

# Сенсоры вместо спектрометров?

M. Fatih Adak, Peter Lieberzeit, Purim Jarujamrus, Nejat Yumusak, Classification of alcohols obtained by QCM sensors with different characteristics using ABC based neural network, Engineering Science and Technology, an International Journal, 2019, 23(3), 463-469.  
<https://doi.org/10.1016/j.jestch.2019.06.011>

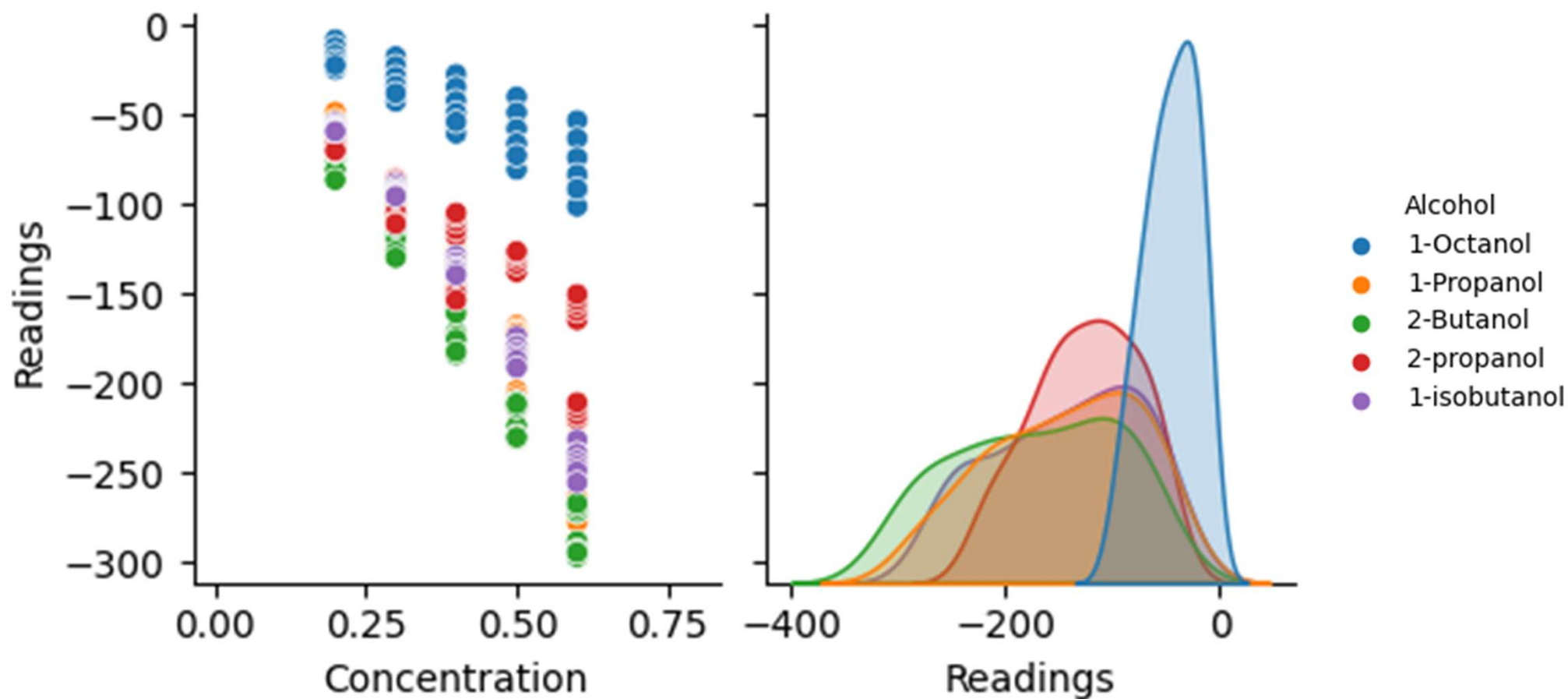
# Задача

- распознавание известных химических веществ по показаниям сенсоров.

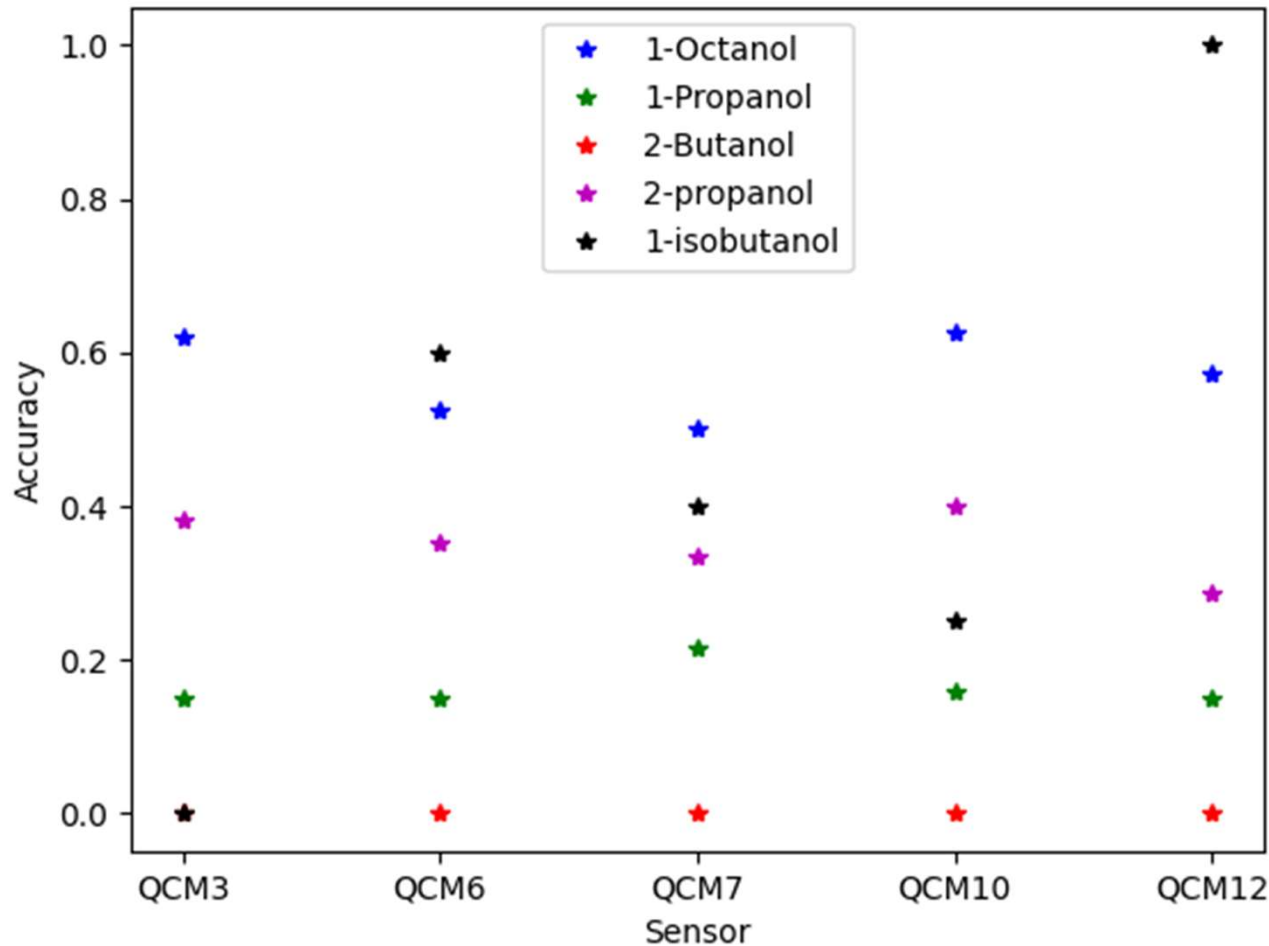
Исходные данные:

- Данные с пяти датчиков (5 файлов), различающихся соотношением двух каналов: QCM3, QCM6, QCM7, QCM10, QCM12.
- Пять типов спиртов: 1-октанол, 1-пропанол, 2-бутанол, 2-пропанол, 1-изобутанол
- Проба газа проходит через датчик в пяти различных концентрациях
- 10 измерений с каждым спиртом/концентрацией = 250 измерений/датчик

# QCM12 – наилучшие результаты



# Точность предсказания



"All the five of the QCM sensors gave successful results, but QCM12-constructed using only NP-was the most successful... The results of 300 different scenarios showed that different alcohols can be classified successfully by using ANN-ABC on the sensor data from QCM12.

ANN-ABC is able to classify the 5 gasses with a success rate of over 99%. "

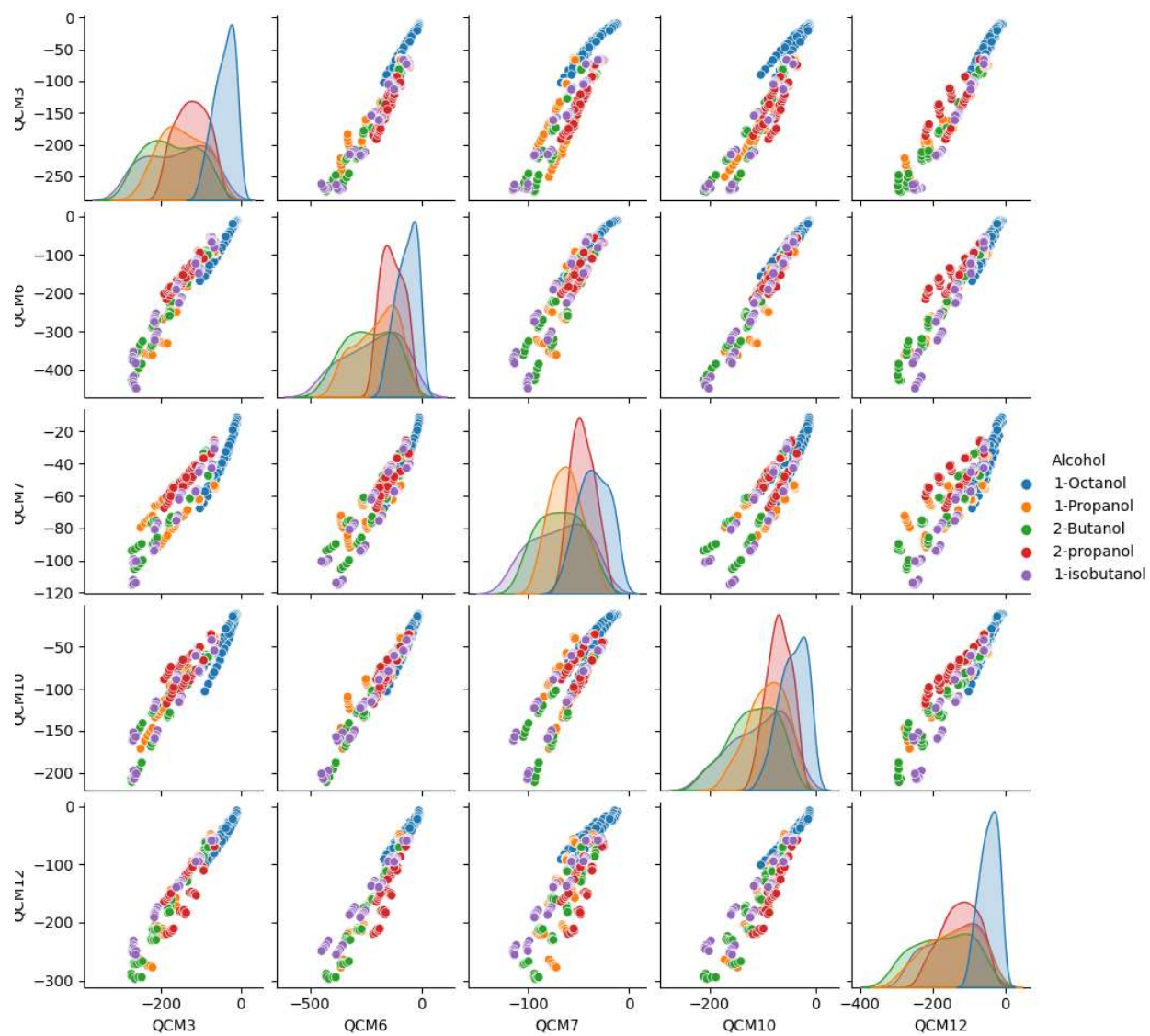
(<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S2215098619303337>)

# Какая пара сенсоров точнее предскажет?

(ml\_alcohol\_pairs.py)

- Объединить датафреймы датчиков в один
- Тогда на двух датчиках одновременно будут сравниваться равные концентрации, а не смесь вообще.

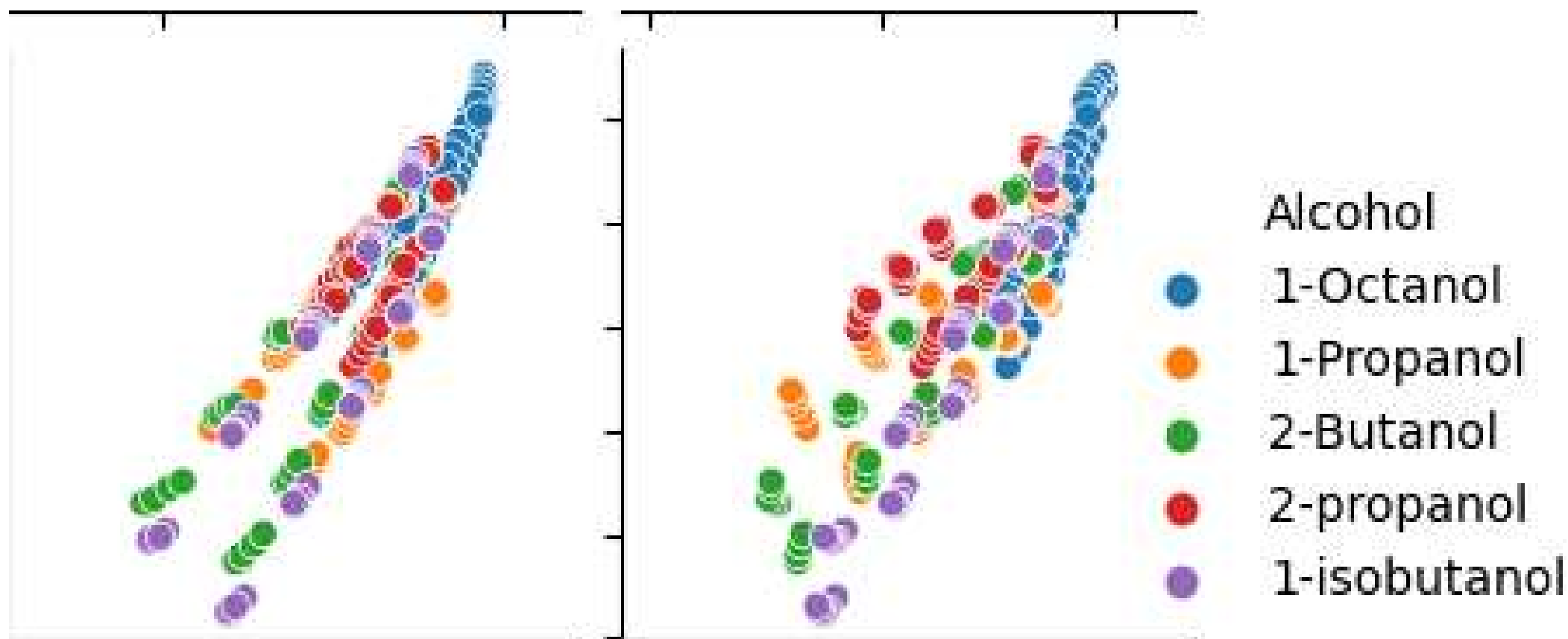
	Concentration	Alcohol	QCM3	QCM6	QCM7	QCM10	QCM12
0	0.2	1-Octanol	-10.06	-11.82	-11.23	-11.98	-9.40
1	0.2	1-Octanol	-10.62	-13.29	-14.21	-10.99	-7.95
2	0.3	1-Octanol	-14.43	-19.32	-18.71	-19.12	-21.44
3	0.3	1-Octanol	-18.31	-26.28	-22.65	-17.28	-17.46
4	0.4	1-Octanol	-24.64	-38.14	-27.32	-33.13	-34.39
...	...	...	...	...	...	...	...
245	0.4	1-isobutanol	-161.48	-191.28	-75.36	-89.26	-139.36
246	0.5	1-isobutanol	-215.52	-322.75	-80.85	-159.23	-186.98
247	0.5	1-isobutanol	-216.68	-274.53	-93.97	-122.95	-191.19
248	0.6	1-isobutanol	-262.01	-447.74	-100.50	-200.98	-248.98
249	0.6	1-isobutanol	-263.28	-381.94	-113.82	-157.18	-255.23

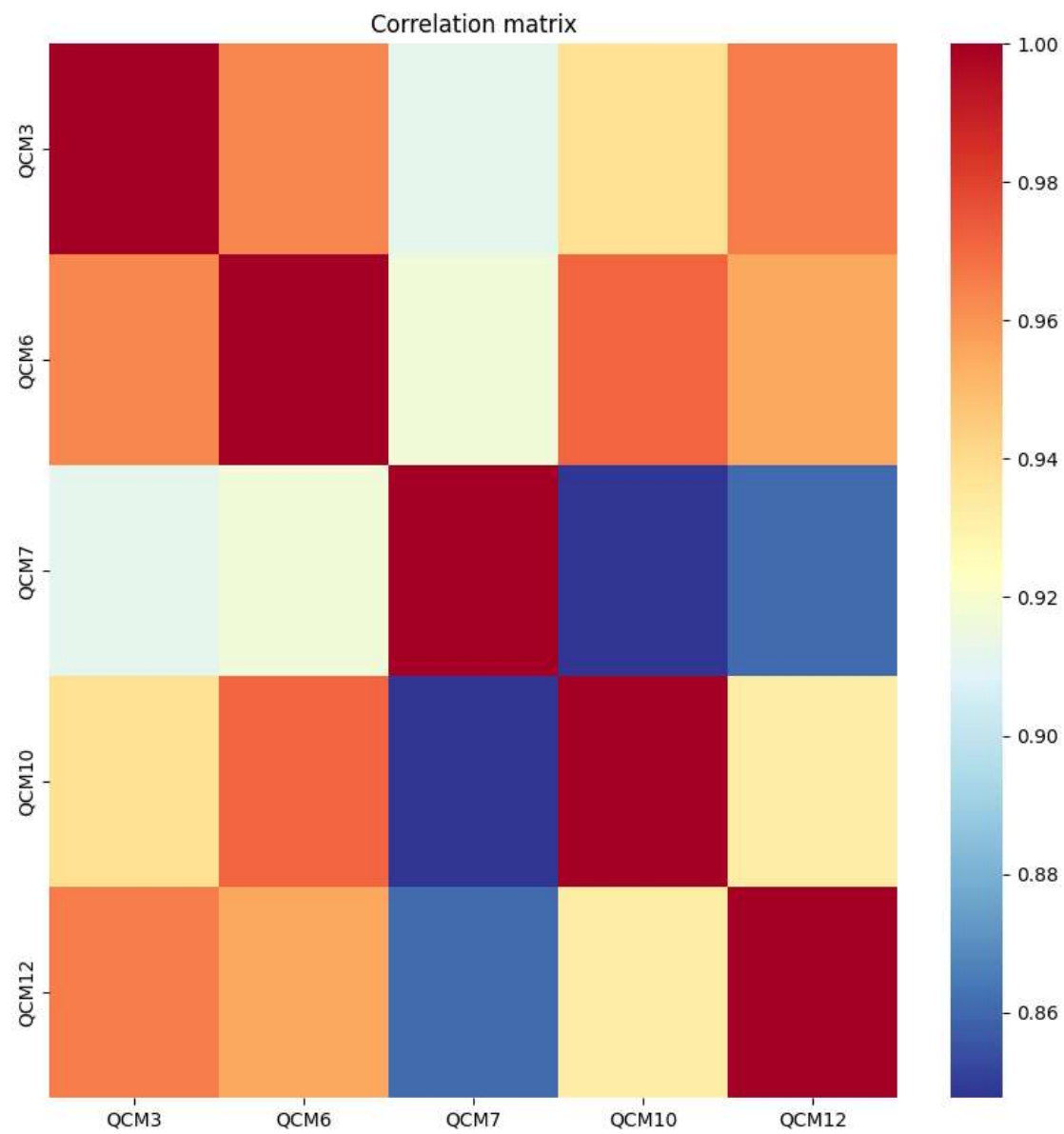


– Какая пара сенсоров точнее предскажет?

– Никакая

- Сильная корреляция датчиков







# Пара датчиков 7 и 12

	QCM7	QCM12
0	-11.23	-9.40
1	-14.21	-7.95
2	-18.71	-21.44
3	-22.65	-17.46
4	-27.32	-34.39
..	...	...
245	-75.36	-139.36
246	-80.85	-186.98
247	-93.97	-191.19
248	-100.50	-248.98
249	-113.82	-255.23

	precision	recall	f1-score	support
1-Octanol	0.63	0.92	0.75	13
1-Propanol	0.00	0.00	0.00	7
1-isobutanol	0.57	0.44	0.50	9
2-Butanol	0.67	0.40	0.50	10
2-propanol	0.50	0.45	0.48	11
accuracy			0.50	50
macro avg	0.47	0.44	0.45	50
weighted avg	0.51	0.50	0.49	50

# Developing of pH sensors based on carbon dots from o-phenylenediamine

M.D. Miruschenko<sup>1,\*</sup>, A.A. Vedernikova<sup>1</sup>, E.V. Ushakova<sup>1</sup>

<sup>1</sup>ITMO University, 197101 Saint Petersburg, Russia

\*Contacts:

ofussr@itmo.ru

m@miruschenko.ru

