http://www.euairnet.it).  
[2] Т. Дж. Лайонс, В. Д. Скотт, Принципы метеорологии загрязнения воздуха, Belhaven Press, Лондон, 1990.  
[3] Б. Дж. Аллоуэй, Д. С. Эйрес, Химические принципы загрязнения окружающей среды, издательство Blackie Academic & Professional, Лондон, 1993.  
[4] П. Блумфилд, Дж. А. Ройл, Л. Дж. Стейберг, К. Янг, Учет метеорологических эффектов при измерении уровней и тенденций озона в городах, Атмосферная среда, 30 (1996) 3067–3077.

- [5] С. Марко, А. Гутьеррес-Гальвес, Обработка сигналов и данных для машинного обоняния и химического восприятия: обзор, *IEEE Sens. J.*, 12(11) (2012) 3189–3214.
- [6] С. Де Вито, М. Пига, Л. Мартиното, Г. Ди Франсия, Мониторинг загрязнения CO, NO<sub>2</sub> и NO<sub>x</sub> в городах с помощью калиброванного на месте электронного носа. автоматическая байесовская регуляризация, *Sensors and Actuators B*, 143 (2008) 182–191.
- [7] Ф. Рёк, Н. Барсан, У. Веймар, Электронный нос: текущее состояние и будущие тенденции, *Хим. Ред.*, 108(2) (2008) 705–725.
- [8] Л. Спинель, М. Жерболес, М. Г. Виллани, М. Александр, Ф. Бонавитакола, Калибровка в полевых условиях кластера доступных недорогих датчиков для воздуха. мониторинг качества. Часть А: озон и диоксид азота, *Sens. And Act. B: Chem.*, 215, (2015), стр. 249–257.
- [9] М. Швейцер-Берберих, Дж. Гопперт, А. Хилерманн, Дж. Митрович, У. Веймар, В. Розенштиль. В. Гопель, Применение нейронной сети систем на динамический отклик массивов датчиков на полимерной основе, *Sensors and Actuators B*, 26–27 (1995) 232–236.
- [10] Монрой, Дж. Г., Лилиенталь, А., Бланко, Дж. Л., Гонсалес-Хименес, Дж., и Тринкавелли, Калибровка датчиков газа МОКС в открытых системах отбора проб на основе гауссовских процессов, *In Sensors, IEEE*, (2012) 1–4.
- [11] М. Тринкавелли, С. Корадеки, А. Лутфи, Система классификации запахов для приложений непрерывного мониторинга, *Sens. Actuators B: Chem.*, 139(2) (2009) 265–273.
- [12] А. Перера, Т. Яманака, А. Гутьеррес-Гальвес, Б. Раман, Р. Гутьеррес-Осуна, Метод уменьшения размерности, вдохновленный конвергенцией рецепторов в обонятельной системе, Датчики и приводы B: *Chem.* 116 (1) (2006) 17–22.
- [13] Э. Льебет, О. Гуалдрон, М. Винайша, Н. Эль-Барбри, Дж. Брезмес, Х. Виланова, Б. Буучихи, Р. Гомес, Дж. Карраско, Х. Коррейг, Эффективный выбор признаков для массы Электронный нос на основе спектрометрии, *Chemometr. Интел. лаборатория Сист.* 85 (2) (2007) 253–261.
- [14] И. Родригес-Лухан, Р. Уэрта, К. Элкан, К. С. Круз, Выбор функции квадратичного программирования, *J. Mach. Учить. Рез.* 11 (2010) 1491–1516.
- [15] J.S. Murguía, A. Vergara, C. Vargas-Olmos, T.J. Wong, J. Fonollosa, R. Huerta, Извлечение признаков двумерного вейвлет-преобразования для химических сенсоров на основе пористого кремния, *Anal. Чим. Акта* 785 (2013) 1–15.
- [16] М.К. Муэззиноглу, А. Вергара, Р. Уэрта, Н. Рулков, М.И. Рабинович, А.Селверстон, Х.Д. Абарбанель, Ускорение хемосенсорных обработка информации с использованием переходных характеристик, *Sens. Actuators B: Chem.* 137 (2) (2009) 507–512.
- [17] Р. Гутьеррес-Осуна, Анализ моделей машинного обоняния: обзор, *IEEE Sens. J.*, 2(3) (2002) 189–202.
- [18] С. Дж. Чен, Д. С. Ховде, К. А. Петерсон, А. В. Маршалл, Обнаружение пожара с помощью датчиков дыма и газа, *Fire Saf. Журнал* 42 (8) (2007) 507–515.
- [19] А. Пардо, С. Марко, Дж. Самитьер, Нелинейные обратные динамические модели систем обнаружения газа на основе массивов химических датчиков для количественных измерений, *IEEE Trans. Инструм. Измерения*, 47 (3) (1998) 644–651.
- [20] M. Pardo, G. Faglia, G. Sberveglieri, M. Corte, F. Masulli, M. Riani, Нейронная сеть с временной задержкой для оценки концентрации газа в смеси, *Sensors and Actuators B: Chem.*, 65 (1) (2000) 267–269.
- [21] Де Вито, С., Кастальдо, А., Лоффредо, Ф., Массера, Э., Поликетти, Т., Насти, И., Ди Франсия, Г., Оценка концентрации газа в трехкомпонентной смеси при комнатной температуре. массив датчиков с использованием нейронных сетей с отводной задержкой, *Sensors and Actuators B*, 124 (2007) 309–316.
- [22] С. Де Вито, Э. Массера, М. Пига, Л. Мартиното, Г. Ди Франсия, О полевой калибровке электронного носа для оценки бензола в городских условиях. сценарий мониторинга загрязнения, *Sensors and Actuators B: Chem.*, 129(2) (2008) 750–757.
- [23] К. Ди Натале, С. Марко, Ф. Давиде, А. Д'Амиго, Сокращение времени калибровки матрицы датчиков за счет динамического моделирования, *Sens. Actuators B: Chem.*, 25(1) (1995) 578–583.
- [24] С. Шейк и др. Непрерывное прогнозирование в хеморезистивных датчиках газа с использованием вычислений коллектора, *Procedia Engineering*, 87 (2014) 843–846.
- [25] Дж. Фоноллоса, С. Шейк, Р. Уэрта, С. Марко, Вычисления резервуара компенсируют медленную реакцию массивов хемосенсоров, подвергающихся воздействию быстро меняющихся концентрации газа при непрерывном мониторинге, *Sensors and Actuators B: Chem.*, 2015.
- [26] Мид, М.И., Попула, ОАМ, Стюарт, Г.Б., Ландсхофф, П., Каллеха, М., Хейс, М., Люис, А., Использование электрохимических датчиков для мониторинг качества городского воздуха в недорогих сетях с высокой плотностью, *Атмосферная среда*, 70 (2013) 186–203.
- [27] Датчик озона O3B4, 4 электрода, техпаспорт, <http://www.alphasense.com/WEB1213/wp-content/uploads/2013/11/O3B4.pdf>.
- [28] Двухокись азота NO2B4, 4 электрода, техпаспорт, <http://www.alphasense.com/WEB1213/wp-content/uploads/2013/11/NO2B4.pdf>.
- [29] CM Bishop, Распознавание образов и машинное обучение, Springer Science, (2006) ISBN 0-387-31073-8.
- [30] Л. Медскер, Л. С. Джейн, Рекуррентные нейронные сети: проектирование и применение, CRC Press (1999).
- [31] J. Fonollosa, L. Fernández, R. Huerta, A. Gutiérrez-Gálvez, S. Marco, Температурная оптимизация массивов датчиков оксида металла с использованием взаимной информации, *Sensors and Actuators B: Chem.*, 187 (2013) 331–339.
- [32] Дж. Фоноллоса, И. Родригес-Лухан, А.В. Шеваде, М.Л. Гомер, М.А. Райан, Р. Уэрта, Мониторинг деятельности человека с использованием массивов газовых датчиков, Датчики и приводы B: *Химия*, 199 (2014) 398–402.
- [33] Ф.А. Давиде, К.Д. Натале, А. Д'Амиго, А. Хиерлеманн, Дж. Митрович, М. Швейцер, У. Веймар, В. Гепель, С. Марко, А. Пардо, Динамическая калибровка QMB с полимерным покрытием датчики с помощью оценки ядра Винера, *Sens. Actuators B: Chem.*, 27(1) (1995) 275–285.
- [34] С. Марко, А. Пардо, Ф. А. Давиде, К. Д. Натале, А. Д'Амиго, А. Хиерлеманн, Дж. Митрович, М. Швейцер, У. Веймар, В. Гепель, Различные стратегии идентификации газа сенсорные системы, *Sens. Actuators B: Chem.*, 34(1) (1996) 213–223.
- [35] Дж. Самитьер, Дж. Лопес-Вильегас, С. Марко, Л. Камара, А. Пардо, О. Руис, Дж. Моранте, Новый метод анализа переходных процессов в химических датчиках, *Sens. Actuators B: Chem.*, 18(1) (1994) 308–312.
- [36] E. Lobet, J. Brezmes, X. Vilanova, J.E. Sueiras, X. Correig, Качественный и количественный анализ летучих органических соединений с использованием переходных и установившихся характеристик массива толстополеночных сенсоров на основе оксида олова, *Sens. Приводы B: Chem.*, 41(1) (1997) 13–21.
- [37] Р. Гутьеррес-Осуна, Анализ моделей машинного обоняния: обзор, *IEEE Sens. J.*, 2(3) (2002) 189–202.
- [38] П. Альтайнц, Дж. Гошник, С. Эрманн, Х. Аче, Мультисенсорная микросистема для загрязняющих веществ в воздухе, *Sens. Actuators B: Chem.*, 33 (1) (1996) 72–76.
- [39] Л. Чжан, Ф. Тиан, С. Лю, Дж. Го, Б. Ху, К. Е. Л. Данг, С. Пэн, К. Кадри, Дж. Фэн, Оптимизация нейронной сети на основе хаоса для концентрации оценка загрязнения воздуха в помещении с помощью электронного носа, *Sens. Actuators A: Phys.*, 189 (2013) 161–167.
- [40] М.Т. Хаган, М.Б. Менхай, Обучение сетей с прямой связью с помощью алгоритма Марквардта, *IEEE Trans. Нейронные сети*, 5 (1994) 989–993.
- [41] Монрой, Дж. Г., Лилиенталь, А. Дж., Бланко, Дж. Л., Гонсалес-Хименес, Дж., и Тринкавелли, М., Вероятностный количественный анализ газа с помощью датчиков MOX в Открытые системы отбора проб - подход с использованием гауссовского процесса, *Sens. Actuators B: Chem.*, 188 (2013) 298–312.
- [42] С. Вембу, А. Вергара, М.К. Муэззиноглу, Р. Уэрта, О характеристиках временных рядов и ядрах для машинного обоняния, Датчики и исполнительные механизмы B: *Chemical*, Volume 174, ноябрь 2012 г., страницы 535–546, ISSN 0925-4005, <http://dx.doi.org/10.1016/j.snb.2012.06.070>.
- [43] J. Quinonego-Candela, C.E. Rasmussen, F. Sinz, O. Bousquet, B. Scholkopf, Evaluating Predictive Uncertainty Challenge, *Lecture Notes in Информатика*, Vol. 3944, 2006, стр. 1–27.

## Биографии

Елена Эспозито получила степень по математике (с отличием) в сентябре 2008 года и докторскую степень по численному анализу в 2011 году в Университете Салерно. В 2013 году она получила стипендию Университета Салерно за исследовательскую деятельность, связанную с системой электронных денег и многоканальными услугами с добавленной стоимостью. В 2015 году она присоединилась к ENEA с постдокторской исследовательской стипендией. Ее исследовательские интересы включают численные методы для обыкновенных дифференциальных уравнений, методы машинного обучения в рамках искусственного обоняния. В настоящее время она участвует в национальных и международных проектах, связанных с применением методологий интеллектуального зондирования для мониторинга качества воздуха и воды.

Саверио Де Вито получил степень в области вычислительной техники в Неаполитанском университете имени Федерико II в 1998 году и докторскую степень. в области информационной инженерии Университета Кассино. Ранее занимаясь обработкой биомедицинских изображений, с 1999 по 2004 год он был техническим менеджером по исследованиям и разработкам в области спутниковой телемедицины и проектов дистанционного обучения в компании, занимающейся разработкой программного обеспечения. В июне 2004 года он присоединился к ENEA в качестве исследователя. Его исследовательские интересы включают искусственное обоняние, беспроводное и интеллектуальное зондирование, мониторинг качества воздуха, статистическое распознавание образов и компьютерную диагностику. Участвует в нескольких национальных и международных исследовательских проектах и является членом нескольких комитетов по совместным исследованиям. Он является автором более 40 научных работ. С 2005 года он является адъюнкт-профессором компьютерных наук и параллельных вычислений в Университете Кассино и Южного Лацио.

Мария Сальвато получила степень по математике (с отличием) в 2008 году и докторскую степень по математическому анализу в 2011 году в Университете Салерно. В 2014 году ей была предоставлена ​​исследовательская стипендия Университета Кассино. В 2015 году она присоединилась к ENEA с докторской исследовательской стипендией. Ее исследовательские интересы включают методы решения эллиптических дифференциальных уравнений в частных производных и распознавание образов в рамках искусственного обоняния. В настоящее время она участвует в национальных и международных проектах (FP7), связанных с применением методологий интеллектуального зондирования в аэрокосмической промышленности.

Вивьен Брайт — исследователь с докторской степенью в области атмосферных наук в Центре атмосферных исследований химического факультета Кембриджского университета. После получения степени бакалавра морской географии в Кардиффском университете Вивьен получила степень магистра прикладной метеорологии в Университете Рединга. После получения степени магистра в 2006 году Вивьен присоединилась к Метеорологическому бюро и прошла обучение на синоптика. В 2008 году Вивьен защитила докторскую диссертацию. в области атмосферных наук в Бирмингемском университете под руководством доктора Уильяма Блосса и доктора Сяомина Цая. Ее доктор философии. исследования включали разработку модели имитации больших вихрей (LES), включающую более подробную схему химических реакций, и использование этой усовершенствованной модели для изучения комбинированного воздействия смешивания и химических реакций на качество городского воздуха. Вивьен присоединилась к Кембриджскому университету в 2012 году, работая с профессором Родом Джонсом в качестве научного сотрудника в группе малых датчиков. Ее исследовательские интересы включают изучение состава атмосферы в городских районах, метеорологию пограничного слоя и определение индивидуального облучения.

Олалекан (Лекан) Попула в настоящее время является постдокторантом в области атмосферных наук в Центре атмосферных исследований химического факультета Кембриджского университета. Он имеет степень бакалавра в области теоретической и прикладной химии в Технологическом университете Ладока Акинтола, Огбомосо, Нигерия. В 2008 году он получил степень магистра физической химии в Университете Ибадана, Нигерия. Лекан поступил в Кембриджский университет в 2009 году, чтобы получить докторскую степень. Атмосферные науки в Центре атмосферных исследований, химический факультет под руководством профессора Родерика Джонса. Его докторская степень исследования включали изучение качества воздуха в городах с использованием сенсорных приборов на основе электрохимии. Его основная работа заключалась в характеристике, развертывании и анализе данных о качестве наружного воздуха с использованием нового портативного недорогого датчика качества воздуха. С тех пор он работает в группе Рода Джонса после получения докторской степени в 2012 году в качестве научного сотрудника в составе группы малых датчиков. Ее исследовательские интересы включают изучение состава атмосферы в городских районах, мониторинг/моделирование качества воздуха, характеристику инструментов контроля качества воздуха, а также управление и анализ сетевых данных. Лекан также является старшим членом Королевского колледжа Кембриджа.

Родерик (Род) Джонс — профессор атмосферных исследований в Центре атмосферных исследований химического факультета Кембриджского университета. Он получил первую степень по физике и степень доктора философии. по физике атмосферы в Оксфордском университете. Он переехал в Кембридж в 1990 году, проработав 5 лет в Метеорологическом бюро Великобритании, где занимался изучением антарктической озоновой «дыры». Его исследовательские интересы связаны со структурой и составом атмосферы, охватывая широкий круг вопросов, от качества местного воздуха до глобального изменения климата, с упором на атмосферные измерения. У него большой опыт работы с новыми спектроскопическими методами, включая DOAS, CRDS и LIDAR, и в последние годы он стал пионером в разработке недорогих сверхмалых газовых датчиков и сенсорных сетей для исследований атмосферы. Его работа над сенсорными сетями и системами сенсорных сетей (включая химические датчики, многоузловую передачу данных, управление сетью и калибровку датчиков, а также инструменты для интеллектуального анализа и отображения данных) привела к крупным программам исследований и разработок, охватывающих качество воздуха, воздействие и воздействие на человека. здоровье и выбросы парниковых газов. Род Джонс также является членом Королевского колледжа Кембриджа, где он преподает все аспекты физической химии для студентов.