

Классификация детектируемых датчиком видов газов с помощью глубокой нейронной сети

Описание задачи и подготовка исходных данных:

В наше время детектирование и определение параметров газов является широко распространенной задачей. Например, на производстве с применением химикатов могут образовывать токсичные летучие вещества вроде Тoluола, которые необходимо быстро зарегистрировать в случае утечки. Кроме того, подобные сенсоры используются в системах, называемых Умный Нос, применяемых для распознавания запахов. Основным элементом данной системы – чувствительная область, состоящая из осажденного методом магнетронного осаждения оксида. В ходе работы датчика измеряется его сопротивление, которое меняется по мере осаждения на его поверхность молекул из протекающего газа. Помимо этого, меняется температура датчика, форма сигнала и другие параметры. По этим данным и их изменению в течение некоторого времени возможно определить тип газа и его параметры (концентрацию и др.). Однако, их количество достаточно большое и прямой связи типа и свойств газов с показаниями датчика нет. Поэтому наиболее удобным и надежным методом классификации протекающего газа является машинное обучение. Ранее уже была разработана похожая система в ФТИ им. Иоффе, в которой для определения газа использовалась комбинация методов PCA и LDA. В данной работе будет продемонстрирован альтернативный способ классификации с помощью нейронной сети с глубоким обучением. Для обучения нейронной сети был подготовлен массив данных для 4 видов газов (бензол, сероводород, толуол и о-ксилол), состоящий из 9 параметров, измеренных в течение ~ 600 секунд с шагом 0.2 секунды при разных температурах. Для удобства работы с собранными данными был реализован алгоритм их обработки. На его выходе получался датасет в формате таблицы, который удобно визуализировать с помощью библиотеки pandas. Поскольку названия газов были в виде строк, а нейронная сеть может работать только с числами, было выполнено их кодирование методом Label Encoder из библиотеки scikit-learn. Также, исходный датасет предварительно разбивался случайным образом на тренировочный и тестовый в соотношении 80/20 соответственно.

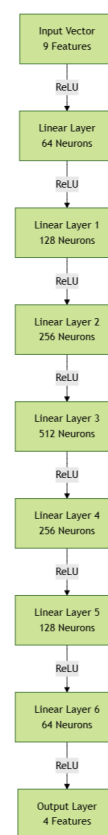


Рис. 1. Схема нейронной сети

Модель нейронной сети:

Для классификации газов по данным из собранного датасета была выбрана полносвязная нейронная сеть из 7 слоев, которая представлена на рис. 1. Ее архитектура была подобрана с помощью модуля `gridsearch`, встроенного в широко распространенный пакет `scikit-learn`. В качестве функции потерь использовалась `Cross-Entropy Loss`, которую часто используют в задачах классификации. Она вычисляет разницу между двумя распределениями вероятностей: истинным и предсказанным. На основе вычисленных ошибок в предсказанных значениях производится оптимизация сети, а именно, изменение ее коэффициентов, с помощью алгоритма `Adam`. Он является комбинацией двух расширений метода градиентного спуска и известен своей эффективностью и результативностью при работе с большими массивами данных и многомерными пространствами параметров. Значение его параметра обучения (`learning rate`) также подбиралось с помощью `gridsearch` модуля. Поскольку обучение нейронной сети идет не по всему набору данных сразу, а по небольшим частям, которые называют батчи (`batches`), для удобства итеративной загрузки данных из датасета использовался модуль `DataLoader`.

Тренировочный цикл нейронной сети был реализован классическим методом. В начале каждой итерации с помощью `DataLoader` загружался батч с данными и соответствующими им метками. Далее выполнялся прямой проход по нейронной сети и вычисление ошибок в предсказанных значениях, посредством их сравнения с

истинными метками с помощью функции ошибок. Далее происходит оптимизация коэффициентов нейронной сети в соответствии с вычисленными ошибками и вывод текущей точности пользователю. Выполнение этого

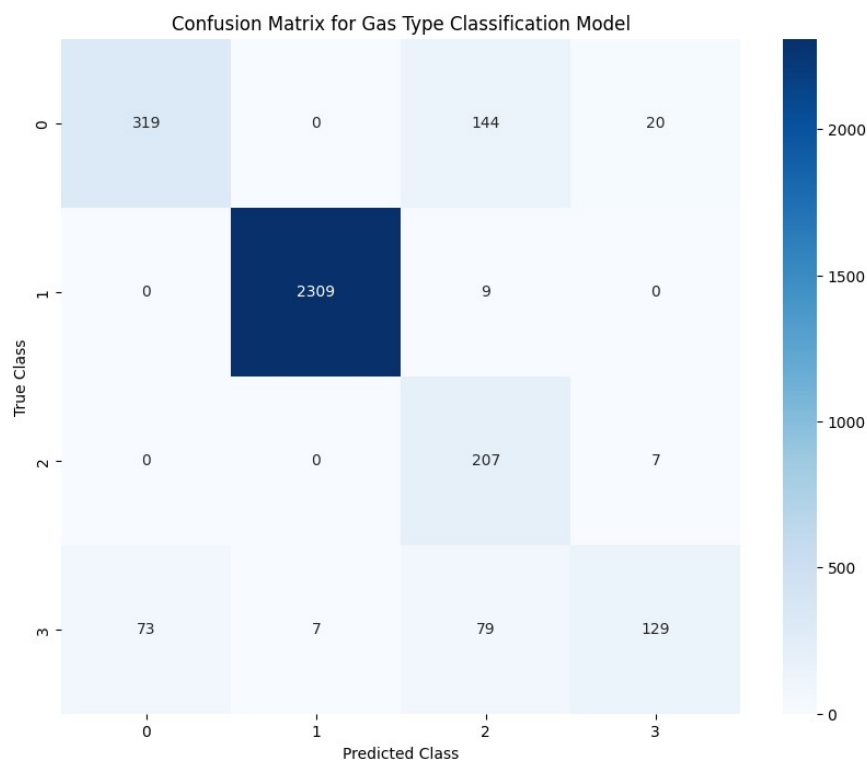


Рис. 2. Матрица ошибок в результате работы модели. Расшифровка классов: Bensene – 0, Toluene – 3, H₂S – 1, O-Xylene – 2.

алгоритма для всех батчей в датасете называется одной эпохой обучения, которых в общей сложности было выполнено 20000.

Оценка полученных результатов классификации:

Обученная модель применялась к тестовой части датасета и полученные прогнозы выводились в виде матрицы ошибок, изображенной на рис. 2, для оценки полученных предсказаний. Точность результатов классификации составила 89.74%. Из матрицы ошибок видно, что хуже всего модель распознает о-ксилол, а лучшие показатели у сероводорода. Такое поведение может быть объяснено прежде всего тем, что в ходе сбора данных для о-ксилола были допущены ошибки в режиме. Кроме того, объем данных для сероводорода был наибольшим, что положительно сказалось на результатах предсказания. Плохая различимость бензола, толуола и о-ксилола можно также объяснить их схожим химическим составом.

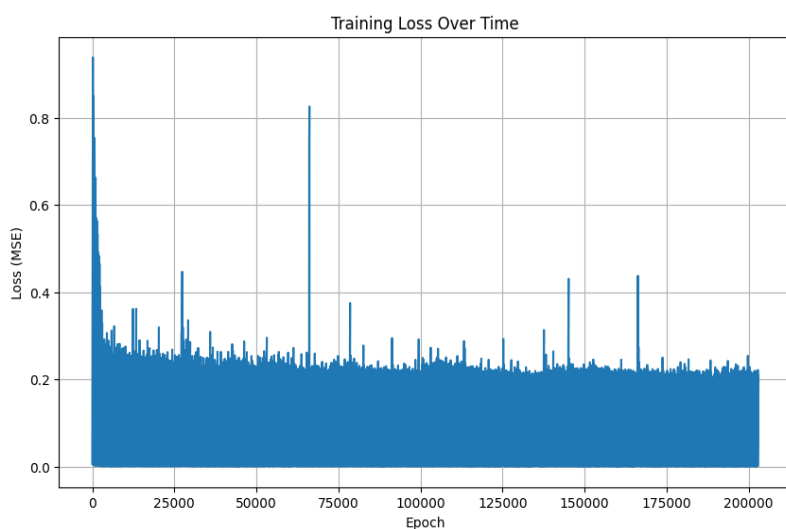


Рис. 3. Зависимость измеряемых ошибок в предсказании модели от номера эпохи обучения.

График зависимости ошибок предсказания от номера эпохи приведен на рис. 3. На нем видны сильные дрожания в ходе обучения и постепенный выход на установившееся значение. Такое поведение значений ошибок, в частности, периодические выбросы, не совсем корректное и может означать переобучение модели.

Выводы и дальнейшие пути развития:

Таким образом, в ходе работы была создана полносвязная нейронная сеть с глубоким обучением. Ее архитектура была подобрана путем оптимизации гиперпараметров с помощью gridsearch метода. Критерием для выбора наилучших значений была точность результатов классификации. Ее наилучшее достигнутое значение составило 89.74%. Анализ метрик полученной модели показал, что в ее структуре все еще есть недочеты, которые необходимо дорабатывать. Для устранения возможного переобучения имеет смысл добавить dropout слои, которые помогут стабилизировать процесс подбора коэффициентов. Также, необходимо заново пересмотреть исходные данные и исправить ошибки, допущенные при их сборе. Для улучшения точности предсказания вне зависимости от схожего

химического состава стоит искать дополнительные измеряемые параметры, которые позволят улучшить их различимость.