

The 10th International Conference in Deep Learning in Computational Physics,
July, 6-8, 2026, SINP MSU, Moscow, Russia

OPTIMIZATION OF THE OPERATING TEMPERATURE RANGE OF SEMICONDUCTOR GAS SENSORS USING MACHINE LEARNING*

Isaev I.V.^{1,2,3}, Chernov K.N.⁴, Dolenko S.A.¹, Krivetskiy V.V.^{2, 5}

¹ D.V. Skobeltsyn Institute of Nuclear Physics, M.V. Lomonosov Moscow State University,

² Scientific-Manufacturing Complex Technological Centre,

³ MIREA – Russian Technological University,

⁴ Physics Department, M.V. Lomonosov Moscow State University

⁵ Chemistry Department, M.V. Lomonosov Moscow State University

** The study was carried out at the expense of the grant No. 22-19-00703-P from the Russian Science Foundation.
<https://rscf.ru/en/project/22-19-00703/>.*

Определение состава газовых смесей

Области применения

❑ Промышленность

- Безопасность технологических процессов
- Средства индивидуальной защиты персонала

❑ Экологический мониторинг

- Оценка качества воздуха городов, промышленных зон, транспорта, жилых и рабочих помещений

❑ Медицина

- Неинвазивная медицинская диагностика и контроль течения болезней
- Контроль эффективности спортивных тренировок

❑ Экспресс - анализ качества, оригинальности, свежести продуктов питания и напитков на основе их запаха.



Определение состава газовых смесей

Существующие технические решения

Принципы работы газоаналитических датчиков:

☐ Термокаталитический

- Измерение количества тепла выделяемого при сгорании газа на катализаторе

☐ Термокондуктивный

- Измерение разницы теплопроводности

☐ Электрохимический и гальванический

- Измерение силы тока, возникающего при химических процессах в электролите

☐ Оптический

- Инфракрасный (ИК-поглощение), интерферометрический, фотоионизационный (УФ)

☐ Полупроводниковый

- Измерение изменения сопротивления полупроводника при абсорбции газов

Определение состава газовых смесей

Существующие технические решения

Преимущества полупроводниковых сенсоров:

- ❑ Возможность длительной непрерывной работы
 - Не имеют расходующихся частей в отличие от электрохимических сенсоров
- ❑ Более низкий предел обнаружения газов
 - По сравнению с оптическими и термокаталитическими сенсорами
- ❑ Широкий спектр детектируемых веществ
- ❑ Низкая стоимость
 - Возможность использования масштабируемых технологий изготовления
- ❑ Низкое энергопотребление
- ❑ Миниатюрность

Определение состава газовых смесей

Направление работ

Общее направление работ: разработка мультidetекторного прибора, содержащего как один, так и массив сенсорных элементов, для одновременного выявления нескольких веществ в воздухе, а также определения качественного и количественного состава газовых смесей.

Определение состава газовых смесей

Возможные постановки задач ММО

Общее направление работ: разработка мультidetекторного прибора, содержащего как один, так и массив сенсорных элементов, для одновременного выявления нескольких веществ в воздухе, а также определения качественного и количественного состава газовых смесей.

Возможные постановки задач, при использовании методов машинного обучения:

☐ Регрессия

- Определение концентрации конкретного газа в воздухе,

☐ Бинарная классификация, многоклассовая классификация

- Определение наличия/отсутствия конкретного газа в воздухе, содержащим примесь одного газа

☐ Многометочная классификация

- Определение качественного состава газовой смеси из нескольких газов

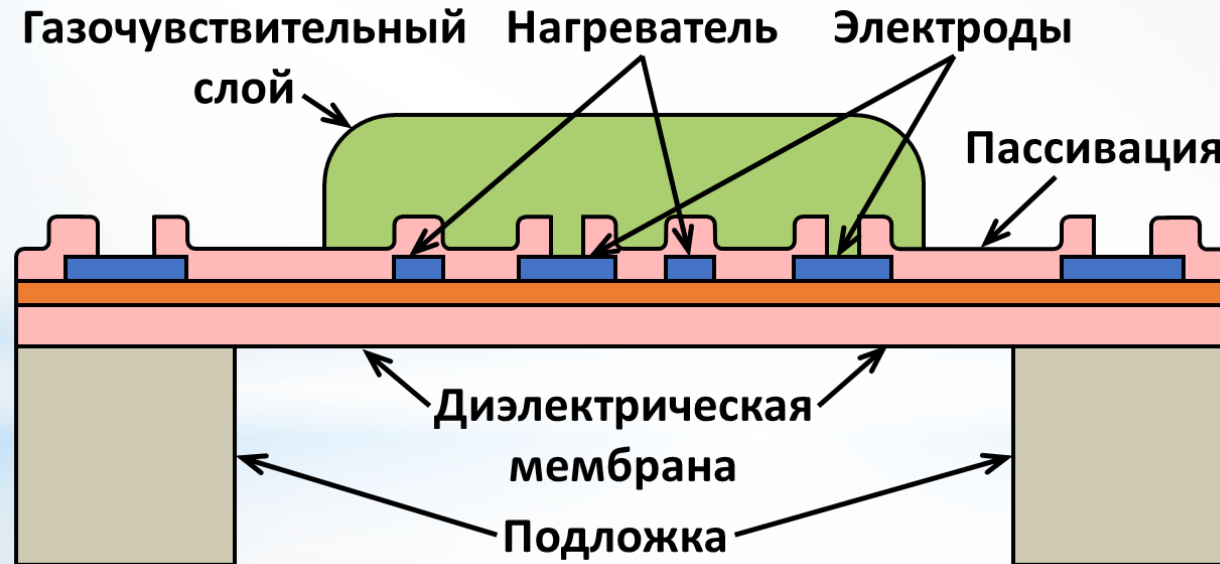
На этапе
набора
данных

Планируется

Физический эксперимент

Полупроводниковый газовый сенсор

Схематическое устройство полупроводникового газового сенсора

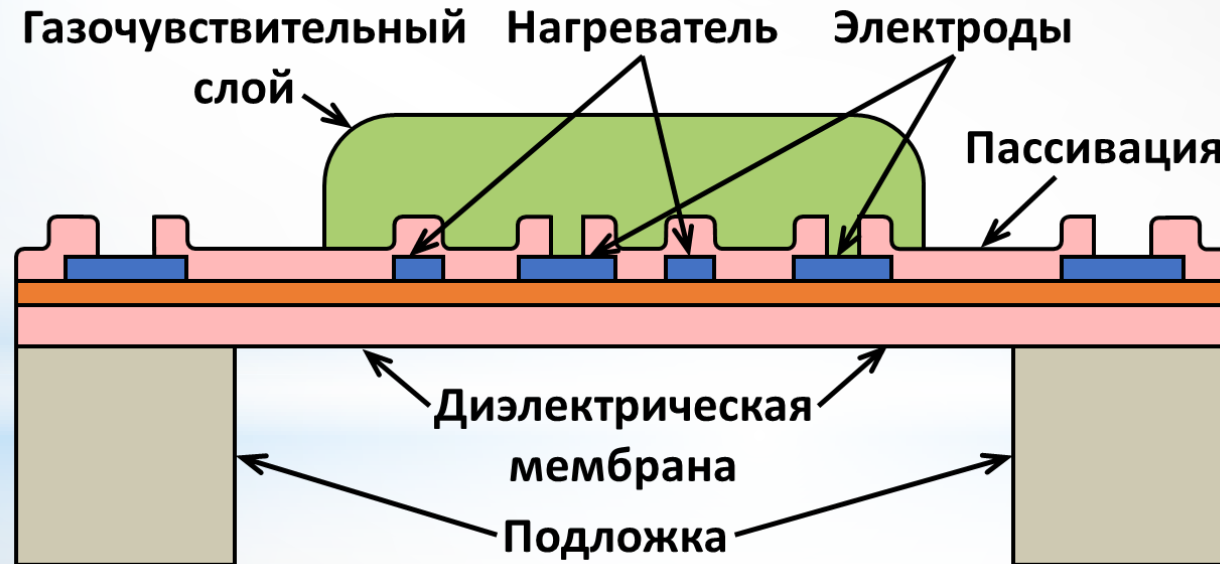


Принцип работы полупроводникового газового сенсора основан на том, что молекулы газа, связывающиеся с материалом сенсора, влияют на его проводимость (электрическое сопротивление).

Физический эксперимент

Полупроводниковый газовый сенсор

Схематическое устройство полупроводникового газового сенсора



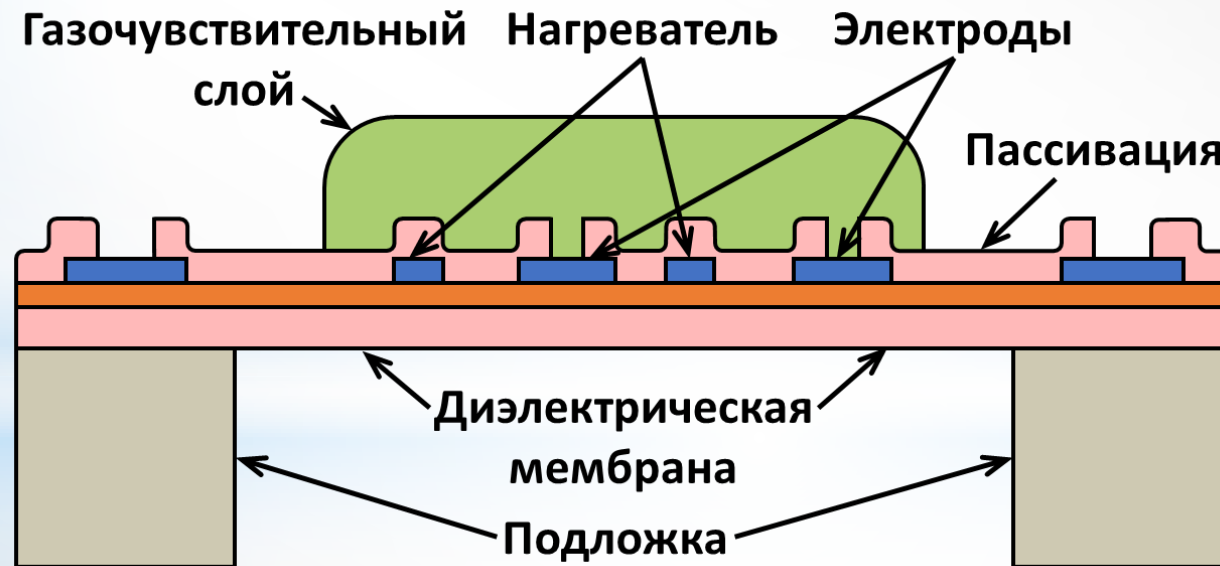
Факторы, влияющие на степень связывания:

- ☐ Тип газа и его концентрация
- ☐ Материал датчика
- ☐ Температура

Физический эксперимент

Полупроводниковый газовый сенсор

Схематическое устройство полупроводникового газового сенсора



Факторы, влияющие на степень связывания:

- ❑ Тип газа и его концентрация
- ❑ Материал датчика
- ❑ Температура

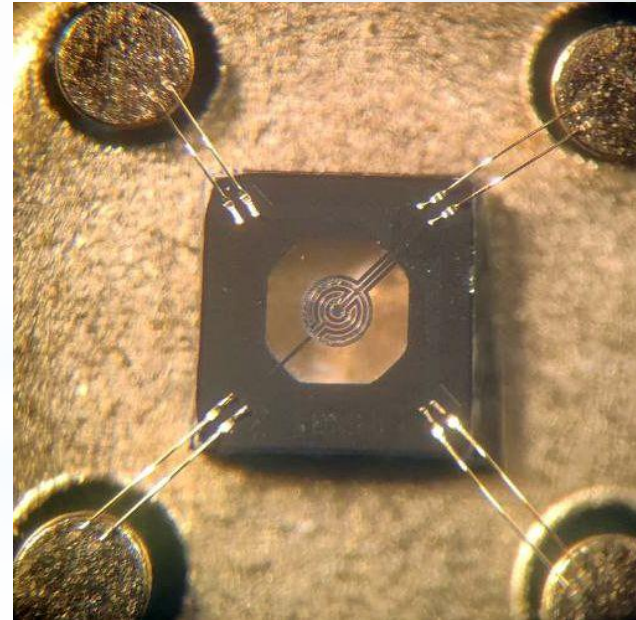
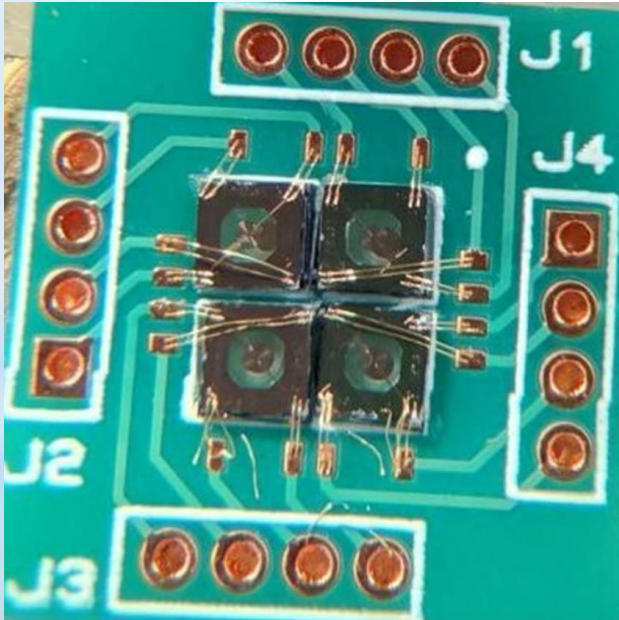


Для достижения **селективности** при определении конкретных газов используется **комплект сенсоров** с различными **легирующими добавками**

Физический эксперимент

Полупроводниковый газовый сенсор

Комплект сенсорных элементов



Факторы, влияющие на степень связывания:

- ☐ Тип газа и его концентрация
- ☐ Материал датчика
- ☐ Температура

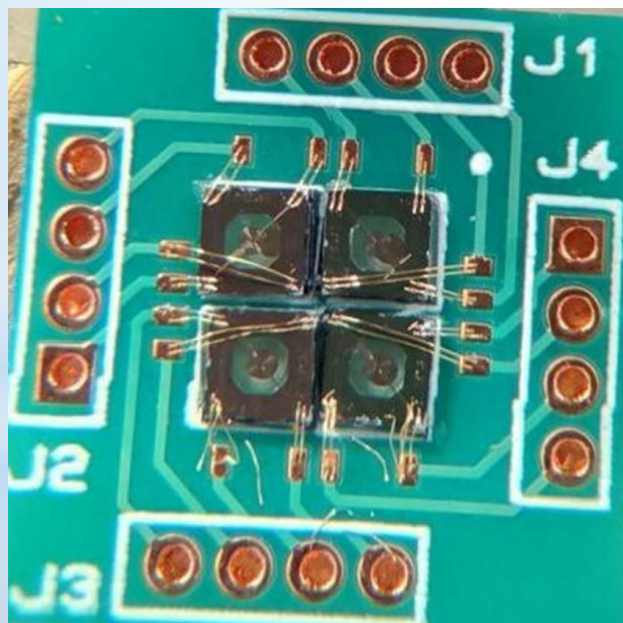


Для достижения **селективности** при определении конкретных газов используется **комплект сенсоров** с различными **легирующими добавками**

Физический эксперимент

Полупроводниковый газовый сенсор

Комплект сенсорных элементов



SnO_2

1. SnO_2 ;
2. $\text{SnO}_2 - \text{Ru}$;
3. $\text{SnO}_2 - \text{Au}$;
4. $\text{SnO}_2 - \text{Pt}$;
5. $\text{SnO}_2 - \text{Pd}$;
6. $\text{SnO}_2 - \text{Cr} - \text{Nb}$;
7. $\text{SnO}_2 - \text{Si}$;
8. $\text{SnO}_2 - \text{Si} - \text{Au}$;

TiO_2

9. $\text{TiO}_2 - \text{Cr}$;
10. $\text{TiO}_2 - \text{Cr} - \text{Au}$;
11. $\text{TiO}_2 - \text{Nb} - \text{Au}$;
12. $\text{TiO}_2 - \text{Nb}$

Факторы, влияющие на степень связывания:

- ☐ Тип газа и его концентрация
- ☐ Материал датчика
- ☐ Температура

Для достижения **селективности** при определении конкретных газов используется **комплект сенсоров** с различными **легирующими добавками**

Физический эксперимент

Полупроводниковый газовый сенсор

Динамики нагрева

Факторы, влияющие на степень связывания:

- ☐ Тип газа и его концентрация
- ☐ Материал датчика
- ☐ Температура



- Степень связывания молекул газа уменьшается с повышением температуры.
- **Необходим** нагрев для приведения датчика в **исходное состояние**.
- Для обеспечения **временного разрешения** необходимо использовать **циклический нагрев и охлаждение**.

Физический эксперимент

Полупроводниковый газовый сенсор

Динамики нагрева

Факторы, влияющие на степень связывания:

- ☐ Тип газа и его концентрация
- ☐ Материал датчика
- ☐ Температура



- Электрическое сопротивление полупроводниковых материалов также зависит от температуры.



Для **повышения селективности** определения газов использовались различные температурные режимы работы:
т. н. **динамики нагрева**.



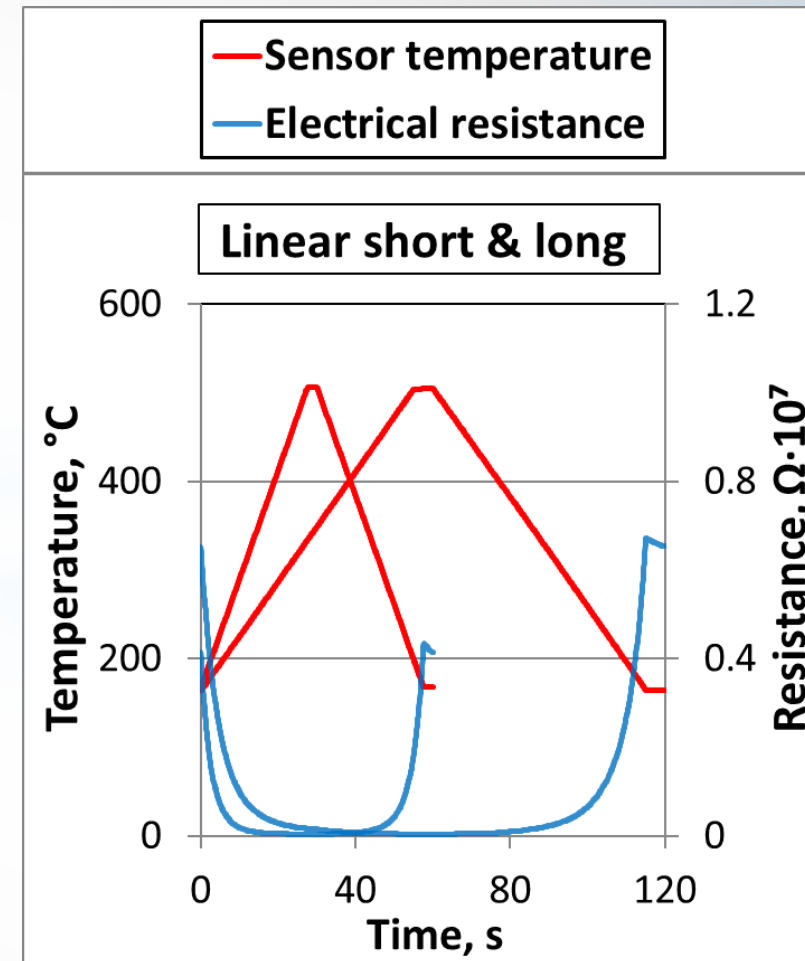
- Степень связывания молекул газа уменьшается с повышением температуры.
- Необходим нагрев для приведения датчика в исходное состояние.
- Для обеспечения временного разрешения необходимо использовать **циклический нагрев и охлаждение**.



Физический эксперимент

Динамики нагрева

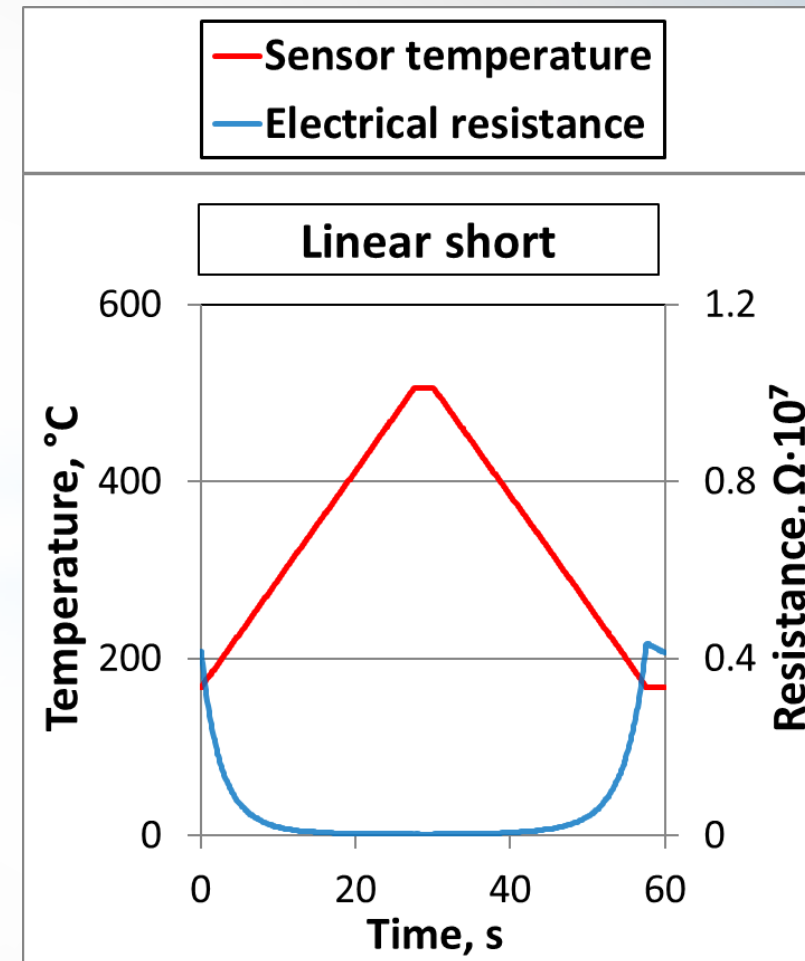
- ❑ Линейный нагрев и охлаждение
 - Линейный длинный
 - Линейный короткий
- ❑ Ступенчатое плавное повышение или понижение температуры
 - Пошаговый вверх
 - Пошаговый вниз
- ❑ Ступенчатое плавное повышение или понижение температуры с кратковременными импульсными скачками температуры до максимума.
 - Импульсный вверх
 - Импульсный вниз



Физический эксперимент

Динамики нагрева

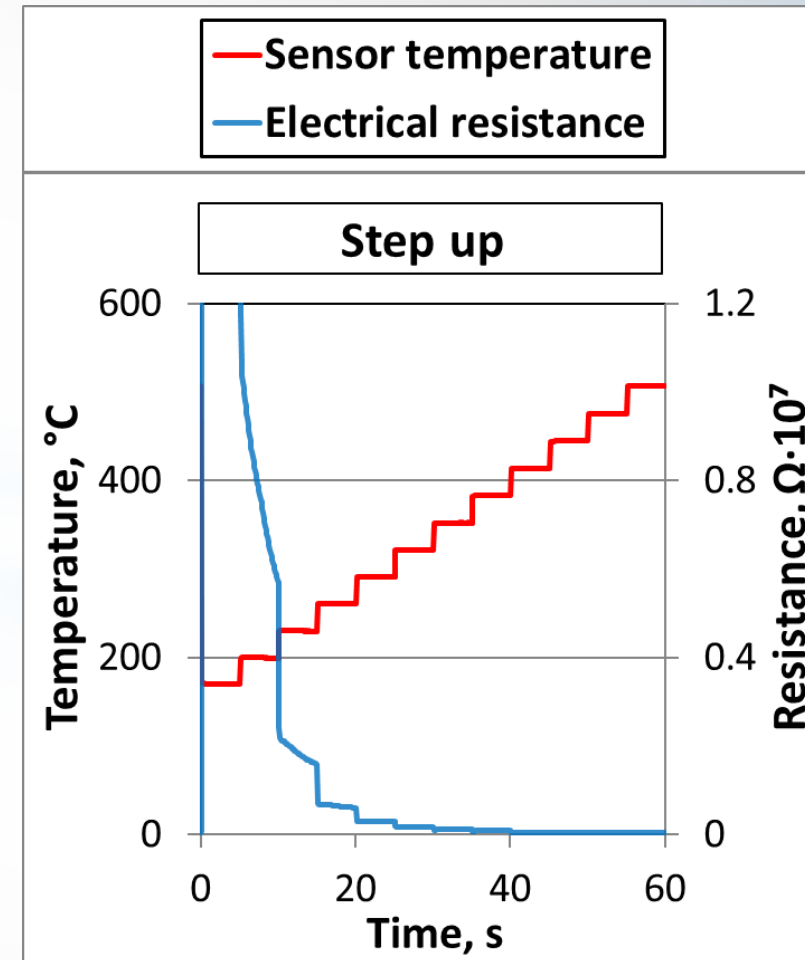
- ❑ Линейный нагрев и охлаждение
 - Линейный длинный
 - **Линейный короткий**
- ❑ Ступенчатое плавное повышение или понижение температуры
 - Пошаговый вверх
 - Пошаговый вниз
- ❑ Ступенчатое плавное повышение или понижение температуры с кратковременными импульсными скачками температуры до максимума.
 - Импульсный вверх
 - Импульсный вниз



Физический эксперимент

Динамики нагрева

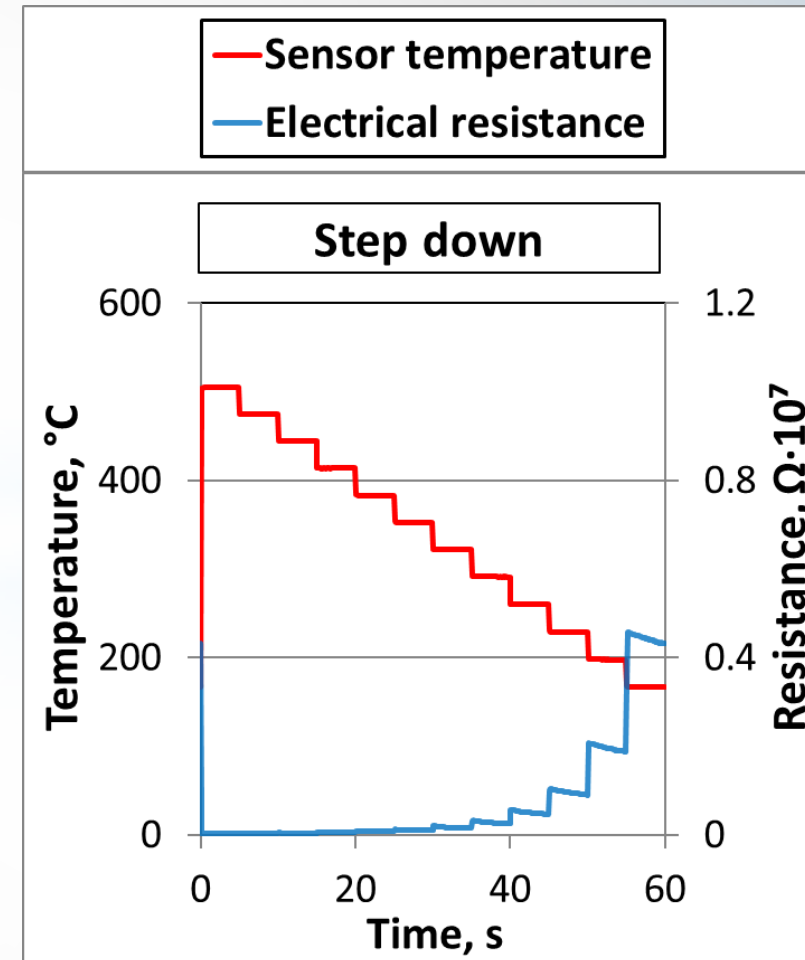
- ❑ Линейный нагрев и охлаждение
 - Линейный длинный
 - Линейный короткий
- ❑ Ступенчатое плавное повышение или понижение температуры
 - Пошаговый вверх
 - Пошаговый вниз
- ❑ Ступенчатое плавное повышение или понижение температуры с кратковременными импульсными скачками температуры до максимума.
 - Импульсный вверх
 - Импульсный вниз



Физический эксперимент

Динамики нагрева

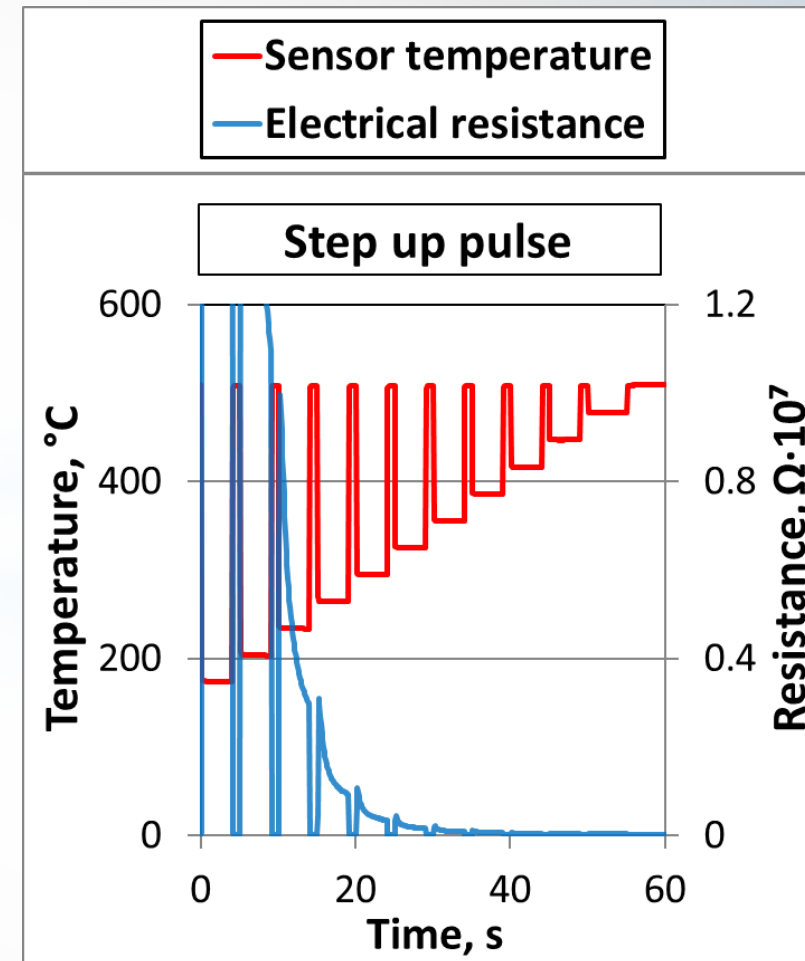
- ❑ Линейный нагрев и охлаждение
 - Линейный длинный
 - Линейный короткий
- ❑ Ступенчатое плавное повышение или понижение температуры
 - Пошаговый вверх
 - Пошаговый вниз
- ❑ Ступенчатое плавное повышение или понижение температуры с кратковременными импульсными скачками температуры до максимума.
 - Импульсный вверх
 - Импульсный вниз



Физический эксперимент

Динамики нагрева

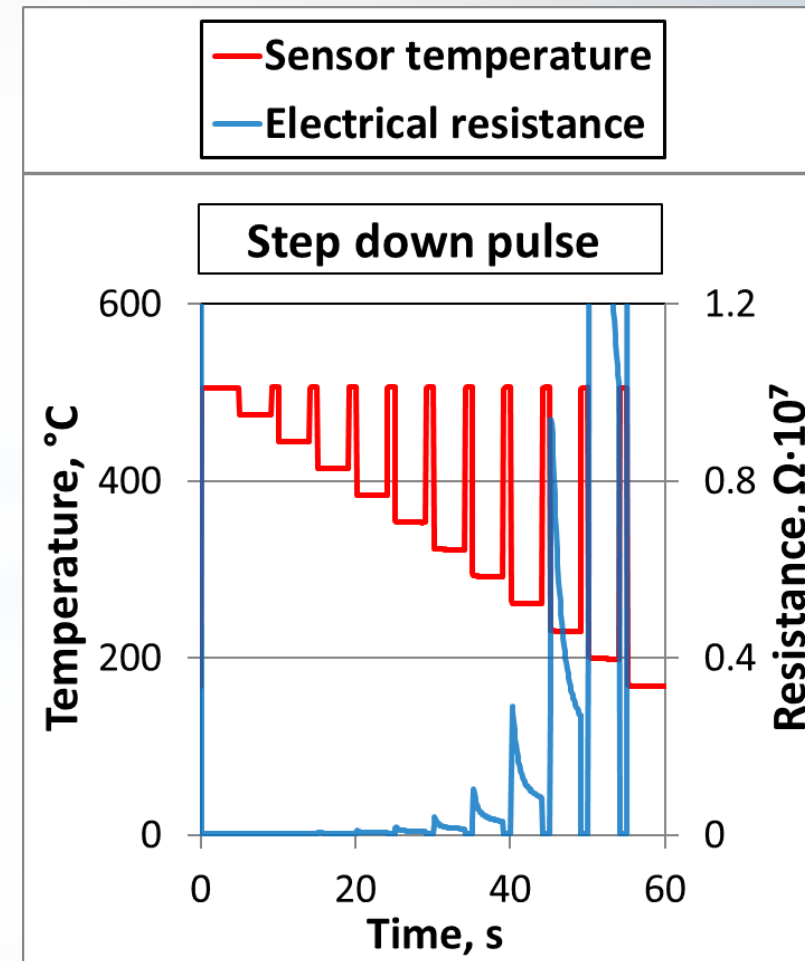
- ❑ Линейный нагрев и охлаждение
 - Линейный длинный
 - Линейный короткий
- ❑ Ступенчатое плавное повышение или понижение температуры
 - Пошаговый вверх
 - Пошаговый вниз
- ❑ Ступенчатое плавное повышение или понижение температуры с кратковременными импульсными скачками температуры до максимума.
 - Импульсный вверх
 - Импульсный вниз



Физический эксперимент

Динамики нагрева

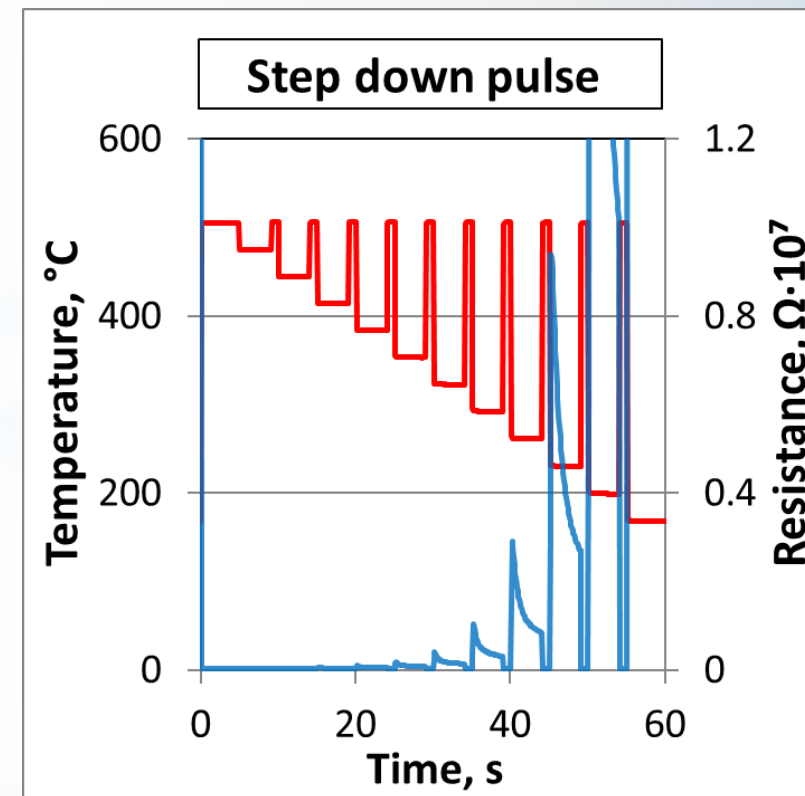
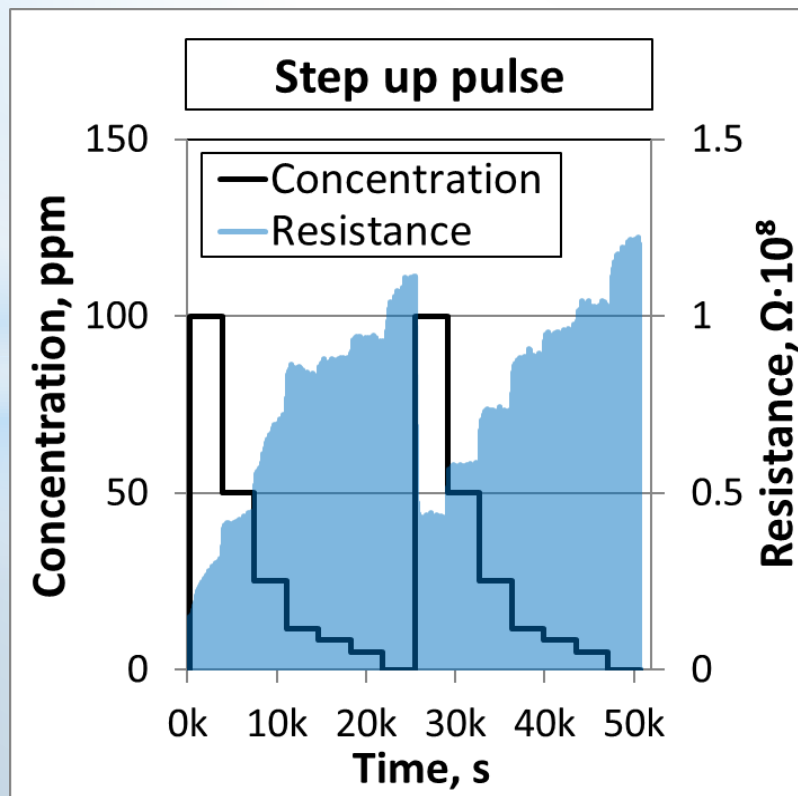
- ❑ Линейный нагрев и охлаждение
 - Линейный длинный
 - Линейный короткий
- ❑ Ступенчатое плавное повышение или понижение температуры
 - Пошаговый вверх
 - Пошаговый вниз
- ❑ Ступенчатое плавное повышение или понижение температуры с кратковременными импульсными скачками температуры до максимума.
 - Импульсный вверх
 - Импульсный вниз



Физический эксперимент

Концентрации газов

В ходе эксперимента были собраны формы сенсорного отклика от **12 датчиков** при **6 различных динамиках нагрева** и **6 различных концентрациях газа**. Несколько серий.



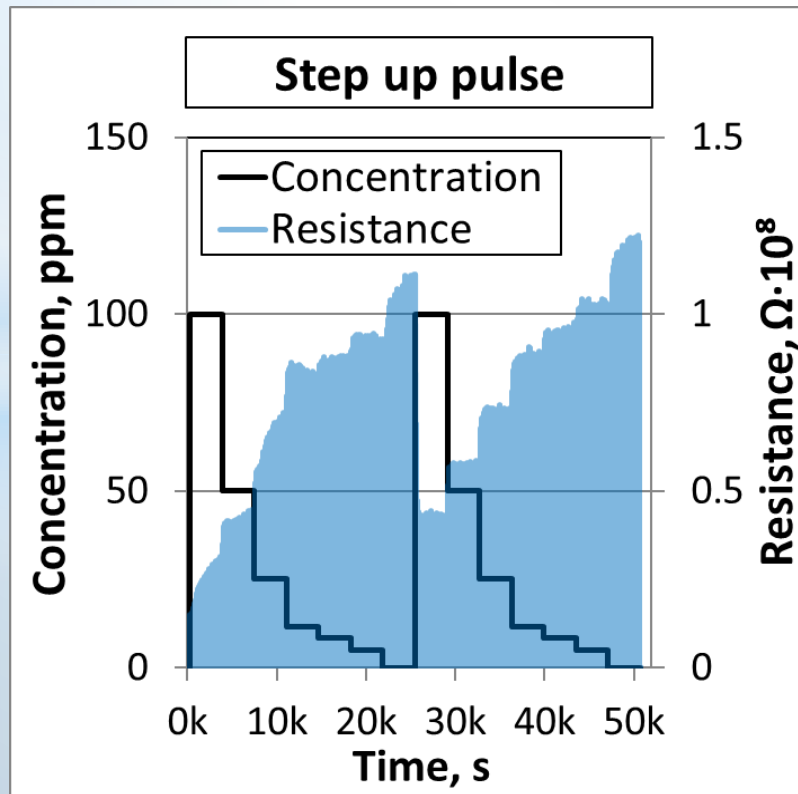
В атмосфере чистого воздуха, а также **в воздухе с примесью газов**:

CO, H₂, CH₄, NH₃, NO, NO₂, H₂S, SO₂, HCON (**только один газ** в каждом эксперименте)

Вычислительный эксперимент

Подготовка и предобработка данных

Этапы подготовки и предобработки данных:

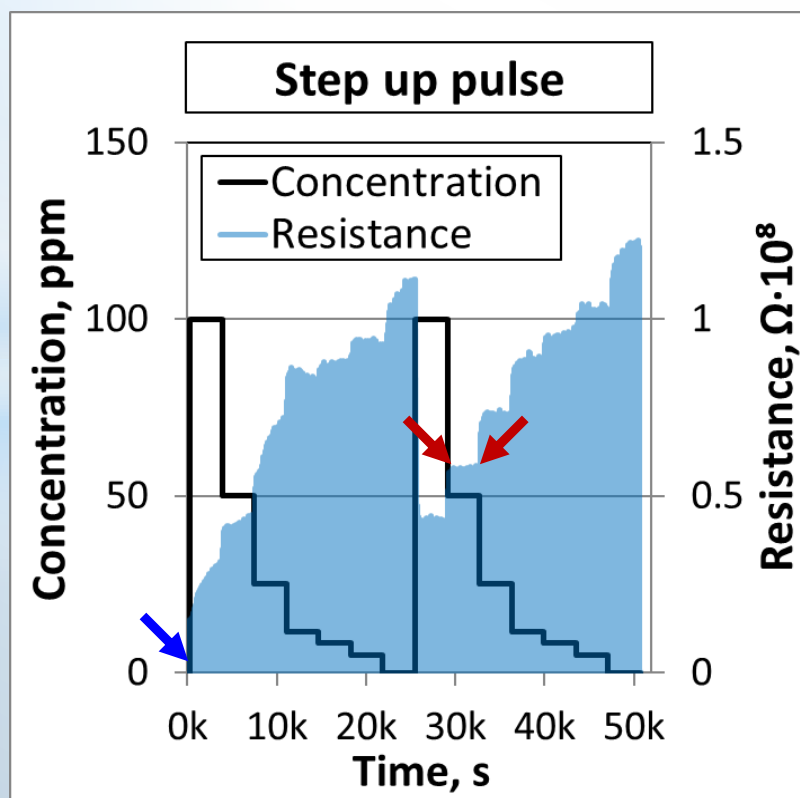


1. Преобразование данных в формат:
1 цикл динамики нагрева –
1 пример набора данных.
2. Замена значений сенсорного отклика
выше 10^{10} Ом
на фиксированное значение 10^{10} Ом,
и ниже 10 Ом
на фиксированное значение 10 Ом.

Вычислительный эксперимент

Подготовка и предобработка данных

Этапы подготовки и предобработки данных:

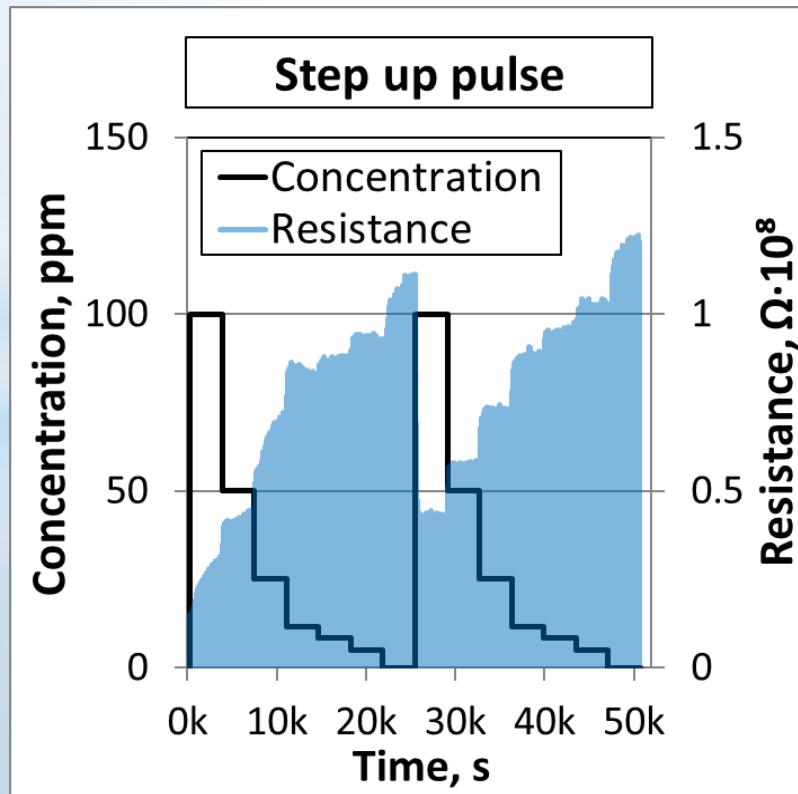


3. **Исключение** участков данных, где производилась продувка экспериментальной установки: **первые несколько циклов** в каждом отдельном эксперименте.
4. Исключение первых нескольких **циклов** **после изменения концентрации** и нескольких циклов непосредственно **перед изменением концентрации**.

Вычислительный эксперимент

Подготовка и предобработка данных

Этапы подготовки и предобработки данных:



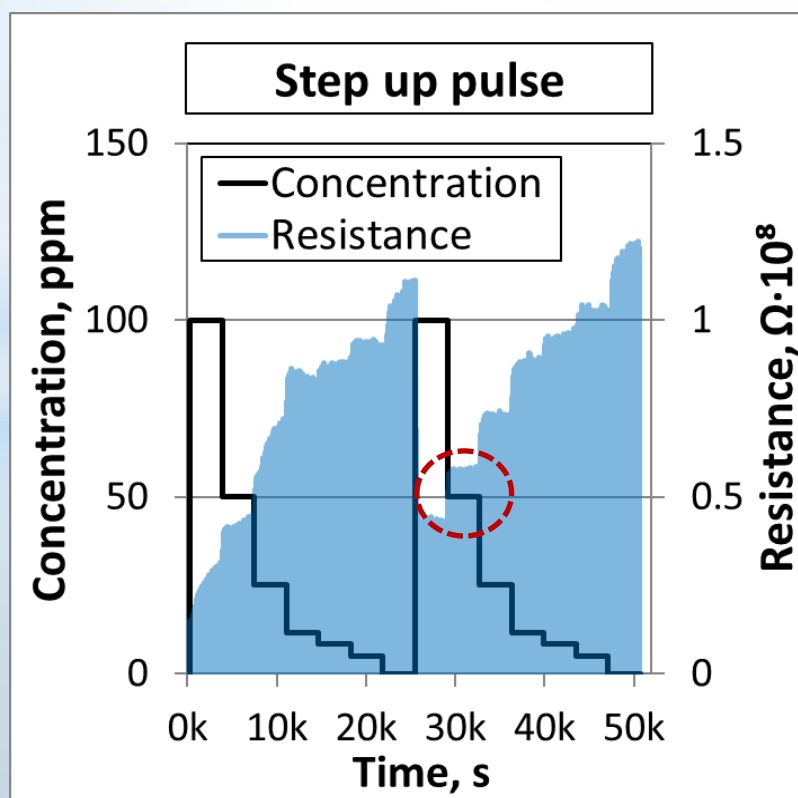
5. Логарифмирование значений сенсорного отклика.

6. Масштабирование значений концентрации газов на диапазон минимума-максимума.

Вычислительный эксперимент

Подготовка и предобработка данных

Этапы подготовки и предобработки данных:



7. Стратифицированное деление на поднаборы

Из каждой **области**
с **фиксированной концентрацией** газа:

- В тренировочный набор отбирались первые n циклов,
- Последующие m циклов – в валидационный набор,
- Последующие k циклов – в тестовый набор

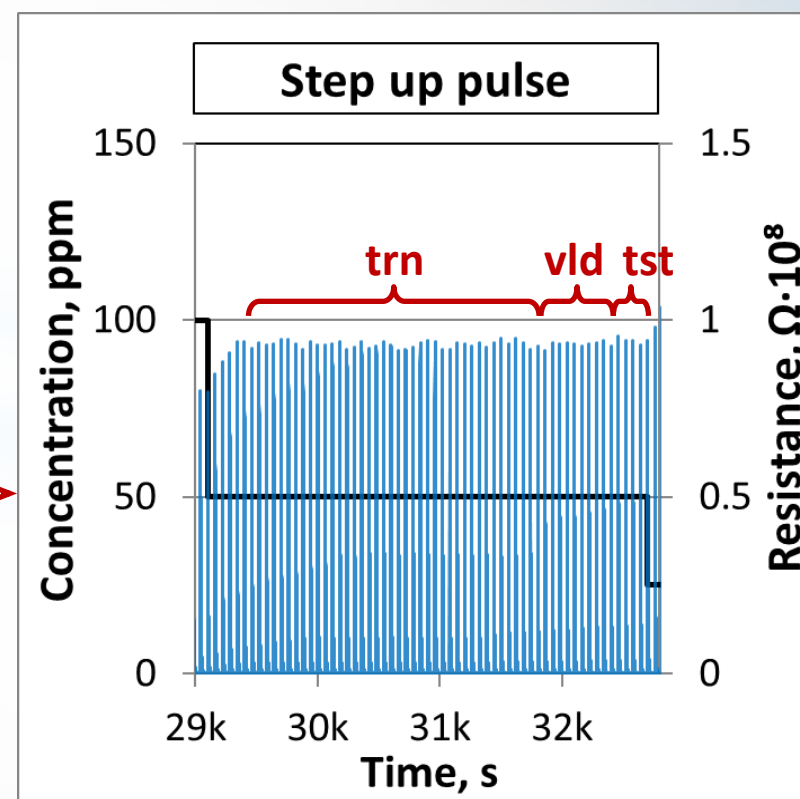
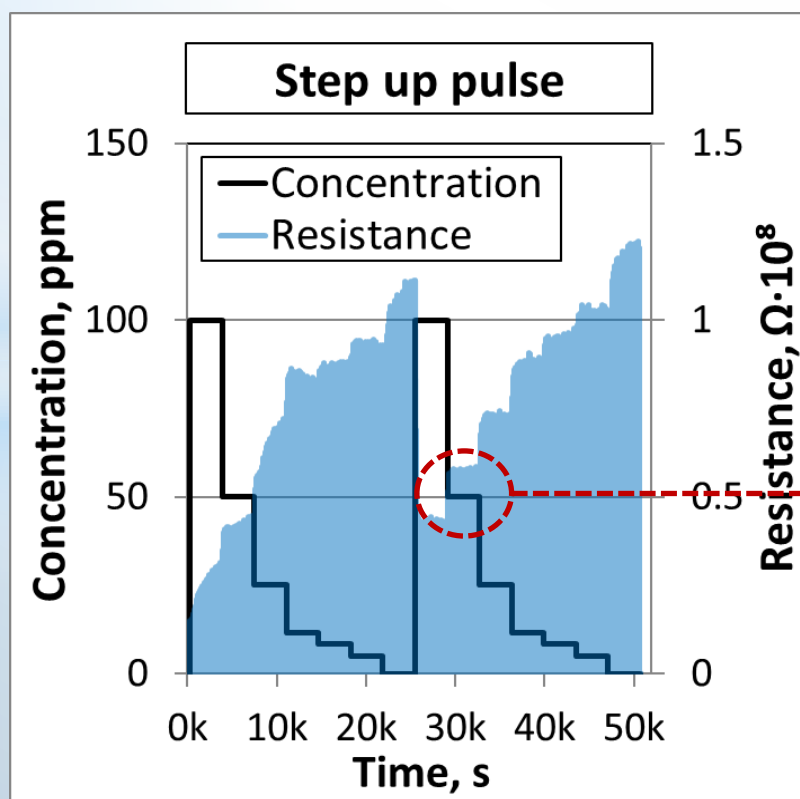
Затем процедура повторялась для остальных участков с фиксированной концентрацией.

Вычислительный эксперимент

Подготовка и предобработка данных

Этапы подготовки и предобработки данных:

7. Стратифицированное деление на поднаборы



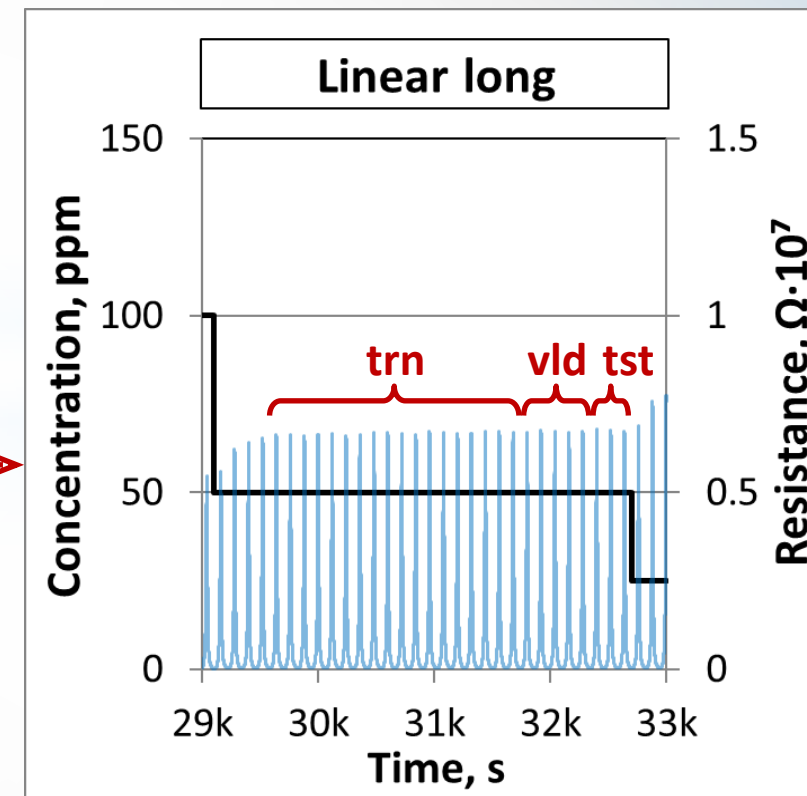
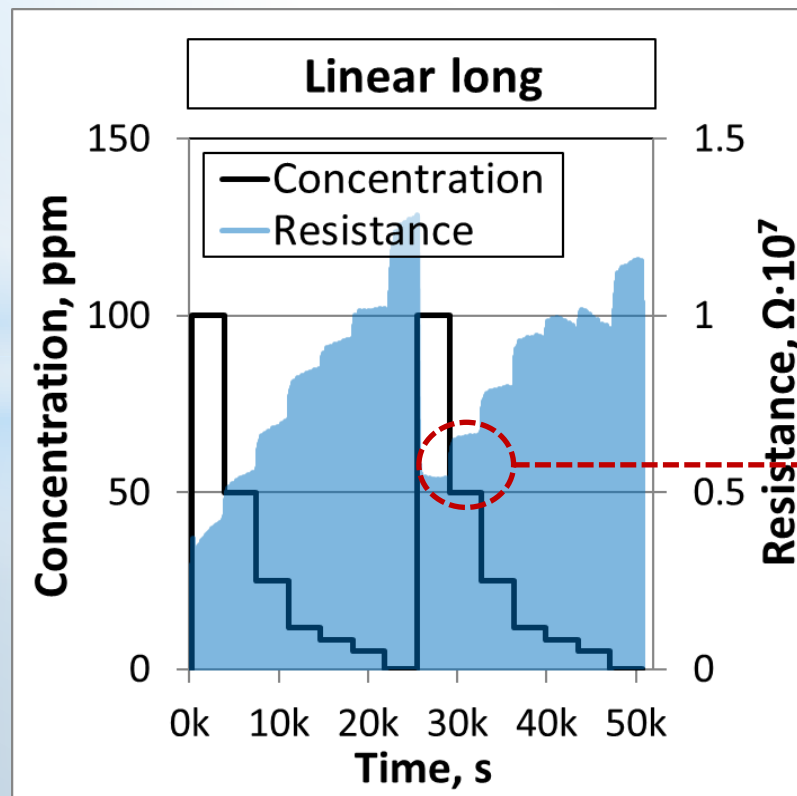
$$n:m:k = 40:10:5$$

Вычислительный эксперимент

Подготовка и предобработка данных

Этапы подготовки и предобработки данных:

7. Стратифицированное деление на поднаборы



$$n:m:k = 18:5:3$$

Вычислительный эксперимент

Цель эксперимента

Проблемы при использовании широкого температурного диапазона:

- ❑ Увеличение времени измерения,
- ❑ Увеличение энергопотребления
- ❑ Ускоренная деградации датчика.
- ❑ Увеличение количества измерений (размерности пространства)
 - Снижению стабильности и производительности моделей машинного обучения.



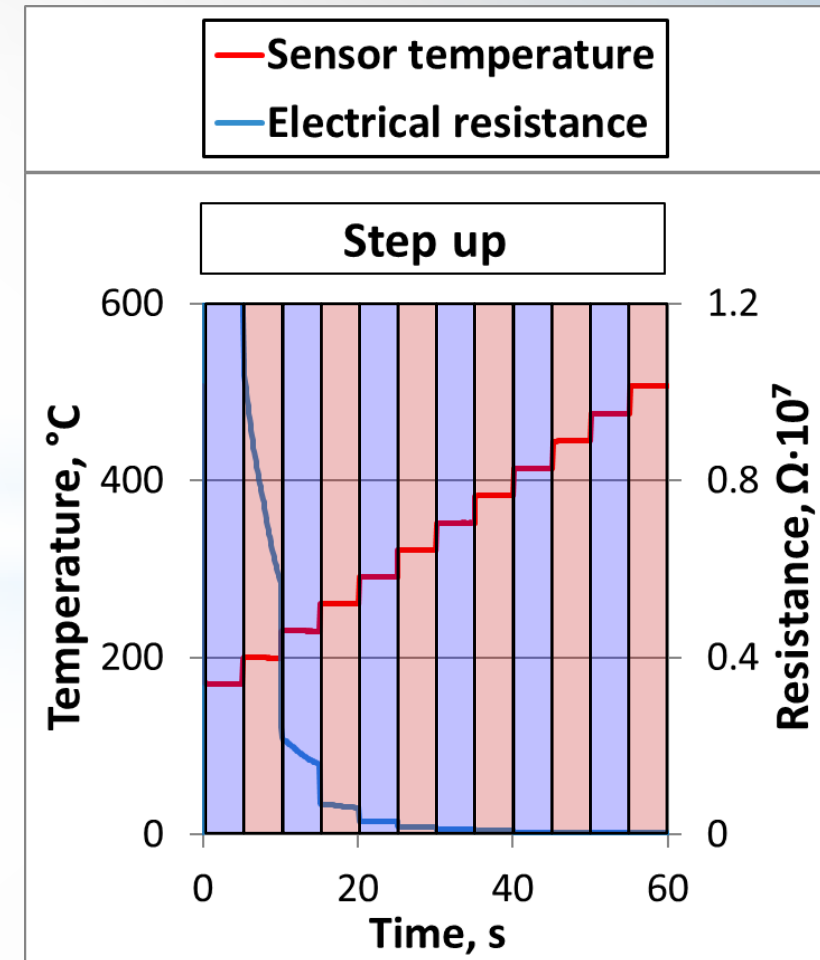
Необходим **поиск оптимальных диапазонов** рабочих температур на основе производительности моделей машинного обучения.

Вычислительный эксперимент

Постановка задачи

Признаки:

- ❑ **Деление отклика на 12 равных частей (окон)**
- ❑ 78 комбинаций положений и размеров
- ❑ В качестве входных признаков используется часть отклика сенсора, попавшая внутрь окна

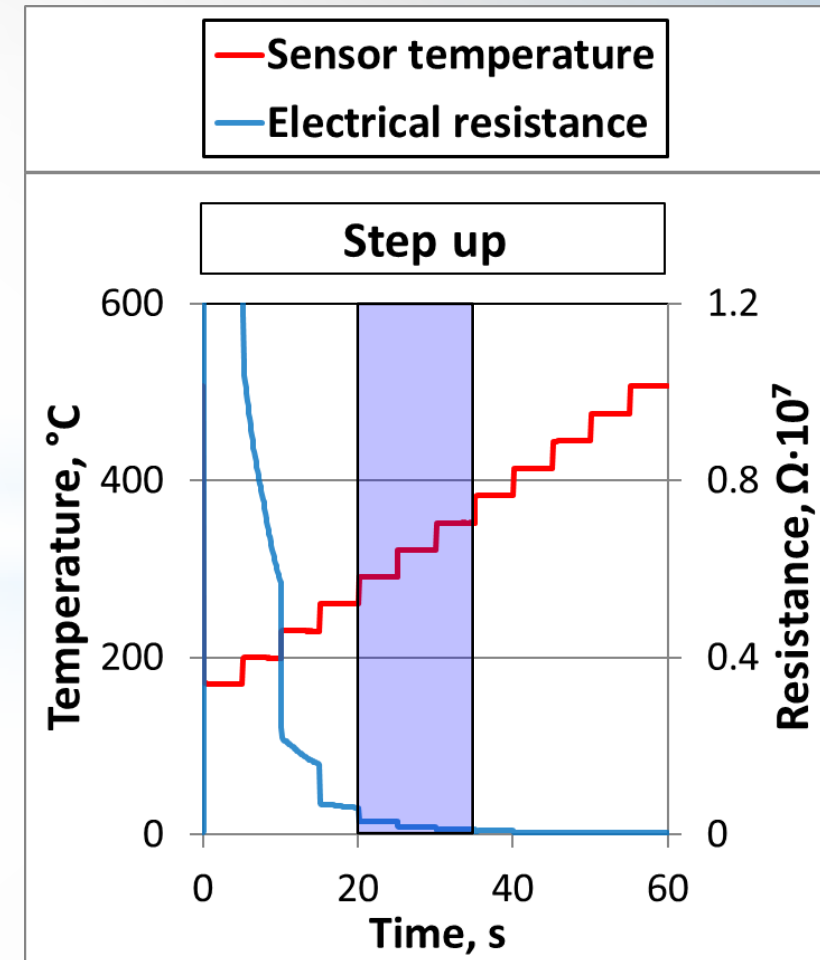


Вычислительный эксперимент

Постановка задачи

Признаки:

- ☐ Деление отклика на 12 равных частей (окон)
- ☐ **78 комбинаций положений и размеров**
- ☐ В качестве входных признаков используется часть отклика сенсора, попавшая внутрь окна
- ☐ 78 комбинаций × 6 динамик ×
× 9 газов × 12 сенсоров = 50 544 моделей



Размер – 3, положение – 5

Вычислительный эксперимент

Постановка задачи

Признаки:

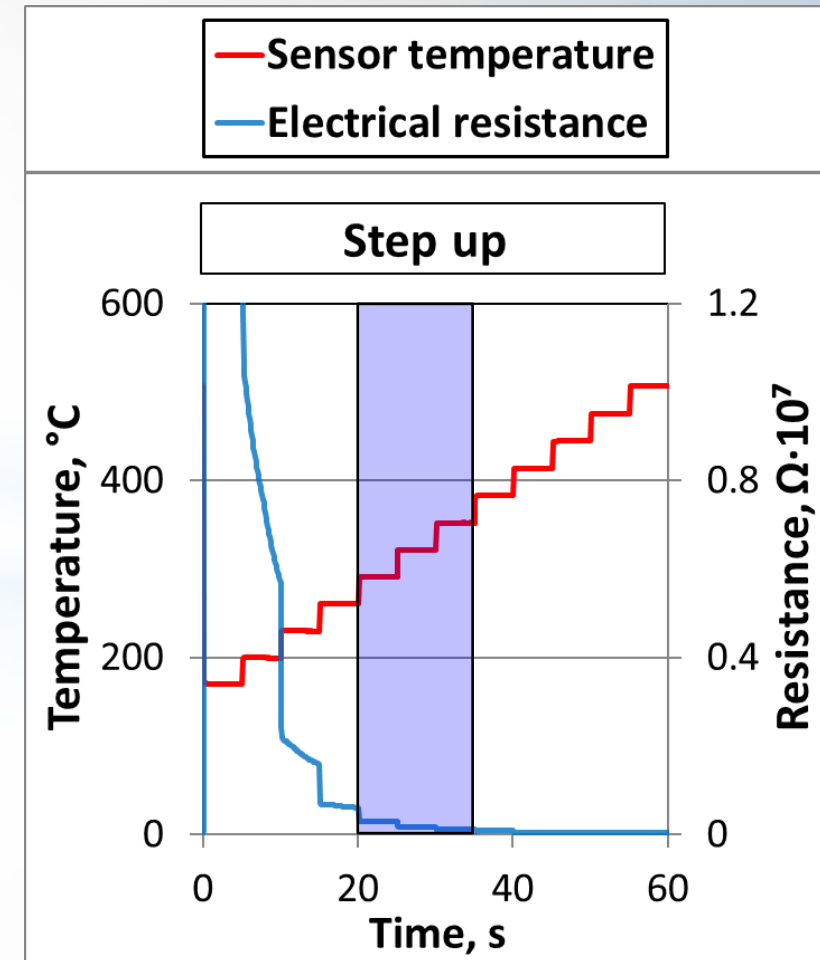
- ☐ Деление отклика на 12 равных частей (окон)
- ☐ 78 комбинаций положений и размеров

Методы машинного обучения:

- ☐ Ridge
- ☐ Градиентный бустинг

Данные:

- ☐ Индивидуальное использование сенсоров
- ☐ Объединенные наборы данных
 - 1 файл – все газы

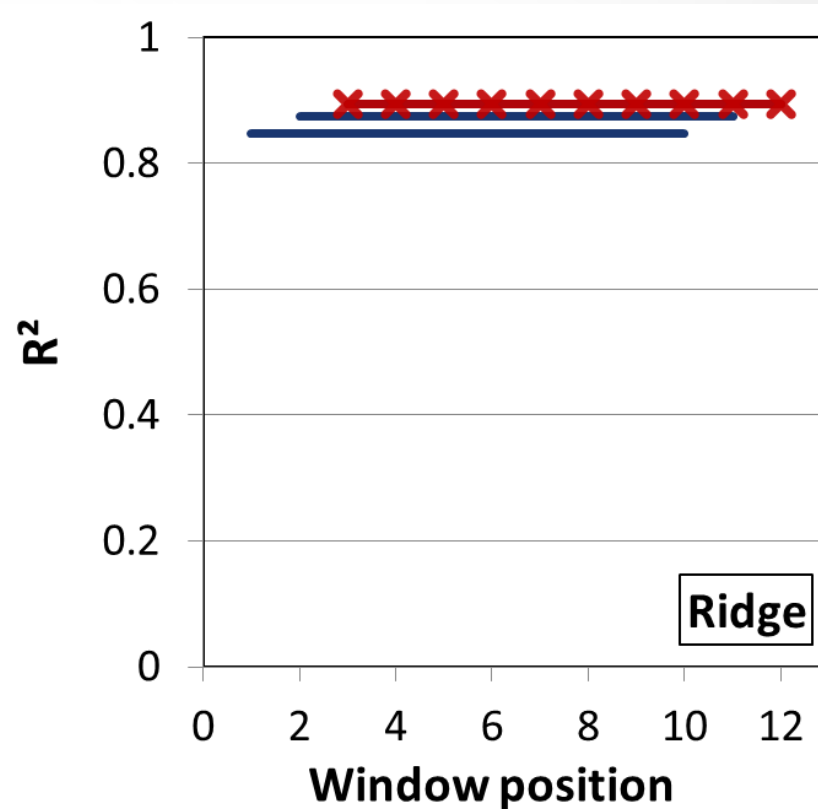
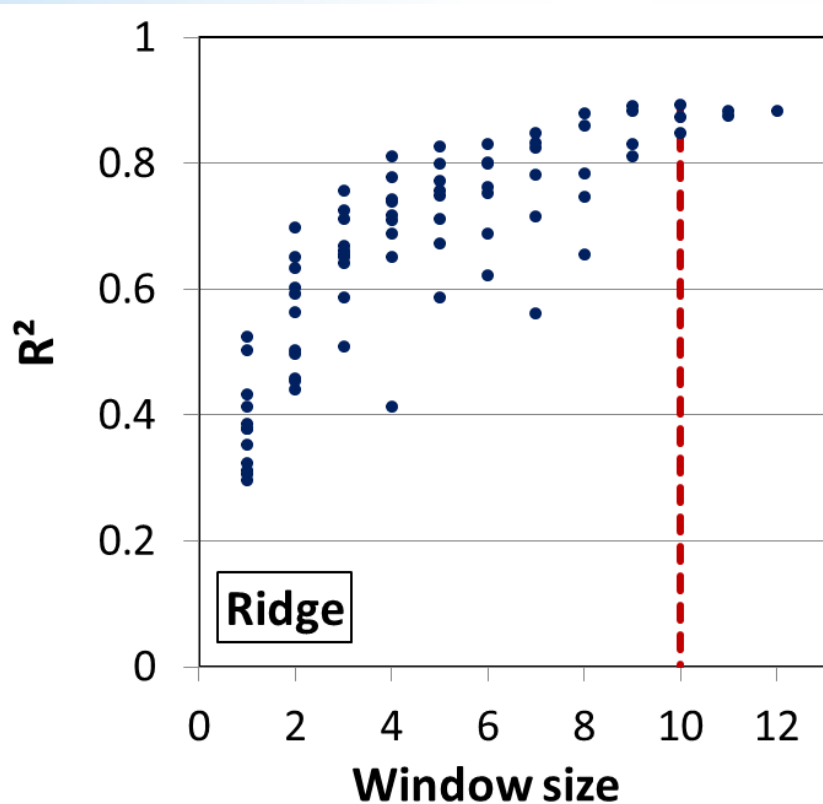


Размер – 3, положение – 5

Результаты: качество решения

Все комбинации размеров и положений окон

Модель Ridge – динамика PU – газ NO – сенсор №7



● All combinations

× Best score

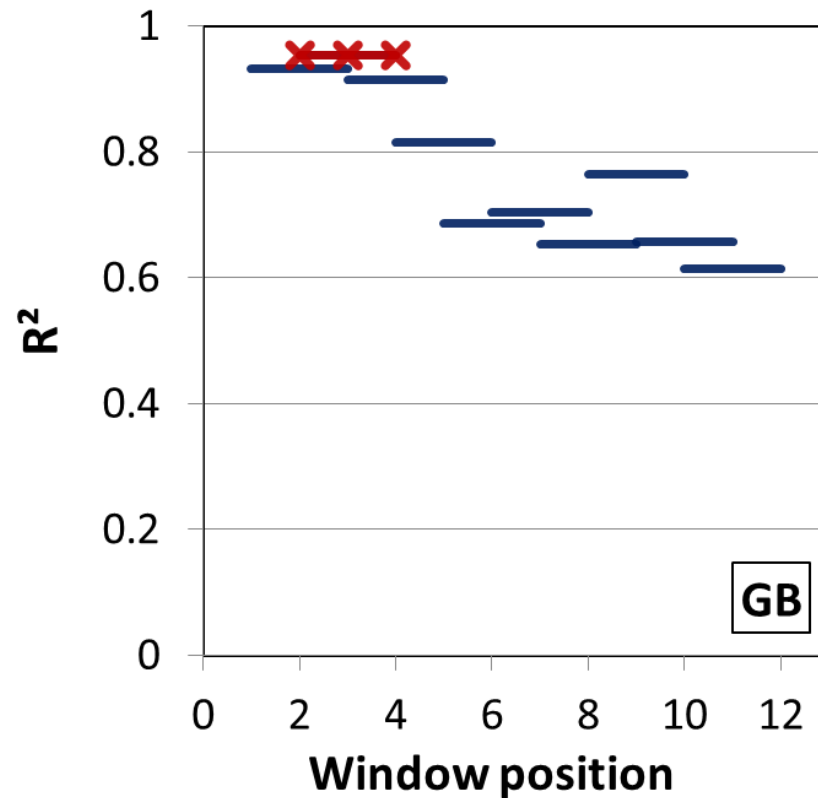
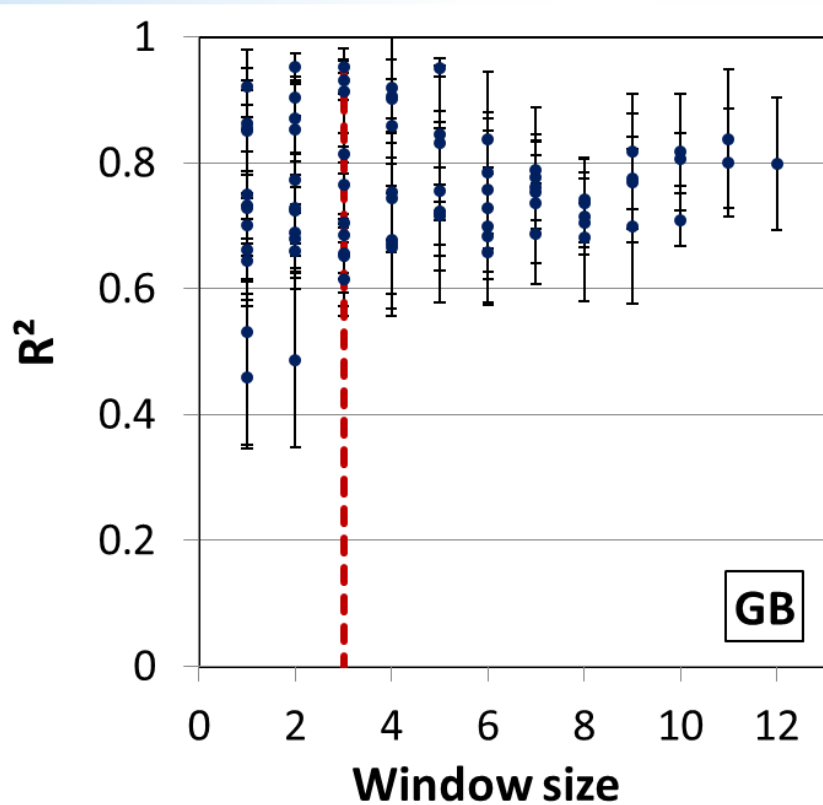
Ridge:

- ☐ Качество решения **растет** с увеличением размера окна
- ☐ Наилучшей результат наблюдается **при больших** размерах окон

Результаты: качество решения

Все комбинации размеров и положений окон

Модель GB – динамика PU – газ NO – сенсор №7



● All combinations

✗ Best score

Градиентный бустинг:

☐ Качество решения

сопоставимое

при различных
размерах окон

☐ Наилучшей результат

наблюдается

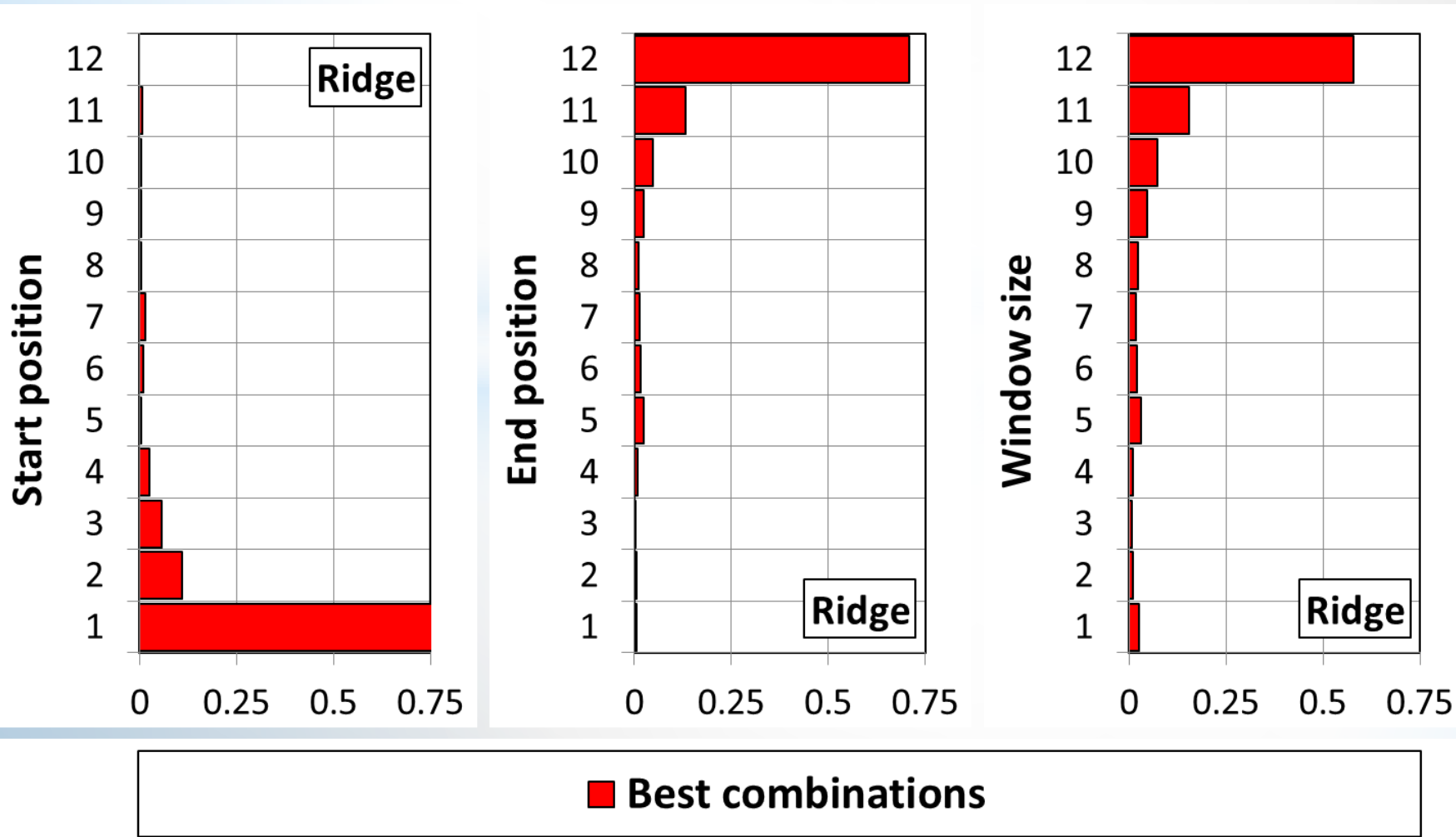
при малых

размерах окон

Результаты: гистограммы позиции и размера окна

Зависимость от динамики нагрева

Наилучший результат в каждом сочетании динамика – газ – сенсор



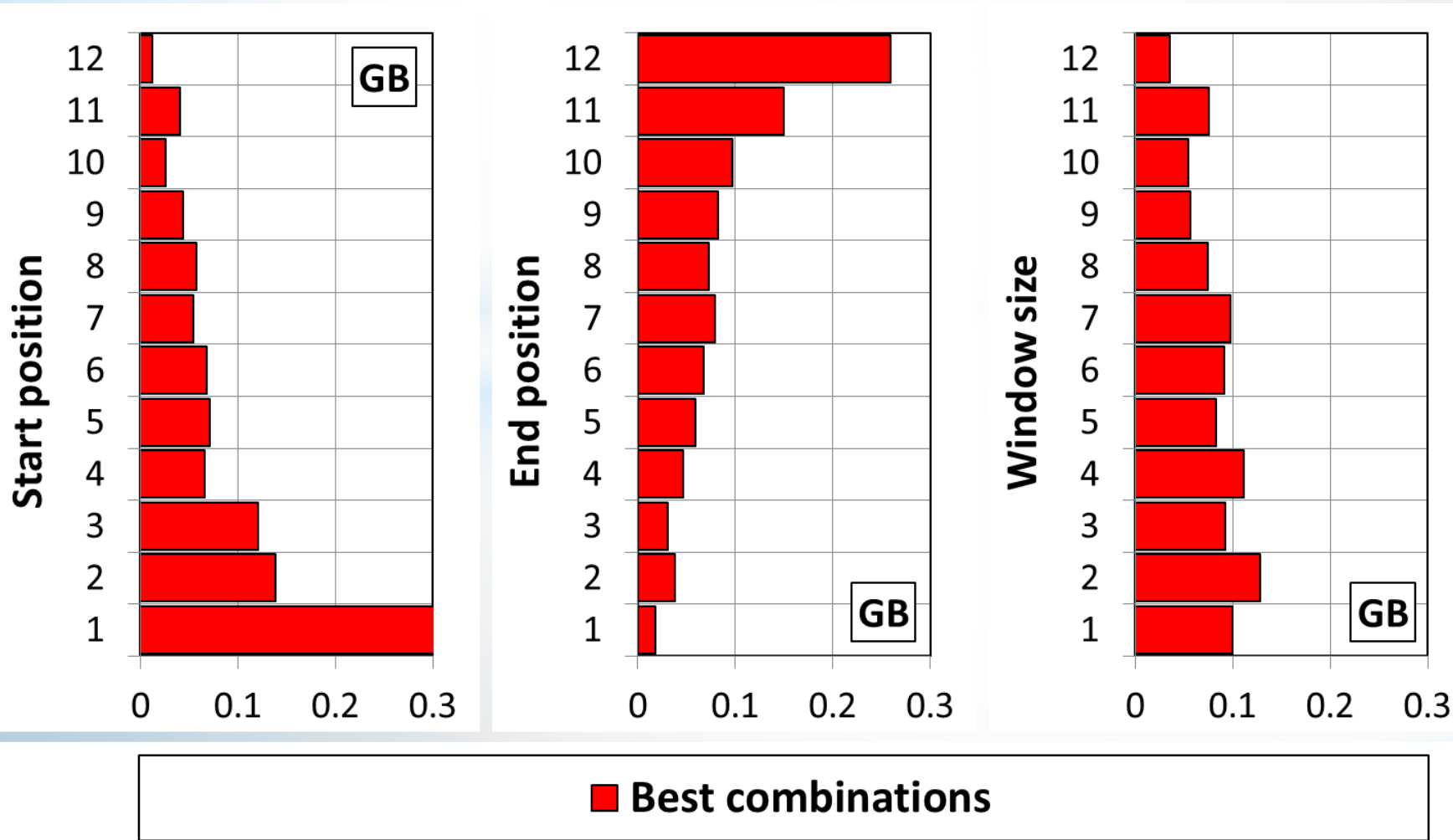
Ridge:

- ☐ Преобладает **крайняя левая** начальная позиция
- ☐ Преобладает **крайняя правая** конечная позиция
- ☐ Преобладает **максимальный** размер окна

Результаты: гистограммы позиции и размера окна

Зависимость от динамики нагрева

Наилучший результат в каждом сочетании динамика – газ – сенсор



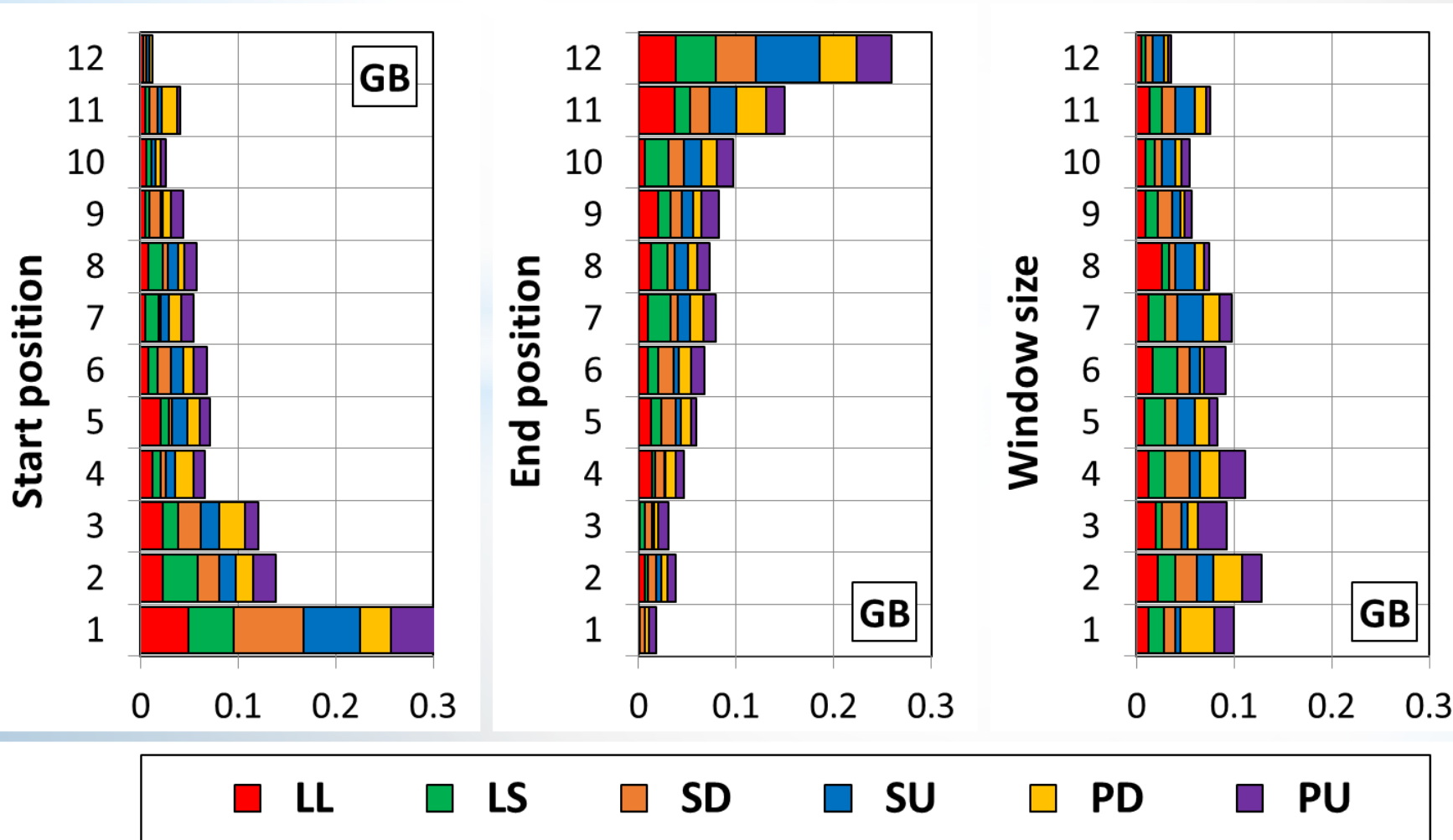
Градиентный бустинг:

- ☐ Преобладает **крайняя левая** начальная позиция
- ☐ Преобладает **крайняя правая** конечная позиция
- ☐ Размеры окон распределены **равномерно**

Результаты: гистограммы позиции и размера окна

Зависимость от динамики нагрева

Наилучший результат в каждом сочетании динамика – газ – сенсор



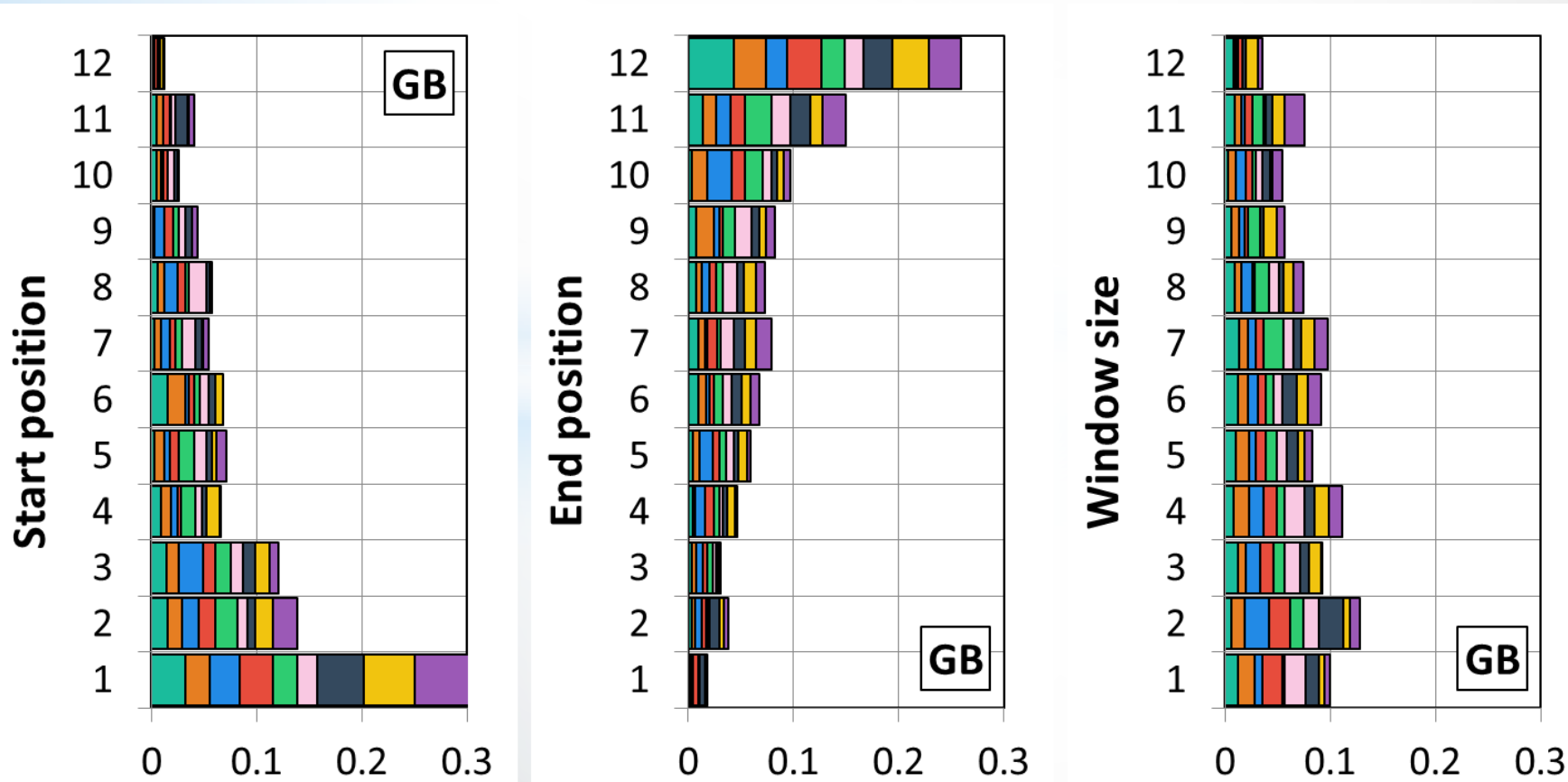
Градиентный бустинг:

□ Зависимость
от динамики нагрева
отсутствует

Результаты: гистограммы позиции и размера окна

Зависимость от динамики нагрева

Наилучший результат в каждом сочетании динамика – газ – сенсор



Градиентный бустинг:

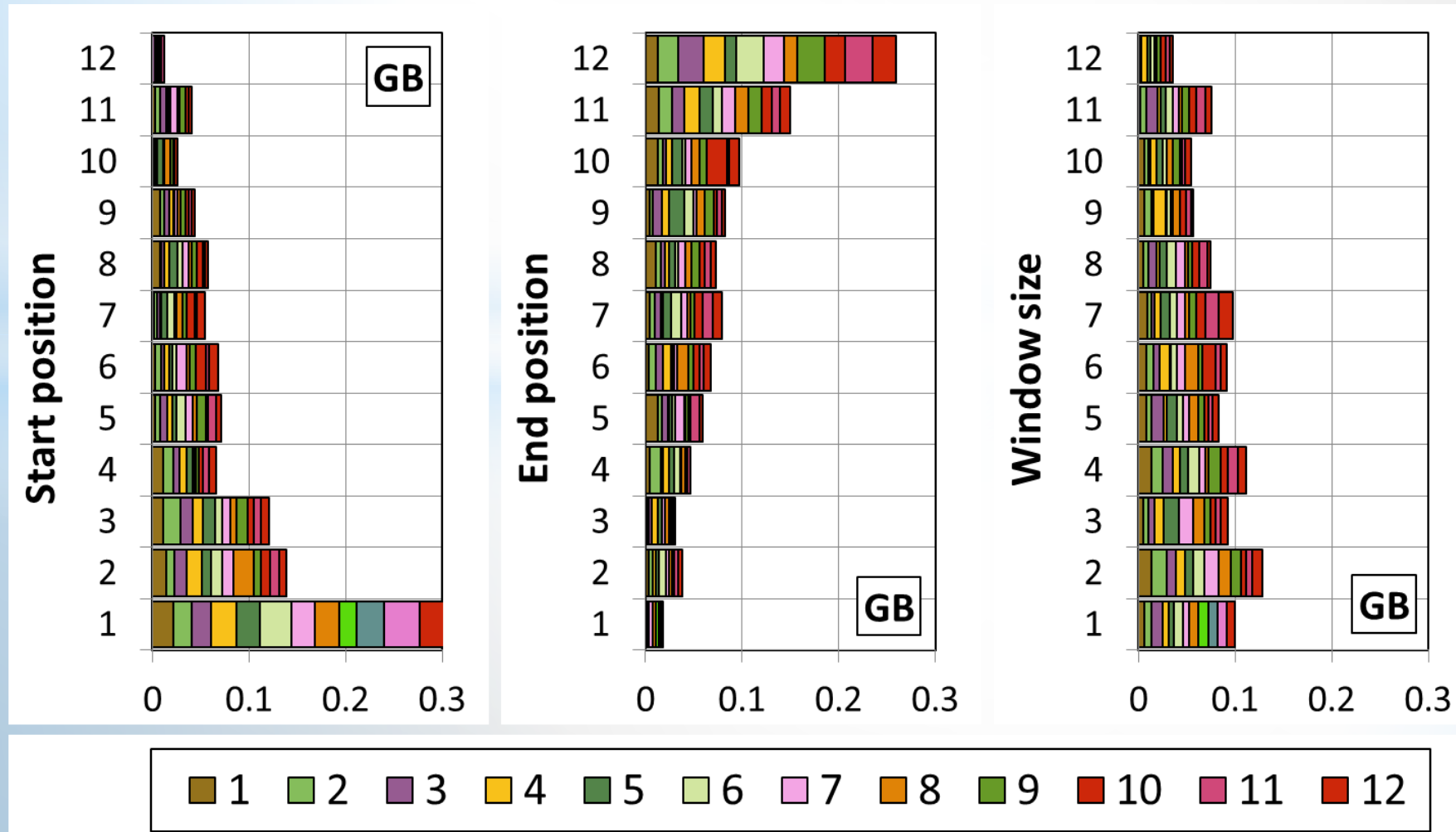
□ Зависимость
от типа газа
отсутствует

CH₄ CO H₂ H₂S HCOH NH₃ NO NO₂ SO₂

Результаты: гистограммы позиции и размера окна

Зависимость от динамики нагрева

Наилучший результат в каждом сочетании динамика – газ – сенсор



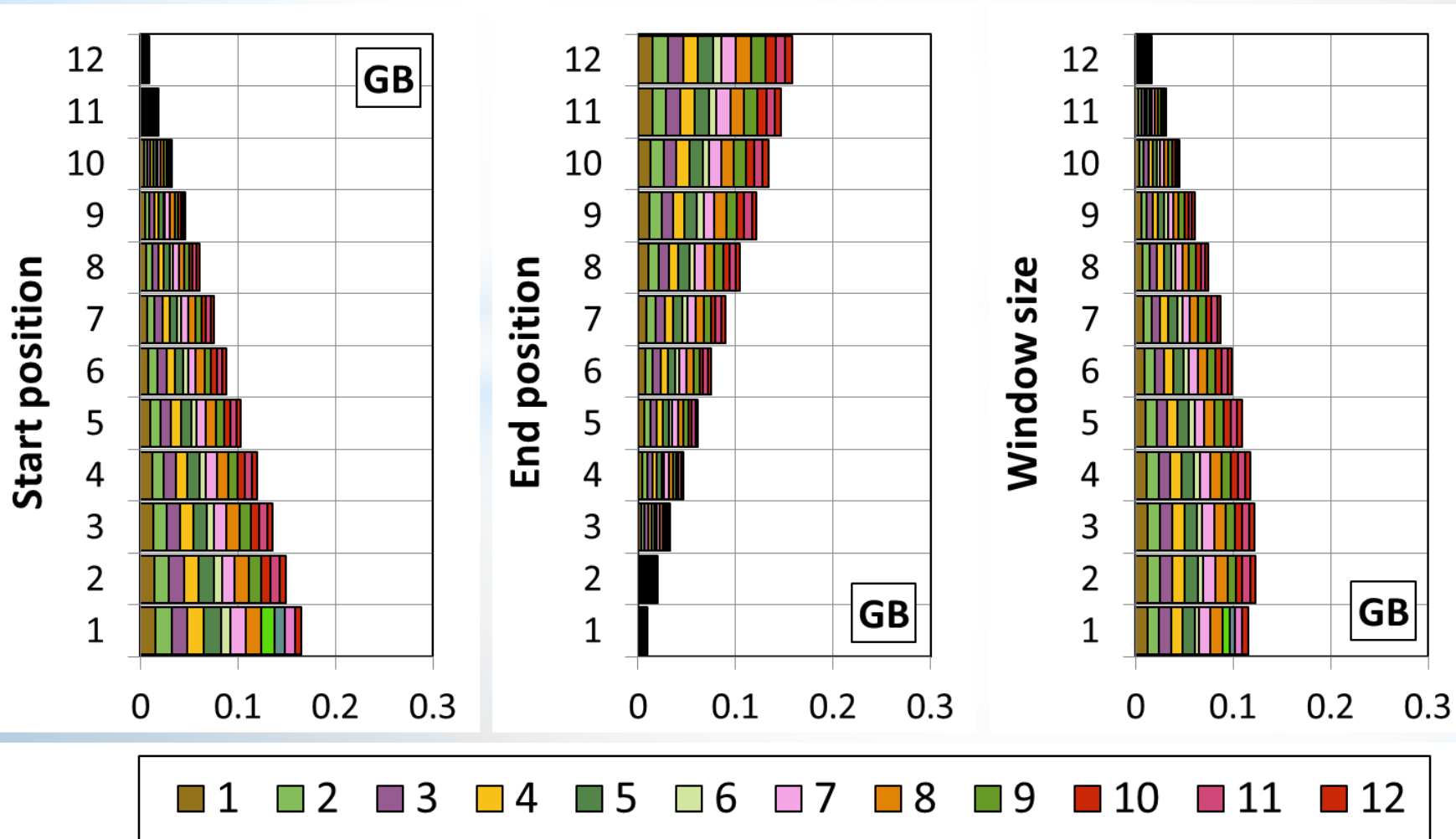
Градиентный бустинг:

□ Зависимость
от номера сенсора
отсутствует

Результаты: гистограммы позиции и размера окна

Зависимость от динамики нагрева

Все комбинации с $R^2 > 0.9$



Градиентный бустинг:

- Зависимость от динамики нагрева, типа газа и номера сенсора также **отсутствует** и для других хороших комбинаций ($R^2 > 0.9$)

Заключение

Выводы

- ❑ На кривой отклика сенсора **не наблюдается** четко выраженных **участков**, обладающих **большей информативностью**.
- ✓ Для обоих методов машинного обучения **преобладает**
крайняя левая начальная позиция
и крайняя правая конечная позиция
окна, охватывающего входные признаки
- ✓ Отсутствует зависимость положения и размера окна,
при котором наблюдается наилучший результат,
от динамики нагрева, типа газа и номера сенсора

Спасибо за внимание !