УДК 004.032.26:543

ХЕМОМЕТРИЧЕСКИЕ АЛГОРИТМЫ ОБРАБОТКИ МНОГОМЕРНЫХ ДАННЫХ МУЛЬТИСЕНСОРНЫХ СИСТЕМ

И. А. ГАРЕЕВ, Г. Г. АМИНЕВА, З. А. БАШИРОВА
Уфимский университет науки и технологий
Уфа, Россия

Введение. Современные мультисенсорные системы (электронные языки и носы) формируют большие массивы многомерных данных, для которых необходимы эффективные способы извлечения значимой информации. Классические подходы, такие как PCA и PLS, рассчитаны преимущественно на статические наборы данных. Между тем многие реальные химико-технологические процессы – старение, коррозия, фрактализация, экстракция – обладают выраженной временной динамикой. В связи с этим разработка хемометрических подходов, учитывающих эволюцию системы во времени, представляет собой актуальную задачу, лежащую на пересечении аналитической химии, математики и информатики.

Цель работы – разработка и апробация комплекса хемометрических алгоритмов (темпоральный PCA, LEAVE-ONE-OUT, частотный анализ, пермутационный тест, PLS-T' анализ, фрактальный анализ) для классификации и мониторинга сложных систем с синергетической природой в режиме реального времени.

Методы исследования. Проанализированы экспериментальные данные нескольких типов: старение растворимых кофейных напитков (вольтамперометрия); анодное растворение алюминиевой фольги (хроноамперометрия в растворе хлорида натрия); анодное растворение никелевой проволоки (хроноамперометрия в растворе хлорида натрия); фрактализация графитового электрода (циклическая вольтамперометрия в присутствии ионов металлов). В работе применены классический PCA, темпоральный PCA с транспонированием матрицы, БПФ абсолютных счетов, LEAVE-ONE-OUT, пермутационный тест, PLS-T' анализ и фрактальный анализ степенного распределения амплитуд.

Вывод. Сочетание перечисленных алгоритмов позволяет получать информативную картину динамики электрохимических систем, выявлять стадийность процессов и их качественные перестройки, а также оценивать устойчивость и неслучайность наблюдаемых структур. Разработанный комплекс может найти применение для автоматической классификации, мониторинга и прогнозирования состояния сложных объектов в реальном времени в задачах химической технологии, контроля качества и экологического мониторинга.