

ДОДАТОК А

Повний лістинг проекту

Файл «generic_synthetic_data.py»

```
import numpy as np
import pandas as pd
import matplotlib.pyplot as plt
from itertools import combinations
import os

num_points = 100
elements = ['Ацетат', 'Аскорбінова кислота', 'Глюкоза', 'Залізо', 'Лактат',
            'NaCl']
np.random.seed(42)
samples_per_class = 5000
samples_per_plot = 3
os.makedirs('Result', exist_ok=True)

def generate_voltamogram(name, num_points):
    x = np.linspace(0, 2 * np.pi, num_points)
    base_signal = {
        'Ацетат': np.sin(x) * np.cos(2 * x),
        'Аскорбінова кислота': np.cos(x) * np.sin(2 * x),
        'Глюкоза': np.sin(2 * x) * np.cos(x / 2),
        'Залізо': np.cos(2 * x) * np.sin(x / 2),
        'Лактат': np.sin(x / 2) * np.cos(x),
        'NaCl': np.cos(x / 2) * np.sin(x)
    }
    phase_shift = np.random.uniform(-np.pi, np.pi)
    amplitude_variation = np.random.uniform(0.8, 1.2)
    noise = np.random.normal(0, 0.8, num_points) + np.random.normal(0, 0.5,
num_points) * np.sin(x)
```

```

    y = amplitude_variation * (base_signal[name] * np.sin(x + phase_shift)) +
noise
    return y.astype(np.float32)
voltammograms = {element: generate_voltamogram(element, num_points) for
element in elements}
comb_2_elements = list(combinations(elements, 2))
comb_3_elements = list(combinations(elements, 3))
def combine_voltammograms(voltammograms, combination, num_samples):
    combined_samples = []
    for _ in range(num_samples):
        combined = np.sum([voltammograms[elem] for elem in combination],
axis=0)
        phase_shift = np.random.uniform(-np.pi, np.pi)
        amplitude_variation = np.random.uniform(0.8, 1.2)
        combined = amplitude_variation * (combined * np.sin(np.linspace(0, 2 *
np.pi, num_points) + phase_shift))
        combined += np.random.normal(0, 0.8, num_points) +
np.random.normal(0, 0.5, num_points) * np.sin(np.linspace(0, 2 * np.pi,
num_points)) # Комбінація шумів
        combined_samples.append(combined.astype(np.float32))
    return combined_samples
X = []
y = []
for element in elements:
    for _ in range(samples_per_class):
        X.append(voltammograms[element] + np.random.normal(0, 0.8,
num_points).astype(np.float32))
        y.append(element)
for comb in comb_2_elements:

```

```

combined_samples = combine_voltammograms(voltammograms, comb,
samples_per_class)
X.extend(combined_samples)
y.extend([f'{comb[0]} + {comb[1]}' for _ in range(samples_per_class)])
for comb in comb_3_elements:
    combined_samples = combine_voltammograms(voltammograms, comb,
samples_per_class)
    X.extend(combined_samples)
    y.extend([f'{comb[0]} + {comb[1]} + {comb[2]}' for _ in
range(samples_per_class)])
X = np.array(X)
y = np.array(y)
from sklearn.model_selection import train_test_split
X_train, X_test, y_train, y_test = train_test_split(X, y, test_size=0.3,
random_state=42)
train_data = pd.DataFrame(X_train, columns=[f'feature_{i}' for i in
range(num_points)])
train_data['label'] = y_train
test_data = pd.DataFrame(X_test, columns=[f'feature_{i}' for i in
range(num_points)])
test_data['label'] = y_test
train_data.to_csv('train_dataset.csv', index=False)
test_data.to_csv('test_dataset.csv', index=False)
print("Навчальний і тестовий датасети збережено у файли 'train_dataset.csv'
та 'test_dataset.csv'")
def save_plot(sample, title, filename):
    plt.figure(figsize=(10, 6))
    plt.plot(sample)
    plt.title(title)
    plt.xlabel('Точка')

```

```

plt.ylabel('Сигнал')
plt.savefig(filename)
plt.close()
for element in elements:
    samples = [voltammograms[element] + np.random.normal(0, 0.8,
num_points).astype(np.float32) for _ in range(samples_per_plot)]
    for i, sample in enumerate(samples):
        filename = f'Result/{element}_sample_{i+1}.png'
        save_plot(sample, f'{element} - 3разок {i+1}', filename)
for comb in comb_2_elements:
    samples = combine_voltamograms(voltammograms, comb, samples_per_plot)
    for i, sample in enumerate(samples):
        title = f'{comb[0]} + {comb[1]} - 3разок {i+1}'
        filename = f'Result/{comb[0]}_{comb[1]}_sample_{i+1}.png'
        save_plot(sample, title, filename)
for comb in comb_3_elements:
    samples = combine_voltamograms(voltammograms, comb, samples_per_plot)
    for i, sample in enumerate(samples):
        title = f'{comb[0]} + {comb[1]} + {comb[2]} - 3разок {i+1}'
        filename = f'Result/{comb[0]}_{comb[1]}_{comb[2]}_sample_{i+1}.png'
        save_plot(sample, title, filename)

```

Файл «Machine Learning.py»

```

import numpy as np
import pandas as pd
from sklearn.preprocessing import LabelEncoder
from sklearn.metrics import accuracy_score, classification_report
import tensorflow as tf
from tensorflow.keras.models import Sequential

```

```

from tensorflow.keras.layers import Dense, Dropout, BatchNormalization,
ReLU
from tensorflow.keras.optimizers import Adam
from tensorflow.keras.callbacks import EarlyStopping
from tensorflow.keras.regularizers import l2
train_data = pd.read_csv('train_dataset.csv')
test_data = pd.read_csv('test_dataset.csv')
X_train = train_data.drop('label', axis=1).values.astype(np.float32)
y_train = train_data['label'].values
X_test = test_data.drop('label', axis=1).values.astype(np.float32)
y_test = test_data['label'].values
label_encoder = LabelEncoder()
y_train_encoded = label_encoder.fit_transform(y_train)
y_test_encoded = label_encoder.transform(y_test)
model = Sequential([
    Dense(64, input_shape=(X_train.shape[1],), kernel_regularizer=l2(0.02)), #
Зменшення кількості нейронів та додання L2 регуляризації
    ReLU(),
    BatchNormalization(),
    Dropout(0.5), # Збільшення Dropout для більшої регуляризації
    Dense(32, kernel_regularizer=l2(0.02)), # Зменшення кількості нейронів
та додання L2 регуляризації
    ReLU(),
    BatchNormalization(),
    Dropout(0.5),
    Dense(len(np.unique(y_train_encoded)), activation='softmax')
])

model.compile(optimizer=Adam(learning_rate=0.04), # Зменшення
швидкості навчання для більш повільного навчання

```

```
        loss='sparse_categorical_crossentropy',
        metrics=['accuracy'])
early_stopping = EarlyStopping(monitor='val_loss', patience=20,
restore_best_weights=True)
history = model.fit(X_train, y_train_encoded, epochs=100, batch_size=256, #
Збільшення розміру батчу
                    validation_split=0.2, verbose=2, callbacks=[early_stopping])
test_loss, test_accuracy = model.evaluate(X_test, y_test_encoded, verbose=0)
print(f'Точність на тестовому наборі: {test_accuracy}')
y_pred_encoded = model.predict(X_test)
y_pred = label_encoder.inverse_transform(np.argmax(y_pred_encoded, axis=1))
print("Звіт про класифікацію:")
report = classification_report(y_test, y_pred, zero_division=1)
print(report)
import matplotlib.pyplot as plt
plt.figure(figsize=(12, 6))
plt.plot(history.history['accuracy'], label='Training Accuracy')
plt.plot(history.history['val_accuracy'], label='Validation Accuracy')
plt.xlabel('Epochs')
plt.ylabel('Accuracy')
plt.legend()
plt.title('Training and Validation Accuracy')
plt.savefig('Training and Validation Accuracy.png')
plt.figure(figsize=(12, 6))
plt.plot(history.history['loss'], label='Training Loss')
plt.plot(history.history['val_loss'], label='Validation Loss')
plt.xlabel('Epochs')
plt.ylabel('Loss')
plt.legend()
plt.title('Training and Validation Loss')
plt.savefig('Training and Validation Loss.png')
```

ДОДАТОК Б

Графічні зразки

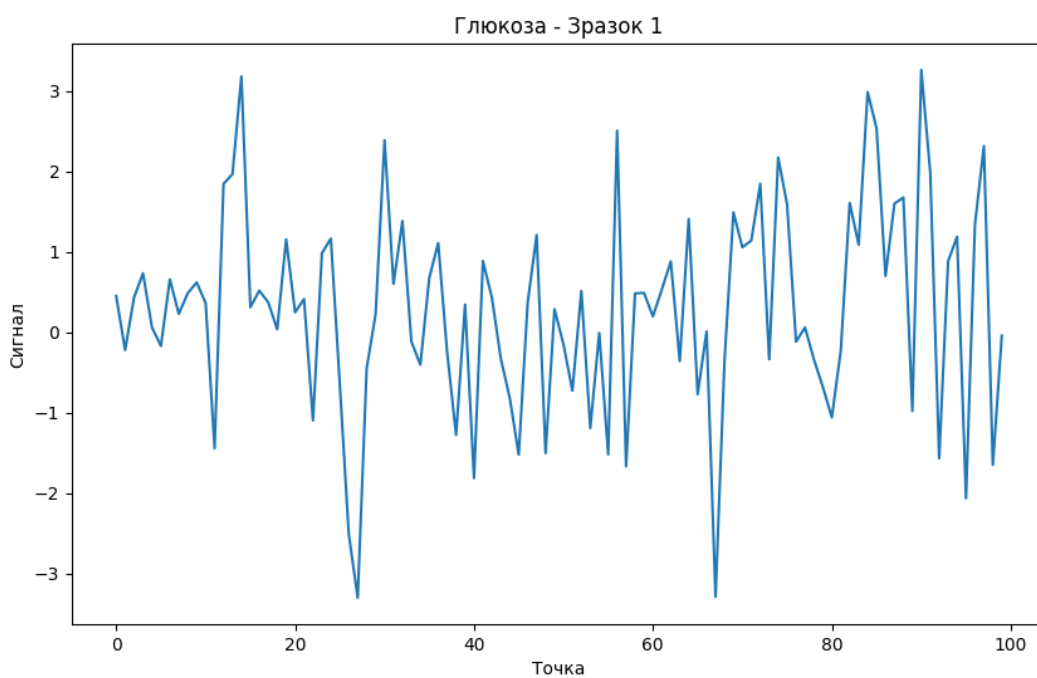


Рисунок Б.1 – Приклад зразка для аналізу «Глюкоза»

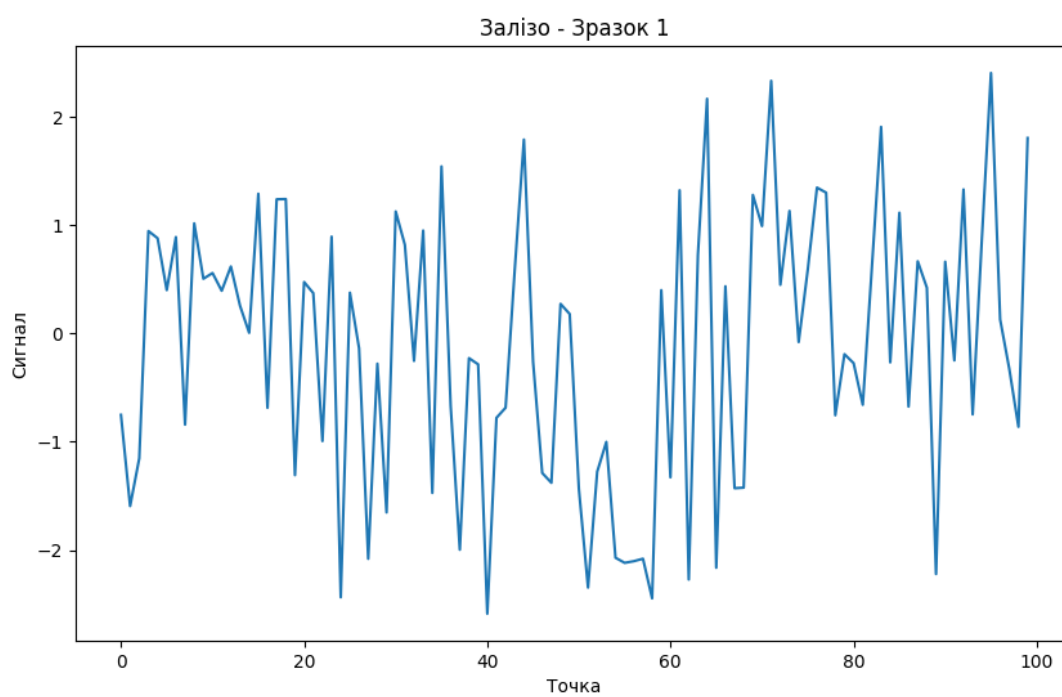


Рисунок Б.2 – Приклад зразка для аналізу «Залізо»

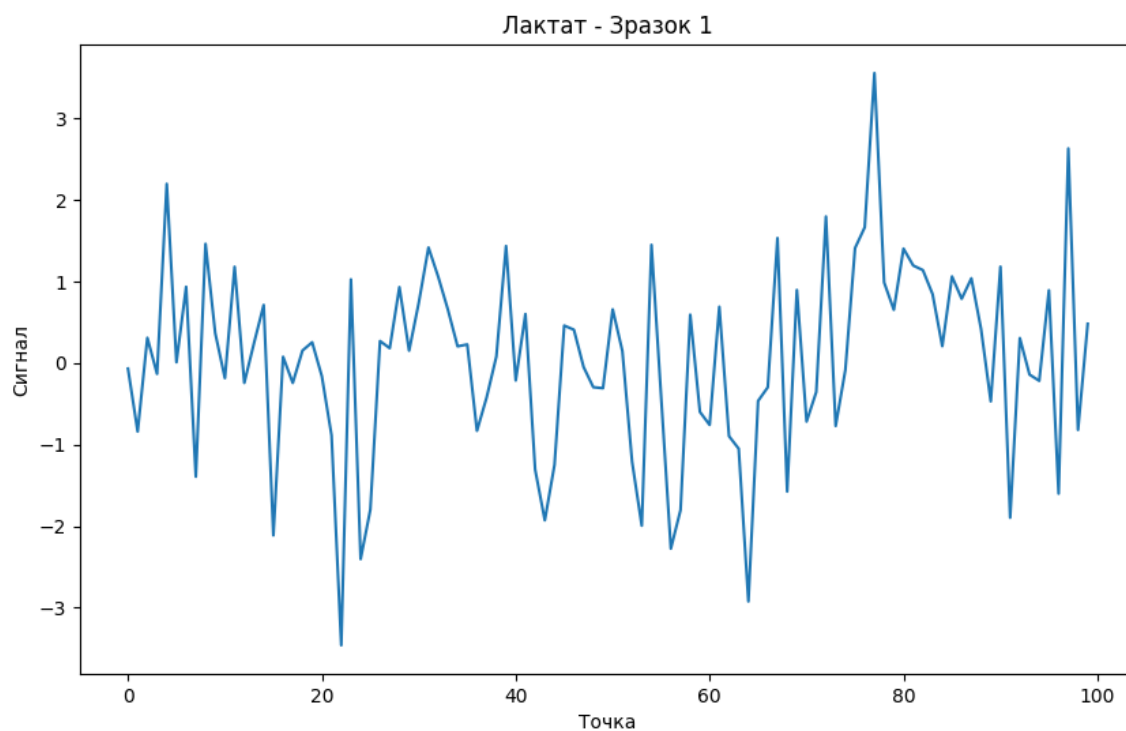


Рисунок Б.3 – Приклад зразка для аналізу «Лактат»

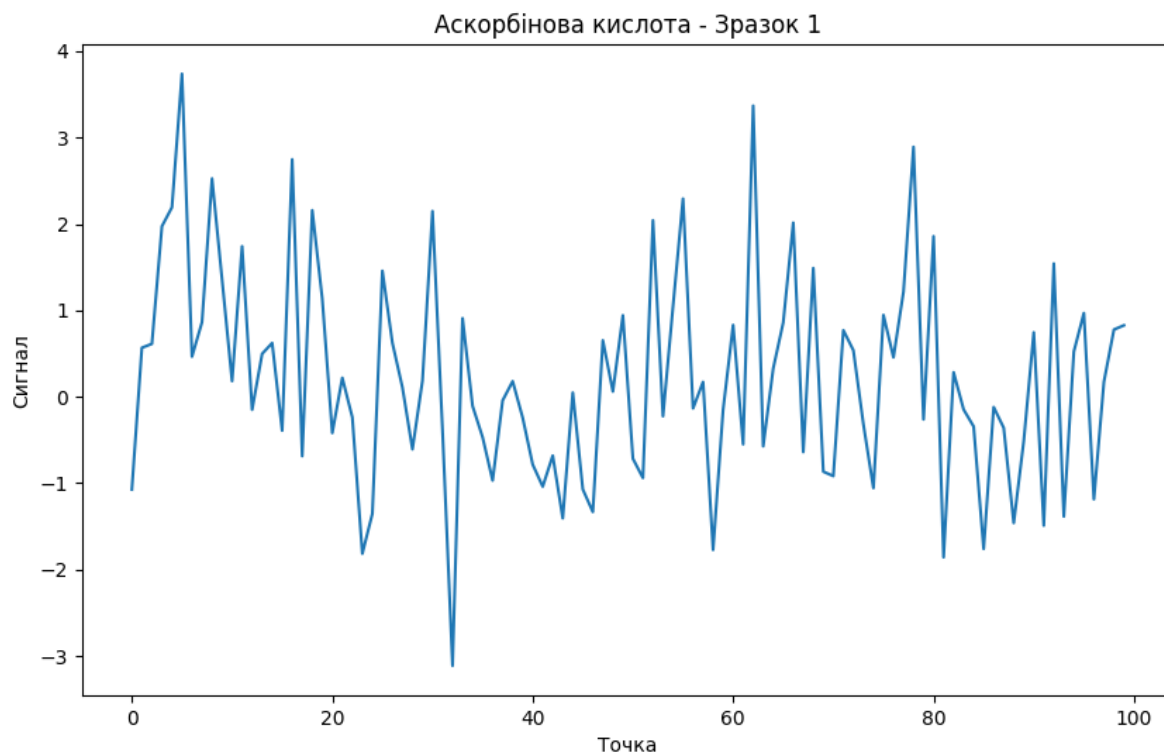


Рисунок Б.4 – Приклад зразка для аналізу «Аскорбінова кислота»

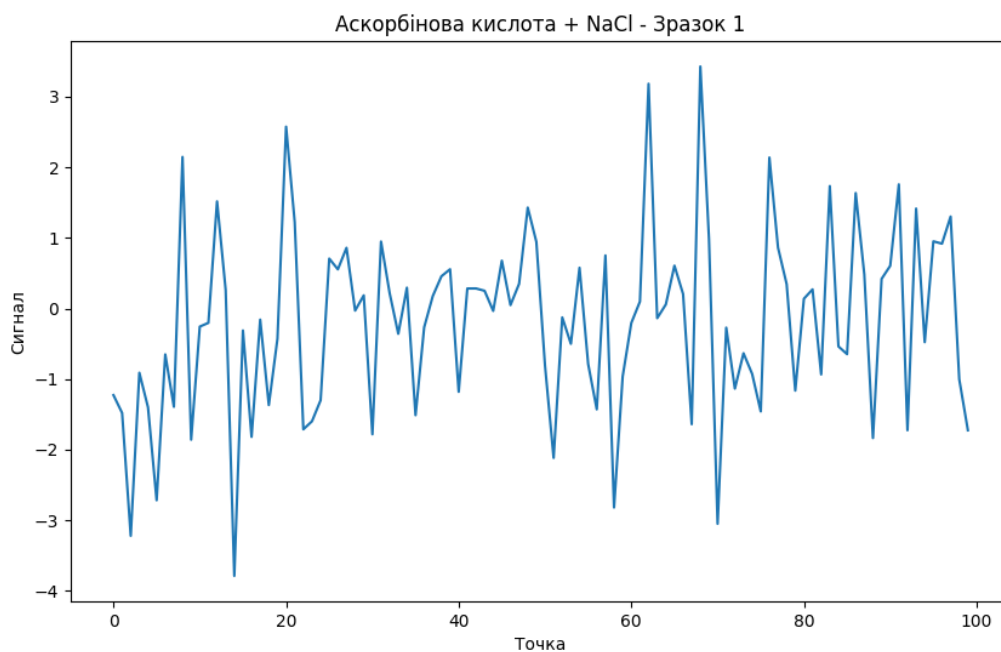


Рисунок Б.5 – Приклад зразка для комбінації аналітів «Аскорбінова кислота» та «NaCl»

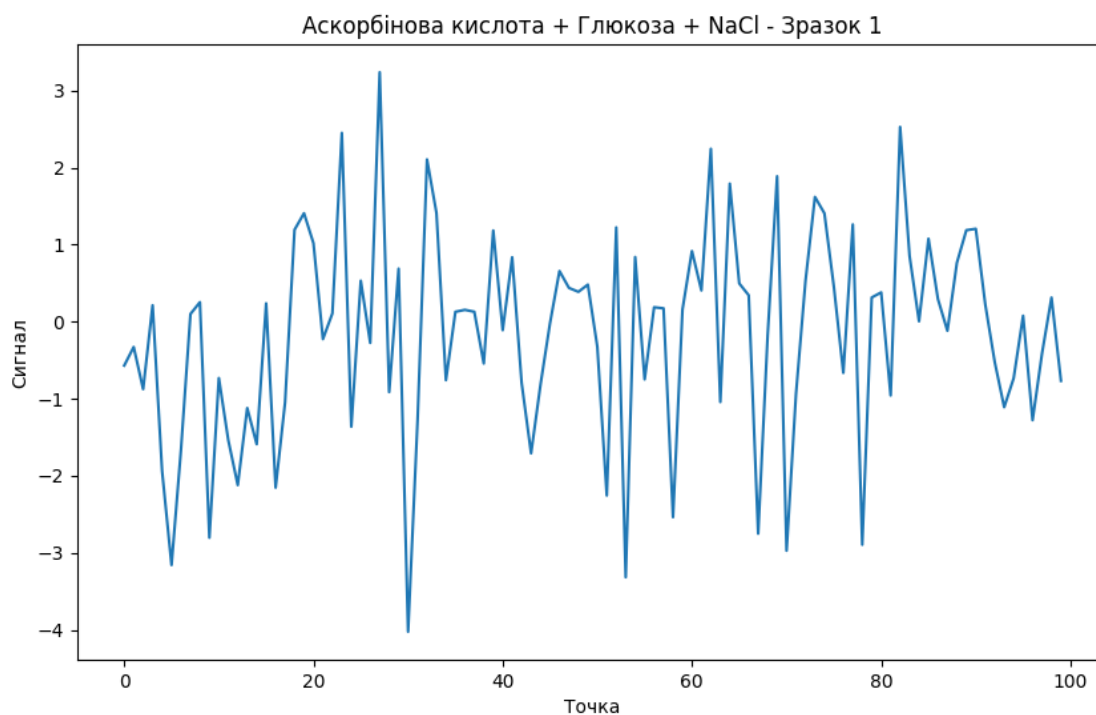


Рисунок Б.6 – Приклад зразка для комбінації аналітів «Аскорбінова кислота», «Глюкоза» та «NaCl»

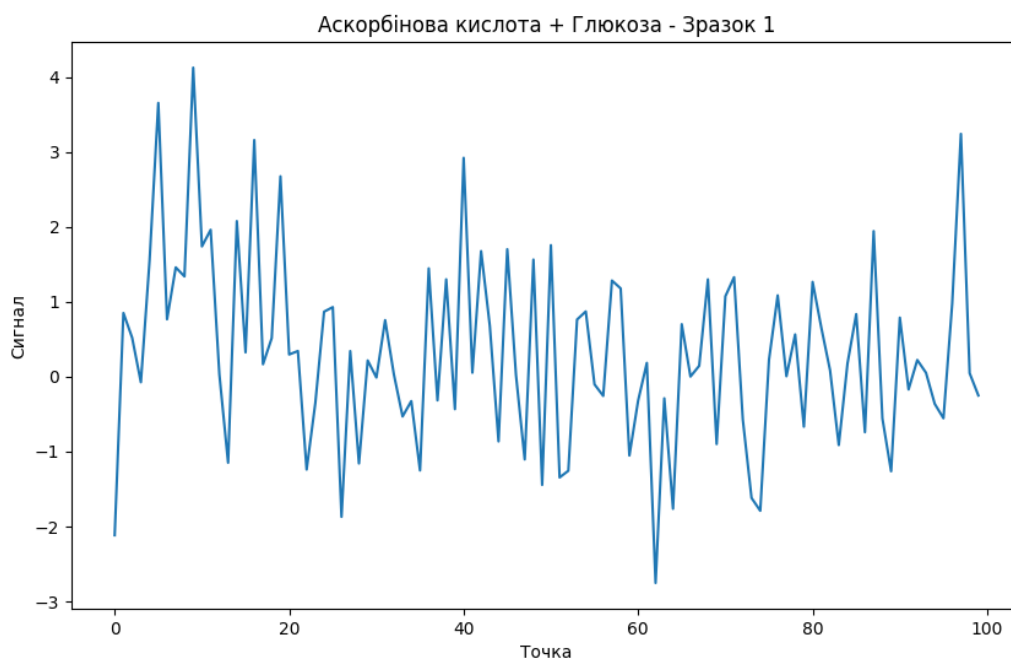


Рисунок Б.7 – Приклад зразка для комбінації аналітів «Аскорбінова кислота», «Глюкоза»

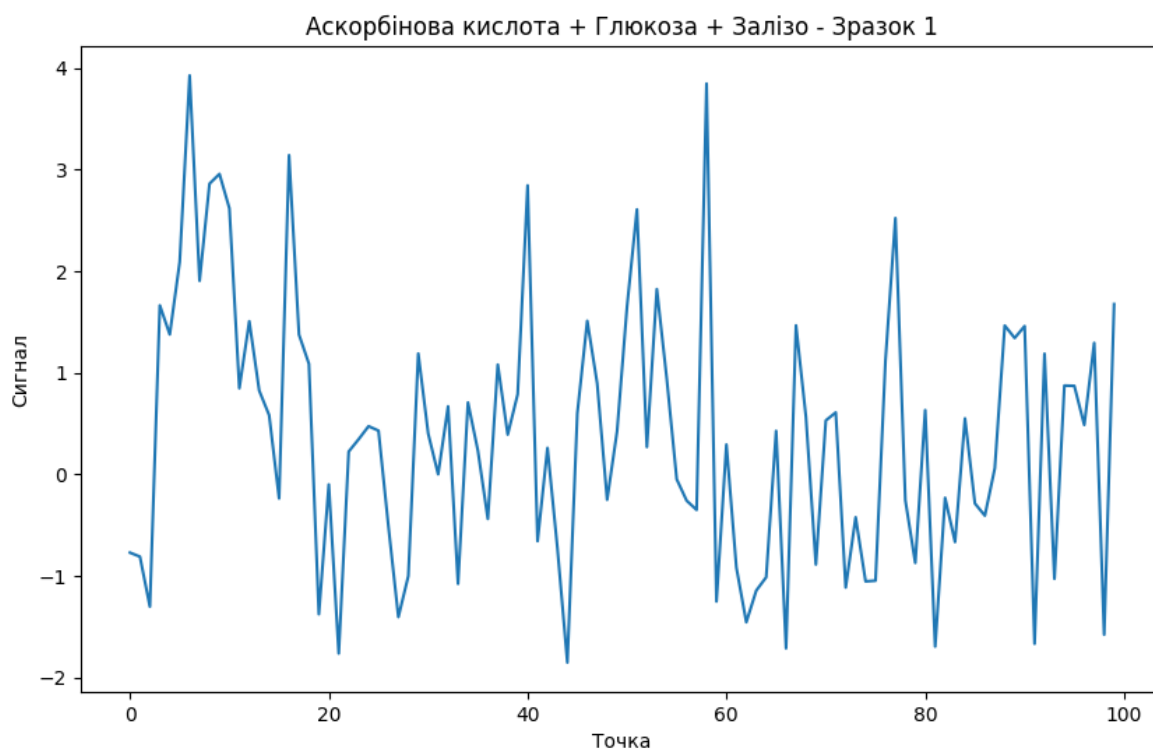


Рисунок Б.8 – Приклад зразка для комбінації аналітів «Аскорбінова кислота», «Глюкоза» та «Залізо»

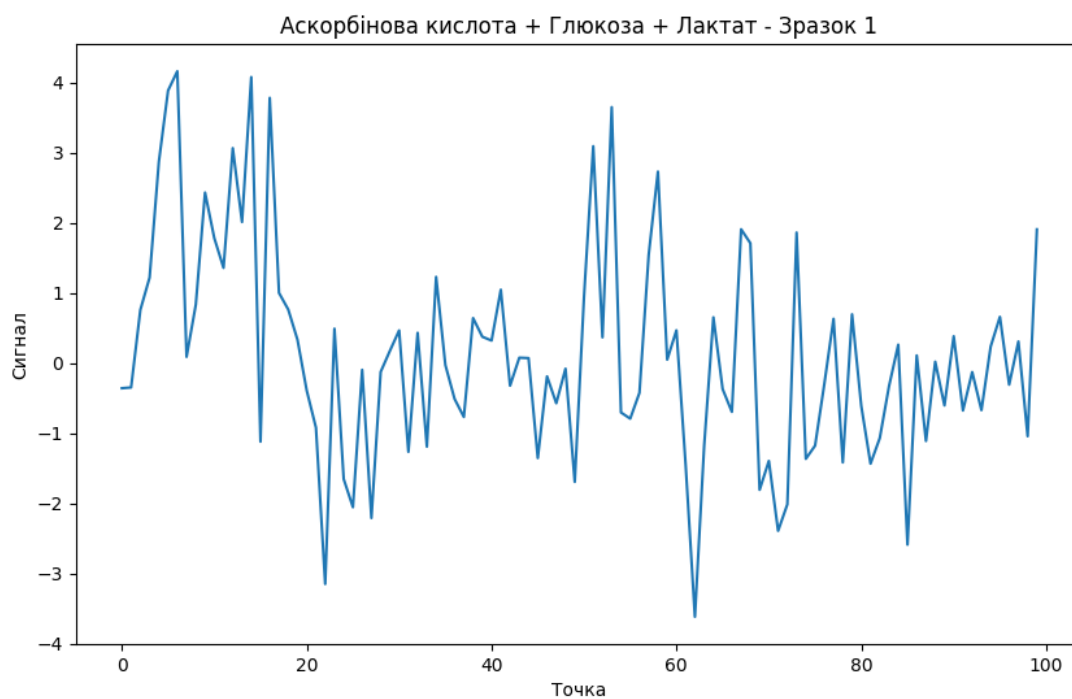


Рисунок Б.9 – Приклад зразка для комбінації аналітів «Аскорбінова кислота», «Глюкоза» та «Лактат»

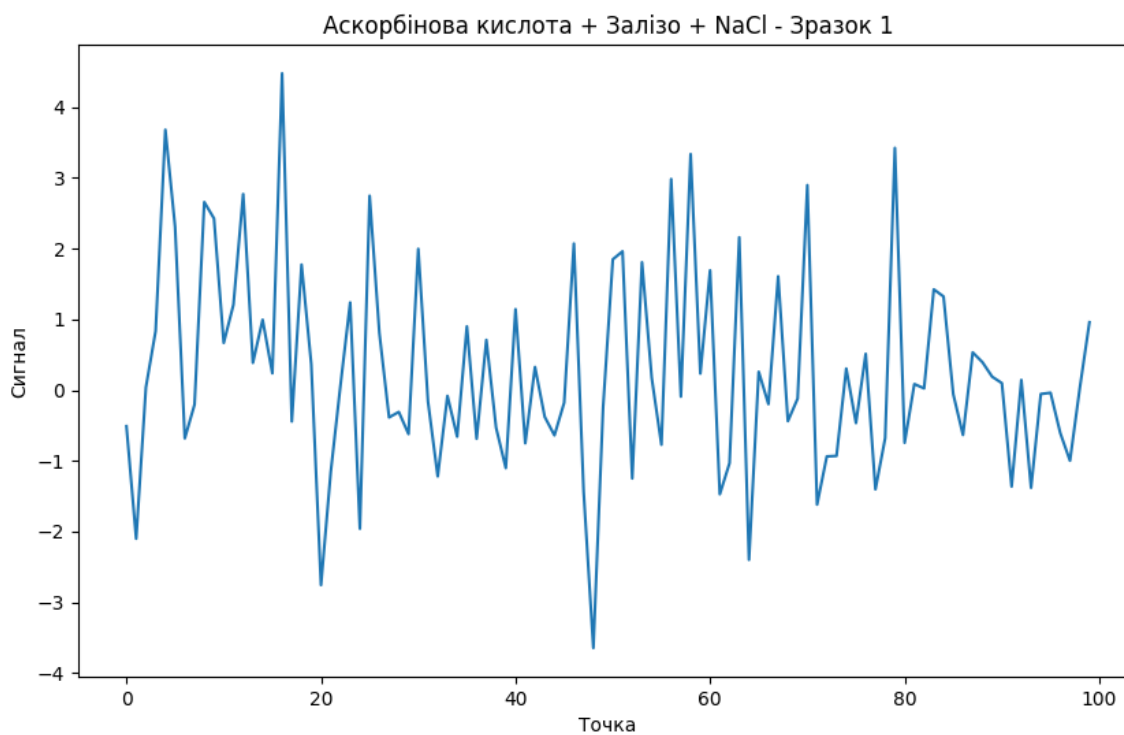


Рисунок Б.10 – Приклад зразка для комбінації аналітів «Аскорбінова кислота», «Залізо» та «NaCl»

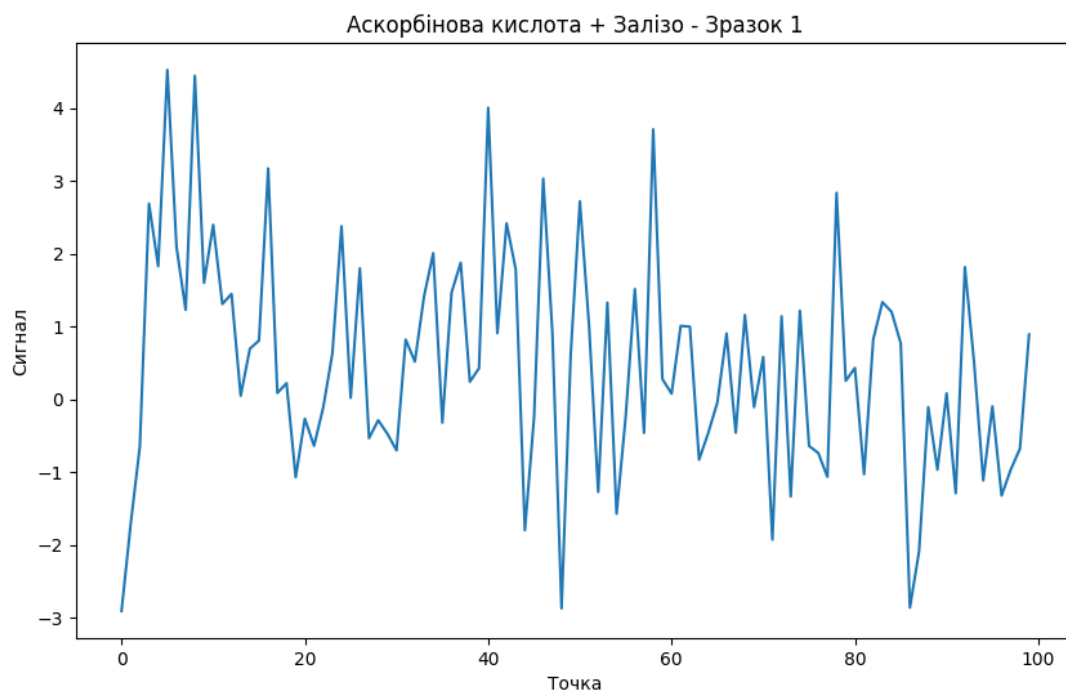


Рисунок Б.11 – Приклад зразка для комбінації аналітів «Аскорбінова кислота», «Залізо»

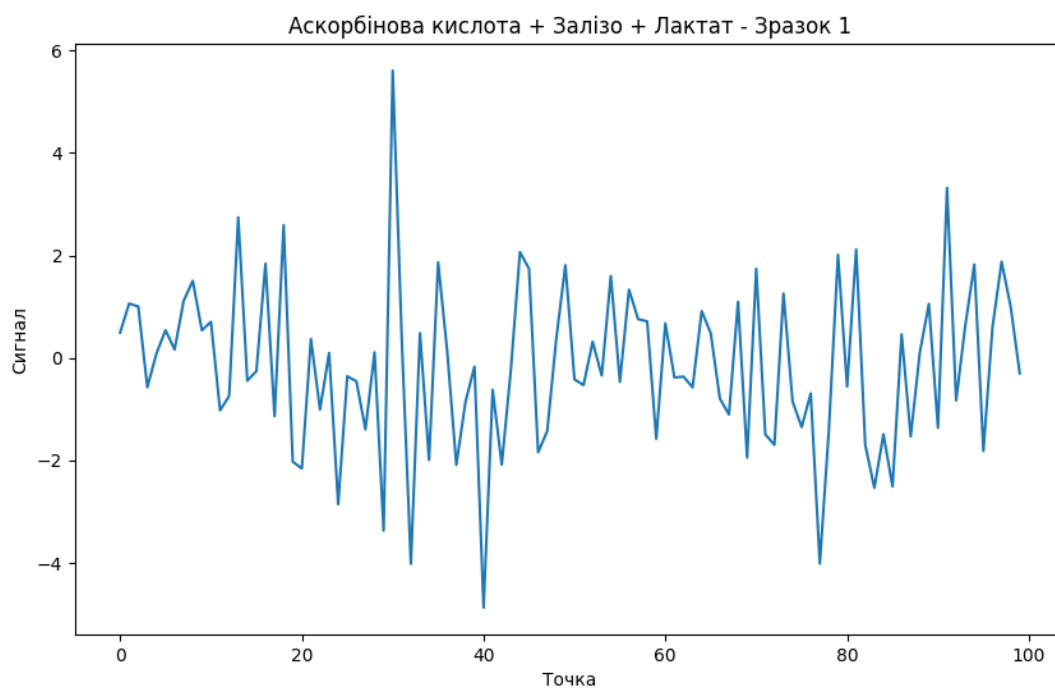


Рисунок Б.12 – Приклад зразка для комбінації аналітів «Аскорбінова кислота», «Залізо», «Лактат»

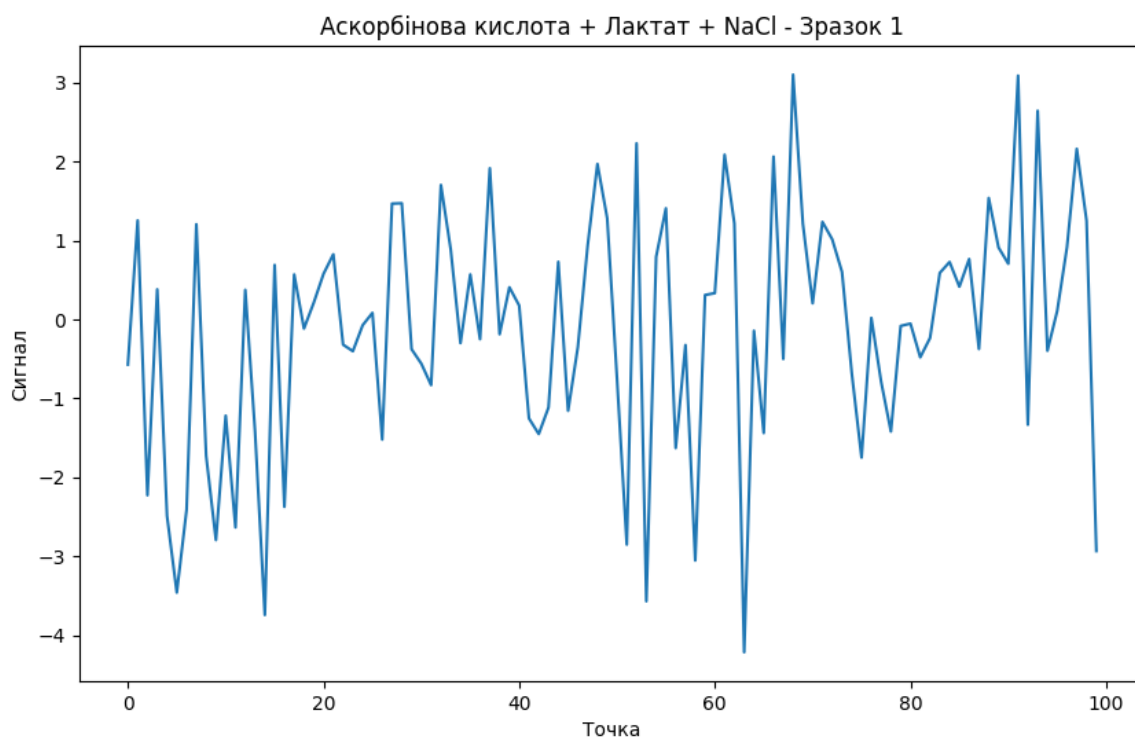


Рисунок Б.13 – Приклад зразка для комбінації аналітів «Аскорбінова кислота», «Лактат», «NaCl»

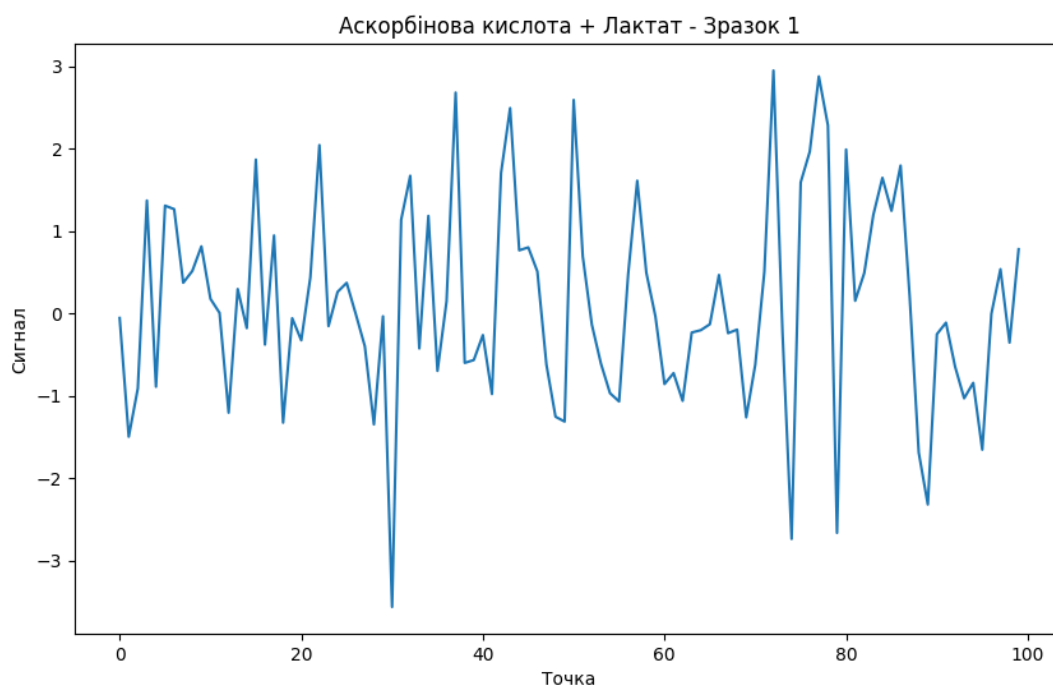


Рисунок Б.14 – Приклад зразка для комбінації аналітів «Аскорбінова кислота», «Лактат»

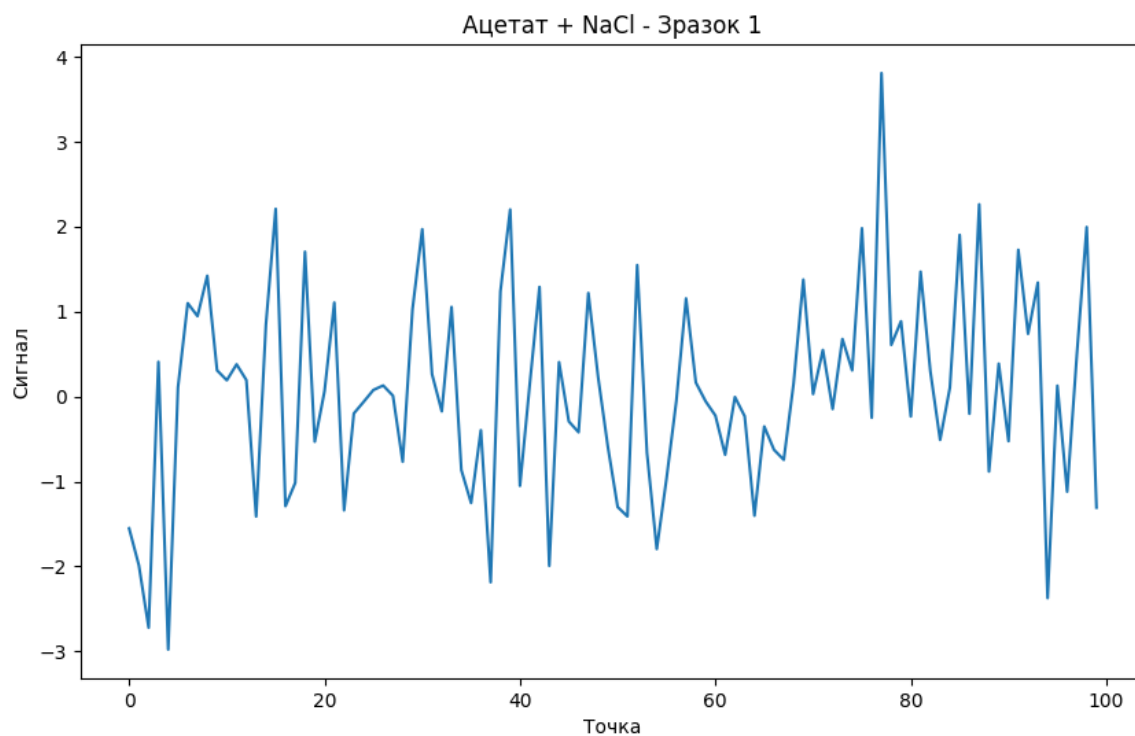


Рисунок Б.15 – Приклад зразка для комбінації аналітів «Ацетат», «NaCl»

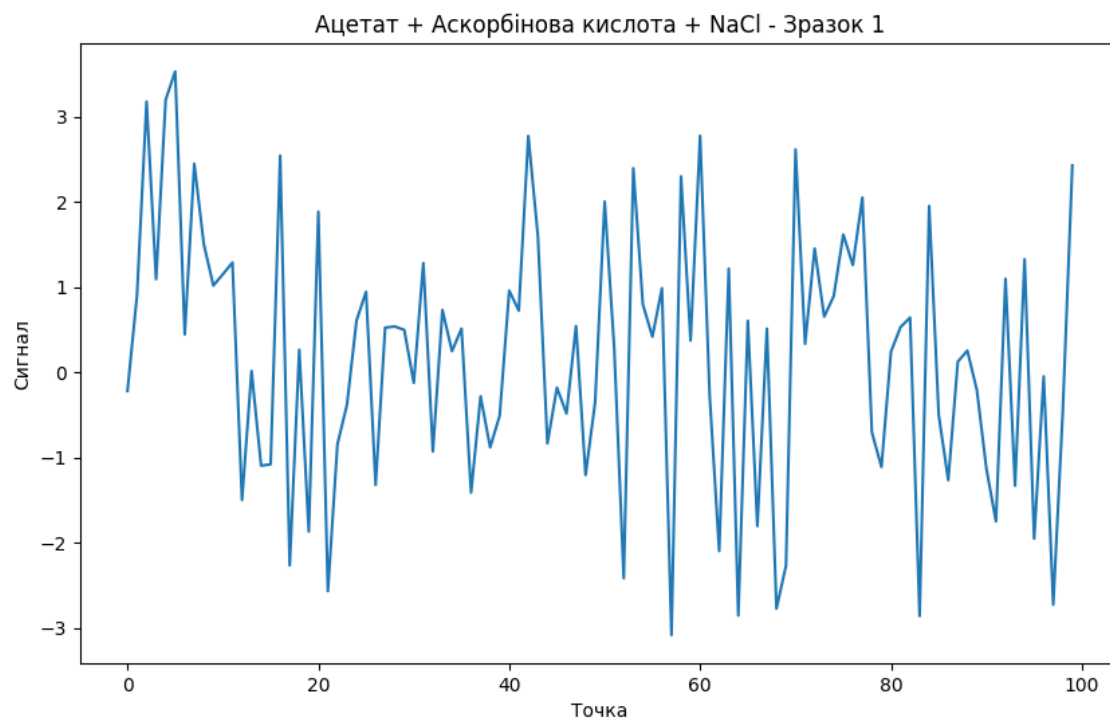


Рисунок Б.16 – Приклад зразка для комбінації аналітів «Ацетат», «NaCl»,
«Аскорбінова кислота»

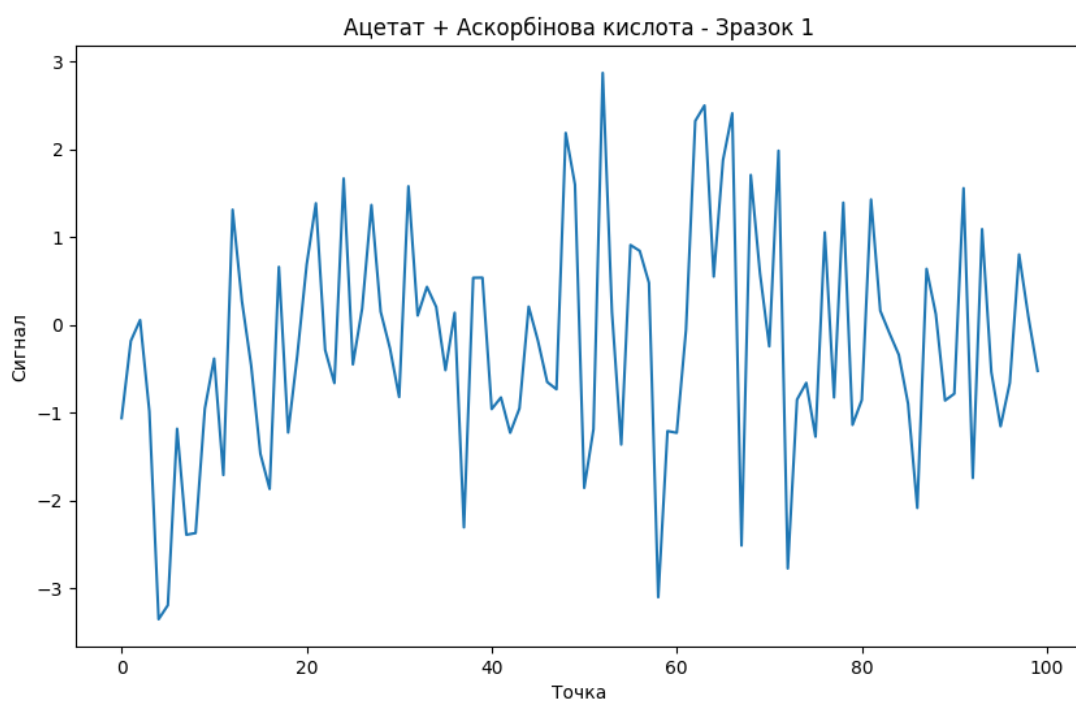


Рисунок Б.17 – Приклад зразка для комбінації аналітів «Ацетат»,
«Аскорбінова кислота»

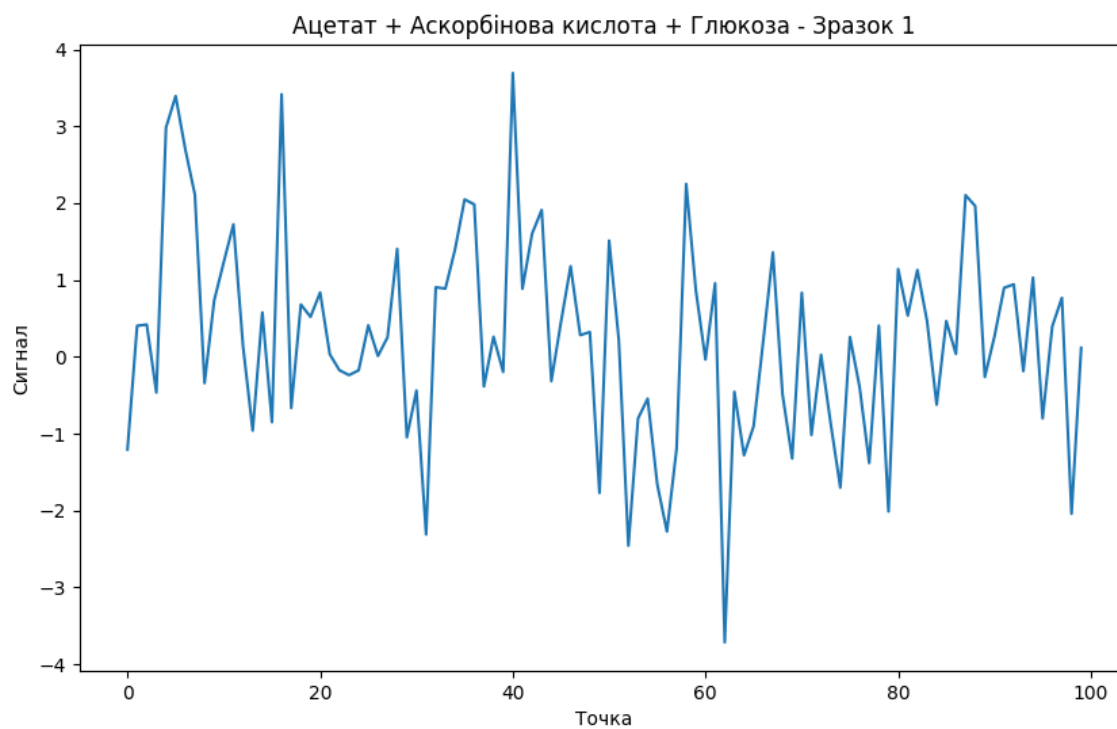


Рисунок Б.18 – Приклад зразка для комбінації аналітів «Ацетат»,
«Аскорбінова кислота», «Глюкоза»

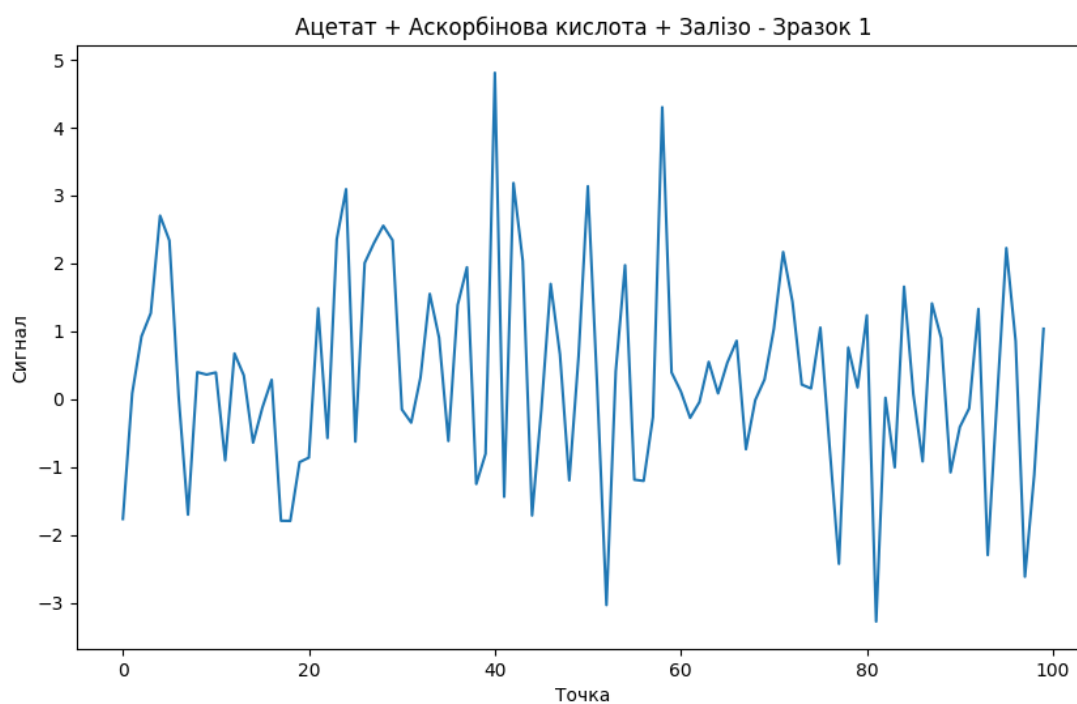


Рисунок Б.19 – Приклад зразка для комбінації аналітів «Ацетат», «Аскорбінова кислота», «Залізо»

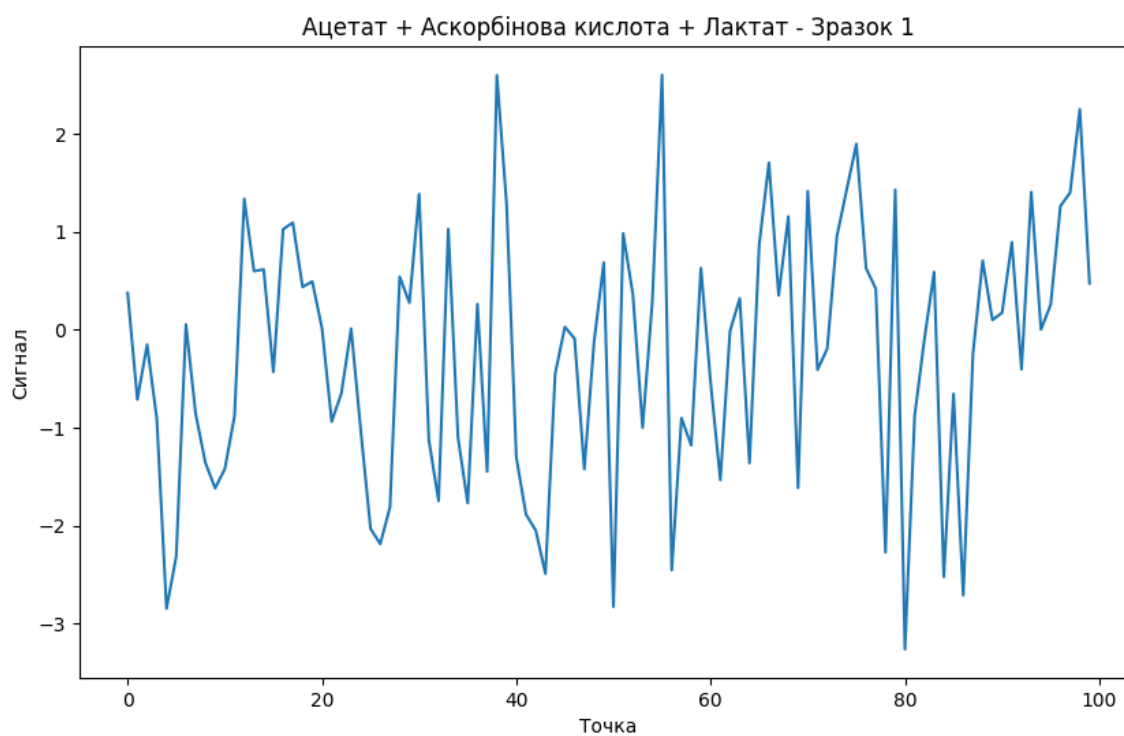


Рисунок Б.20 – Приклад зразка для комбінації аналітів «Ацетат», «Аскорбінова кислота», «Лактат»

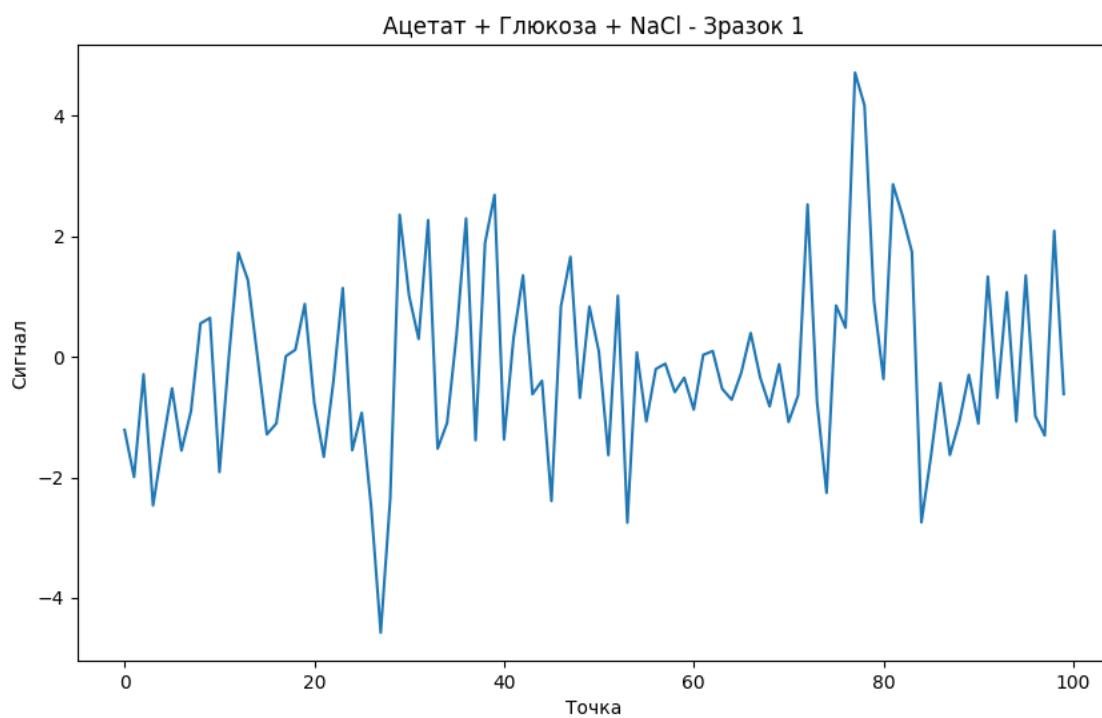


Рисунок Б.21 – Приклад зразка для комбінації аналітів «Ацетат», «Глюкоза», «NaCl»

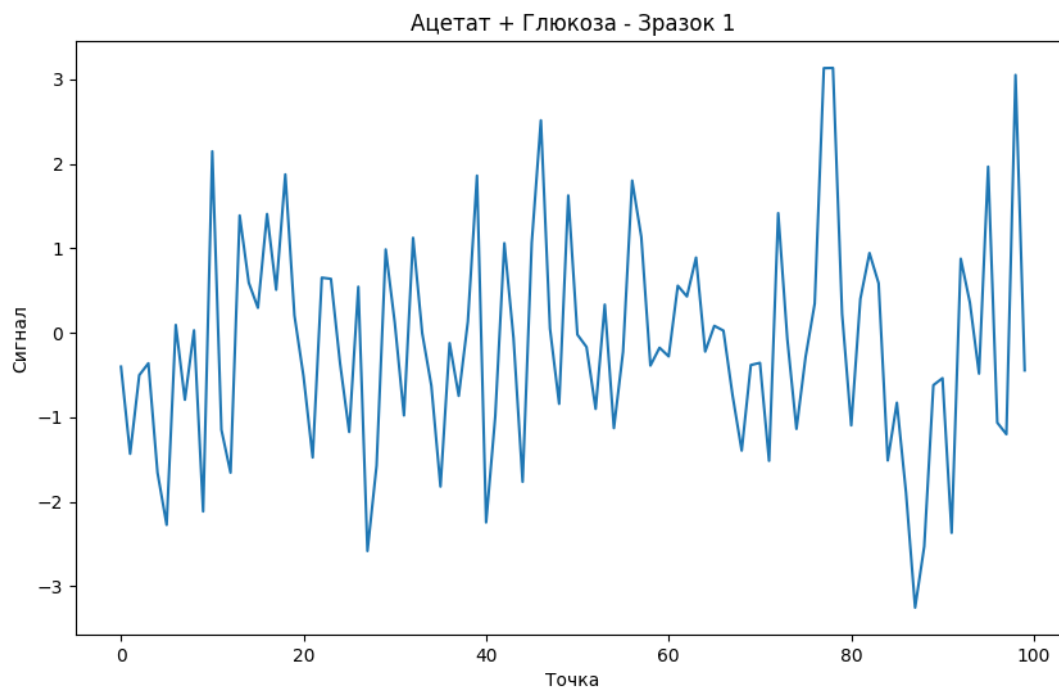


Рисунок Б.22 – Приклад зразка для комбінації аналітів «Ацетат», «Глюкоза»

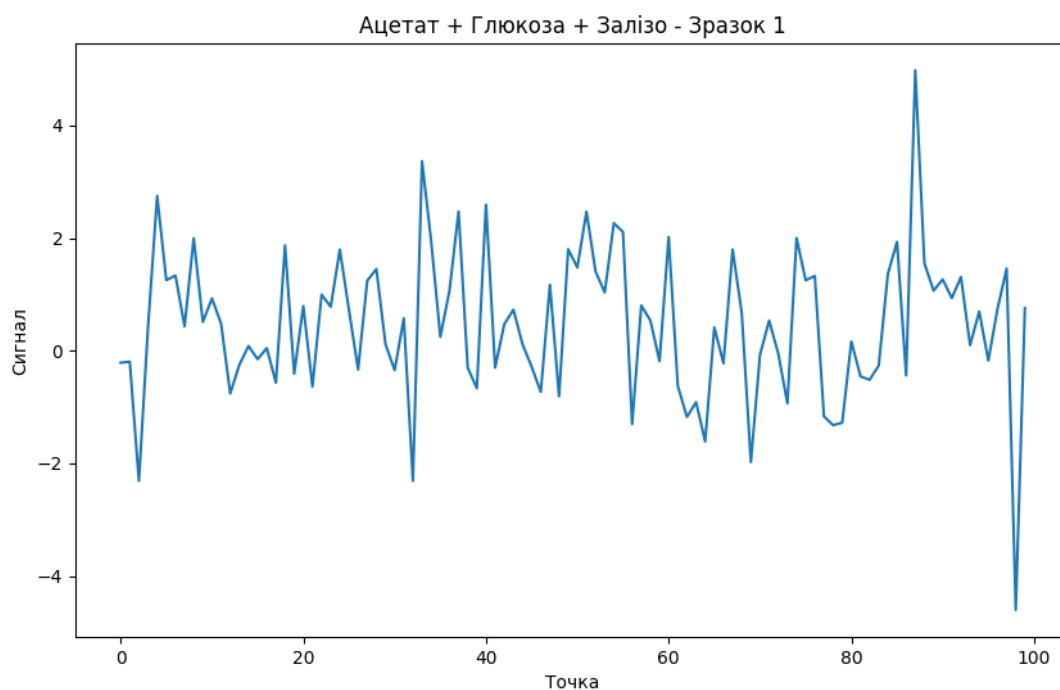


Рисунок Б.23 – Приклад зразка для комбінації аналітів «Ацетат», «Глюкоза», «Залізо»

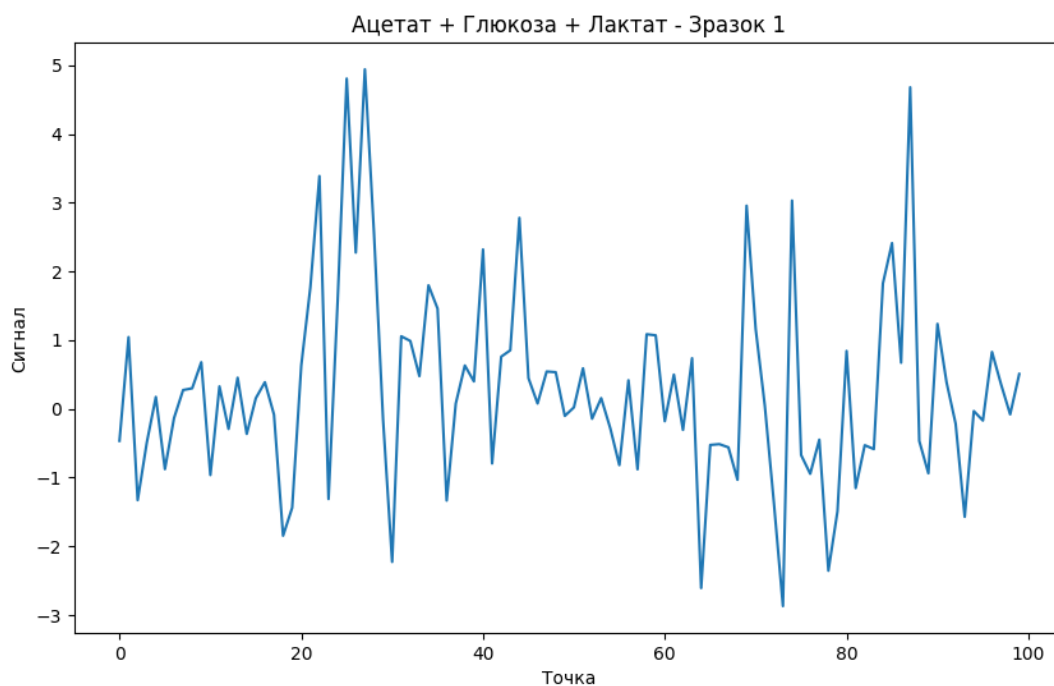


Рисунок Б.24 – Приклад зразка для комбінації аналітів «Ацетат», «Глюкоза», «Лактат»

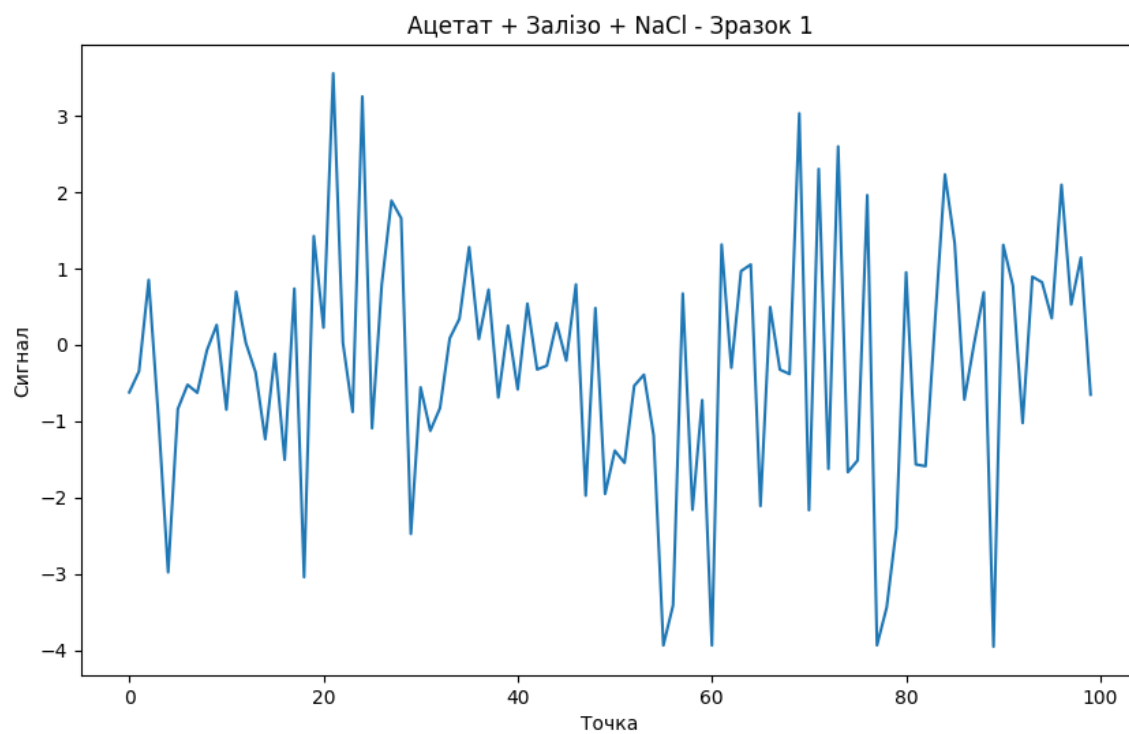


Рисунок Б.25 – Приклад зразка для комбінації аналітів «Ацетат», «Залізо», «NaCl»

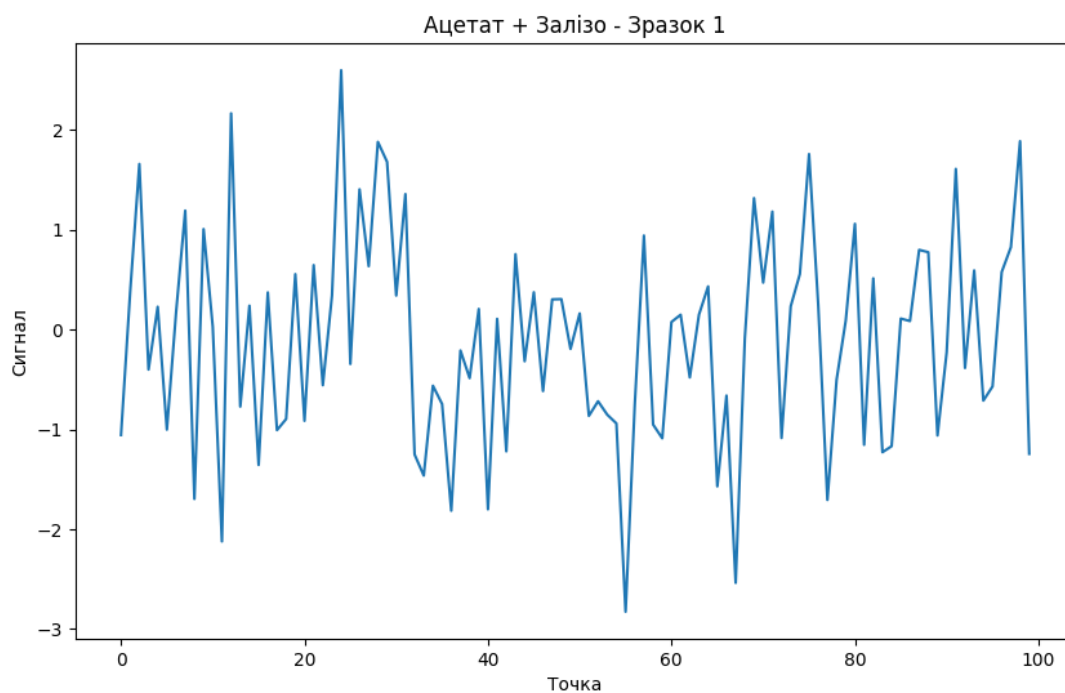


Рисунок Б.26 – Приклад зразка для комбінації аналітів «Ацетат», «Залізо»

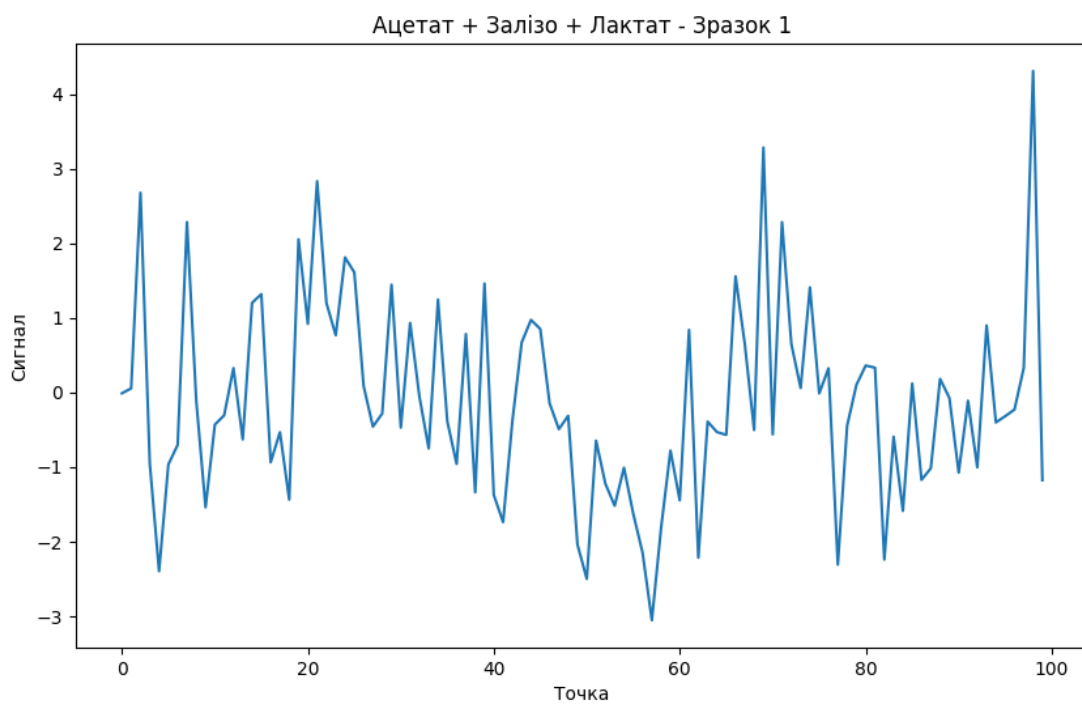


Рисунок Б.27 – Приклад зразка для комбінації аналітів «Ацетат», «Залізо», «Лактат»

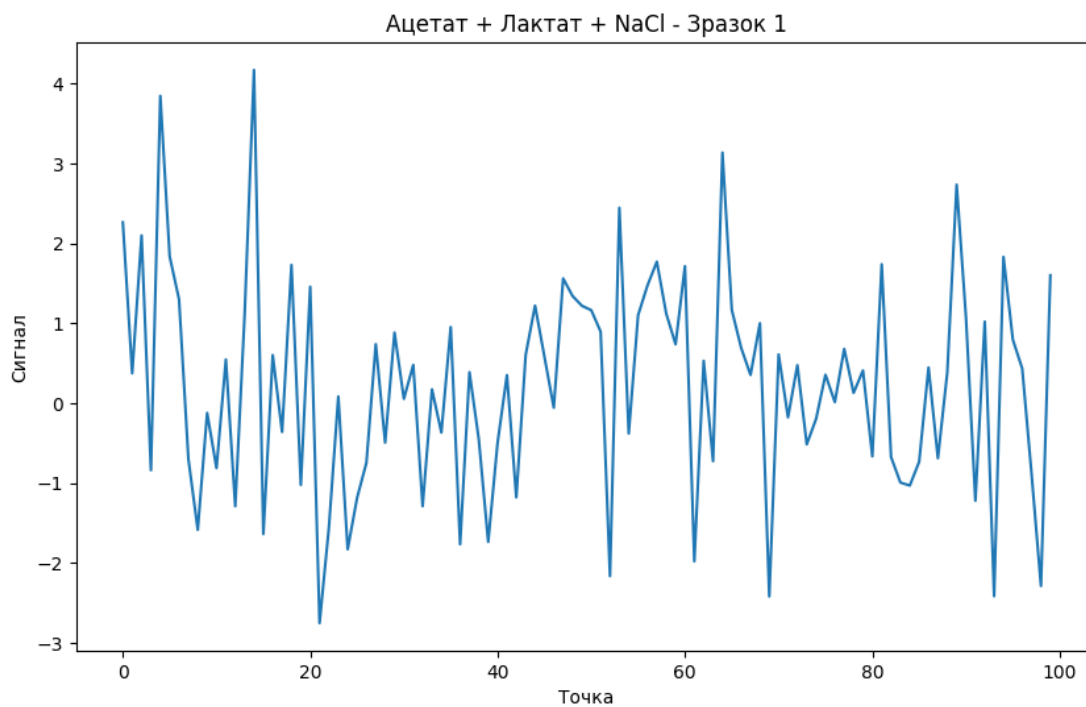


Рисунок Б.28 – Приклад зразка для комбінації аналітів «Ацетат», «Лактат», «NaCl»

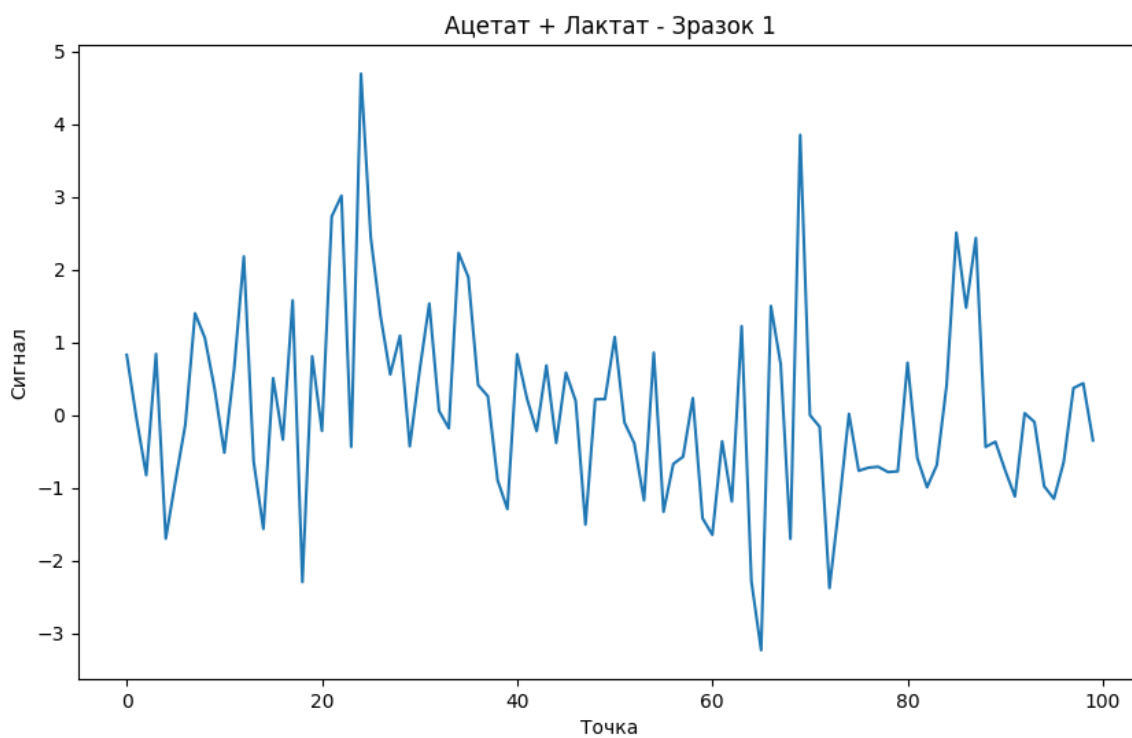


Рисунок Б.29 – Приклад зразка для комбінації аналітів «Ацетат», «Лактат»

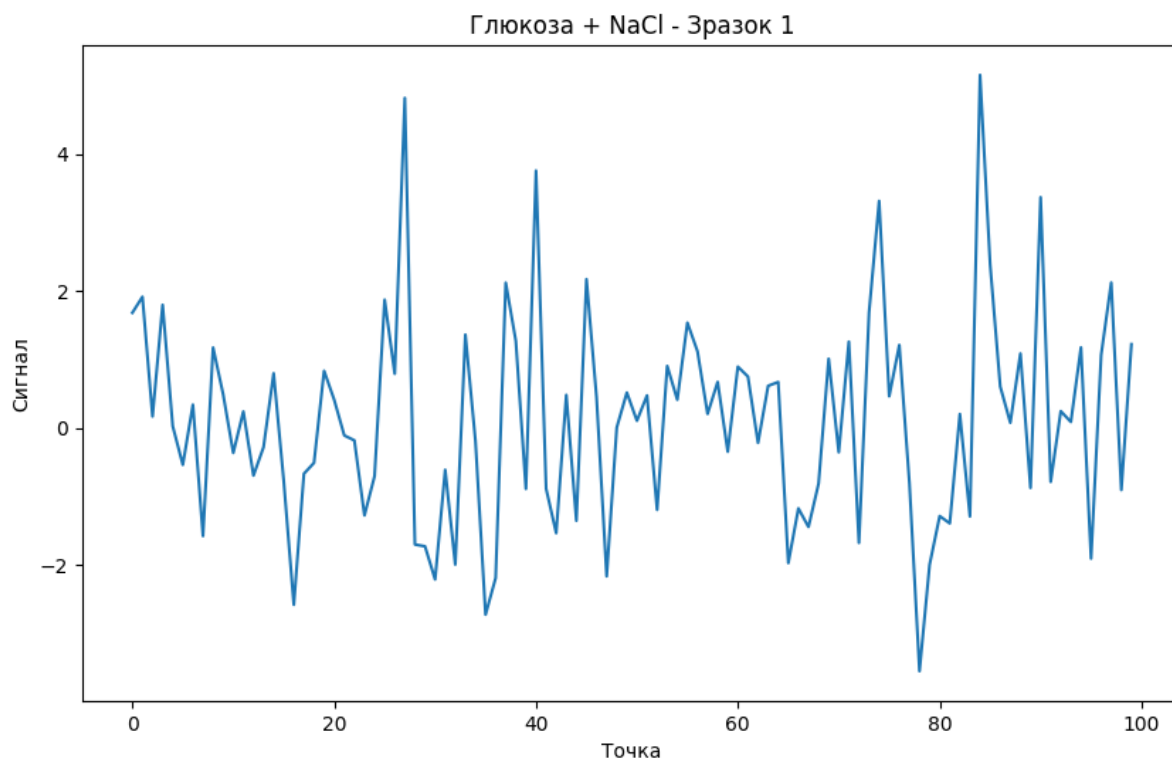


Рисунок Б.30 – Приклад зразка для комбінації аналітів «Глюкоза», «NaCl»

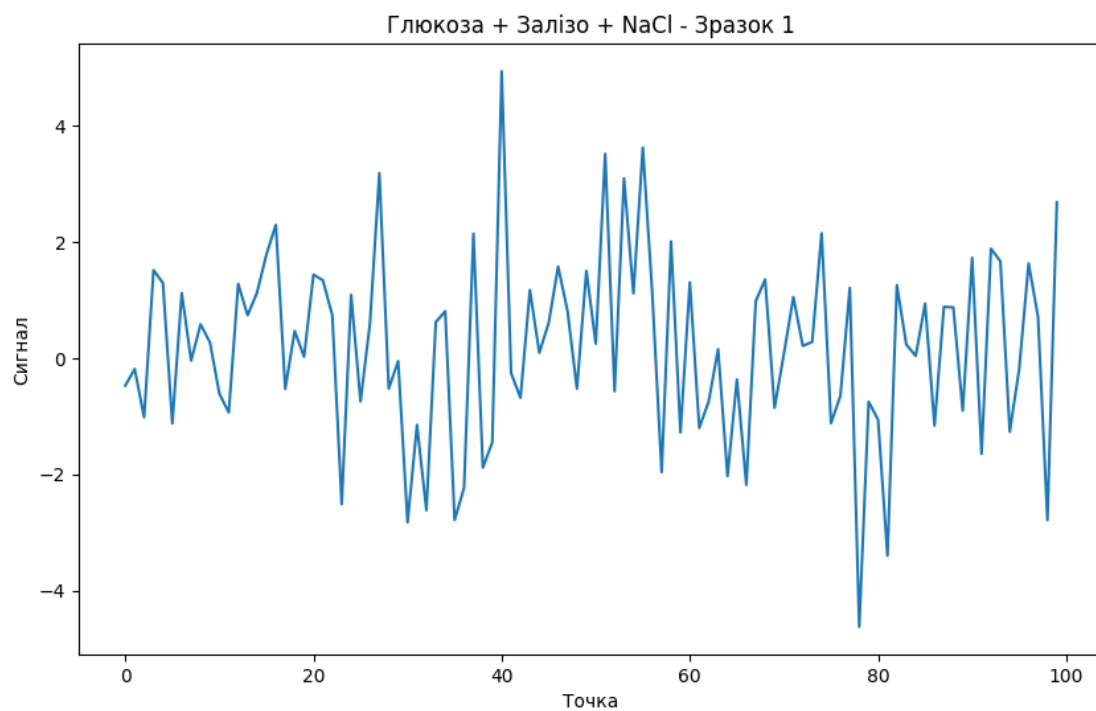


Рисунок Б.31 – Приклад зразка для комбінації аналітів «Глюкоза», «Залізо», «NaCl»

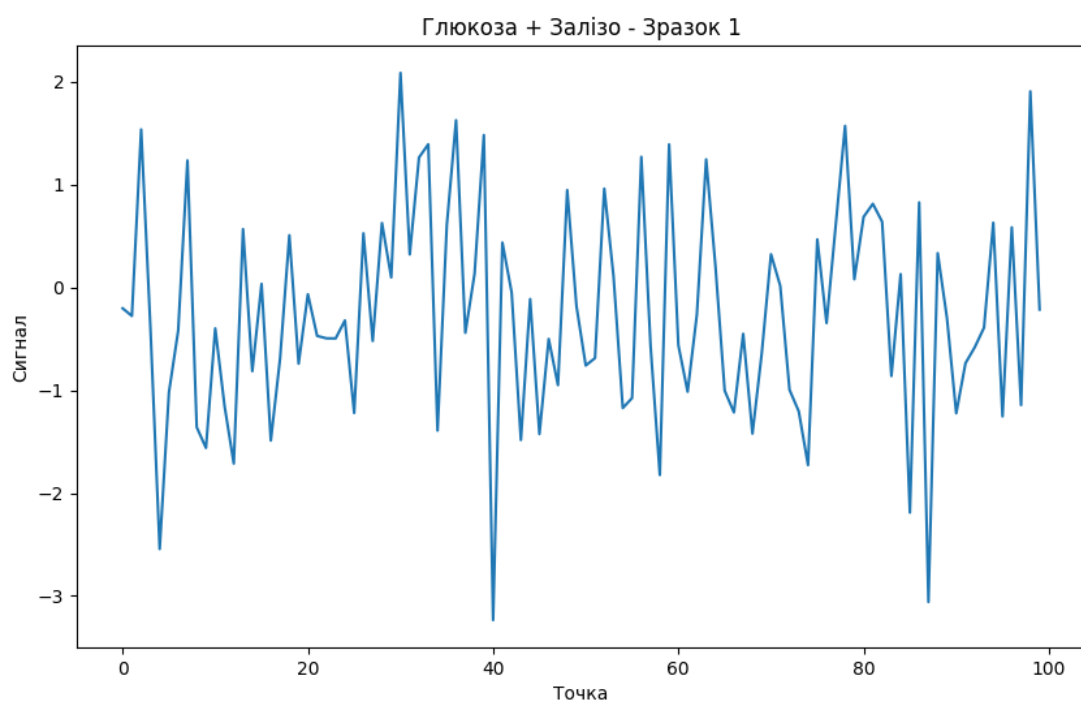


Рисунок Б.32 – Приклад зразка для комбінації аналітів «Глюкоза», «Залізо»

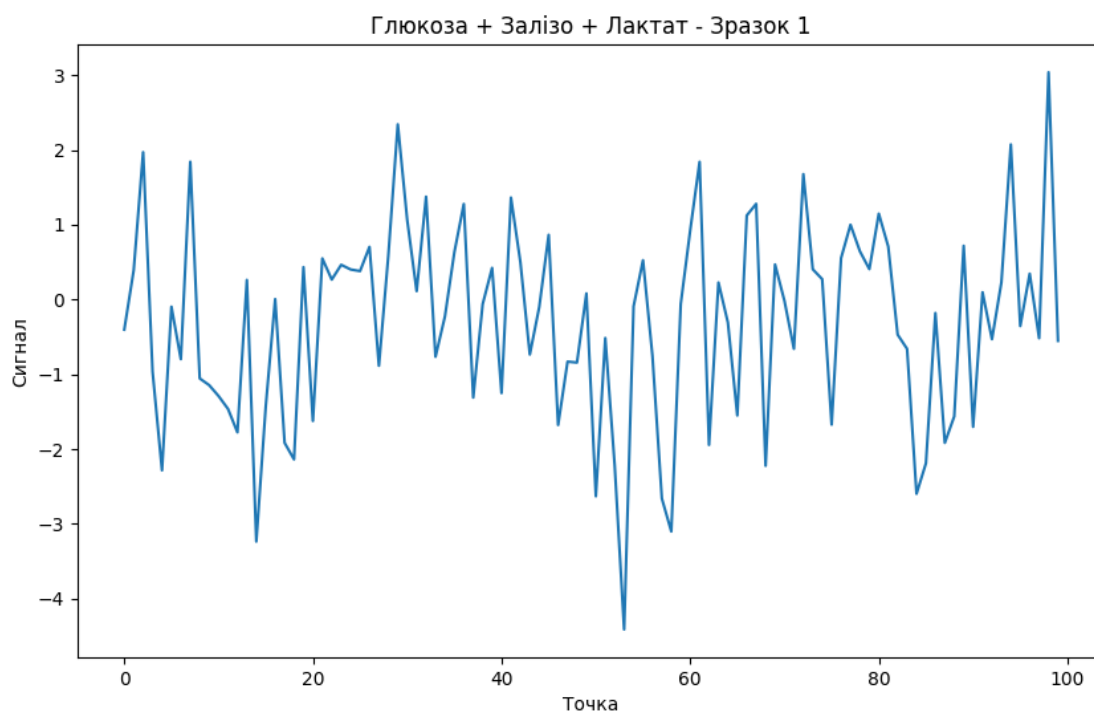


Рисунок Б.33 – Приклад зразка для комбінації аналітів «Глюкоза», «Залізо», «Лактат»

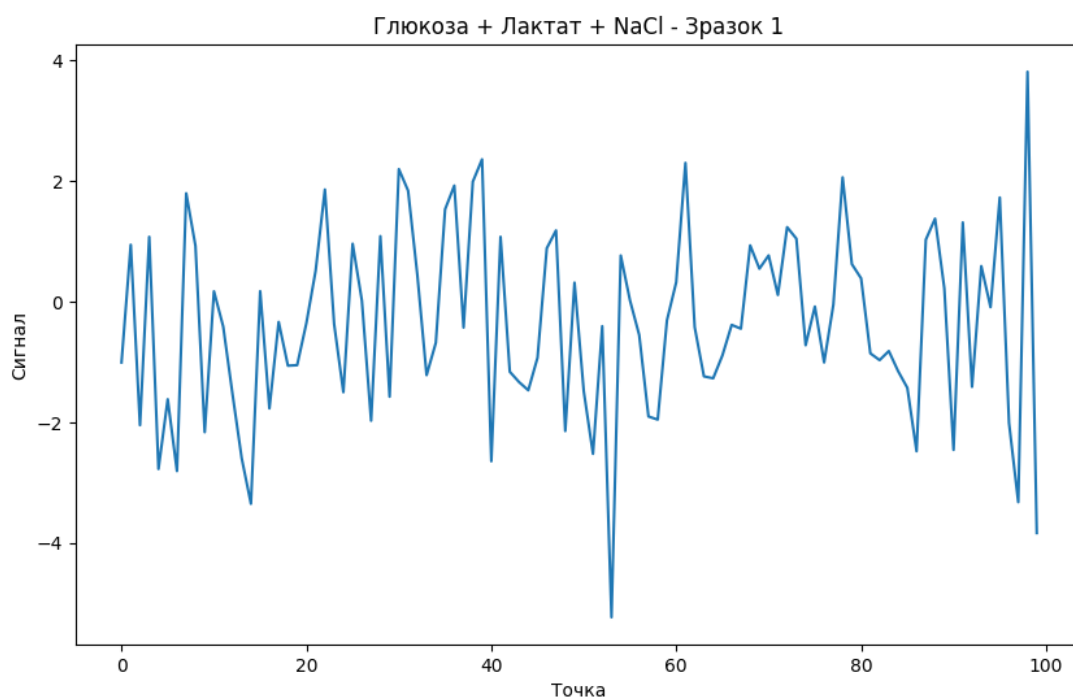


Рисунок Б.34 – Приклад зразка для комбінації аналітів «Глюкоза», «Залізо», «NaCl»

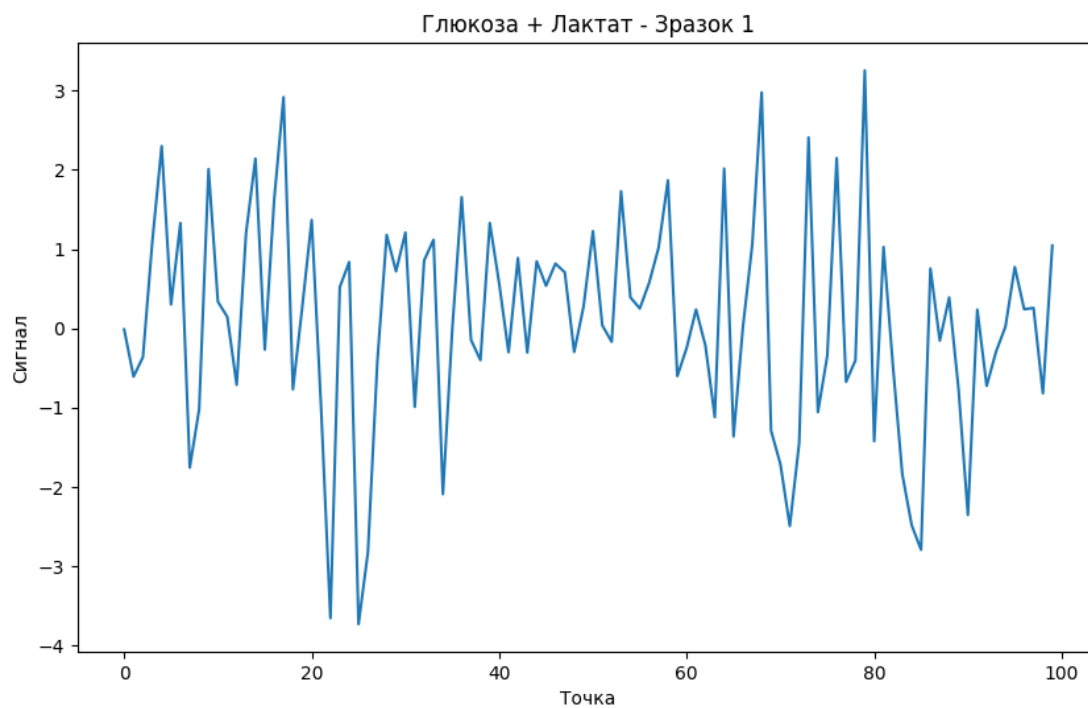


Рисунок Б.35 – Приклад зразка для комбінації аналітів «Глюкоза», «Лактат»

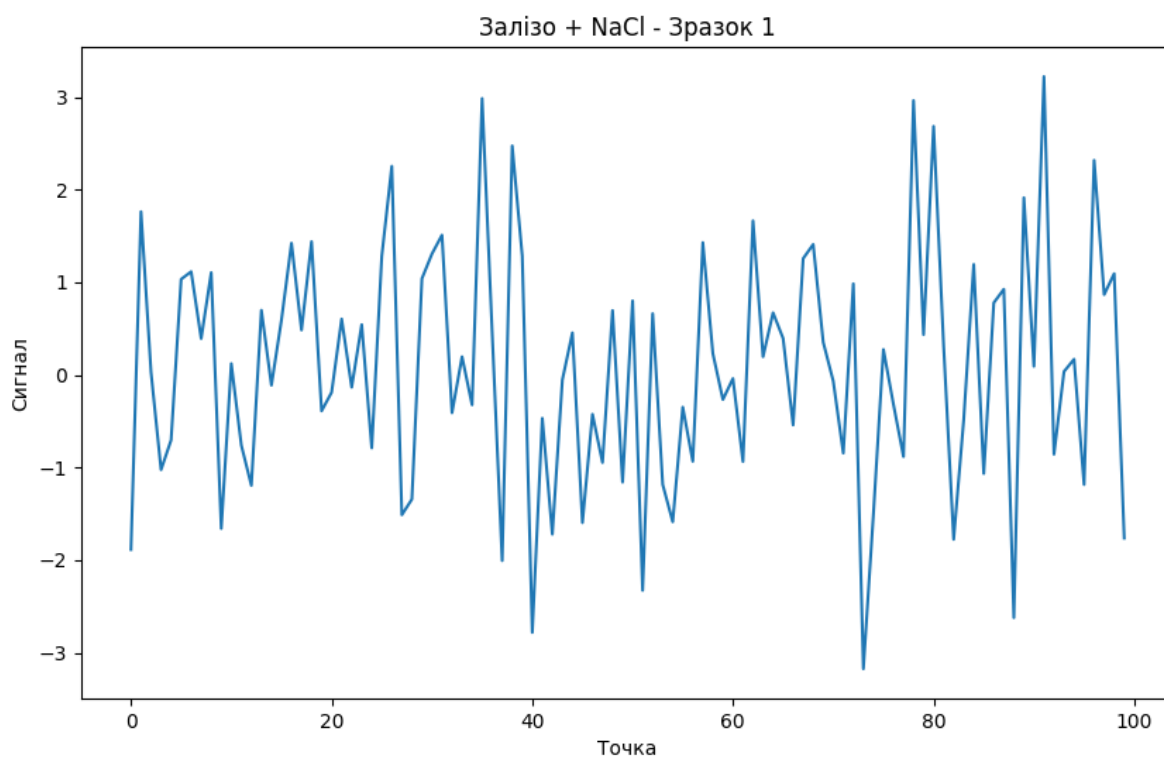


Рисунок Б.36 – Приклад зразка для комбінації аналітів «Залізо», «NaCl»

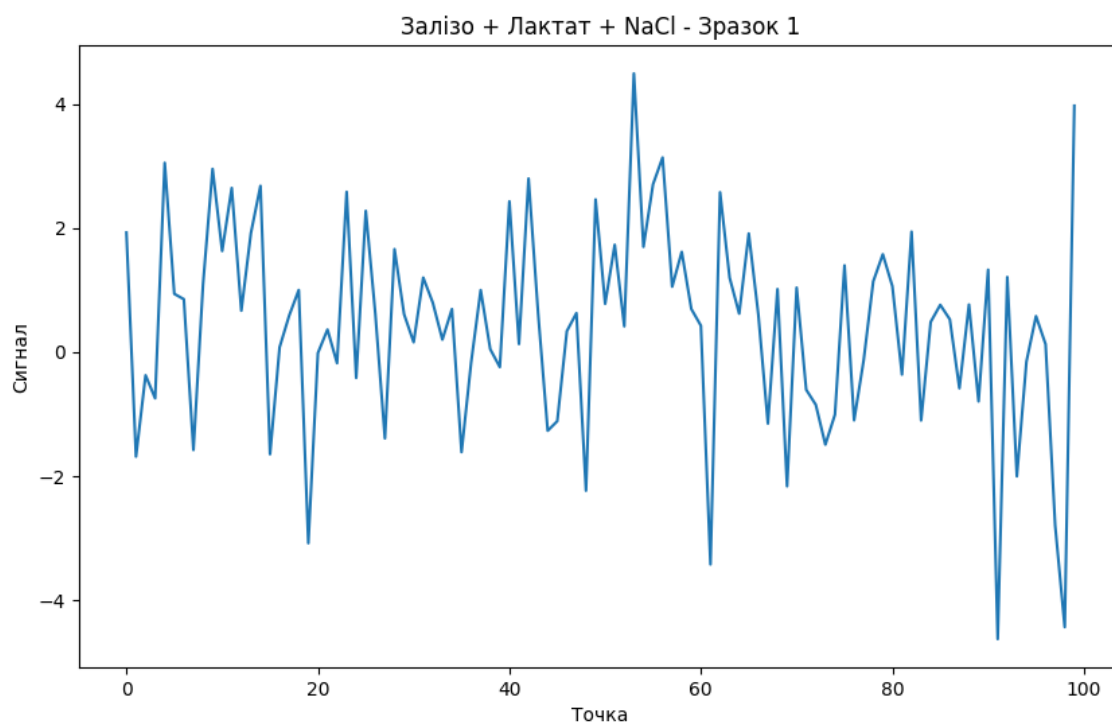


Рисунок Б.36 – Приклад зразка для комбінації аналітів «Залізо», «Лактат», «NaCl»

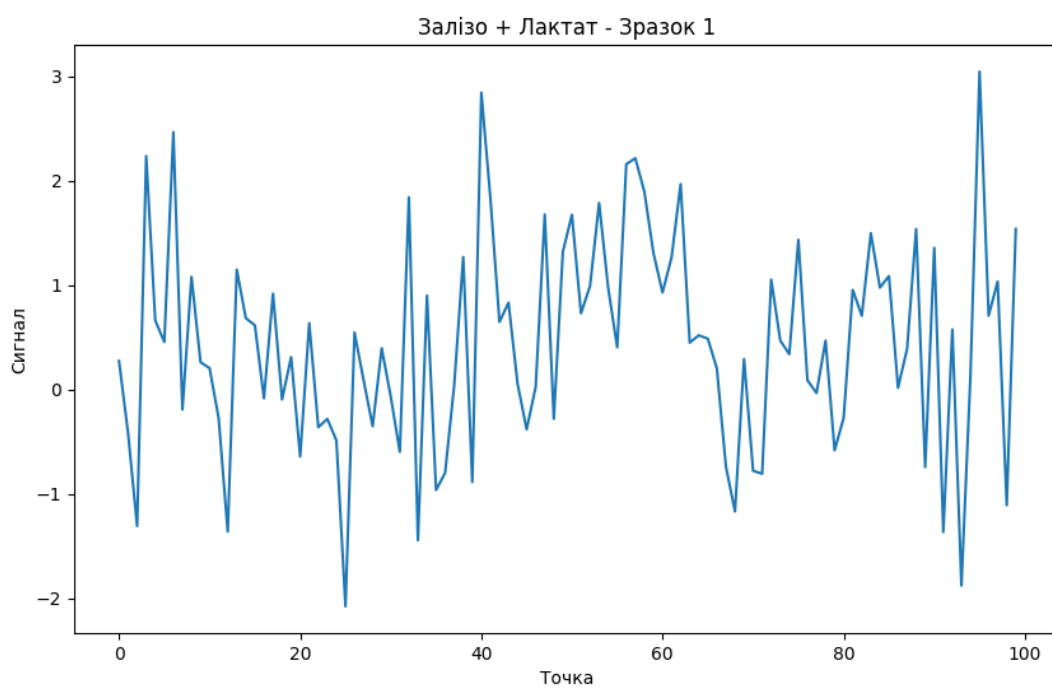


Рисунок Б.38 – Приклад зразка для комбінації аналітів «Залізо», «Лактат»

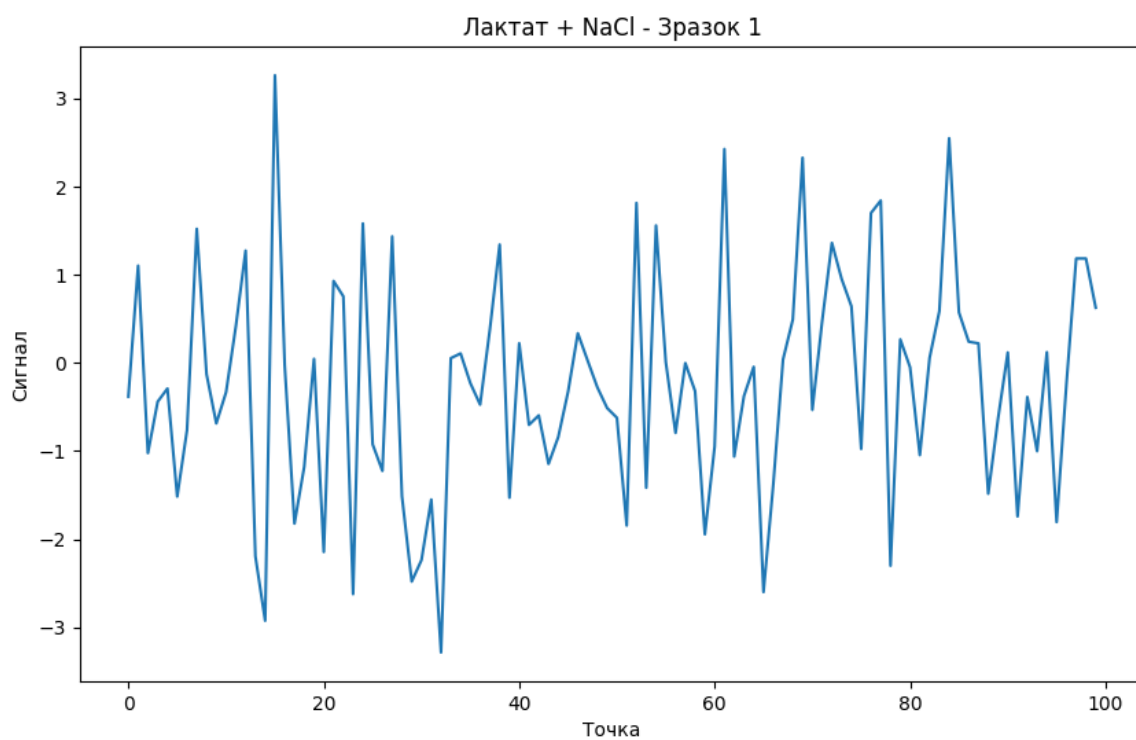


Рисунок Б.39 – Приклад зразка для комбінації аналітів «Лактат», «NaCl»

