15

„Умный нос“ на основе МЭМС NiO-датчика с нейросетевой классификацией паров органических веществ

© А.С. Кондратьева,[1,2] И.А. Лаздин,[2] И.А. Голтаев,[2] К.П. Карасев,[1,2] Д.А. Стрижкин,[2] Я.Б. Эннс,[1,2] А.Н. Казакин,[2] И.М. Комаревцев,[2] П.А. Карасев[2]

Алферовский университет,
Санкт-Петербург, Россия
Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,
Санкт-Петербург, Россия
e-mail: bitbooks8@gmail.com

Поступило в Редакцию 31 марта 2026 г.
В окончательной редакции 21 июня 2026 г.
Принято к публикации 30 июня 2026 г.

Представлен „умный нос“ на основе резистивного газового датчика из оксида никеля, реализованного с использованием технологий микроэлектромеханических систем (МЭМС). Описаны технология изготовления МЭМС-структуры и формирование чувствительного слоя NiO с нанокластерами золота, архитектура нейронной сети и параметры обучения. Приведены расчеты энергопотребления устройства в непрерывном и импульсном режимах работы. Обсуждаются возможные области применения устройства в медицинской диагностике, пищевой промышленности, промышленной безопасности и системах IoT-мониторинга качества воздуха. Для распознавания паров органических веществ (воды, этанола, ацетона и изопропанола) используется классифицирующая сверточная нейронная сеть, обученная на временных откликах сопротивления при диффузионной подаче целевых газов. Подход с использованием нейронной сети позволил добиться точности распознавания аналитов 96 %.

Ключевые слова:

DOI: 10.61011/JTF.2027.01.64199.76-26

Введение

Развитие компактных и портативных систем анализа летучих органических соединений (ЛОС) для мониторинга окружающей среды, промышленной безопасности и персонализированной медицинской диагностики требует энергоэффективных устройств регистрации и универсальных систем сбора и обработки данных. В качестве таких детекторов подходят металлоксидные резистивные сенсоры, которые сохраняют высокую привлекательность благодаря простоте и малой стоимости изготовления, совместимости с кремниевыми технологиями и высокой чувствительности к широкому спектру газов [1,2]. Существенным ограничением остается недостаточная селективность одиночных чувствительных элементов, особенно при анализе сложных газовых смесей в условиях переменной влажности. В качестве решения в таких системах предлагается использовать массивы из нескольких металлоксидных сенсоров. Данный подход приводит к увеличению стоимости и габаритов конечного изделия, что делает задачу создания универсальной системы сбора и обработки данных еще актуальнее. В качестве решения предлагается использовать автоматический сбор данных в комбинации с методами машинного и глубокого обучения. Это приводит к развитию области приборов, имитирующих обоняние человека. В области искусственного обоняния за последние 20 лет были намечены основные ориентиры в создании электронного носа. При этом для достижения чувствительности, сопоставимой с возможностями обонятельной системы человека, требуемый предел обнаружения данных систем должен находиться на уровне миллиардных долей (ppb). Современные системы электронного носа включают в себя не только массив газовых датчиков, но и механизм управления потоком газа, микропроцессор для анализа данных и специализированные алгоритмы для распознавания и классификации запахов. После работы всех систем электронного носа создается характерный „отпечаток запаха“, по которому в дальнейшем удается различать данный запах на фоне других или даже разделять их характерный набор в смеси. Для детектирования в качестве чувствительных элементов часто выступают газовые датчики на основе микроэлектромеханических систем (МЭМС) с активным полупроводниковым слоем на поверхности. Наиболее часто используются металлоксидные полупроводники *n*-типа, так как они представлены большим числом соединений [3]. При этом полупроводники *p*-типа показывают схожую возможность детектирования как восстановительных газов (H_2S, CO и т.д.), так и газов, проявляющих двойственные свойства, но изучены в меньшей степени [4–6]. Среди полупроводников *p*-типа выделяют оксид никеля (NiO) заего отличную химическую стойкость и высокую стабильность [7]. Активный слой на основе NiO оказывается пригодным для детекции спиртов и кетонов в газовой фазе при рабочих температурах около 200 °C–400 °C и

хорошую технологическую совместимость с тонкопленочными МЭМС-структурами [2,8,9]. Интеграция металлоксидного МЭМС-сенсора с алгоритмами глубокого обучения может позволить реализовать системы типа „умный нос“ даже наединичном сесноре [10–13].

В настоящей работе описан программно-аппаратный комплекс „умный нос“, аппаратная часть которого основана на резистивном МЭМС-датчике на основе NiO, а программная часть представляет собой обученную на различных аналитах (пары воды, этанола, ацетона и изопропанола) сверточную нейронную сеть (CNN). Рассмотрены конструкция и технология изготовления МЭМС-структуры, особенности формирования и анализа чувствительного слоя Au–NiO, архитектура и обучение классифицирующей нейронной сети, а также выполнены расчеты энергопотребления устройства для различных режимов работы. В отличие от ранее предложенных NiO-сенсоров ЛОС [8,9], выполненных преимущественно в виде толстопленочных структур, в настоящей работе реализован мембранный МЭМС-датчик с интегрированным Ni-нагревателем и модифицированным Au–NiO чувствительным слоем. В отличие от работ [11–13], использующих массивы сенсоров и/или принудительный поток газа, в предлагаемой системе: (i) используется одиночный МЭМС-элемент с диффузионной подачей газа, (ii) применяется компактная CNN-сеть (или MLP), пригодная для работы на микроконтроллере, и (iii) по сравнению с аналогами существенно снижено энергопотребление в непрерывном и импульсном режимах работы.

1. Конструкция и изготовление МЭМС

Газочувствительный элемент устройства представляет собой мембранный чип, включающий кремниевую подложку, диэлектрический слой SiO_2/Si_3N_4, интегрированный микронагреватель, контактные электроды и поверхностный чувствительный слой NiO, созданный с внедрением нанокластеров золота. Все перечисленные элементы реализуемы в рамках стандартной технологии микросистемной техники [1].

Технологический процесс изготовления МЭМС-чипа включает формирование диэлектрического слоя на кремниевой подложке, нанесение Ni-микронагревателя в форме меандра, формирование встречно-штыревых контактов (Cr/Ni/Au), вытравливание мембраны со стороны подложки, формирование золотых нанокластеров и нанесение чувствительного слоя NiO [1].

Для формирования золотых нанокластеров методом терморезистивного осаждения был нанесен слой золота толщиной 2.5 нм, который затем был облучен на имплантере ионами PF_4 с энергией 0.65 keV и флюенсом $\Phi = 4 \times 10^{13}$ см$^{-2}$. Как показано в [14], при таком облучении слой золота сворачивается в ансамбль округлых нанокластеров.

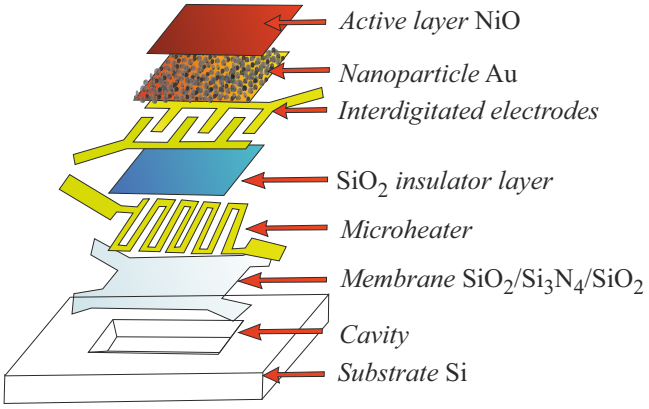


Рис. 1. МЭМС-чип с микронагревателем, контактными электродами и NiO-слоем (принципиальная схема).

Чувствительный слой NiO формируется поверх слоя золотых нанокластеров в виде тонкой пленки с развитой поверхностью толщиной порядка $d \approx 40-50$ nm методом реактивного магнетронного распыления Ni в атмосфере Ar/O_2 с последующим отжигом при 350 °C в течение 1 h [2,8,9]. Более подробно технологический процесс изготовления датчика описан в работе [15]. Параллельно с созданием активного слоя на чувствительном элементе проводилось осаждение оксида никеля на тестовую подложку оксида кремния. Поверх этого слоя был сформирован слой золотых нанокластеров по той же технологии, что и на активном слое датчика. Для фиксации нанокластеров они были дополнительно покрыты тонким (~ 10 nm) слоем оксида никеля. В результате формировался слой Au–NiO для изучения морфологии и структуры, идентичный по режимам получения активному слою датчика.

Размер активной мембраны $\approx 200 \times 200\,\mu$m^2, толщина мембраны $(Si_3)N_4)/SiO_2 \approx 1.5\,\mu$m, сопротивление нагревательного элемента при 25 °C и 250 °C соответственно составило $R_{H,25} \approx 180\,\Omega$, $R_{H,250} \approx 440\,\Omega$.

2. Методы исследования

В настоящей работе методом просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ) были установлены размеры нанокластеров золота, а также охарактеризована кристаллическая структура используемого слоя оксида никеля. Исследование газочувствительных свойств сенсора проводилось путем введения паров аналита в измерительную камеру с размещенным в ней чувствительным элементом. В настоящей работе измерялось изменение электрического сопротивления чувствительного слоя датчиков (отклик) при введении различных ЛОС. Регистрируемые временные кривые отклика использовались в качестве входных признаков для сверточной нейронной сети, обученной распознавать наличие или отсутствие аналита.

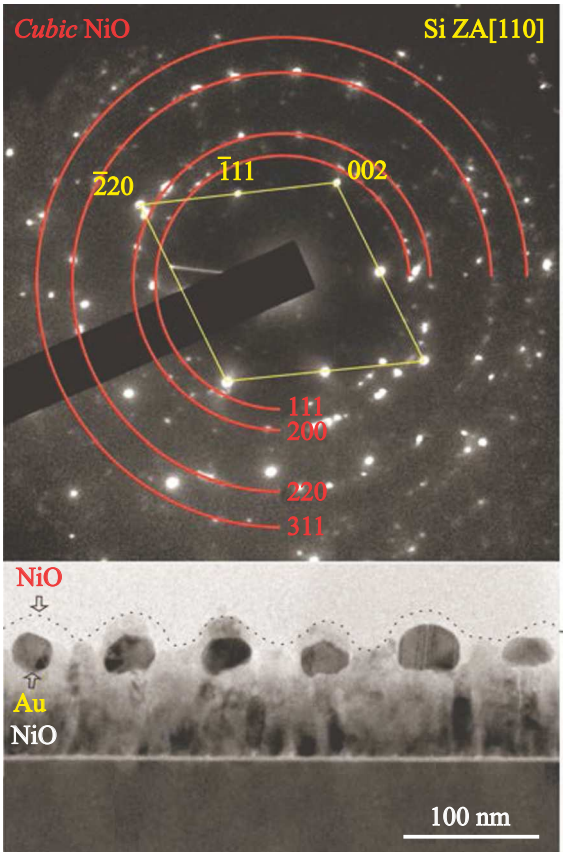


Рис. 2. ПЭМ-изображение Au–NiO (нанокластеров Au в матрице NiO); *a* — картина микродифракции; *b* — поперечный срез Au–NiO.

2.1. Морфология и структура Au–NiO

Структура и морфология слоя Au–NiO исследовались методом ПЭМ при ускоряющем напряжении 200 kV. На рис. 2 представлены картины микродифракции и поперечного среза активной области.

На картине микродифракции (рис. 2, *a*) отчетливо видны рефлексы от кристаллографических плоскостей (111), (200), (220) кубического NiO ($Fm\bar{3}m$), что свидетельствует о поликристаллической структуре получаемых пленок. Рефлексы от золотых нанокластеров совпадают с рефлексами кристаллографических плоскостей (111) и (200) NiO, и оттого их не удается выделить на картине микродифракции.

Средний размер кристаллитов NiO оказался $D_{\mathrm{NiO}} \approx 20$–$30$ nm, средний размер частиц золота $D_{\mathrm{Au}} \approx (30 \pm 10)$ nm. Слой оксида никеля при этом имеет блочную структуру (рис. 2, *b*); нижний блок, находящийся в контакте с подложкой, представляет собой тонкую пленку оксида никеля (40–60 nm), поверх нее формируется второй блок, состоящий из нанокластеров золота [8,9,16]. Таким образом, материал активного слоя, нанесенный поверх нанокластеров золота, будет демонстрировать развитую поверхность. Это должно повысить эффективность детектирования летучих органических соединений, за счет увеличения площади поверхности взаимодействия.

2.2. Экспериментальная установка и протокол измерений

Эксперименты проводились в измерительной камере фиксированного объема, внутри которой размещался газовый датчик в корпусе. Конструкция камеры позволяла обеспечивать независимую подачу аналитов. Устройство работало в диффузионном режиме согласно ГОСТ IEC 60079-29-1: газ поступает к датчику из объема камеры за счет молекулярной диффузии без формирования направленного потока [1,8].

Концентрации паров аналитов (воды, этанола, ацетона и изопропанола) задавались при помощи контроля температуры источника вещества в жидкой форме (20 °C). Перед началом записи отклика пауза не выдерживалась — исследовалась динамика отклика. Между записями откликов выдерживалась пауза до установления исходных значений проводимости системы (300 s). Температура и относительная влажность воздуха, в котором происходила диффузия паров аналита, измерялись одновременно с основными кривыми изменения сопротивления активного слоя при помощи датчиков T/RH. Во время измерений температура окружающей среды составляла (20 ± 2) °C, а влажность варьировалась в диапазоне 20 %–80 % RH.

2.2.1. Режимы работы сенсора и регистрация изменения сопротивления активного слоя

Рабочая температура чувствительного слоя поддерживалась на уровне $T = (250 \pm 2)$ °C путем подачи постоянного напряжения $U_{\mathrm{H}} = 7$ V на интегрированный Ni-нагреватель ($R_{\mathrm{H}} \approx 440\,\Omega$, потребляемая мощность $P_{\mathrm{H}} \approx 111$ mW).

Отклик сенсора регистрировался как временная зависимость сопротивления $R(t)$ в циклическом режиме:

1) стабилизация в воздухе до достижения стационарного сопротивления R_{air};

2) диффузионное введение анализируемого газа до концентрации C;

3) запись отклика $R(t)$ в течение $t_{\mathrm{meas}} \approx 100$ s;

4) естественное удаление газа из измерительной камеры и восстановление базового сопротивления.

Для оценки повторяемости откликов и разброса параметров для каждого газа и уровня концентрации было выполнено не менее $N_{\mathrm{cycles}} = 110$ циклов измерений.

2.2.2. Расчет и анализ энергопотребления сенсора

Для оптимизации времени автономной работы системы были проведены оценки энергопотребления сенсора

Таблица 1. Параметры энергопотребления и время автономной работы сенсора в различных режимах

Режим работы	P_{H}, mW	P_{tot}, m	E_{day}, W·h	Время работы, day
Непрерывный	111.0	119.0	2.86	2.1
Импульсный (10 %)	11.1	19.1	0.46	13.2

в двух режимах: непрерывном и импульсном (с широтно-импульсной модуляцией, коэффициент заполнения 10 %, период $T_{\mathrm{cycle}} = 60\,\mathrm{s}$, время нагрева $t_{\mathrm{on}} = 6\,\mathrm{s}$).

При расчетах принималось, что суммарное энергопотребление складывается из мощности микронагревателя (P_{H}) и постоянного потребления измерительной схемы вместе с микроконтроллером ($P_{\mathrm{MCU}} \approx 8\,\mathrm{mW}$ [11]). Расчет времени автономной работы выполнен для Li-ion батареи емкостью 650 mA·h ($U = 9\,\mathrm{V}$, запас энергии $E_{bat} \approx 6.05\,\mathrm{W{\cdot}h}$). Сводные данные расчетов приведены в табл. 1.

Переход к импульсному режиму работы (ШИМ) позволяет снизить суточное энергопотребление сенсорного элемента примерно в 6 раз и увеличить времяего автономной работы с нескольких суток до двух недель, что является критически важным для реализации распределенных беспроводных сетей газового мониторинга.

3. Газочувствительность и динамика отклика

Отклики, получаемые при помощи МЭМС-датчика, входящего в представленную в работе систему „умный нос“, представлены на рис. 3.

На графиках можно выделить три участка: первый участок соответствует введению аналита в область детектора посредством диффузионной подачиего паров. Взаимодействие газа с поверхностью активного слоя приводит к изменению сопротивления слоя вследствие передачи или обмена зарядом между адсорбированной молекулой газа и приповерхностной областью полупроводника. В рассматриваемом газовом сенсоре на основе оксида никеля, модифицированного нанокластерами золота, установление равновесия при воздействии газа обусловлено совокупностью процессов адсорбции молекул на активных центрах поверхности, последующего переноса заряда и обратной десорбции. Время достижения стационарного состояния обусловлено кинетикой хемосорбционных процессов и скоростью перераспределения заряда в обедненном слое полупроводника. Взаимодействие молекул газа-аналита происходит преимущественно на термодинамически выгодных активных центрах поверхности — в местах локализации нанокластеров золота и на границах раздела фаз Au/NiO [1]. Локальная адсорбция на активных центрах инициирует переход носителей заряда между локальными энергетическими состояниями адсорбированных частиц и энергетическими уровнями валентной зоны оксида никеля, а последующее установление равновесия между актами адсорбции и десорбции на протяжении всего цикла измерения определяет кинетику формирования измерительного отклика. На участке нарастания сигнала определяется время отклика $t_{90}^{\uparrow}$, которое обусловлено вышеописанными процессами. Время отклика $t_{90}^{\uparrow}$ определяется как время достижения 90 % от максимального изменения сопротивления при включении подачи газа.

Следующий участок соответствует насыщению: на данном этапе устанавливается стабильная концентрация газа в области детектирования датчика. Последний этап соответствует восстановлению датчика после прекращения подачи исследуемого аналита. Длительное восстановление исходного сопротивления слоя (релаксация) связано с тем, что десорбция аналита и обратный перенос заряда требуют преодоления более высокого энергетического барьера, требуемого для разрыва образующихся связей. При этом восстановление исходного состояния поверхности также лимитируется скоростью повторной хемосорбции кислорода воздуха на активных центрах.

Поэтому время восстановления $t_{90}^{\downarrow}$ определяется как время возврата к 90 % исходного уровня после выключения подачи газа. Аналогичные метрики используются в работах по NiO и другим MOX-сенсорам [2,9,16]. Для хеморезистивного сенсора, используемого в работе, получены значения параметров, приведенные в табл. 2. Из нее видно, что характерные времена отклика варьируются от 45 до 200 s, что может говорить о различной степени взаимодействия газа с находящейся на воздухе поверхностью. При этом для газов с преобладанием процесса хемосорбции (этанол, изопропанол, ацетон) время взаимодействия напрямую влияет на величину отклика. В случае времени восстановления для этанола, изопропанола и ацетона видно, что процесс восстановления поверхности занимает время, на порядок превышающее время взаимодействия с парами воды, что также может свидетельствовать о протекании процесса хемодесорбции для данных газов.

Сопротивление полупроводникового слоя NiO при рабочей температуре можно описать зависимостью:

$$R(T) = R_0 \exp\left(\frac{E_{\mathrm{a}}}{k_{\mathrm{B}}T}\right), \qquad (1)$$

где R_0 — предэкспоненциальный множитель, E_{a} — эффективная энергия активации ($\sim 0.2{-}0.4\,\mathrm{eV}$ для наноструктурированного NiO [2]), k_{B} — постоянная Больцмана, T — абсолютная температура. Для рассматриваемого слоя при $T = 250\,^{\circ}\mathrm{C}$ условно принимаем $E_{\mathrm{a}} \approx 0.3$ eV и $R(T) \approx 150{-}180\,\mathrm{k\Omega}$.

При экспонировании слоя в присутствии газа в условиях повышенной температурыего сопротивление меняется. Величина отклика сенсора на введение газа G

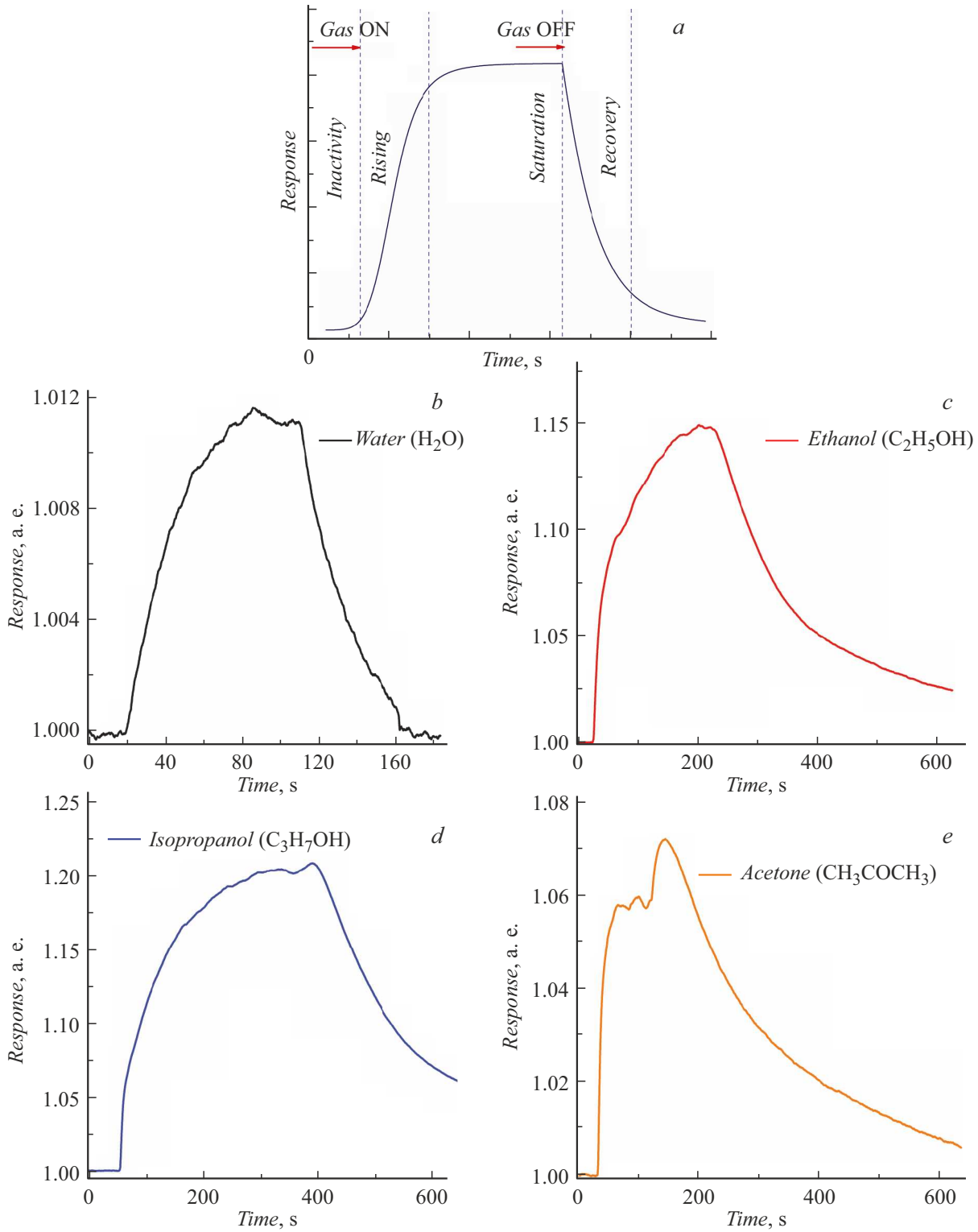


Рис. 3. Временные зависимости сопротивления при диффузионной подаче паров: общий вид кривой с указаниями основных процессов изменения сигнала (*a*), воды (*b*), этанола (*c*), ацетона (*d*) и изопропанола (*e*).

определяется как:

$$S_G = \frac{R_{gas}}{R_{air}}, \qquad (2)$$

где R_{air} — сопротивление в воздухе, R_{gas} — сопротивление при воздействии газа концентрацией C. Важно отметить, что для металлооксидных газовых датчиков характерен временной дрейф базовой линии при длительной работе. Данный эффект приводит к снижению точности распознавания летучих органических соединений (ЛОС), что накладывает существенные ограничения

Таблица 2. Параметры отклика датчика на различные газы

Параметр	Наименование газа			
	Вода	Этанол	Изопропанол	Ацетон
Измеряемая концентрация	30 %–80 % RH	8.5 %–8.7 %	6.6 %–6.7 %	3.3 %–3.4 %
Отклик датчика	0.012	0.15	0.21	0.06
Время отклика $t_{90}^{\uparrow}$	60 s	120 s	200 s	45 s
Время восстановления $t_{90}^{\downarrow}$	50 s	700 s	800 s	600 s

на практическое применение подобных систем [1]. Так, сопротивление чувствительного в воздухе (R_{air}) претерпевает изменение в ходе длительной эксплуатации. В нашей работе дрейф базовой линии составил $\sim 18\,\%$ за более чем 500 h непрерывной работы при $T = 250\,^{\circ}\mathrm{C}$. При этом изначальное сопротивление датчика уменьшилось с 180 до 150 kΩ ($T = 250\,^{\circ}\mathrm{C}$).

При малых концентрациях зависимость можно аппроксимировать линейной функцией:

$$S_G(C) \approx k_G C, \tag{3}$$

где k_G — коэффициент чувствительности [1,8,9].

4. Извлечение признаков для нейросетевой обработки

Для обучения нейронной сети использовались временные отклики $R(t)$, записанные для различных комбинаций газов, концентраций и количества циклов. В результате был сформирован датасет объемом $N_{\mathrm{tot}} = 440$ экспериментальных откликов, примерно по $N_{per\,gas} \approx 110$ образцов на каждый газ.

Датасет был разделен на обучающую, валидационную и тестовую подвыборки в пропорции 80 %/10 %/10 %, стратифицировано по типу газа и концентрации. Перед построением признаков временные ряды подвергались предобработке: вычитанию базовой линии, нормализации по R_{air} и, при необходимости, фильтрации высокочастотного шума.

Из каждого отклика вычислялся вектор признаков $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^{N_{feat}}$, включающий:

- максимальную чувствительность $S_{\max} = R_{\max}/R_{air}$;
- времена достижения 10 %, 50 % и 90 % от $S_{\max}$ (t_{10}, t_{50}, t_{90}) и соответствующие времена восстановления;
- интегральные характеристики:

$$A_{\mathrm{on}} = \int_0^{t_{\mathrm{on}}} S(t)\,dt, \quad A_{\mathrm{off}} = \int_{t_{\mathrm{off}}}^{t_{\mathrm{fin}}} S(t)\,dt;$$

- значения нормированного отклика $S(t_i)$ в фиксированные моменты времени.

4.1. Формирование матрицы признаков

В настоящей работе использовался вектор размерности $N_{feat} = 48$, что обеспечило баланс между информативностью признаков и сложностью модели. Временные ряды $R(t)$ каждого из сигналов (всего 10) преобразуются с помощью сверточной нейросети (CNN) в вектор признаков $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^{N_{feat}}$, где N_{feat} — фиксированная размерность на выходе. Подход с признаковым описанием и использованием динамики отклика согласуется с современными работами по ML-обработке газовых сигналов [10–13]. Общая схема формирования нейронной сети приведена на рис. 4.

На выходе сверточной нейросети для каждого сигнала была получена матрица признаков размером 48×64. После был добавлен Dropout-слой для стабилизации обучения и вслед за ним Flatten-слой для преобразования матрицы в вектор признаков размерностью $N_{feat} = 48 \times 64 = 3072$. Такой алгоритм применялся к каждому временному ряду; полученные векторы объединялись в один общий вектор размером $3072 \times 10 = 30\,720$, который затем подавался на вход классификатора. Итоговую схему можно записать в виде:

$$\left\{ R(t) \xrightarrow{\mathrm{CNN}} A_{48\times 64} \xrightarrow[flatten]{dropout} x_{3072} \right\}_{i=1}^{10}$$

$$\xrightarrow{concatenate} X_{30\,720} \xrightarrow{\mathrm{MLP}} GasType,$$

4.2. Архитектура нейронной сети

4.2.1. Сверточная нейросеть (CNN)

Для извлечения вектора признаков из каждой временной последовательности использовалась классическая CNN-архитектура, состоящая из последовательности слоев:

- Conv1d с ядром $k = 3$ и 16 фильтрами: $(200 \times 1) \to (198 \times 16)$;
- MaxPooling: $(198 \times 16) \to (99 \times 16)$;
- Conv1d с ядром $k = 3$ и 32 фильтрами: $(99 \times 16) \to (97 \times 32)$;
- MaxPooling: $(97 \times 32) \to (48 \times 32)$.

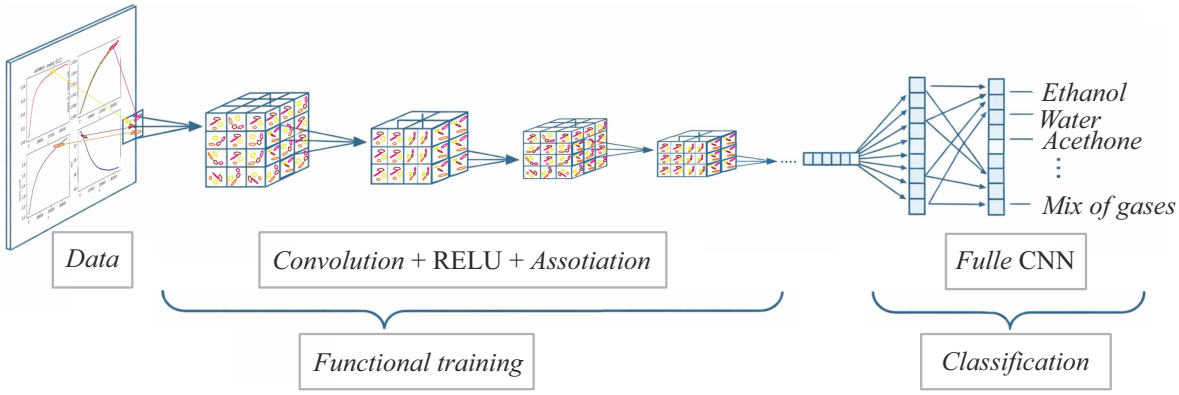


Рис. 4. Структурная схема MLP-сети, используемой в работе.

В результате получается карта признаков размером (48×32), которая затем преобразовывалась, как это было описано ранее.

4.2.2. MLP-классификатор

Классификатор был реализован в виде обычной полносвязной (FNN) нейронной сети, на вход которой подавался полученный из CNN общий вектор признаков. Пусть $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^{30\,720}$ — входной вектор. Структура сети:

$$\mathbf{h} = \varphi(W_1\mathbf{x} + \mathbf{b}_1), \tag{4}$$

$$\mathbf{z} = W_2\mathbf{h} + \mathbf{b}_2, \quad \mathbf{y} = \mathrm{softmax}(\mathbf{z}), \tag{5}$$

где $\varphi(\cdot)$ — активационная функция слоя (в нашем случае использовалась ReLU), $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^4$ — вектор вероятностей классов $\{H_2O$, EtOH, Acetone, i-PrOH$\}$. Аналогичные компактные MLP и CNN-архитектуры применялись для задач „умного носа“ и идентификации летучих органических соединений (VOC) [11–13].

Конфигурация слоев:

- входной слой: 30 720 признаков;
- скрытый слой: 128 нейронов (ReLU);
- Dropout-слой;
- выходной слой: 4 нейрона (softmax).

Число параметров полученной конфигурации нейронной сети составило $N_{param} = 3\,996\,164$.

4.3. Параметры обучения и качество классификации

Для повышения качества классификации были использованы методы регуляризации при обучении нейронной сети. Функция потерь — кросс-энтропия с L_2-регуляризацией:

$$\mathcal{L} = -\frac{1}{M}\sum_{m=1}^{M}\sum_{k=1}^{4} t_{m,k}\,\ln y_{m,k} + \lambda\sum_i \|W_i\|_2^2, \tag{6}$$

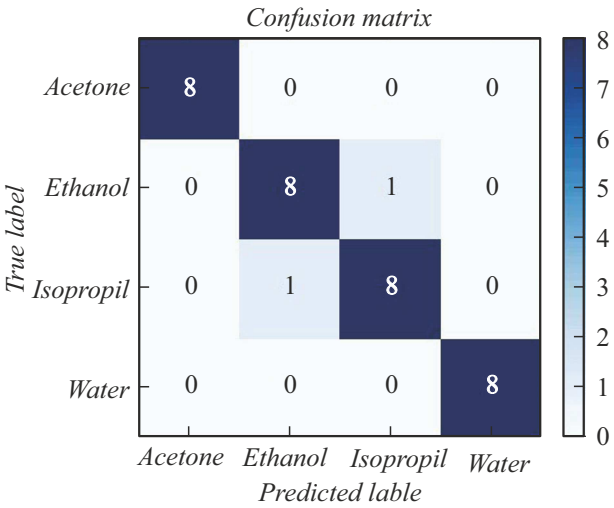


Рис. 5. Матрица ошибок для четырех классов газов.

где M — размер батча, $t_{m,k}$ — истинная метка (one-hot), $y_{m,k}$ — выход softmax, λ — коэффициент L_2-регуляризации. Такой выбор функции потерь и регуляризации является стандартным в задачах ML-классификации газовых откликов [10–13].

Используется оптимизатор Adam со скоростью обучения $\alpha_0 = 10^{-3}$, ступенчатым уменьшением α в 2 раза при отсутствии улучшения на валидации в течение 50 эпох, размером батча $B = 32$ и максимальным числом эпох 1000. Применяется ранняя остановка при отсутствии улучшения валидационных потерь в течение 100 эпох и L_2-регуляризация $\lambda = 10^{-4}$.

Обучающая выборка формируется из серий откликов сенсора при заданных концентрациях четырех газов и уровнях влажности с разделением на обучающую и валидационную подвыборки (80 % / 20%). Признаки стандартизируются (вычитание среднего и деление на стандартное отклонение по обучающей подвыборке), как это обычно делается в задачах „электронного носа“ [11,13].

Условные результаты:

• точность на обучающей выборке $\mathrm{Acc}_{train} \approx 99.0\,\%$;

• точность на тестовой выборке (рис. 5) $\mathrm{Acc}_{test} \approx 96.5\,\%$.

Также точность на тестовой выборке по классам приведена на рис. 5.

Заключение

В работе представлен „умный нос“ на основе резистивного МЭМС-датчика с чувствительным слоем на основе оксида никеля, модифицированного нанокластерами золота, а также нейросетевой классификатор паров воды, этанола, ацетона и изопропанола. На основании проведенного исследования можно сформулировать следующие выводы.

1. Разработана энергоэффективная мембранная МЭМС-структура с чувствительным слоем на основе нанокристаллического оксида никеля, модифицированного нанокластерами золота (Au–NiO). ПЭМ-исследования подтвердили формирование нанокомпозитной структуры с размером кристаллитов матрицы 20−30 nm и равномерным распределением каталитических центров допирующего метала.

2. Экспериментально установлена газочувствительность разработанных сенсоров при рабочей температуре 250 °C к парам этанола, ацетона и изопропанола. Показано, что датчики обладают воспроизводимым откликом, требуемым для портативных систем с быстродействием ($t_{90}^{\uparrow} \leq 200\,\mathrm{s}$), а также инвариантностью к изменению относительной влажности воздуха ($|S_{\mathrm{H_2O}}| \lesssim 0.012$).

3. На основе динамических признаков профиля проводимости $R(t)$ сформирован массив данных ($N_{\mathrm{tot}} = 440$), использованный для обучения полносвязной нейронной сети (MLP). Разработанный классификатор обеспечивает высокую точность распознавания целевых газов ($\mathrm{Acc}_{test} \approx 96.5\,\%$), что подтверждает применимость мультисенсорной системы в задачах мультикомпонентного качественного анализа.

4. Проведен сравнительный анализ энергопотребления макета устройства. Установлено, что оптимизация режима питания микронагревателя путем перехода от непрерывного к импульсному режиму работы (с коэффициентом заполнения 10 %) снижает среднюю потребляемую мощность со 119 mW до 19 mW. Это позволяет увеличить расчетное время автономной работы более чем в 6 раз.

Полученные результаты показывают, что сочетание наноструктурированного Au–NiO чувствительного слоя, мембранной МЭМС-архитектуры и компактного нейросетевого классификатора позволяет реализовать энергоэффективный „умный нос“ для распознавания паров органических веществ в диапазоне 10−50000 ppm. Показана применимость представленной сенсорной структуры для анализа выбранного набора летучих органических соединений (ацетон, этанол, изопропанол), начиная с концентрационного порога в 10 ppm. По совокупности характеристик (чувствительность, время отклика, точность классификации, энергопотребление) разрабатываемое устройство представляется перспективным для применения в системах мониторинга выдыхаемого воздуха и неинвазивной диагностики, в задачах контроля спиртов и растворителей в пищевой и химической промышленности, а также в автономных узлах IoT-сетей для мониторинга качества воздуха в помещениях.

В дальнейшем планируется расширить набор детектируемых компонентов за счет использования массива МЭМС-сенсоров с различными чувствительными слоями, исследовать регрессионные модели для количественного определения концентрации газов и провести метрологические испытания в соответствии с профильными ГОСТ-методиками для диффузионных газоанализаторов.

Благодарность

Исследования методом ПЭМ выполнены с использованием оборудования федерального ЦКП „Материаловедение и диагностика в передовых технологиях“, поддержанного Минобрнауки России.

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Список литературы

[1] E. Comini. Comprehensive Analytical Chem., **57**, 511 (2012).
[2] G. Korotcenkov. Mater. Sci. Eng., **139** (1), 1−23 (2007).
[3] S.Y. Jeong, J. Kim, J. Leeet. Advanced Materials. John Wiley Son., **32** (51), 2002075 (2020).
[4] A.V. Almaev, B.O. Kushnarev, E.V. Chernikov, V.A. Novikov. Tech. Phys. Lett., **46**, 1028 (2020). DOI: 10.1134/S106378502010017X
[5] A.V. Almaev, B.O. Kushnarev, E.V. Chernikov, V.A Novikov. HYPERLINK „https://colab.ws/researchers/R-36020-1502D-JK80Z“ P.M. Korusenko, HYPERLINK "https://colab.ws/researchers/R-382EB-0E6AD-SI14U"S.N. Nesov. Superlattices and Microstructures, **151**, 106835 (2021). DOI: 10.1016/j.spmi.2021.106835
[6] S.J. Park, S.M. Lee, M. Oh. Sustainable Food Technology. Royal Society Chem., **2**, 266 (2024).
[7] S. Srivastava, A.K. Gangwar, A. Kumar et al. Mater. Res. Bull., **165**, 266 (2023).
[8] S.G. Leonardi, G. Malgas, E. Comini et al. Sensors and Actuators B: Chemical, **124** (1), 142 (2007).
[9] S. Kumari, S. Chauhan, S. Negi et al. Phys. Status Solidi (a), **221** (24), 2400143 (2024).
[10] H. Song, Y. Wang, H. Wang. Sensor, **24** (6), 1863 (2024).
[11] M. Ziyatdinov, F. Perera, S. Marco. Sensors and Actuators B: Chemical, **130** (1), 234 (2008).
[12] Y. Zou, K. Shiba, H. Nakamoto et al. Light: Science & Applications, **12**, (2023).
[13] Y. Xu, X. Zhang, J. Chen et al. Micromachine, **15** (5), 891 (2024).

[14] М.С. Тужилкин, П.Г. Беспалова, М.В. Мишин, И.Е. Колесников, К.В. Карабешкин, П.А. Карасев, А.И. Титов. ФТП, **54** (1), 90 (2020).
[15] I. Komarevtsev, A. Kondrateva, A. Kazakin et al. Mater. Phys. Mechan., **44** (2), 157 (2024).
[16] A. Kondrateva, I. Komarevtsev, I. Lazdin, Y. Enns, A. Kazakin, E. Fedorenko, A. Shakhmin, V. Andreeva, M. Mishin, P. Karaseov. Micro and Nanostructures, **207**, 208318 (2025).