

# Modelos de deep learning para classificação de gases detectados por matrizes de sensores nariz artificial

Ismael C. S. Araujo<sup>1</sup>, Juan C. Rodriguez Gamboa<sup>1</sup>, Adenilton J. da Silva<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Departamento de Computação  
Universidade Federal Rural de Pernambuco (UFRPE)  
Recife, PE – Brasil

<sup>2</sup>Centro de Informática  
Universidade Federal de Pernambuco (UFPE)  
Recife, PE – Brasil

ismael.cesar@ufrpe.br, juan.gamboa@ufrpe.br, ajsilva@cin.ufpe.br

**Abstract.** *The use of Deep Learning techniques has been promising to the classification problems, especially the ones related to image classification. The classification of gases detected by an artificial nose is one other area where Deep Learning techniques can be used to seek classification improvements. Succeeding in a classification task can result in many advantages to quality control, as well as to preventing accidents. In this work, it is presented some Deep Learning models specifically created to the task of gas classification.*

**Resumo.** *O uso de técnicas como Deep Learning tem se mostrado promissor para problemas de classificação, principalmente em relação a classificação de imagens. Classificação de gases detectados por um nariz artificial é mais uma das áreas em que técnicas de Deep Learning podem ser utilizadas para aprimoramento de classificação. O sucesso na tarefa de classificação de gases pode ser vantajoso tanto para controle de qualidade, quanto para prevenção de acidentes. Neste trabalho são apresentados modelos de Deep Learning voltados especificamente à tarefa de classificação de gases.*

## 1. Introdução

A detecção de compostos odorantes pode ser utilizada numa variedade de aplicações do mundo real. De controle de qualidade, até detecção de alimentos deteriorados e também na prevenção de acidentes com gases que são explosivos ou nocivos ao corpo humano [Zanchettin and Ludermir 2007]. Principalmente em situações onde o olfato humano é falho, ou até mesmo inútil, para detecção de certos tipos de gases. A detecção de gases é realizada com o auxílio de dispositivo denominado nariz artificial [Fonollosa et al. 2016, Zanchettin and Ludermir 2007]. Tal dispositivo gera dados que podem ser avaliados por modelos de aprendizagem de máquina para distinguir qual tipo de gás está sendo detectado. Neste trabalho são apresentados três configurações diferentes de modelos de aprendizagem de máquina para completar esta tarefa. Isto foi feito com o objetivo de investigar o desempenho dos modelos implementados de acordo com os conjuntos de dados utilizados. O resto deste trabalho está organizado da seguinte forma: A seção 2 é dividida em duas partes. A primeira contém uma breve explanação sobre os conjuntos de dados, bem como algumas explicações sobre a aquisição dos dados. Na segunda parte, há

uma explanação de como os modelos de aprendizagem de máquina foram definidos. Na seção 3 são mostrados os resultados dos modelos de acordo com cada conjunto de dados. A seção 4 contém a conclusão e também são discutidos possíveis trabalhos futuros.

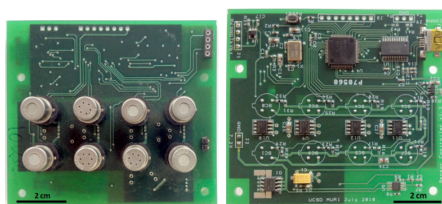
## 2. Metodologia

### 2.1. Conjunto de dados

Um nariz artificial é um dispositivo eletrônico construído para distinguir componentes odorantes. O dispositivo se divide em dois componentes, o componente sensorial e o componente que faz o reconhecimento de padrões [Zanchettin and Ludermir 2007]. O componente sensorial do dispositivo é composto de uma matriz de sensores de óxido metálico (MOX). Cada sensor MOX é desenhado para detectar uma propriedade específica da substância odorante. As propriedades detectadas são séries temporais de diferentes valores de resistência que cada substância desencadeia nos sensores MOX. A tabela 1 contém uma breve explanação de uma matriz com oito sensores MOX. Este tipo de array de sensores é o mais utilizado em aplicações reais como controle de qualidade, detecção de apodrecimento de comida.

Tipo de sensor	Unidade de detecção	Gás
TGS2611	1	Metano
TGS2612	1	Metano, Propano, Butano
TGS2610	1	Propano
TGS2600	1	Hidrogênio, monóxido de carbono
TGS2602	2	Amônia, $H_2S$ , compostos orgânicos voláteis(VOC)
TGS2620	2	monóxido de carbono, gases combustíveis, VOC

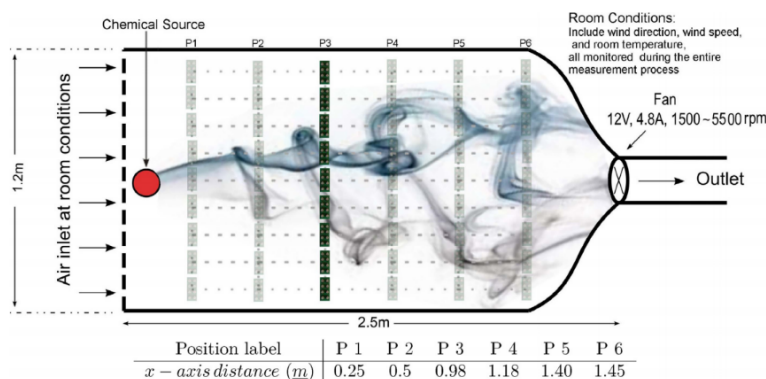
**Tabela 1. A descrição de cada unidade de detecção e seus respectivos gases alvo. Fontes: [Zanchettin and Ludermir 2007, Fonollosa et al. 2016] , Tradução nossa**



**Figura 1. Imagem dianteira e traseira de uma matriz de sensores MOX com oito unidades de detecção. fonte: [Fonollosa et al. 2014]**

Três conjuntos de dados diferentes foram utilizados neste trabalho. Os conjuntos de dados serão referidos como *Wind tunnel* [Vergara et al. 2013], *Single Array Wind Tunnel (SAWT)* [Fonollosa et al. 2016], e *Turbulent gas mixtures* [Fonollosa et al. 2015]. Ambos *SAWT* e *Turbulent gas mixtures* foram utilizados nos trabalhos de Jordi Fonollosa, contudo o método de aquisição de dados dos mesmos foram feitos utilizando configurações diferentes. Os dados do conjunto *Wind tunnel* foram adquiridos por um conjunto de nove matrizes de sensores MOX. O conjunto de matriz de sensores foram postos num túnel de vento, onde compostos odorantes foram inseridos. O processo de detecção foi feito posicionando o conjunto de matrizes de sensores em seis locais diferentes no túnel de vento. Dessa forma, gerando seis subconjuntos diferentes onde os

compostos químicos avaliados foram os seguintes: Acetona, acetaldeído, amônia, butanol, etileno, metano, metanol, monóxido de carbono em dois níveis de concentração diferentes, benzeno e tolueno [Vergara et al. 2013]. Portanto, todos os seis subconjuntos possuem onze classes. Por simplicidade, os dois diferentes níveis de concentração de monóxido de carbono serão referidos como *C1* e *C2*. A figura 2 demonstra a organização do túnel de vento e as diferentes localizações das matrizes de sensores. Neste trabalho os seis diferentes subconjuntos serão referidos como *P1-P6*.



**Figura 2. Túnel de vento com as seis diferentes posições das matrizes de sensores, onde as seis diferentes posições são rotuladas como P1-P6. O ponto vermelho indica onde a substância odorante foi inserida no túnel de vento. fonte: [Vergara et al. 2013]**

No conjunto *SAWT*, os dados também foram adquiridos utilizando a matriz de sensores MOX. Foram construídas quatro unidades sensoriais independentes, cada uma com uma matriz de sensores MOX. Os gases foram inseridos no sistema por três ramificações fluídicas, onde a primeira foi conectada a um cilindro de ar, e as outras duas poderia ser conectadas a qualquer outro tipo de cilindro [Fonollosa et al. 2016]. As cinco unidades independentes de sensores geraram cinco tipos de subconjuntos diferentes. Neste trabalho os subconjuntos serão referidos como *B1-B5 system*. No conjunto *Turbulent Gas Mixtures* os dados também foram adquiridos utilizando um túnel de vento. Contudo, diferente da aquisição de dados do conjunto *Wind Tunnel*, somente uma única matriz de sensores MOX foi utilizada. Onde um gases diferentes eram colocados no túnel de vento em diferentes níveis de concentração. Isso foi feito devido ao fato de que gases e compostos odorantes são encontrados em diferentes níveis de concentrações na natureza. Ou seja, as moléculas de um composto volátil podem se espalhar pelo ambiente de acordo com a direção do vento e da presença de outros compostos voláteis [Zanchettin and Ludermir 2007] Os gases compostos na mistura foram etileno, metano e monóxido de carbono (CO). Onde o objetivo era detectar o etileno em diferentes níveis de concentração na mistura. Isto é, num nível de concentração nulo ou *ET<sub>n</sub>*. E também em um nível de concentração baixo, médio e alto (*ET<sub>l</sub>*, *ET<sub>m</sub>* e *ET<sub>h</sub>* respectivamente).

## 2.2. Sniff Nets

Os experimentos foram implementados utilizando a linguagem *python*, versão 3.6. Os modelos utilizados nos experimentos foram implementados utilizando o *framework* de aprendizagem de máquina *Keras* [Chollet et al. 2015]. Três modelos foram implementados para efetuar os experimentos. O primeiro foi uma rede neural convolutiva *feed*

<i>Tipo de camada</i>	<i>Parâmetros de camada</i>	<i>Tipo de camada</i>	<i>Parâmetros de camada</i>	<i>Tipo de camada</i>	<i>Parâmetros de camada</i>
Conv2D	Filtros:50, Kernel:(3782, 6)	Conv2D	Filtros:50, Kernel:(2950, 6)	Conv2D	Filtros:50, Kernel:(241, 38)
Batch Normalization		Batch Normalization		Batch Normalization	
DropOut	$p: 0.25$	DropOut	$p: 0.25$	DropOut	$p: 0.25$
Conv2D	Filtros:50, Kernel:(3763, 4)	Conv2D	Filtros:50, Kernel:(2931, 4)	Conv2D	Filtros:50, Kernel:(222, 5)
Batch Normalization		Batch Normalization		Batch Normalization	
DropOut	$p: 0.25$	DropOut	$p: 0.25$	DropOut	$p: 0.25$
Average Pooling 2D	Kernel:(1881, 2)	Average Pooling 2D	Kernel:(1465, 2)	Average Pooling 2D	Kernel:(111, 2)
Flatten		Flatten		Flatten	
Dense	$\mathcal{N}: 50$	Dense	$\mathcal{N}: 50$	Dense	$\mathcal{N}: 50$
Batch Normalization		Batch Normalization		Batch Normalization	
Dense	$\mathcal{N}:\mathcal{C}$	Dense	$\mathcal{N}:\mathcal{C}$	Dense	$\mathcal{N}:\mathcal{C}$

SAWT

Turbulent Gas Mixtures

Wind tunnel

**Tabela 2. Configurações da rede Sniff ConvNet**

*forward*. Pelo resto deste trabalho o primeiro modelo implementado será referido como *Sniff ConvNet*. Seja  $\mathcal{N}$  o número de neurônios,  $\mathcal{C}$  o número de classes e  $p$  indica a probabilidade. O modelo *Sniff ConvNet* foi implementado utilizando as configurações descritas na Tabela 2.

Onde as camadas *Dense* também são conhecidas como as camadas completamente conectadas. A razão de haver diferentes versões de um mesmo modelo é justamente porque cada conjunto de dados contém um tipo diferente de medição. Contudo, os tipos de camadas são mantidos independentemente do conjunto de dados a ser avaliado. O mesmo é o caso para o número de filtros para as camadas convolutivas e o número de neurônios nas camadas completamente conectadas. Exceto no modelo que avalia o conjunto *Wind Tunnel*, que possui 11 classes.

O segundo modelo foi uma rede neural residual. Pelo resto deste trabalho, este modelo será referido como *Sniff ResNet*. A configuração do *Sniff ResNet* se encontra nas tabelas 3. Os tipos de camadas *Add* são onde os saltos das conexões unidos a uma das saídas da camada. Como mencionado para o modelo *Sniff ConvNet*, a configuração básica do *Sniff ResNet* é mantida a mesma, independentemente do conjunto de dados sendo avaliado.

O terceiro modelo implementado avalia a detecção de cada matriz de sensores de forma independente. Como mencionado anteriormente, os dados sendo avaliados vem das detecções de matrizes de sensores. Para os conjuntos *SAWT* e *Turbulent Gas Mixtures* as matrizes utilizadas para fazer as detecções são compostas de seis sensores. No conjunto *Wind tunnel* as detecções foram feitas utilizando múltiplas matrizes de sensores. Em outras palavras, um conjunto com 71 sensores. Então, para as detecções de cada sensor um MLP é construído para avaliar os dados de entrada. Em seguida, todos os dados processados por cada MLP é concatenado e propagado adiante para a segunda parte do modelo. Neste trabalho a segunda parte será referida como *fusion layer*. E o terceiro modelo em si será referido como *Sniff Multinose*. Na tabela 4 se encontra uma configuração genérica do *Sniff Multinose*. Seja  $\mathcal{T}$  o tamanho da entrada.

### 3. Resultados

Como mencionado, modelos similares com configurações pouco diferentes foram utilizados nos experimentos, de acordo com o conjunto de dados sendo avaliado. Neste trabalho os resultados serão demonstrados segundo cada conjunto de dados. O método de validação cruzada utilizado em todos os conjuntos de dados foi o *holdout*. Com 80% dos exemplos utilizados no conjunto de treino e 20% utilizados no conjunto de teste. Os resultados

Índice	Tipo de camada	Parâmetros de camada	Conexão da camada	Índice	Tipo de camada	Parâmetros de camada	Conexão da camada
0	InputLayer	Formato: 3801, 8, 1		0	InputLayer	Formato: 2969, 8, 1	
1	Conv2D	Kernel:(3793, 6), Filtros: 20	0	1	Conv2D	Kernel:(2961, 6), Filtros: 20	0
2	Conv2D	Kernel:(3793, 6), Filtros: 20	1	2	Conv2D	Kernel:(2961, 6), Filtros: 20	1
3	BatchNormalization		2	3	BatchNormalization		2
4	Add		1,3	4	Add		1,3
5	MaxPooling2D	Kernel:(10,1)	4	5	MaxPooling2D	Kernel:(10,1)	4
6	Conv2D	Kernel:(371, 4), Filtros: 80	5	6	Conv2D	Kernel:(288, 4), Filtros: 80	5
7	Conv2D	Kernel:(371, 4), Filtros: 80	6	7	Conv2D	Kernel:(288, 4), Filtros: 80	6
8	BatchNormalization		7	8	BatchNormalization		7
9	Add		6,8	9	Add		6,8
10	MaxPooling2D	Kernel:(10,1)	9	10	MaxPooling2D	Kernel:(10,1)	9
11	Flatten		10	11	Flatten		10
11	Dense	$\mathcal{N}:100$	10	11	Dense	$\mathcal{N}:100$	10
12	Dropout	$p:0.25$	11	12	Dropout	$p:0.25$	11
13	Dense	$\mathcal{N}:\mathcal{C}$	12	13	Dense	$\mathcal{N}:\mathcal{C}$	12

Índice	Tipo de camada	Parâmetros de camada	Conexão da camada
0	InputLayer	Formato: 260, 71, 1	
1	Conv2D	Kernel:(252, 38), Filtros: 20	0
2	Conv2D	Kernel:(252, 38), Filtros: 20	1
3	BatchNormalization		2
4	Add		1,3
5	MaxPooling2D	Kernel:(10,1)	4
6	Conv2D	Kernel:(17, 5), Filtros: 80	5
7	Conv2D	Kernel:(17, 5), Filtros: 80	6
8	BatchNormalization		7
9	Add		6,8
10	MaxPooling2D	Kernel:(10,1)	9
11	Flatten		10
11	Dense	$\mathcal{N}:100$	10
12	Dropout	$p:0.25$	11
13	Dense	$\mathcal{N}:\mathcal{C}$	12

**Tabela 3. Configurações da rede neural residual para as bases de dados SAWT e Turbulent Gas Mixtures. Configurações da rede neural residual para o conjunto de dados Wind tunnel**

Sensor 1	Sensor 2	...	Sensor N
Dense: $\mathcal{N}:\mathcal{T}$ , Ativação: ReLU	Dense: $\mathcal{N}:\mathcal{T}$ , Ativação: ReLU	...	Dense: $\mathcal{N}:\mathcal{T}$ , Ativação: ReLU
Dense: $\mathcal{N}:\mathcal{T}/4$ , Ativação: Tanh	Dense: $\mathcal{N}:\mathcal{T}/4$ , Ativação: Tanh	...	Dense: $\mathcal{N}:\mathcal{T}/4$ , Ativação: Tanh
Dense: $\mathcal{N}:\mathcal{T}/8$ , Ativação: Tanh	Dense: $\mathcal{N}:\mathcal{T}/8$ , Ativação: Tanh	...	Dense: $\mathcal{N}:\mathcal{T}/8$ , Ativação: Tanh
Concatenação da avaliação de todos os sensores			
Dense: $\mathcal{N}:100$ , Ativação: Tanh			
Dense: $\mathcal{N}:100$ , Activation: ReLU			
Dense: $\mathcal{N}:\mathcal{C}$ , Activation: softmax			

**Tabela 4. Configuração genérica para a detecção de matriz de sensores utilizando o modelo Sniff Multinose**

e gráficos mostrados nas matrizes a seguir foram adquiridos utilizando o procedimento *classification\_report* [Pedregosa et al. 2011] e o histórico do modelo foi obtido a partir da chamada *fit*. Para todos os modelos descritos, as configurações de treinamento e ajuste foram as seguintes: Os modelos implementados foram treinados utilizando 20 épocas de treinamento, com taxa de aprendizado de 0.001, e tamanho de *batch* de 10 exemplos de dados. A função custo utilizada foi a *categorical cross entropy*. E o método de otimização utilizado foi gradiente descendente estocástico (SGD) com *momentum* igual a 0.9.

### 3.1. SAWT dataset

Para o subconjunto *B1-system* houveram bons resultados para todos os modelos implementados. Tabela 5 mostra os relatórios de classificação de cada modelo de acordo com o subconjunto *B1-system* do conjunto SAWT. O melhor resultado de acurácia pertencendo a o modelo *Sniff Resnet*.

Similarmente, tabelas 6, 7, 8 e 9 mostram os relatórios de classificação dos modelos implementados de acordo com os subconjuntos (*B2-B5-system*) Pode-se observar

Classe	<i>Sniff ConvNet</i>				<i>Sniff Resnet</i>				<i>Sniff Multinose</i>				
	Precisão	Recall	F1-score	Acurácia	Precisão	Recall	F1-score	Acurácia	Precisão	Recall	F1-score	Acurácia	
Etileno	1.00	0.90	0.95	0.97	1.00	1.00	1.00	1.00	0.83	1.00	0.92	0.97	
Etanol	1.00	1.00	1.00		1.00	1.00	1.00		1.00	1.00	1.00		0.93
Monóxido de carbono	0.89	1.00	0.94		1.00	1.00	1.00		1.00	1.00	0.89		1.00
Metano	1.00	1.00	1.00		1.00	1.00	1.00		1.00	1.00	1.00		1.00

**Tabela 5. Resultados de precisão, recall, F1-score e acurácia dos modelos *Sniff ConvNet*, *Sniff ResNet* e *Sniff Multinose* para o conjunto SAWT no subconjunto *B1-system***

que o pior desempenho total pertence ao modelo *Sniff multinose* com o subconjunto *B4-system*. Onde é também onde os valores de precisão, *recall* e *f1-score* alcançam 1.00.

Classe	<i>Sniff ConvNet</i>				<i>Sniff Resnet</i>				<i>Sniff Multinose</i>				
	Precisão	Recall	F1-score	acurácia	Precisão	Recall	F1-score	acurácia	Precisão	Recall	F1-score	acurácia	
Etileno	0.90	1.00	0.95	0.97	1.00	0.86	0.92	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00	
Etanol	1.00	1.00	1.00		0.88	1.00	0.93		1.00	1.00	1.00		1.00
Monóxido de carbono	1.00	0.86	0.92		1.00	1.00	1.00		1.00	1.00	1.00		1.00
Metano	1.00	1.00	1.00		1.00	1.00	1.00		1.00	1.00	1.00		1.00

**Tabela 6. Resultados de precisão, recall, F1-score e acurácia dos modelos *Sniff ConvNet*, *Sniff ResNet* e *Sniff Multinose* para o conjunto SAWT no subconjunto *B2-system***

Class	<i>Sniff ConvNet</i>				<i>Sniff Resnet</i>				<i>Sniff Multinose</i>				
	Precisão	Recall	F1-score	acurácia	Precisão	Recall	F1-score	acurácia	Precisão	Recall	F1-score	acurácia	
Etileno	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00	0.82	0.90	0.88	0.83	1.00	0.91	0.97	
Etanol	1.00	1.00	1.00		1.00	1.00	0.17		1.00	1.00	0.91		0.95
Monóxido de carbono	1.00	1.00	1.00		0.71	0.71	1.00		1.00	1.00	1.00		1.00
Metano	1.00	1.00	1.00		0.50	1.00	0.67		1.00	1.00	1.00		1.00

**Tabela 7. Resultados de precisão, recall, F1-score e acurácia dos modelos *Sniff ConvNet*, *Sniff ResNet* e *Sniff Multinose* para o conjunto SAWT no subconjunto *B3-system***

Através da comparação entre o custo e acurácia dos modelos na figura 3 pode-se observar que para o conjunto *B1-system* todos os modelos convergiram bem, tanto em relação ao treino quanto em relação a validação dos valores de custo e acurácia. O modelo *Sniff Multinose* teve maiores problemas para convergir para melhores valores de acurácia e custo quando avaliando o subconjunto *B4-system*. Apesar deste fato, o modelo *Sniff Multinose* convergiu melhor que os outros modelos para os subconjuntos *B1, B2, B3* e *B5 systems*.

### 3.2. Turbulent Gas mixtures data set

O conjunto *Turbulent Gas mixtures* foi o mais difícil para os modelos aprenderem. Mesmo nas comparações entre os valores de custo e acurácia, pode-se observar que alguns modelos precisam de mais épocas para convergir. A tabela 10 mostra os valores do relatório de predição para cada modelo. Neste conjunto de dados o modelo *Sniff Multinose* tem a melhor valor de acurácia, no mesmo conjunto o modelo *Sniff ConvNet* teve valores de acurácia pouco maiores que 50%. Na figura 4 pode ser visto que apesar de haver um bom valor de acurácia, pode-se notar a evidência de sobreajuste do modelo *Sniff Multinose* sobre o conjunto de dados.

Class	<i>Sniff ConvNet</i>				<i>Sniff Resnet</i>				<i>Sniff Multinose</i>			
	Precisão	Recall	F1-score	acurácia	Precisão	Recall	F1-score	acurácia	Precisão	Recall	F1-score	acurácia
Etileno	0.75	1.00	0.86	0.94	1.00	1.00	1.00	0.94	0.80	1.00	0.89	0.81
Etanol	1.00	0.80	0.89									
Monóxido de carbono	1.00	0.86	0.92									
Metano	1.00	1.00	1.00									

**Tabela 8. Resultados de precisão, recall, F1-score e acurácia dos modelos *Sniff ConvNet*, *Sniff ResNet* e *Sniff Multinose* para o conjunto SAWT no subconjunto *B4-system***

Class	<i>Sniff ConvNet</i>				<i>Sniff Resnet</i>				<i>Sniff Multinose</i>			
	Precisão	Recall	F1-score	acurácia	Precisão	Recall	F1-score	acurácia	Precisão	Recall	F1-score	acurácia
Etileno	1.00	0.57	0.73	0.81	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00
Etanol	1.00	1.00	1.00									
Monóxido de carbono	0.50	1.00	0.67									
Metano	1.00	1.00	1.00									

**Tabela 9. Resultados de precisão, recall, F1-score e acurácia dos modelos *Sniff ConvNet*, *Sniff ResNet* e *Sniff Multinose* para o conjunto SAWT no subconjunto *B5-system***

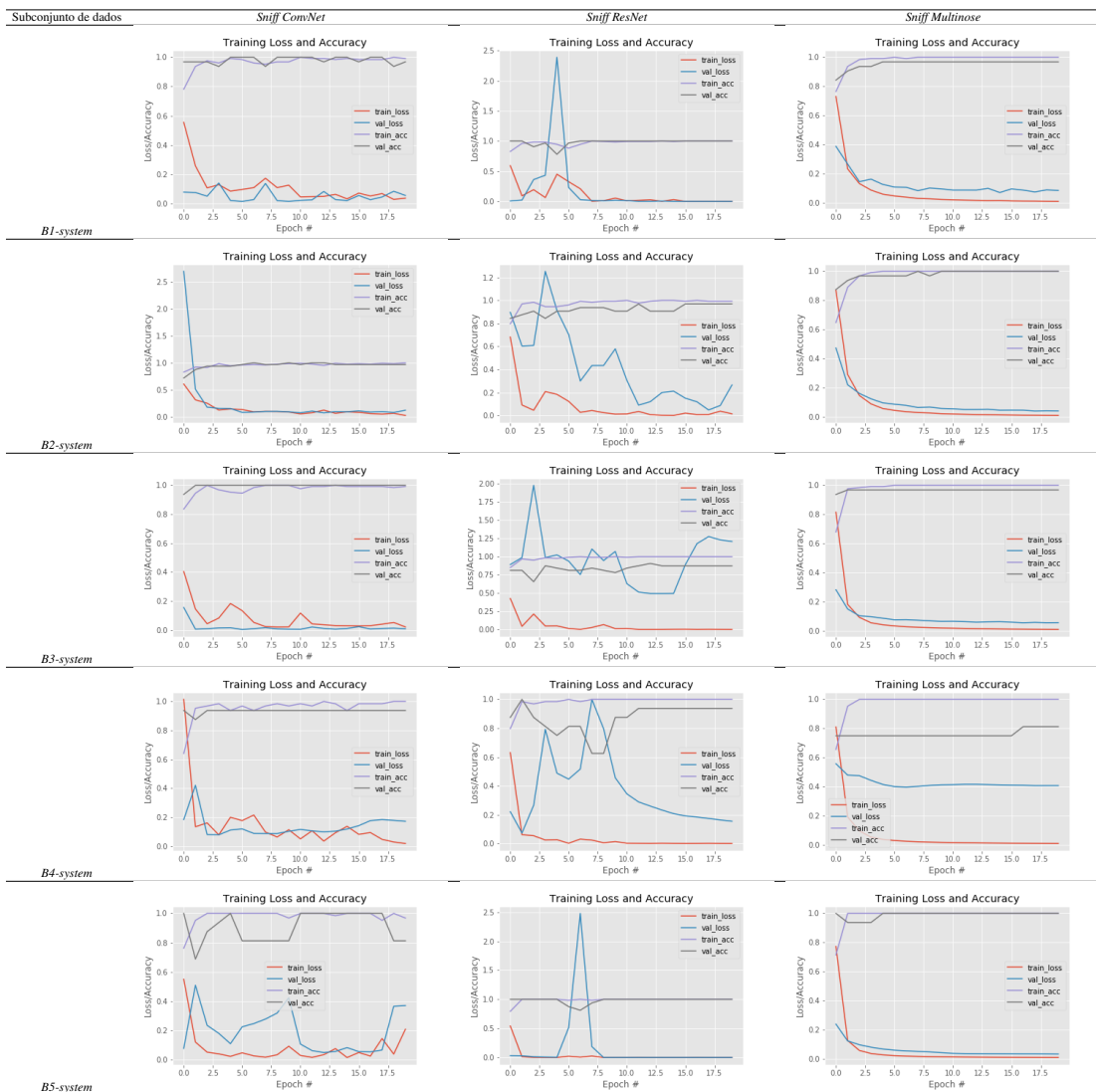
### 3.3. Wind Tunnel Dataset

Relembrando seção 2, diferentemente do conjunto *Turbulent Gas mixtures*. O conjunto *Wind tunnel* foi adquirido posicionando nove matrizes de oito sensores MOX em seis lugares diferentes em uma instalação de túnel de vento. Na tabela 11 é mostrado os relatórios de classificação de cada modelo de acordo com a primeira posição das matrizes de sensores 2. Apesar dos valores de acurácia terem sido menores que 90% os modelos tiveram valores de acurácia melhores que os obtidos nos experimentos com o conjunto *Turbulent Gas mixtures*. As tabelas 12,13,14,15 e 16 mostram os resultados dos modelos de acordo com os subconjuntos que contém as detecções das outras posições onde as outras matrizes de sensores foram colocadas. Das tabelas pode-se observar que o melhor valor geral de acurácia pertence ao modelo *Sniff Multinose*. Contudo, apesar disso todos os modelos tiveram um desempenho melhor com os dados adquiridos pelas detecções das múltiplas matrizes de sensores em uma instalação de túnel de vento do que pelos dados adquiridos por uma única matriz de sensores tal como no conjunto *Turbulent Gas mixtures*. Todos os modelos tiveram desempenho melhor quando as matrizes de sensores foram posicionadas na localização *P4*.

Na figura 5 é mostrado a comparação entre o custo e a acurácia de cada modelo de acordo com as diferentes posições em que as matrizes de sensores foram posicionadas. Também pode-se observar que quanto mais próximos os sensores estão da fonte de gás, mais difícil é para os modelos aprenderem os dados. Contudo, pode-se inferir a partir da figura 5 e tabelas 11,12, 13, 14, 15 e 16 que o modelo *Sniff Multinose* teve um desempenho geral melhor sobre todas as posições de matriz de sensores na instalação de túnel de vento.

Class	<i>Sniff ConvNet</i>				<i>Sniff Resnet</i>				<i>Sniff Multinose</i>			
	Precisão	Recall	F1-score	acurácia	Precisão	Recall	F1-score	acurácia	Precisão	Recall	F1-score	acurácia
<i>ET_n</i>	1.00	1.00	1.00	0.58	1.00	1.00	1.00	0.61	1.00	0.62	0.77	0.75
<i>ET_l</i>	0.43	0.33	0.38									
<i>ET_m</i>	0.45	0.45	0.45									
<i>ET_h</i>	0.58	0.70	0.64									

**Tabela 10. Resultados de precisão, recall, F1-score e acurácia dos modelos *Sniff ConvNet*, *Sniff ResNet* e *Sniff Multinose* para o conjunto *Turbulent Gas mixtures***

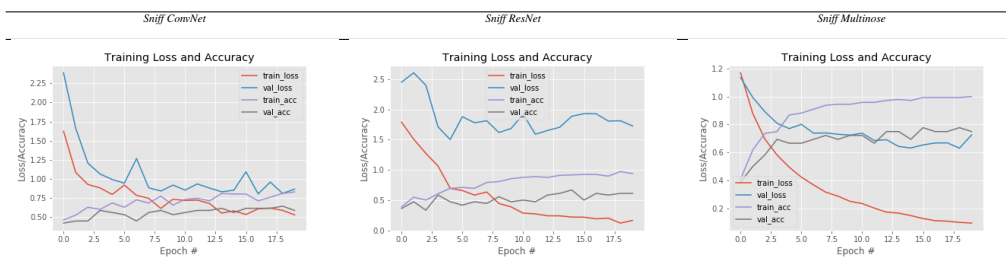


**Figura 3.** Comparação de custo do conjunto de treino e validação (*train\_loss*, *val\_loss*). E acurácia do conjunto de treino e de validação (*train\_acc*, *val\_acc*) de cada subconjunto do conjunto SAWT de acordo com cada modelo implementado. Cada *plot* contém a evolução do custo e da acurácia dos conjuntos de treino e validação. O eixo Y representa o resultado e o eixo X representa as épocas

Class	<i>Sniff ConvNet</i>				<i>Sniff Resnet</i>				<i>Sniff Multinose</i>			
	Precisão	Recall	F1-score	acurácia	Precisão	Recall	F1-score	acurácia	Precisão	Recall	F1-score	acurácia
Acetaldeído	1.00	0.86	0.95		0.67	0.67	0.67		0.67	0.50	0.57	
Acetona	0.80	1.00	1.00		1.00	1.00	1.00		1.00	1.00	1.00	
Amônia	1.00	1.00	0.92		1.00	1.00	1.00		1.00	1.00	1.00	
Benzeno	1.00	0.60	0.75		1.00	0.50	0.67		1.00	1.00	1.00	
Butanol	1.00	0.75	0.86		0.67	0.50	0.57		0.75	0.75	0.75	
CO C1	0.00	0.00	0.00	0.88	0.00	0.00	0.00	0.83	0.00	0.00	0.00	0.88
CO C2	1.00	1.00	1.00		0.60	1.00	0.75		1.00	1.00	1.00	
Etileno	1.00	1.00	1.00		1.00	0.71	0.83		1.00	1.00	1.00	
Metano	1.00	1.00	1.00		1.00	1.00	1.00		0.80	1.00	0.89	
Metanol	0.83	1.00	0.91		1.00	1.00	1.00		0.75	1.00	0.86	
Tolueno	0.50	1.00	0.67		0.50	0.67	0.57		0.80	1.00	0.89	

**Tabela 11.** Resultados de precisão, *recall*, *F1-score* e acurácia dos modelos *Sniff ConvNet*, *Sniff ResNet* e *Sniff Multinose* para o subconjunto P1





**Figura 4.** Comparação de custo do conjunto de treino e validação ( $train\_loss, val\_loss$ ). E acurácia do conjunto de treino e de validação ( $train\_acc, val\_acc$ ) do conjunto *Turbulent Gas mixtures* de acordo com cada modelo implementado. Cada *plot* contém a evolução do custo e da acurácia dos conjuntos de treino e validação. O eixo Y representa o resultado e o eixo X representa as épocas

Class	<i>Sniff ConvNet</i>				<i>Sniff Resnet</i>				<i>Sniff Multinose</i>			
	Precisão	Recall	F1-score	acurácia	Precisão	Recall	F1-score	acurácia	Precisão	Recall	F1-score	acurácia
Acetaldeído	0.80	1.00	0.89		1.00	0.33	0.50		0.83	1.00	0.91	
Acetona	1.00	1.00	1.00		1.00	1.00	1.00		1.00	1.00	1.00	
Amônia	1.00	1.00	1.00		1.00	0.50	0.67		1.00	1.00	1.00	
Benzeno	1.00	0.50	0.67		1.00	0.67	0.80		1.00	0.80	0.89	
Butanol	0.22	1.00	0.36		0.50	1.00	0.67		0.75	0.75	0.75	
CO C1	0.00	0.00	0.00	0.74	1.00	0.50	0.67	0.82	1.00	0.50	0.67	0.95
CO C2	0.50	1.00	0.67		0.00	0.00	0.00		0.00	0.00	0.00	
Etileno	1.00	1.00	1.00		1.00	1.00	1.00		1.00	1.00	1.00	
Metano	1.00	0.62	0.77		0.40	1.00	0.57		0.50	1.00	0.67	
Metanol	1.00	0.20	0.33		1.00	0.75	0.86		1.00	1.00	1.00	
Tolueno	1.00	1.00	1.00		1.00	1.00	1.00		1.00	1.00	1.00	

**Tabela 12.** Resultados de precisão, *recall*, *F1-score* e acurácia dos modelos *Sniff ConvNet*, *Sniff ResNet* e *Sniff Multinose* para o subconjunto *P2*

Class	<i>Sniff ConvNet</i>				<i>Sniff Resnet</i>				<i>Sniff Multinose</i>			
	Precisão	Recall	F1-score	acurácia	Precisão	Recall	F1-score	acurácia	Precisão	Recall	F1-score	acurácia
Acetaldeído	0.71	1.00	0.83		1.00	0.83	0.91		1.00	1.00	1.00	
Acetona	1.00	1.00	1.00		1.00	1.00	1.00		1.00	1.00	1.00	
Amônia	1.00	1.00	1.00		1.00	1.00	1.00		1.00	1.00	1.00	
Benzeno	1.00	1.00	1.00		1.00	1.00	1.00		1.00	1.00	1.00	
Butanol	1.00	1.00	1.00		0.50	0.75	0.86		1.00	1.00	1.00	
CO C1	1.00	1.00	1.00	0.95	0.00	0.00	0.00	0.95	1.00	1.00	1.00	1.00
CO C2	1.00	1.00	1.00		1.00	1.00	1.00		1.00	1.00	1.00	
Etileno	1.00	1.00	1.00		1.00	1.00	1.00		1.00	1.00	1.00	
Metano	1.00	1.00	1.00		1.00	1.00	1.00		1.00	1.00	1.00	
Metanol	1.00	0.80	0.89		0.50	1.00	0.67		1.00	1.00	1.00	
Tolueno	1.00	0.83	0.91		1.00	1.00	1.00		1.00	1.00	1.00	

**Tabela 13.** Resultados de precisão, *recall*, *F1-score* e acurácia dos modelos *Sniff ConvNet*, *Sniff ResNet* e *Sniff Multinose* para o subconjunto *P3*

Class	<i>Sniff ConvNet</i>				<i>Sniff Resnet</i>				<i>Sniff Multinose</i>			
	Precisão	Recall	F1-score	acurácia	Precisão	Recall	F1-score	acurácia	Precisão	Recall	F1-score	acurácia
Acetaldeído	1.00	1.00	1.00		0.75	1.00	0.86		1.00	1.00	1.00	
Acetona	1.00	1.00	1.00		1.00	1.00	1.00		1.00	1.00	1.00	
Amônia	1.00	1.00	1.00		1.00	1.00	1.00		1.00	1.00	1.00	
Benzeno	1.00	1.00	1.00		1.00	1.00	1.00		1.00	1.00	1.00	
Butanol	1.00	1.00	1.00		1.00	0.50	0.67		1.00	1.00	1.00	
CO C1	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00	0.93	1.00	1.00	1.00	1.00
CO C2	1.00	1.00	1.00		1.00	1.00	1.00		1.00	1.00	1.00	
Etileno	1.00	1.00	1.00		1.00	1.00	1.00		1.00	1.00	1.00	
Metano	1.00	1.00	1.00		1.00	1.00	1.00		1.00	1.00	1.00	
Metanol	1.00	1.00	1.00		0.67	1.00	0.80		1.00	1.00	1.00	
Tolueno	1.00	1.00	1.00		1.00	1.00	1.00		1.00	1.00	1.00	

**Tabela 14.** Resultados de precisão, *recall*, *F1-score* e acurácia dos modelos *Sniff ConvNet*, *Sniff ResNet* e *Sniff Multinose* para o subconjunto *P4*

Class	<i>Sniff ConvNet</i>				<i>Sniff Resnet</i>				<i>Sniff Multinose</i>			
	Precisão	Recall	F1-score	acurácia	Precisão	Recall	F1-score	acurácia	Precisão	Recall	F1-score	acurácia
Acetaldeído	1.00	1.00	1.00		1.00	0.40	0.57		1.00	1.00	1.00	
Acetona	1.00	1.00	1.00		0.00	0.00	0.00		1.00	1.00	1.00	
Amônia	1.00	1.00	1.00		1.00	1.00	1.00		1.00	1.00	1.00	
Benzeno	1.00	0.86	0.92		1.00	0.86	0.92		1.00	1.00	1.00	
Butanol	0.75	1.00	0.86		0.29	1.00	0.44		0.67	1.00	0.80	
CO C1	0.00	0.00	0.00	0.95	1.00	0.50	0.67	0.78	0.00	0.00	0.00	0.90
CO C2	1.00	1.00	1.00		1.00	0.83	0.91		1.00	1.00	1.00	
Etileno	1.00	1.00	1.00		1.00	1.00	1.00		1.00	1.00	1.00	
Metano	1.00	1.00	1.00		0.67	1.00	0.80		1.00	1.00	1.00	
Metanol	0.80	1.00	0.89		1.00	0.50	0.67		0.67	0.50	0.57	
Tolueno	1.00	1.00	1.00		0.50	1.00	0.67		0.80	1.00	0.89	

**Tabela 15. Resultados de precisão, recall, F1-score e acurácia dos modelos *Sniff ConvNet*, *Sniff ResNet* e *Sniff Multinose* para o subconjunto P5**

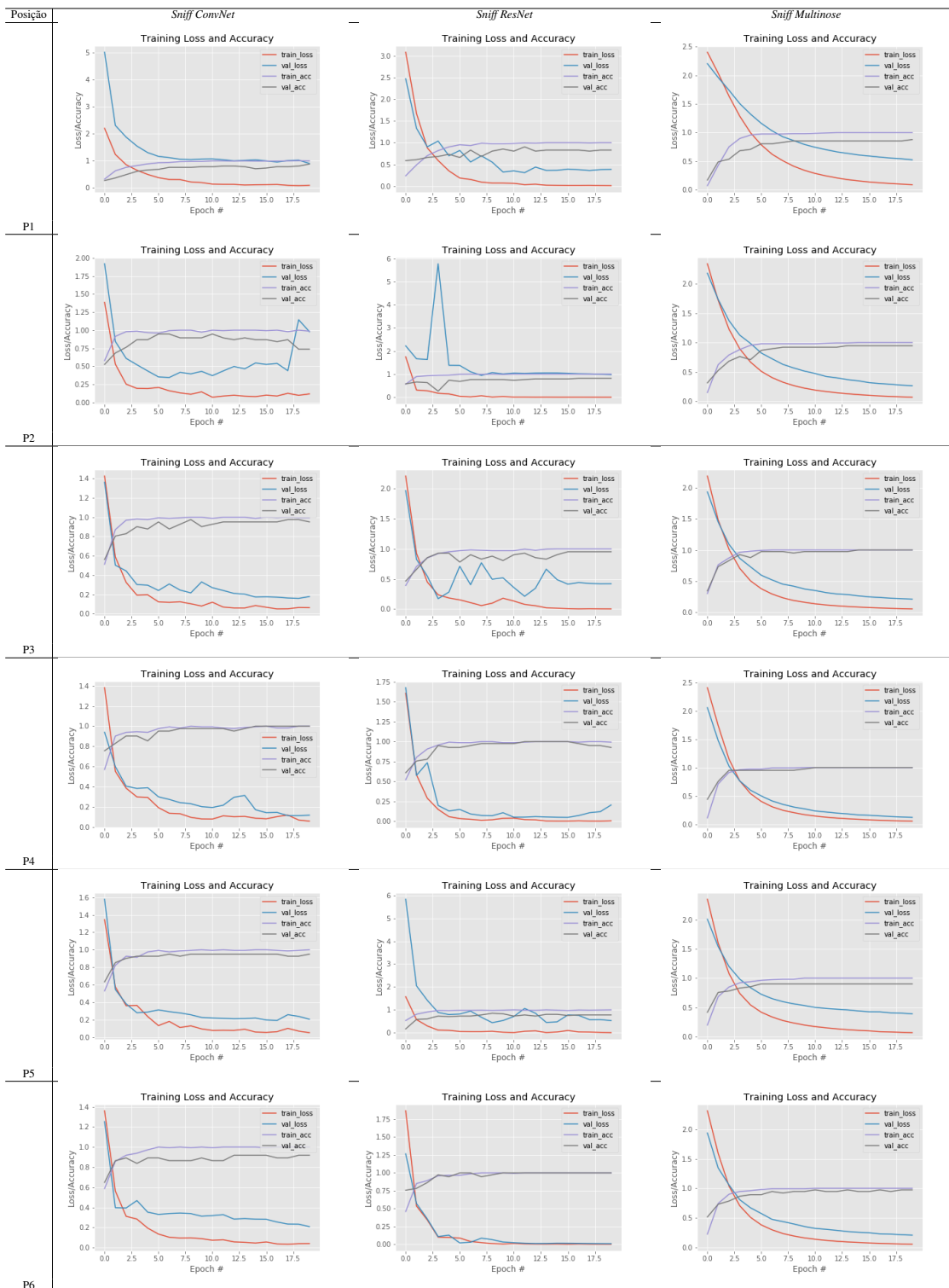
Class	<i>Sniff ConvNet</i>				<i>Sniff Resnet</i>				<i>Sniff Multinose</i>			
	Precisão	Recall	F1-score	acurácia	Precisão	Recall	F1-score	acurácia	Precisão	Recall	F1-score	acurácia
Acetaldeído	0.67	1.00	0.80		1.00	1.00	1.00		0.00	0.00	0.00	
Acetona	1.00	1.00	1.00		1.00	1.00	1.00		1.00	1.00	1.00	
Amônia	1.00	1.00	1.00		1.00	1.00	1.00		1.00	1.00	1.00	
Benzeno	1.00	0.67	0.80		1.00	1.00	1.00		1.00	0.80	0.89	
Butanol	0.00	0.00	0.00	0.95	1.00	1.00	1.00	1.00	0.00	0.00	0.00	
CO C1	0.00	0.00	0.00		1.00	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00	0.97
CO C2	1.00	1.00	1.00		1.00	1.00	1.00		1.00	1.00	1.00	
Etileno	1.00	1.00	1.00		1.00	1.00	1.00		1.00	1.00	1.00	
Metano	1.00	1.00	1.00		1.00	1.00	1.00		1.00	1.00	1.00	
Metanol	1.00	1.00	1.00		1.00	1.00	1.00		1.00	1.00	1.00	
Tolueno	0.60	0.75	0.67		1.00	1.00	1.00		0.50	1.00	0.67	

**Tabela 16. Resultados de precisão, recall, F1-score e acurácia dos modelos *Sniff ConvNet*, *Sniff ResNet* e *Sniff Multinose* para o subconjunto P6**

Onde os valores de acurácia e de custotiveram melhor convergência quando comparado aos dos outros modelos implementados.

#### 4. Conclusão e trabalhos futuros

Este trabalho mostra resultados experimentais do uso de modelos de *deep learning* [Godfellow et al. 2016] na classificação de gases detectados por matrizes de sensores de nariz artificial. Apesar dos bons valores de acurácia obtidos, pode-se observar na Fig.4 que quanto mais heterogêneo for o composto será mais difícil para o modelo distinguir os diferentes gases. Como mencionado na seção 2.1 das bases de dados utilizadas, duas eram compostas de subconjuntos. Já que os exemplos de dados dos subconjuntos foram salvos com o mesmo formato. Um trabalho futuro poderia ser a reutilização do modelo em um dos subconjuntos para ser treinado e classificar exemplos de dados em outros subconjuntos diferentes. Um outro trabalho futuro a ser feito é realizar uma análise comparativa dos modelos implementados com outros algoritmos (como por exemplo *support vector machines* ou *random forest*) e abordagens de DL utilizadas em problemas similares. O único tipo de pré-processamento utilizado nos experimentos foi a normalização. Outro trabalho futuro poderia ser, aplicar outros tipos de transformação nos dados. Por exemplo, transformar a detecção de cada sensor MOX em uma imagem. Significando que a detecção de uma matriz com oito sensores MOX seria representada por uma imagem com oito canais. Em seguida, os experimentos neste trabalho poderiam ser repetidos de modo a investigar se algum tipo de melhoria foi obtida ao se aplicar tal transformação. Desta forma, outros tipos de conjuntos de dados utilizando matrizes de sensores MOX poderiam ser utilizados.



**Figura 5. Comparação de custo do conjunto de treino e validação ( $train\_loss$ ,  $val\_loss$ ). E acurácia do conjunto de treino e de validação ( $train\_acc$ ,  $val\_acc$ ) do conjunto *Wind Tunnel* de acordo com cada modelo implementado. Cada *plot* contém a evolução do custo e da acurácia dos conjuntos de treino e validação. O eixo Y representa o resultado e o eixo X representa as épocas**

## Referências

- Chollet, F. et al. (2015). Keras. <https://keras.io>.
- Fonollosa, J., Fernandez, L., Gutiérrez-Gálvez, A., Huerta, R., and Marco, S. (2016). Calibration transfer and drift counteraction in chemical sensor arrays using direct standardization. *Sensors and Actuators B: Chemical*, 236:1044–1053.
- Fonollosa, J., Rodríguez-Luján, I., Trincavelli, M., and Huerta, R. (2015). Data set from chemical sensor array exposed to turbulent gas mixtures. *Data in brief*, 3:216–220.
- Fonollosa, J., Rodríguez-Luján, I., Trincavelli, M., Vergara, A., and Huerta, R. (2014). Chemical discrimination in turbulent gas mixtures with mox sensors validated by gas chromatography-mass spectrometry. *Sensors*, 14(10):19336–19353.
- Goodfellow, I., Bengio, Y., and Courville, A. (2016). *Deep learning*. MIT press.
- Pedregosa, F., Varoquaux, G., Gramfort, A., Michel, V., Thirion, B., Grisel, O., Blondel, M., Prettenhofer, P., Weiss, R., Dubourg, V., Vanderplas, J., Passos, A., Cournapeau, D., Brucher, M., Perrot, M., and Duchesnay, E. (2011). Scikit-learn: Machine learning in Python. *Journal of Machine Learning Research*, 12:2825–2830.
- Vergara, A., Fonollosa, J., Mahiques, J., Trincavelli, M., Rulkov, N., and Huerta, R. (2013). On the performance of gas sensor arrays in open sampling systems using inhibitory support vector machines. *Sensors and Actuators B: Chemical*, 185:462–477.
- Zanchettin, C. and Ludermir, T. B. (2007). Wavelet filter for noise reduction and signal compression in an artificial nose. *Applied Soft Computing*, 7(1):246–256.