

Un sistema de clasificación de olores en línea para narices electrónicas

An online odor classification system for electronic noses



■■■■■

Juan-Álvaro Fernández-Muñoz¹, José-Luis Herrero-Agustín², Jesús Lozano-Rogado¹, José-Pedro Santos-Blanco³, José-Ignacio Suárez-Marcelo¹
Universidad de Extremadura. E.II.II. Dpto. Ing. Eléctrica, Electrónica y Automática¹ y Dpto. Ing. Sistemas Informáticos y Telemáticos². Avenida Elvas, s/n – 06006 Badajoz. Tfno: +34 924 289 600.
³ Instituto de Tecnologías Físicas y de la Información. Centro Superior de Investigaciones Científicas. C/ Serrano, 144 – 28006 Madrid. Tfno: +34 91 561 88 06.

DOI: <http://dx.doi.org/10.6036/8075> | Recibido: 02/06/2016 • Aceptado: 27/10/2016

ABSTRACT

- The design of technical instrumentation based on biological principles, which are utilized by human perception senses to interact with the environment, has been a principal subject of research in several engineering disciplines for decades. However, only some of these artificial senses, such as machine vision, have comparatively reached a sufficient level of maturity so as to allow their regular use in nowadays industry. The challenge of artificially replicating the biological olfactory sense has resulted in the development of compact electronic systems commonly known as electronic noses or e-noses. These systems require, on the one hand, the use of specifically designed sensors for detecting odors, and secondly, the application of artificial intelligence software techniques for data processing and classification in a real-time basis. In this paper, a novel artificial olfaction system based on web services is introduced. The proposed system provides online odour data processing and recognition capabilities, regardless of e-nose location and built-in sensors, thus facilitating the design of smaller, generic or specific e-noses, which are suitable for use in connected IT environments.
- **Keywords:** electronic nose, multi-sensor system, pattern recognition, distributed systems, artificial intelligence, pollutant classification, Internet of things.

RESUMEN

El diseño de instrumentos basados en los mismos principios que los sentidos asociados a la percepción humana del entorno ha sido objeto de gran interés en investigación en diversas áreas de la ingeniería durante décadas. Comparativamente, sin embargo, solo algunos de estos sentidos, como la visión artificial, han alcanzado un nivel de madurez tal que permite hoy su uso habitual en la industria. El reto de replicar artificialmente el sentido olfativo biológico ha dado lugar a sistemas electrónicos compactos conocidos como narices electrónicas o e-noses, en inglés. Estos sistemas requieren, por un lado, el uso de sensores diseñados específicamente para detectar olores, y por otro, la aplicación de técnicas *software* de inteligencia artificial para el procesamiento de la información y la clasificación de los datos en tiempo real. En este trabajo se presenta un novedoso sistema de olfacción artificial basado en servicios *web*, que posibilita la conexión remota en línea de narices electrónicas para el envío de sus datos adquiridos, y la recepción de los resultados de clasificación de aromas de interés,

obtenidos mediante técnicas de reconocimiento de patrones sobre dichos datos, con mínimo retardo. El sistema es independiente de la ubicación del terminal detector y de sus sensores, lo que facilita el diseño de narices electrónicas más pequeñas, específicas o genéricas, aptas para su uso en entornos conectados inteligentes.

Palabras Clave: nariz electrónica, sistema de sensores, reconocimiento de patrones, sistemas distribuidos, inteligencia artificial, clasificación de contaminantes, Internet de las cosas.

1. INTRODUCCIÓN

Uno de los retos de ingeniería más importantes de las últimas décadas ha sido el de replicar artificialmente el sentido olfativo biológico mediante, por un lado, el desarrollo de novedosos tipos de sensores diseñados específicamente para detectar olores, y por otro, la aplicación de técnicas *software* de inteligencia artificial (IA) para el procesamiento de la información y la clasificación de datos dentro del paradigma de tiempo de respuesta mínimo [1]. En su acepción más ampliamente aceptada, una nariz electrónica (en inglés, *electronic nose* o *e-nose*) es un dispositivo que comprende un conjunto de sensores electroquímicos con sensibilidades parcialmente solapadas entre sí, y un sistema de reconocimiento de patrones apropiado, capaz de reconocer olores simples o complejos [2]. En la actualidad, los recientes avances en microelectrónica, sensores y procesamiento de señales han posibilitado la fabricación de narices electrónicas compactas, dotadas de una mayor capacidad de integración en plataformas portátiles o móviles, robotizadas e inteligentes, que pueden formar parte de escenarios interconectados en red como el Internet de las cosas [1,3].

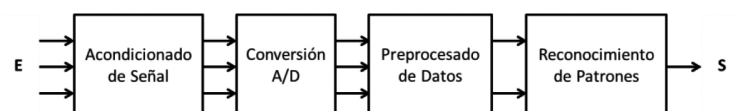


Fig. 1: Diagrama de bloques de una nariz electrónica

En la Fig. 1 se muestra la arquitectura típica de un sistema electrónico de identificación de olores. El proceso de identificación comienza recopilando las señales de salida de cada uno de los elementos de la matriz de sensores, que se producen a partir de un cambio de sus propiedades eléctricas al exponerse a una sustancia específica. De forma similar a los receptores olfativos biológicos, que son sensibles a múltiples olores, donde un mismo olor puede

ser detectado por diferentes receptores; un sensor químico responde de forma diferente a distintas sustancias, pudiendo operar en paralelo para cubrir todo un rango de sustancias de interés. El grado de selectividad de respuesta de la nariz depende, por tanto, en gran medida del tipo y número de sensores de entrada. Estas señales han de ser acondicionadas como paso previo a su digitalización, ya que es necesario operar con datos discretos fiables en la etapa de procesamiento. La etapa de preprocesado tiene como objetivo reducir la redundancia de los datos de entrada, para optimizar la respuesta del bloque de reconocimiento de patrones, cuya salida representa la clasificación del olor [1].

Las aplicaciones actuales de las narices electrónicas proporcionan servicios de clasificación de aromas y permiten detectar situaciones especiales en una notable diversidad de contextos prácticos, desde aplicaciones biomédicas y medioambientales, al control de calidad de productos farmacéuticos y el proceso de alimentos, entre otros. Sin embargo, los sistemas basados en narices electrónicas se diseñan habitualmente como aplicaciones independientes, no conectadas, incapaces de proporcionar servicios de compartición de resultados ni de peticiones remotas. Recientemente, varios autores [1,4] han mostrado un creciente interés en el uso de servidores *web* para compartir datos y proporcionar servicios de clasificación desde Internet. Sin embargo, la estructura *software* utilizada es de naturaleza cerrada.

El presente trabajo propone un enfoque de diseño para un sistema de olfacción artificial basado en servicios específicos *web* que permitan: (1) aceptar datos adquiridos por narices electrónicas con capacidad de conexión a red, (2) clasificar las sustancias de interés usando técnicas de IA para reconocimiento de patrones, y (3) proporcionar una aplicación *web* de altas prestaciones, capaz de generar resultados de clasificación de aromas en respuesta a peticiones de clasificación en línea, con mínimo retardo. El resto del artículo se ha estructurado como sigue: en la Sección 2 se presentan los detalles técnicos incorporados al sistema de olfacción artificial desarrollado, en especial su estructura y funcionalidad. En la Sección 3 se presentan los resultados de una prueba de validación de funcionamiento a la que ha sido sometido el sistema propuesto, para clasificar un grupo de contaminantes de interés en aplicaciones de control de la calidad del aire. Finalmente, en la Sección 4 se resumen las principales conclusiones derivadas de estos resultados.

2. MATERIALES Y MÉTODOS

2.1. NARIZ ELECTRÓNICA PORTÁTIL

En el presente trabajo se ha utilizado una nariz electrónica portátil con capacidades de conectividad inalámbrica a redes Ethernet. La nariz electrónica WiNOSE ha sido la herramienta utilizada en diversos estudios de clasificación de aromas publicados en la última década [5,6]. Para este trabajo, se ha configurado un dispositivo WiNOSE 3.0 con sensores adecuados para las pruebas que se detallan más adelante en la Sección 3. El dispositivo de olfacción artificial WiNOSE puede describirse mediante cuatro bloques funcionales básicos o subsistemas: (1) extracción de aromas, (2) detección de aromas, (3) instrumentación y control y (4) acondicionado de señal.

2.1.1. Extracción de aromas

Se ha elegido la técnica del espacio de cabeza modificada para la extracción de olores desde viales de vidrio. Esta técnica consiste en aislar la muestra de agua en forma líquida en un recipiente

herméticamente cerrado, en este caso un vial, de manera que los volátiles que son desprendidos por el agua residual queden conservados en la zona superior del recipiente, formando así una muestra gaseosa en equilibrio con el líquido, representativa del olor de la misma. Acto seguido, a través de unas aberturas para la entrada y salida del gas portador, se realiza el transporte de los volátiles desprendidos de la muestra hacia los sensores [3,7].

2.1.2. Sensores

La nariz electrónica WiNOSE 3.0 admite hasta 4 microsensores de diversos tipos integrados como *array* de entrada. Se han fabricado celdas a medida en Al para alojar diferentes tipos de *arrays* de sensores. Para las pruebas detalladas en la Sección 3, se han elegido cuatro sensores comerciales de película de SnO₂ (SGX Sensortech modelos MiCS-5524 (x2), MiCS-5526 y MiCS-5914), suspendidos sobre estructuras micromecanizadas de Si, que incorporan una resistencia calefactora y contactos para medir la resistencia de la película sensible. Cada sensor puede operar a una temperatura distinta, hasta un máximo de 500 °C, con un consumo inferior a 100 mW. En la Fig. 2 se muestran los sensores ya integrados en parejas, junto a una de las celdas de Al. Cada celda está conectada a una electroválvula de tres vías (SMC S70) que permite seleccionar entre dos entradas, una para medida de la muestra, y otra para un gas de referencia, dotándose esta última de un filtro de carbón activo para evitar impurezas. El sistema se completa con sendos sensores de humedad relativa y temperatura (Sensirion SHT15), una microbomba (Rietschle Thomas 2002) y un caudalímetro (SMC PFMV5).

2.1.3. Instrumentación y control

El dispositivo se gobierna mediante un microcontrolador digital de señales (DSC) Microchip DSPIC33FJ128GP306, con 16 kB de RAM y 128 kB de memoria FLASH. Posee cuatro conversores A/D para la medida de los sensores y cinco salidas con modulación PWM para la calefacción de los sensores y el control de la microbomba. Dispone de controlador WiFi y pantalla LCD táctil, que permite visualizar los principales parámetros de medida en modo histórico, así como modificar diferentes parámetros de configuración (p. e. potencia de bombeo y temperatura de sensor). La



Fig. 2: Montaje en placa de dos sensores SGX Sensortech MiCS-5524, junto a celda de Al fabricada a medida

nariz se alimenta con 3 baterías recargables de 4500 mA/h que proporcionan 8 horas de autonomía.

2.1.4. Acondicionado de señal

En todo sistema olfativo artificial, debido a perturbaciones inevitables al método de medida, es necesario utilizar técnicas de procesamiento de datos y señales para mejorar la robustez de la medida [3]. El objetivo fundamental del acondicionado de señal es mejorar el rendimiento de los bloques posteriores de la Fig. 1, responsables de la identificación de las muestras de entrada. Los datos de los sensores se manipulan para obtener parámetros descriptivos de la respuesta de la matriz de sensores que optimicen la selectividad de las técnicas de reconocimiento [8]. Generalmente, en esta fase se llevan a cabo tres pasos básicos: (1) manipulación de la medida de entrada o base, que compensa las derivas de los sensores de entrada, (2) compresión, que extrae información de la respuesta transitoria de cada sensor, y (3) normalización, que prepara un vector de características homogéneas adecuado para el preprocesado de datos (véase Fig. 1).

2.2. RECONOCIMIENTO DE PATRONES

2.2.1. Preprocesado de Datos

Los datos provenientes de la nariz electrónica poseen un alto grado de redundancia debido, por una parte, a la sensibilidad cruzada de los sensores de gas, y también a la elevada dimensionalidad de los datos acondicionados del *array* de entrada. El preprocesado de datos busca reducir la dimensionalidad, con el fin de obtener un conjunto de valores numéricos (o vector característico) asociado a cada aroma lo más compacto posible, con miras a su posterior clasificación e identificación. Las herramientas matemáticas más habitualmente utilizadas en este bloque son el Análisis de Componentes Principales (PCA, del inglés *Principal Component Analysis*) y el Análisis Discriminante Lineal (LDA, del inglés *Linear Discriminant Analysis*).

El algoritmo PCA, de naturaleza no supervisada, define una transformación lineal del sistema de coordenadas de entrada en otro que permite categorizar en cada dimensión las varianzas relativas del conjunto de datos de forma ordenada. Como resultado, se determinan los componentes principales de la distribución como aquellas dimensiones asociadas a varianzas más significativas. La reducción de dimensionalidad se obtiene descartando aquellos componentes principales de menor varianza [9]. El objetivo del algoritmo LDA es encontrar las líneas de separación que mejor permiten separar clases entre sí, con conocimiento *a priori* de dichas clases. LDA proporciona resultados óptimos cuando las variables son de naturaleza Gaussiana. Es posible, en principio, que una componente principal de menor importancia sea la más discriminante para una pareja de clases, pero también es habitual que las distribuciones de entrada no sean Gaussianas. Por esta razón, ambas técnicas se consideran complementarias en la literatura [10].

2.2.2. Técnicas para Reconocimiento de Patrones

El objetivo del reconocimiento de patrones es clasificar o etiquetar de forma automática la clase o etiqueta asociada a cada vector de entrada obtenido a la salida del bloque de preprocesado. Para lograr una correcta identificación de las muestras, es necesario llevar a cabo un proceso de aprendizaje supervisado, según el cual una técnica concreta ajustará los parámetros necesarios para optimizar la tasa de éxito de clasificación (TE) de las muestras de aprendizaje, con la intención de utilizar dichos parámetros para clasificar muestras futuras. En este trabajo se ha dotado a este

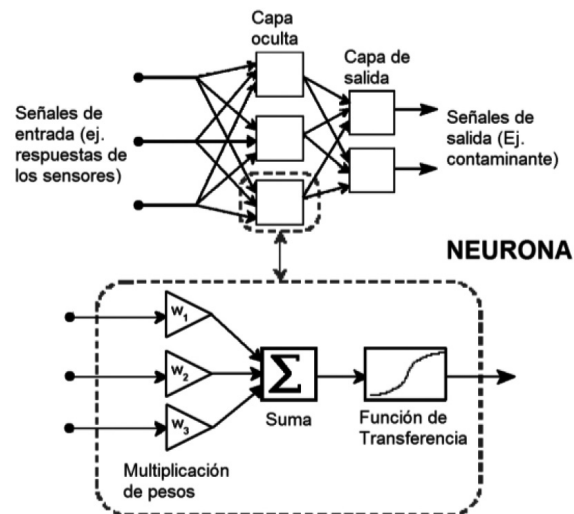


Fig. 3: Estructura de un perceptrón de 3 capas: entrada (3 neuronas), oculta (3 neuronas) y salida (2 neuronas)

bloque con dos técnicas de clasificación diferentes: (1) perceptrón multicapa sin realimentación, y (2) clasificador borroso.

El perceptrón multicapa es un tipo de red neuronal artificial (RNA) dotado de una red homogénea de procesadores idénticos o neuronas, organizados en varios planos o capas, con interconectividad completa entre cada neurona de una capa y las neuronas de la capa inmediatamente anterior, aplicando una suma ponderada de todas las conexiones, y una función logística o de saturación a la salida. En la Fig. 3 se muestra la estructura del perceptrón más simple, que contiene tres capas: entrada, oculta y salida. Las capas de entrada y salida tienen dimensión fija, según el número de elementos del vector de entrada y de etiquetas a clasificar, respectivamente. Solo la capa oculta permite un ajuste tanto del número de neuronas como del valor de los pesos. El algoritmo de propagación hacia atrás (en inglés, *backpropagation*), con diferencia el más utilizado en este tipo de RNA, realiza el ajuste de los pesos en dos fases. En la primera, se introduce un vector en la capa de entrada y se calcula el valor de cada capa hacia delante hasta la salida. En la segunda, se modifican los pesos capa a capa, hacia atrás, para ajustar la salida al valor deseado [11].

La segunda técnica de clasificación considerada es un clasificador de lógica borrosa (FL, del inglés *Fuzzy Logic*). FL es una extensión de la lógica clásica que permite definir un grado de pertenencia parcial para cada elemento de un conjunto [12]. La clasificación borrosa se basa en la definición de funciones de pertenencia adecuadas a vectores de entrada y clases o etiquetas de salida. La clasificación se formula mediante reglas lógicas que combinan con operadores AND las funciones de pertenencia de los elementos del vector de entrada para cada clase de salida. Para un vector de entrada, el clasificador identifica la clase de salida como aquella asociada a la regla lógica con grado de pertenencia máximo. El aprendizaje FL requiere de métodos para la definición de las funciones de pertenencia individuales y para la selección de variables a utilizar en cada regla. En este trabajo se utiliza un método basado en el proceso de ajuste de parámetros de otro tipo de RNA llamado de base radial. De estructura similar al perceptrón, aunque con un número de neuronas y capas determinado, estas redes incorporan una función de salida neuronal de base radial (RBF, del inglés *radial basis function*), típicamente una función Gaussiana, siendo su método de ajuste del tipo no supervisado [11]. El clasificador FL propuesto utiliza un método similar para obtener las funciones de pertenencia, siendo todas Gaussianas ajustadas a la

estadística de los vectores de entrada para cada clase, como en una RNA RBF. El ajuste final del número de variables de cada regla se realiza mediante un algoritmo de búsqueda secuencial simple, que optimiza la selectividad borrosa de cada regla respecto al resto de reglas para el conjunto de muestras de aprendizaje.

2.3. PLATAFORMA DE SERVICIOS DE OLFACCIÓN WEB

2.3.1. Metodología de diseño

Para el presente trabajo se ha desarrollado una novedosa plataforma *web* que permite adquirir los datos extraídos de narices electrónicas antes del bloque de preprocesamiento (véase Fig. 1). Es decir, el sistema *web* aglutina la parte del sistema de olfacción artificial clásico dedicada al procesamiento digital de los datos de entrada, permitiendo de forma transparente utilizar sus módulos de reconocimiento independientemente de la nariz utilizada y de las muestras de entrada. El objetivo fundamental de esta plataforma es proporcionar un alto grado de accesibilidad para poder utilizar tanto los datos procesados como los servicios ofrecidos. Además, esta propuesta proporciona una aplicación rápida y fácil de usar, con pocos requisitos, accesible de forma remota y disponible a través de cualquier dispositivo con capacidad de conexión a servicios *web*, p. e. microsensores conectables a red, tabletas o *smartphones*.

De acuerdo con los dos tipos de clasificación de muestras considerados en la Sección 2.2.2, se propone una metodología de diseño de la plataforma *web* que permita la construcción flexible de aplicaciones de detección de aromas (véase Fig. 4). Esta metodología se basa en la definición de diferentes niveles en los que se desarrolla cada una de las partes de la plataforma. La metodología se divide en dos secciones independientes: red neuronal y modelo borroso. El objetivo del primer nivel es obtener un conjunto de datos iniciales que permitan la construcción de los modelos de

clasificación. Para la construcción de la red neuronal, la información recibida de la nariz electrónica se transforma en parejas E/S etiquetadas tras una evaluación de datos con objeto de reducir la dimensionalidad. Para construir el modelo borroso, se determina un conjunto de reglas ajustadas al tipo de datos de E/S mediante el procedimiento descrito en la Sección 2.2.2. El siguiente nivel contiene los algoritmos que permiten el ajuste de cada modelo a las parejas de E/S seleccionadas en cada caso. El resultado de ambas aproximaciones son dos modelos (red neuronal y modelo borroso) que posibilitan la clasificación genérica de los datos de entrada en las clases seleccionadas en el nivel anterior.

El nivel de servicios *web* conecta el sistema desarrollado tanto con los usuarios como con las aplicaciones externas que solicitan resultados de clasificación de aromas. Para proporcionar un acceso remoto al sistema, la plataforma desarrollada utiliza servicios RESTful, basados en la arquitectura REST (del inglés *REpresentational State Transfer*). RESTful es actualmente la tecnología más relevante en el desarrollo de servicios *web* y móviles. Si el propósito de un servicio es proporcionar una ventana a sus clientes para que puedan acceder a los recursos, el diseñador del servicio busca que sea fácil de implementar, mantener, extender y ampliar. Los servicios RESTful logran estos objetivos mediante el uso de un conjunto reducido de primitivas del protocolo de aplicación HTTP, como GET, POST, PUT y DELETE [13]. Por último, el nivel de componentes *web* define una aplicación con un alto grado de eficiencia que soporta peticiones a través de Internet y permite a los usuarios conectarse con cada uno de los diferentes servicios ofrecidos por la plataforma de forma transparente e independiente del dispositivo.

2.3.2. Implementación

Siguiendo la metodología descrita en la Sección 2.3.1, se ha desarrollado una novedosa plataforma de servicios *web* para la

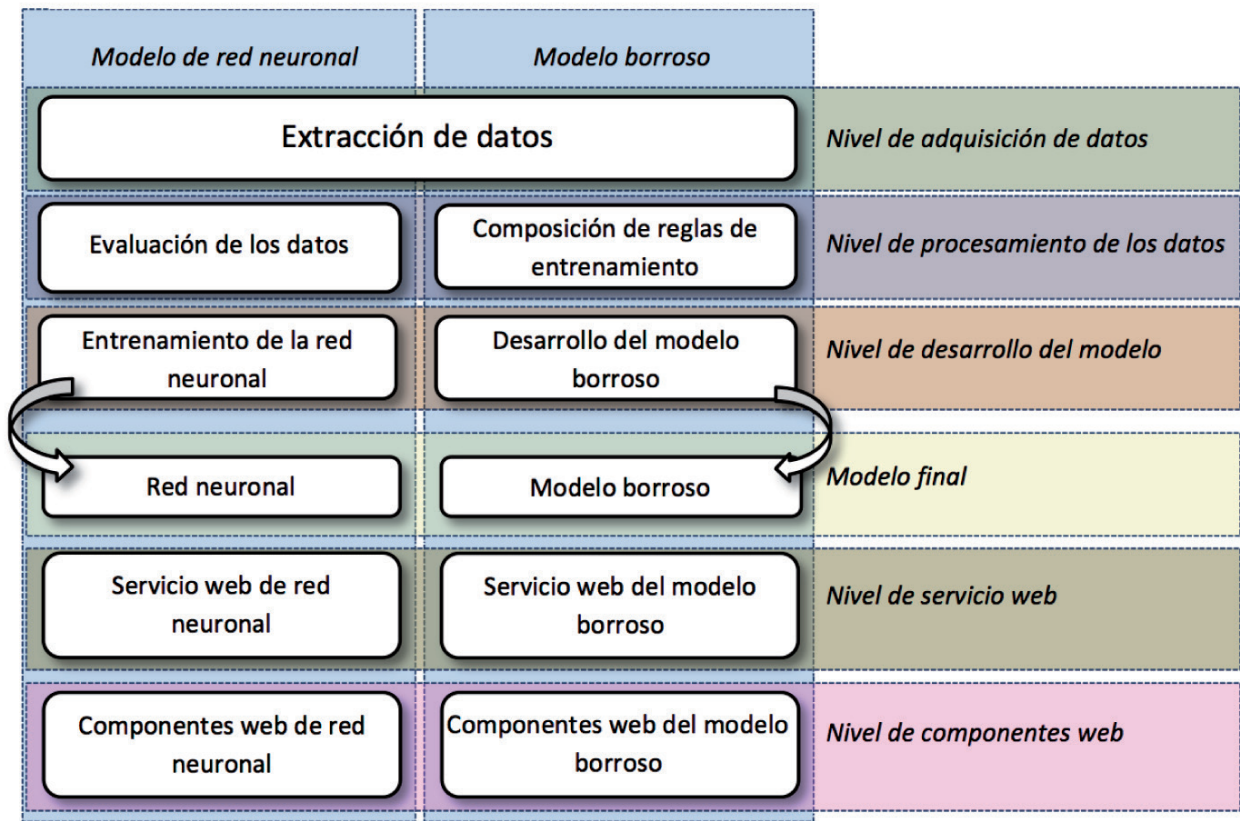


Fig. 4: Estructura software del servidor web para clasificación de aromas

clasificación genérica de aromas en línea, en la que se integran las siguientes tecnologías *software* de alta eficiencia:

- Servicios *web* RESTful, que proporcionan un mecanismo de conexión rápido y simple.
- AJAX (del inglés *Asynchronous JavaScript and XML*), tecnología que combina XML y JavaScript para desarrollar clientes de servicios *web* ejecutables en el navegador, permitiendo el diseño por hilos de ejecución en paralelo para que el flujo asíncrono de peticiones de cliente y respuestas del servidor no afecte a otros procesos durante la espera.
- Aplicaciones RIA (del inglés *Rich Internet Applications*), aplicaciones *web* que optimizan el control del flujo de datos cliente/servidor para reducir el tiempo de espera entre peticiones y respuestas, y en las que la gestión del interfaz se localiza en el lado cliente, mientras que la manipulación de datos y otras operaciones complejas se implementan en el lado servidor.
- Arquitectura de diseño de plataforma basada en componentes *web* (PCW, del inglés *Platform Component Web*), que proporciona una infraestructura adecuada para la construcción de aplicaciones *web* de alto rendimiento.

En la Fig. 5 se ilustra la estructura de la plataforma de servicios *web* desarrollada junto a los diferentes niveles de diseño inte-

grados en la misma. La capa de adquisición de datos implementa el nivel de adquisición de datos definido en la metodología, que además incluye los algoritmos necesarios para extraer información de dispositivos de nariz electrónica y almacenar sus datos en formato recuperable por consulta, p. e. base de datos SQL. La capa de clasificación de datos está relacionada con aquellos niveles que gestionan las técnicas de clasificación, mientras que los servicios *web* RESTful permiten conectar el sistema con usuarios externos a nivel de aplicación *web*. Finalmente, las capas de interfaz de usuario y la plataforma de componentes *web* se combinan para ofrecer una aplicación *web* que permita la clasificación de los aromas de entrada.

El diseño mediante componentes facilita la construcción robusta de aplicaciones *web* complejas y con modularidad escalable. Un componente *software* es una unidad de composición que puede desarrollarse de manera aislada, y que puede estar compuesto por otros componentes aislados para formar aplicaciones complejas jerarquizadas. Basada en este concepto de diseño, la PCW propuesta en este trabajo permite construir una aplicación *web* mediante la composición de componentes desarrollados específicamente para ser activados en un navegador *web*, es decir, integra también desde su metodología por niveles los elementos necesarios para el desarrollo y uso de aplicaciones *web* robustas. La PCW propuesta se divide en dos secciones: cliente y servidor. En la sección del cliente se integran varias entidades que permiten

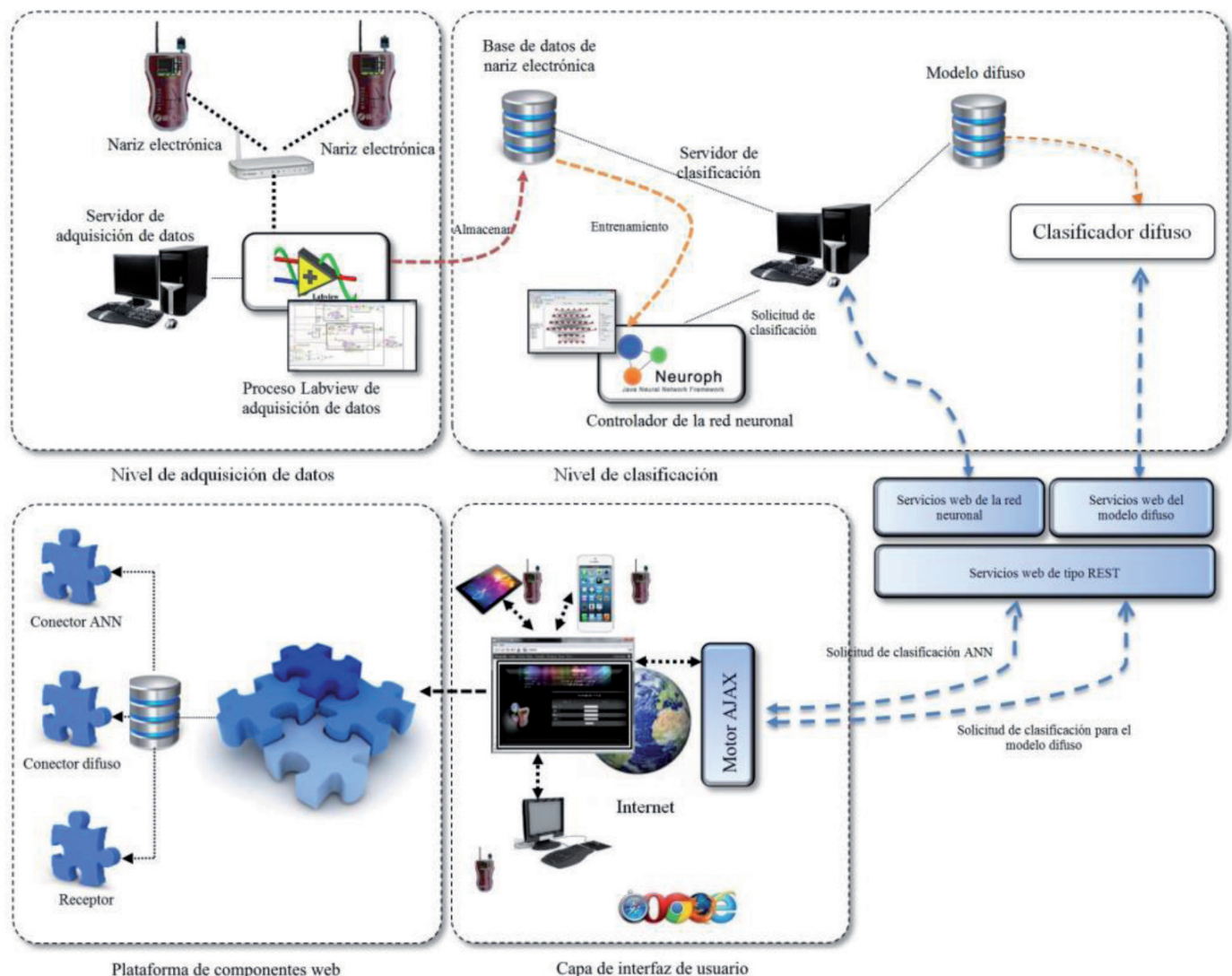


Fig. 5: Plataforma web para olfacción artificial de aromas en línea

ENTRADA \ SALIDA	Agua		Acetona		Tolueno		Amoníaco		Formaldehído		Peróxido de Hidrógeno		Etanol		Benceno		Diclorometano		Ácido acético		Xileno		Dimetil-acetamida	
Agua	18	17																			1			
Acetona			18	18																				
Tolueno					18	18																		
Amoníaco							17	17					1	1										
Formaldehído									18	18														
Peróxido de Hidrógeno											18	18												
Etanol							2						16	18										
Benceno							1								14	18	1						2	
Diclorometano															1		17	18						
Ácido acético																		17	18				1	
Xileno								1											1	17	17			
Dimetil-acetamida																	1	2					16	17

Fig. 6: Matriz de confusión para experimento de detección de 12 contaminantes en disolución con 216 muestras

manipular componentes, incorporar mecanismos de rendimiento y activar protocolos de comunicación, mientras que la sección del servidor proporciona un elemento intermedio (*proxy*) para establecer la comunicación con el exterior. De esta manera, el beneficio logrado es doble: por un lado, se proporcionan nuevas capacidades para gestionar y controlar la descarga y activación de aquellos componentes *web* que componen la aplicación y, en segundo lugar, se permite al usuario conectar con los recursos externos necesarios a través de servicios *web* RESTful.

3. RESULTADOS

La plataforma de servicios de olfacción *web* detallada en la Sección 2.3 ha sido probada como proveedora de servicios de clasificación para una nariz electrónica WiNOSE 3.0 inalámbrica portátil (véase Sección 2.1). El objetivo de la prueba ha sido demostrar la capacidad del sistema para, partiendo desde cero, realizar las fases de aprendizaje de los dos métodos de clasificación y reconocimiento de patrones incorporados como componentes de la plataforma, RNA multicapa y clasificador FL basado en reglas, y después identificar un conjunto de muestras con un total de 12 sustancias contaminantes de interés en aplicaciones de control de la calidad del aire.

Conforme a las especificaciones de la Sección 2.3.2, la aplicación *web* desarrollada para el lado del cliente se compone de dos elementos: núcleo y componente de comunicaciones. El primero proporciona operaciones básicas para descargar e integrar los componentes en la aplicación *web*, mientras que el segundo especifica los protocolos de comunicación necesarios para efectuar la conexión de la aplicación con los servicios externos. La conexión entre la aplicación y un servicio externo se establece mediante un componente llamado conector. En este caso, se han definido dos tipos de conectores: conector RNA y conector FL, que enlazan a la aplicación con servicios específicos relacionados con el modelo de red neuronal y el modelo borroso, respectivamente. Tras la corres-

pondiente fase de aprendizaje, requerida para adaptar la respuesta del servicio a los vectores de datos enviados por el cliente, el conector habilita al cliente la opción de efectuar consultas.

Para la aplicación de prueba, las consultas del cliente contienen 5 datos numéricos: 1 para indicar el tipo de método de clasificación requerido, y otros 4 correspondientes a los valores obtenidos del *array* de entrada de la nariz electrónica tras el bloque de acondicionamiento (véase Sección 2.1). Según el tipo de clasificación elegida, se descargan y activan automáticamente los componentes *web* correspondientes. Una vez solicitada desde el cliente la clasificación de un contaminante, el componente receptor recibe la información devuelta por la solicitud de clasificación, analiza los datos y extrae cada atributo, mientras que el componente de almacén de datos guarda esta información y proporciona una interfaz *web* adecuada que permite suministrar al usuario la respuesta a la consulta.

La plataforma ha sido probada con un total de 216 muestras correspondientes a 18 medidas de 12 compuestos diferentes, consistiendo 11 de ellos en disoluciones al 5% de diversas sustancias contaminantes, siendo el compuesto restante agua destilada. Para el modelo RNA, se utilizó una estructura con 1 capa oculta ajustada a 15 neuronas, mientras que para el modelo borroso, que consta de 12 reglas FL, se realizó una búsqueda para elegir el mejor conjunto de reglas en la fase de aprendizaje, obteniendo un conjunto de reglas optimizado donde 6 de ellas se basan solamente en la información de 1 sensor, y las otras 6 reglas en la información de 2 sensores cada una. El modelo borroso optimizado requiere el uso de los 4 sensores de entrada para poder discernir entre las 12 sustancias.

Para comparar los resultados de clasificación obtenidos mediante los dos métodos de reconocimiento de patrones implementados, es necesario establecer un método de validación adecuado. En este caso, debido a la reducida cantidad de medidas realizadas para cada sustancia objetivo, el método de validación cruzada dejando uno fuera (LOOCV, del inglés *Leave One Out Cross Validation*)

resulta ser el más apropiado. Este método, computacionalmente costoso, implica separar los datos de forma que se utilice una sola vez cada muestra como dato de prueba, mientras que todas las demás sirven para conformar los datos de entrenamiento. El proceso se repite para todas las muestras, almacenando en una matriz o tabla los resultados de clasificación acumulados para cada muestra. Esta tabla se denomina de contingencia o error, o también matriz de confusión, y permite comparar fácilmente el rendimiento de un grupo de técnicas sobre el mismo conjunto de muestras.

La Fig. 6 recoge en forma de matriz de confusión combinada los resultados obtenidos en este experimento mediante el uso de las dos técnicas de reconocimiento de patrones incorporadas a la plataforma: RNA y clasificador borroso. El par de valores recogido en cada elemento de la matriz indica el número de ocasiones que la sustancia de entrada (fila) ha sido clasificada como la sustancia de salida (columna). El par recoge dos valores, el primero para la técnica RNA, y el segundo para el clasificador FL. Como puede observarse, la tasa de éxito en la clasificación supera el 94% en el detector RNA, y el 98% en el modelo borroso. Por tanto, ambos modelos pueden considerarse adecuados para la tarea de reconocimiento de patrones planteada.

4. CONCLUSIONES

En el presente trabajo se ha presentado una novedosa plataforma para el desarrollo de sistemas de olfacción artificial basados en servicios *web* de alto rendimiento. La utilización de servicios *web* en este tipo de sistemas permite desarrollar en paralelo dos partes bien diferenciadas: (1) el instrumento de medida, que debe alojar los sensores, los circuitos de acondicionamiento y un microprocesador para el control del dispositivo y la gestión de comunicaciones, incluyendo un cliente *web* capaz de generar solicitudes y procesar respuestas, y (2) el servidor de aplicaciones *web*, encargado de gestionar las peticiones de uno o más instrumentos de medida, ejecutar consultas, entrenar modelos de reconocimiento, realizar procesos de validación y gestionar y almacenar históricos.

Al reducir los requisitos del instrumento de medida, se permite optimizar su diseño y reducir su tamaño físico, peso y consumo eléctrico, así como los costes de fabricación. Junto al uso de modernos microsensores y microactuadores, estos nuevos tipos de narices electrónicas compactas pueden explotar su capacidad de integración en plataformas portátiles o móviles, robotizadas e inteligentes, con interconexión en red, aproximándose de forma definitiva al modelo de sensores utilizado en el Internet de las cosas. La medida de la contaminación y caracterización de aromas en un entorno de múltiples sensores portátiles interconectados es un concepto en desarrollo actualmente, que solo puede llevarse a cabo con el uso de instrumentos de medida de bajo coste, conectados a plataformas de servicios de olfacción de acceso remoto. Además, la portabilidad del equipo de medida permite obtener mediciones continuas en zonas de difícil acceso, almacenarlas en memoria, y conectarse a un servidor para el volcado de datos y su posterior tratamiento.

El experimento propuesto para la validación del sistema de olfacción artificial basado en servicios *web* se ha dirigido al contexto de la detección de sustancias contaminantes, de gran relevancia práctica. El hecho de disponer de un número reducido de medidas para cada sustancia simula una situación habitual en narices portátiles en entornos no controlados o de rápida evolución, donde a menudo solo puede realizarse un reducido grupo de medidas en un pequeño intervalo de tiempo. La posibilidad de elección *in situ* de modelos de reconocimiento para un entrenamiento rápido

es un valor añadido del sistema desarrollado. En este sentido, puede afirmarse que el experimento de identificación de contaminantes ha permitido validar: (1) el número y tipo de sensores utilizados, (2) el acondicionamiento de señal y *hardware* de control de la nariz electrónica inalámbrica de prueba, (3) los métodos de reconocimiento de patrones propuestos, que constan de métodos de aprendizaje supervisado y no supervisado, y (4) la metodología de diseño de la plataforma *web* y la estructura *software* basada en componentes para la construcción de los servicios *web*.

Finalmente, la estructura modular de la plataforma y su metodología de diseño permiten incorporar con facilidad nuevos servicios futuros sin menoscabar los ya existentes. Actualmente, se está planificando un nuevo conjunto de experimentos con sensores y narices electrónicas inalámbricas de bajo coste, que pretende incluir algoritmos de preprocesado de datos, no incorporados aún en la plataforma, como PCA y LDA. Se espera que estos experimentos continúen proporcionando datos de interés para la comunidad científica.

BIBLIOGRAFÍA

- [1] Loutfi A, Coradeschi S. "Odor recognition for intelligent systems". IEEE Intelligent Systems. 2008. Vol.23-1 p.41-48. DOI: <http://dx.doi.org/10.1109/MIS.2008.11>
- [2] Persaud KC, Dodd GH. "Analysis of discrimination mechanisms of the mammalian olfactory system using a model nose". Nature. 1982. Vol. 299 p.352-355. DOI: <http://dx.doi.org/10.1038/299352a0>
- [3] Gardner JW, Bartlett PN. Electronic noses: principles and applications. Oxford University Press. Oxford, Reino Unido. 1999. ISBN: 978-0198559559.
- [4] Ma XY, Liu YX. "Investigation of alcohol identification based on electronic olfactory system". En: Chou T (ed). Remote sensing and smart city. WIT Press. Southampton, Reino Unido. 2015. p.121-130. ISBN: 978-1784660291.
- [5] Santos JP, Aleixandre M, Cruz C. "Hand held electronic nose for VOC detection". Chemical Engineering Transactions. 2012. Vol.30 p.181-186. DOI: <http://dx.doi.org/10.3303/CET1230031>
- [6] Santos JP, Aleixandre M, Horrillo MC. "WiNOSE: wireless electronic nose for outdoors applications". Chemical Engineering Transactions. 2010. Vol.23 p.159-164. DOI: <http://dx.doi.org/10.3303/CET1023027>
- [7] Lozano J, Santos JP, Horrillo MC. "Wine applications with electronic noses". En: Preedy V, Rodríguez ML (eds). Electronic noses and tongues in food science. Academic Press. Londres, Reino Unido. 2016. p.137-148. ISBN: 978-0131249912.
- [8] Gutiérrez-Osuna, R. "Pattern analysis for machine olfaction: a review". IEEE Sensors Journal. 2002. Vol.2-3 p.189-202. DOI: <http://dx.doi.org/10.1109/JSEN.2002.800688>
- [9] Jolliffe IT. Principal component analysis. 2ª ed. Springer. Nueva York, EE.UU. 2002. ISBN: 978-0387954424.
- [10] Martínez AM, Kak AC. "PCA versus LDA". IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence. 2001. Vol.23-2 p.228-233. DOI: <http://dx.doi.org/10.1109/34.908974>
- [11] Haykin SO. Neural networks and learning machines. 3ª ed. Pearson. Upper Saddle River, EE.UU. 2009. ISBN: 978-0131471399.
- [12] Kosko B. Fuzzy engineering. Prentice Hall, Upper Saddle River, EE.UU. 1997. ISBN: 978-0131249912.
- [13] Richardson L, Ruby S. RESTful web services. O'Reilly. Sebastopol, EE.UU. 2007. ISBN: 978-0596529260.

AGRADECIMIENTOS

El presente trabajo ha sido realizado gracias al apoyo del Ministerio de Economía y Competitividad a través del proyecto TEMINAIR (TEC2013-48147-C6-5-R).