



Ítalo de Oliveira Santos

**Sobre a Capacidade de Representação de um
Nariz Eletrônico Composto por Dois
Sensores do Tipo Óxido Metálico**

São Cristóvão - SE

Março de 2025

Ítalo de Oliveira Santos

**Sobre a Capacidade de Representação de um Nariz
Eletrônico Composto por Dois Sensores do Tipo
Óxido Metálico**

Dissertação de Mestrado apresentada ao Programa de Pós-graduação em Engenharia Elétrica – PROEE, da Universidade Federal de Sergipe, como parte dos requisitos necessários à obtenção do título de Mestra em Engenharia Elétrica

Universidade Federal de Sergipe – UFS

Programa de Pós-Graduação em Engenharia Elétrica - PROEE

Orientador: Prof. Jugurta Rosa Montalvão Filho

São Cristóvão - SE

Março de 2025



UNIVERSIDADE FEDERAL DE SERGIPE
PRÓ-REITORIA DE PÓS-GRADUAÇÃO E PESQUISA
COORDENAÇÃO DE PÓS-GRADUAÇÃO
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA ELÉTRICA-PROEE

TERMO DE APROVAÇÃO

“Sobre a Capacidade de Representação de um Nariz Eletrônico Composto por Dois Sensores do Tipo Óxido Metálico”

Discente:

Ítalo de Oliveira Santos

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Elétrica da Universidade Federal de Sergipe, como parte dos requisitos exigidos para a obtenção do título de Mestre em Engenharia Elétrica.

Aprovada pela banca examinadora composta por:

Prof. Dr. Elyson Adan Nunes Carvalho (PROEE/UFS)
Presidente

Prof. Dr. Jânio Coutinho Canuto (PROEE/UFS)
Examinador Interno

Prof. Dr. Luiz Miranda Cavalcante Neto (Télécom SudParis)
Examinador Externo

Ítalo de Oliveira Santos
Discente

Cidade Universitária “Prof. José Aloísio de Campos”, 12 de março de 2025.

**FICHA CATALOGRÁFICA ELABORADA PELA BIBLIOTECA CENTRAL
UNIVERSIDADE FEDERAL DE SERGIPE**

S237s Santos, Ítalo de Oliveira
Sobre a capacidade de um nariz eletrônico composto por dois sensores do tipo óxido metálico / Ítalo de Oliveira Santos ; orientador Jugurta Rosa Montalvão Filho. - São Cristóvão, 2025.
58 f. : il.

Dissertação (mestrado em Engenharia Elétrica) – Universidade Federal de Sergipe, 2025.

1. Detectores. 2. Teoria da informação. 3. Representação do conhecimento (Teoria da informação). I. Montalvão Filho, Jugurta Rosa orient. II. Título.

CDU 621.391

*Dedico este trabalho a todos professores que
semeiam a curiosidade em seus alunos.*

Agradecimentos

Atrevo-me a dizer que agradecer aqui é uma tarefa difícil. Não por ser difícil sentir gratidão, mas por ter que resumir em uma única página tamanho sentimento pelas mais diversas pessoas.

Gostaria de direcionar meus agradecimentos inicialmente à pessoa que conheço por quase metade de minha existência: minha esposa, Andréa. Crescemos juntos, nos mais diversos aspectos da vida, e sem sombra de dúvidas você foi a pessoa que mais me apoiou e esteve presente em todos os momentos, comemorando vitórias e sendo meu alicerce em momentos difíceis. Sem a tua presença, eu não seria quem sou hoje.

Agradeço a minha família, em especial aos meus pais, que me incentivaram e possibilitaram que eu pudesse aprender e me manter curioso sobre o mundo sem grandes preocupações. Com o apoio deles, assim como de meu irmão, minhas tias, avós e sogra que pude chegar aqui.

Agradeço ao meu orientador, Jugurta, por todos os ensinamentos e por toda a atenção. Você foi e continuará sendo um de meus maiores exemplo de professor. Sem sombra de dúvidas, tive muita sorte com os professores ao longo de minha trajetória e, com isso, eu estendo meus agradecimentos aos meus professores do Departamento de Engenharia Elétrica da UFS e a todos aqueles outros que instigaram minha mente curiosa de alguma forma.

Agradeço aos amigos e membros do grupo Biochaves e do Laboratório de Comunicação e Processamento de Sinais da UFS, antigos e novos, com os quais convivi em momentos diferentes de minha graduação e mestrado. Vocês fizeram com que minha trajetória acadêmica tenha se tornado muito mais leve e enriquecedora e guardo com muito carinho todas as lembranças.

Agradeço à professora Meriem e aos membros do grupo Boost, que me acolheram durante meu estágio. Tive a oportunidade de conhecer pessoas incríveis de diferentes culturas e desenvolver ainda mais minhas habilidades em pesquisa.

Por fim, agradeço a Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES) pelo apoio financeiro, possibilitando que eu pudesse me dedicar única e exclusivamente à pesquisa.

Resumo da Dissertação apresentada ao PROEE/UFS como parte dos requisitos necessários para a obtenção do grau de Mestre (Me.)

SOBRE A CAPACIDADE DE REPRESENTAÇÃO DE UM NARIZ ELETRÔNICO COMPOSTO POR DOIS SENSORES DO TIPO ÓXIDO METÁLICO

Ítalo de Oliveira Santos

Março/2025

Orientador: Prof. Jugurta Rosa Montalvão Filho

Programa: Engenharia Elétrica

O uso de narizes eletrônicos para a análise de sinais de cheiro vem crescendo ao longo das últimas décadas. Desde aplicações em distinção e controle de qualidade de alimentos, até aplicações médicas, muitos trabalhos fazem uso desses dispositivos e estudam características associadas aos sensores que são utilizados em suas construções. Os sensores do tipo óxido metálico (MOX) são um dos mais utilizados, mas ainda apresentam desvantagens que continuam a ser estudadas e compensadas de alguma forma, a exemplo da baixa seletividade. Neste contexto, esse trabalho teve como objetivo propor uma maneira quantificável, a partir dos conhecimentos de teoria da informação, de comparar a capacidade de espaços gerados por respostas simultâneas de sensores MOX em representar, com um erro de classificação arbitrariamente baixo, diferentes combinações de misturas de gases presentes em um ambiente. A estimação dessa quantidade proposta é demonstrada para dados simulados de um arranjo de dois sensores MOX diferentes baseados em um sensor comercial funcionando em dois níveis de modulações de temperatura distintos, em que foi constatada uma capacidade de representação de poucas dezenas de classes para o espaço de sinal, quando analisadas medidas em regime estacionário sem efeito de deriva, sob níveis moderados de ruído. Acredita-se que essa quantidade proposta possa ser útil para compreender e comparar ainda mais esses dispositivos que compõem os narizes eletrônicos para estabelecer limites teóricos quanto aos seus usos em classificadores.

Palavras-chave: Sensores MOX. Teoria da informação. Capacidade de representação.

Abstract of Dissertation presented to PROEE/UFS as a partial fulfillment of the requirements for the degree of Master

ON THE CAPACITY OF REPRESENTATION OF AN ELECTRONIC NOSE
COMPOSED BY TWO METAL OXIDE SENSORS

Ítalo de Oliveira Santos

March/2025

Advisor: Prof. Jugurta Rosa Montalvão Filho

Department: Electrical Engineering

The use of electronic noses for the analysis of odor signals has been increasing over the last decades. From applications in food discrimination and quality control to medical applications, many studies have used these devices and studied the characteristics associated with the sensors used in their construction. Metal oxide (MOX) sensors are one of the most widely used, but they still have disadvantages that continue to be studied and compensated for in some way, such as their low selectivity. In this context, this work aimed to propose a quantifiable way, based on the knowledge of information theory, to compare the capacity of spaces generated by simultaneous responses of MOX sensors to represent, with an arbitrary low classification error, different combinations of gas mixtures present in an environment with an arbitrarily low error. The estimation of this proposed quantity is demonstrated for simulated data from an array of two different MOX sensors based on a commercial sensor operating at two different temperature modulation levels, in which a representation capacity of a few dozen classes for the signal space was observed, when measurements were analyzed in a steady state without drift effect, under moderate noise levels. It is believed that this proposed quantity may be useful to further understand and compare these devices that constitute electronic noses to establish theoretical limits regarding their use in classifiers.

Keywords: MOX sensors. Information Theory. Representation capacity.

Sumário

Lista de ilustrações	i
Lista de tabelas	iv
1 Introdução	1
1.1 Objetivos	3
1.2 Organização do trabalho	3
2 Revisão Bibliográfica e Fundamentação Teórica	5
2.1 Narizes eletrônicos	5
2.1.1 Tecnologias de sensores de gás	6
2.1.2 Sinais de cheiro com sensores MOX	7
2.1.3 Métodos de extração de características e classificação	8
2.1.4 Seletividade dos sensores MOX	9
2.2 Teoria da informação	12
2.2.1 Entropia	12
2.2.2 Entropia para mais de uma variável aleatória	13
2.2.3 Canal de comunicação discreto com ruído	15
2.2.4 Entropia diferencial	16
2.2.5 Canal de comunicação contínuo com ruído	17
2.3 Estimadores de dependências	17
2.3.1 Autocorrelação	17
2.3.2 Método de correntropia padrão	18
2.3.3 Função de correntropia por detecção de coincidências	18
2.4 Estimador de dimensão intrínseca e entropia diferencial	19
3 Definição da Capacidade de Representação	22
3.1 Canal de comunicação com ruído	22
3.2 Paralelo entre canal de comunicação e capacidade de representação	24
4 Abordagem Proposta e Simulações	27
4.1 Modelo de respostas idealizadas	27
4.2 Estudo do ruído	28
4.2.1 Sobre a dependência a diferentes concentrações de gases	30
4.2.2 Sobre a dependência temporal	30
4.2.3 Sobre a interdependência entre sensores	31
4.2.4 Resultados	32
4.3 Estimação da capacidade de representação	33
4.4 Simulação de erro de quantização	35
5 Conclusão	39

Referências 41

Lista de ilustrações

Figura 2.1 – Diagrama simplificado do funcionamento de um nariz eletrônico (fonte: autoria própria).	6
Figura 2.2 – Exemplo de resposta de um sensor MOX à presença de um gás alvo (fonte: autoria própria).	9
Figura 2.3 – (a) Exemplo de observação simultânea de dois sensores hipotéticos modelados como VA X_1 e X_2 que apresentam dependência linear. (b) Exemplo de observações simultâneas de dois sensores hipotéticos modelados como VAs $X_1 = 2U$ e $X_2 = 3U$, onde U é uma VA uniforme com domínio restrito ao intervalo $[-0.5, 0.5]$. As VAs X_1 e X_2 não só apresentam dependência linear, como são funções de uma única VA independente (fonte: autoria própria).	11
Figura 2.4 – Diagrama de relações entre entropias de duas VAs (fonte: autoria própria).	15
Figura 2.5 – Esquema de comunicação (fonte: autoria própria).	16
Figura 3.1 – Diagramas que mostram o conjunto de possíveis elementos \mathcal{Y}^N . Dentro deste, há um subconjunto dos $2^{NH(Y)}$ elementos y típicos da saída e vários conjuntos de $2^{NH(Y X)}$ elementos típicos de erro (y típicos dado x típicos) (a) com sobreposição (gerando erro de confusão) e (b) sem sobreposição (sem erros de confusão). (Fonte: autoria própria, baseado em [28]).	24
Figura 3.2 – Esquema simplificado de um canal de comunicação contínuo AWGN (acima) e sistema envolvendo as estruturas das respostas simultâneas de arranjos de sensores MOX (abaixo) (fonte: autoria própria).	25
Figura 4.1 – Diagrama de circuito simplificado, como recomendado pela fabricante para ser usado com o sensor MOX (SB-30 da FIS, Japan) (fonte: autoria própria).	28
Figura 4.2 – (a) Exemplo de série temporal referente a resposta dos quatro sensores MOX em um experimento. (b) Ruído extraído de cada um dos quatro sensores MOX para o mesmo experimento. Sensores: MICS 5524 (mox1), MICS 5914 (mox2), CCS801 (mox3) e TGS8100 (mox4) (fonte: autoria própria).	30

Figura 4.3 – Variâncias estimadas ao longo do tempo (cinza) e séries temporais originais cada um dos quatro sensores MOX em um mesmo experimento. Sensores: MICS 5524 (mox1), MICS 5914 (mox2), CCS801 (mox3) e TGS8100 (mox4) (fonte: autoria própria).	31
Figura 4.4 – Exemplo de comparação entre as funções de correntropia do sinal original e do ruído permutado para cada um dos quatro sensores MOX em um mesmo experimento. Sensores: MICS 5524 (\hat{V}_1), MICS 5914 (\hat{V}_2), CCS801 (\hat{V}_3) e TGS8100 (\hat{V}_4) (fonte: autoria própria).	32
Figura 4.5 – Curva $\log_2(C(r))$ estimada ao longo do eixo $\log_2(r)$, cuja inclinação é comparada a das retas padrão cujas inclinações são referentes a dimensões entre 1 e 4 (fonte: autoria própria).	33
Figura 4.6 – Etapas de simulação dos dados. (a) Pares de concentrações (c_1, c_2) de acetona e etanol. (b) Pares (x_1, x_2) de razões de condutâncias de dois sensores virtuais. (c) Pares (v_{g1}, v_{g2}) das respostas convertidas das sensores em sinais de tensão usados como entrada (x_1, x_2). (d) Pares (y_1, y_2) utilizados como a saída corrompida com intensidades de ruído que foram experimentalmente determinadas para sensores desse tipo (fonte: autoria própria).	34
Figura 4.7 – Região de resposta dos sensores delimitada pela linha preta e centros de agrupamentos em vermelho para um $k = 33$. Com essa quantização, pontos nessa região são atribuídos aos seus centros mais próximos. Os eixos representam medidas simultâneas para os sensores 1 e 2, em <i>Volts</i> (fonte: autoria própria).	36
Figura 4.8 – Gráfico do erro de confusão de classes estimado para cada número de quantizações vetoriais do espaço de respostas simultâneas dos sensores. A linha vertical tracejada indica a capacidade de representação de 33 classes (fonte: autoria própria).	37
Figura 4.9 – Ilustração da não uniformidade das regiões no espaço de concentrações relacionadas as escolhas de aglomerações no espaço de sensores. (a) Agrupamentos obtidos a partir da quantização vetorial com $k = 33$. Todos os pontos próximos entre si que apresentam uma mesma cor estão relacionados a um mesmo rótulo. (b) Particionamento correspondente no espaço de concentrações relacionados aos agrupamentos para $k = 33$ (fonte: autoria própria).	37

Figura 4.10–(a) 32 Classes que deseja-se discriminar representadas no espaço de mistura de concentrações de Acetona e Etanol (pontos pretos). (b) Disposição das 32 classes que deseja-se discriminar (pontos pretos) e as regiões no espaço de concentrações referentes ao particionamento realizado no espaço de sensores através do *k-means* com $k = 33$ (fonte: autoria própria). 38

Lista de tabelas

Tabela 4.1 – Parâmetros do modelo de dois sensores virtuais.	28
Tabela 4.2 – Resumo dos testes realizados para caracterização do ruído.	33
Tabela 4.3 – Estimação de capacidade de representação para diferentes níveis de ruído para uma mesma distribuição de entrada.	35

Capítulo 1

Introdução

O olfato é um dos sentidos mais antigos em termos evolutivos e se dá através de quimiorreceptores presentes em diversos seres vivos. Animais primitivos que não possuem um sistema nervoso bem definido ou até mesmo seres unicelulares são capazes de utilizar este sentido para reconhecer ambientes e buscar meios de subsistência, mas, apesar da tamanha importância, este é um dos sentidos menos compreendidos entre os cinco sentidos humanos. Estima-se que os seres humanos possam possuir cerca de 100 milhões de células olfatórias presentes em seu epitélio olfativo, mas que essas estejam restritas a 400 tipos de receptores (cada um destes podendo responder a uma quantidade limitada de moléculas) capazes de responder a presença de voláteis no ambiente [1, 2].

Assim como existem câmeras que capturam sinais de imagem ou microfones para sons, dispositivos comerciais chamados narizes eletrônicos são utilizados com a intenção de tentar capturar sinais de cheiro. Esses dispositivos são compostos por um arranjo de sensores, em sua maioria de gases, de diferentes tipos e seletividades, a fim de se obter respostas multivariadas à presença de voláteis presentes no ambiente, para que em seguida essas sejam tratadas e levadas a sistemas de reconhecimento de padrões [3].

Seja no reconhecimento da presença de voláteis ou na classificação de eventos, as assinaturas de cheiro já foram utilizadas em diversas áreas, a exemplo da identificação de alimentos [4]; controle de qualidade de alimentos [5]; determinação da presença de doenças [6, 7]; análise da presença de poluentes [8]; análise de qualidade de ar [9]; entre outras. Atualmente, existem diversas tecnologias de sensores de gás, cada uma delas apresentando pontos positivos e negativos em termos de custo, sensibilidade, seletividade, tempo de resposta, complexidade de construção e manutenção, mas, de uma maneira geral, várias delas podem ser utilizadas na construção de narizes eletrônicos.

Dentre as tecnologias mais utilizadas, estão os sensores do tipo óxido metálico (*metal oxide*, MOX), devido a sua alta sensibilidade, baixo custo e portabilidade [10]. Estes sensores são do tipo condutivo, tendo sua característica de resistência modificada a depender da presença de um gás alvo em sua superfície e, mesmo com seu amplo uso,

apresentam problemas como alta sensibilidade à temperatura e à umidade do ambiente, sofrem de deriva curta e longa [11] e eles apresentam uma baixa seletividade [12]. Apesar dos esforços em compreender e reduzir essas problemáticas presentes nesses sensores, a maioria delas ainda continua em aberto.

Nesse contexto, o presente trabalho buscou focar na característica de baixa seletividade, para a qual já existem algumas estratégias que buscam melhorá-la, recaindo em problemas de extração de características, treinamento de classificadores a partir de dados rotulados ou em análises dimensionais, com o uso de ferramentas a exemplo da análise de componentes principais (*principal component analysis*, PCA) [12]. No entanto, ainda não há uma maneira direta e sistemática de quantificar e comparar a redundância presente em arranjo de sensores MOX que compõe um nariz eletrônico. Ao passo que é aumentada a quantidade de diferentes sensores em um nariz eletrônico, é de se esperar que haja um aumento no custo e na complexidade de sua construção, mas que pode não trazer um retorno relevante em termos de aumento da capacidade de classificação. Essa bem conhecida desproporção entre a quantidade de sensores MOX em um arranjo e a capacidade de representação do sinal multivariado gerado motiva a exploração de alguma medida, que não dependa de dados rotulados, que possibilite comparar e avaliar a capacidade geral de representação de espaços gerados por diferentes construções de narizes eletrônicos, ou seja, o número de misturas de gases que podem ser classificados com um erro próximo de nulo.

O menor arranjo de sensores MOX que pode ser utilizado na construção de narizes eletrônicos é a composição de dois sensores diferentes, sem empregar modulação de temperatura (já que alterar a temperatura de operação desses dispositivos faz com que se obtenham sensores virtualmente diferentes [13]). Para este arranjo, as respostas simultâneas desses sensores a um conjunto de gases podem ser representadas como pontos em um espaço no \mathbb{R}^2 . No entanto, devido à baixa seletividade desses sensores e, conseqüentemente, dependências probabilísticas entre as suas observações simultâneas, o subespaço abrangido pelas observações pode ser visto em uma dada estrutura contida no \mathbb{R}^2 .

De forma similar, se um arranjo de N sensores é utilizado, é esperado se obter observações multivariadas em uma estrutura contida no \mathbb{R}^N , no entanto, estas observações podem possuir uma dimensão intrínseca (o número mínimo de variáveis independentes necessárias para representar os dados sem perda de informação [14]) que não seja necessariamente a mesma do espaço de observações, N .

Além dessa noção de que observações simultâneas de sensores MOX possam formar estruturas com formatos complexos, devido às suas dependências probabilísticas, um outra problemática que envolve esses sensores é a presença de um ruído que corrompe suas medições, o qual ocasiona incertezas nestas, que idealmente deveriam ser constantes no caso dos sensores serem excitados de uma mesma maneira.

Dentro desse contexto, uma quantidade pode ser conceptualizada para esses sistemas de aquisição de dados com arranjos de sensores MOX a partir dos conhecimentos apresentados no trabalho de Shannon [15], em específico, partindo da ideia da capacidade de um canal de comunicações ruidoso. Utilizando como base teoria da informação, é possível buscar estabelecer paralelos entre sistemas de comunicação ruidosos e sistemas de aquisição de dados ruidosos, a fim de definir um limite teórico para o número de classes, referentes a combinações de misturas de gases, que podem ser representadas por esses espaços, de forma a obter um erro de classificação arbitrariamente pequeno. Isto possibilitaria compreender e comparar diferentes arranjos de sensores, levando em conta a natureza de suas respostas e dos ruídos que corrompem suas medições.

1.1 Objetivos

De forma ampla, este trabalho tem como objetivo propor, utilizando teoria da informação, uma medida da capacidade de representação de espaços gerados por narizes eletrônicos, construídos com sensores MOX, medida esta que representa o número máximo de combinações de misturas de gases que podem ser classificadas com um erro arbitrariamente pequeno. Além disso, determinar esta quantidade em um arranjo de 2 sensores virtuais simulados a partir de modelos previamente validados.

Os objetivos específicos deste trabalho são:

- Definir uma capacidade de representação com base nos paralelos entre a capacidade de um canal de comunicação ruidoso e a aquisição de dados em um sistema ruidoso;
- Implementar simulações de respostas idealizadas de sensores MOX;
- Estudar e caracterizar o ruído que afeta sensores MOX;
- Estimar a capacidade de representação para um arranjo de 2 sensores virtuais modelados em pontos de operação validados a partir do ruído estudado;
- Determinar o erro de classificação em diferentes quantizações vetoriais do espaço gerado pelo mesmo arranjo de 2 sensores virtuais para analisá-los a partir da capacidade de representação estimada.

1.2 Organização do trabalho

Este trabalho está organizado de maneira a apresentar no Capítulo 2 a revisão bibliográfica sobre narizes eletrônicos e características dos sinais provenientes de sensores MOX, assim como a base teórica de teoria de informação e das metodologias necessárias para

a execução deste trabalho. No Capítulo 3, encontra-se a conceptualização da capacidade de representação proposta. Já no Capítulo 4, são demonstradas estimações de capacidade de representação para dados simulados utilizando modelos previamente validados na literatura, além do estudo do ruído que afeta sensores MOX, bem como uma simulação para verificar as capacidades de representação estimadas. Por fim, no Capítulo 5 são feitas as considerações finais quanto a este trabalho.

Capítulo 2

Revisão Bibliográfica e Fundamentação Teórica

Neste capítulo são apresentadas as características dos narizes eletrônicos e dos sensores que os compõem, além da base teórica necessária para a compreensão deste trabalho e dos métodos e algoritmos mais recentes utilizados para as análises e estimativas posteriormente propostas.

2.1 Narizes eletrônicos

Narizes eletrônicos são compostos principalmente por arranjos de sensores de gás de diferentes seletividades e/ou tecnologias, muitas vezes juntos com sensores de umidade relativa e temperatura, para obter uma resposta multivariada à presença de gases e voláteis em um ambiente ou um sistema fechado. A depender da maneira como são construídos, amostras do ar passam por esses arranjos de sensores cujas respostas são condicionadas, amostradas, quantizadas e armazenadas com o auxílio de microcontroladores de forma local ou remota. Após isso, esses dados coletados podem então passar por etapas de processamentos de sinais e extração de características, a fim de serem utilizados em sistemas de reconhecimento de padrões para etapas de classificação e discriminação de eventos ou voláteis [3]. Esse esquema de funcionamento pode ser visto na Figura 2.1.

Existem diversos estudos que confirmam a utilização destes dispositivos nas mais diversas áreas. Alguns deles utilizaram os narizes eletrônicos na identificação de câncer [16]; outros estudos focaram em outros tipos de doenças [6, 7]; há também aplicações na avaliação de qualidade de ar, tanto em ambientes abertos quanto fechados [9, 17]; controle de qualidade e segurança de alimentos [5, 18, 19]; identificação de tipos de alimentos e bebidas [4, 20]; detecção de componentes químicos [8, 17]; entre outras aplicações [17].

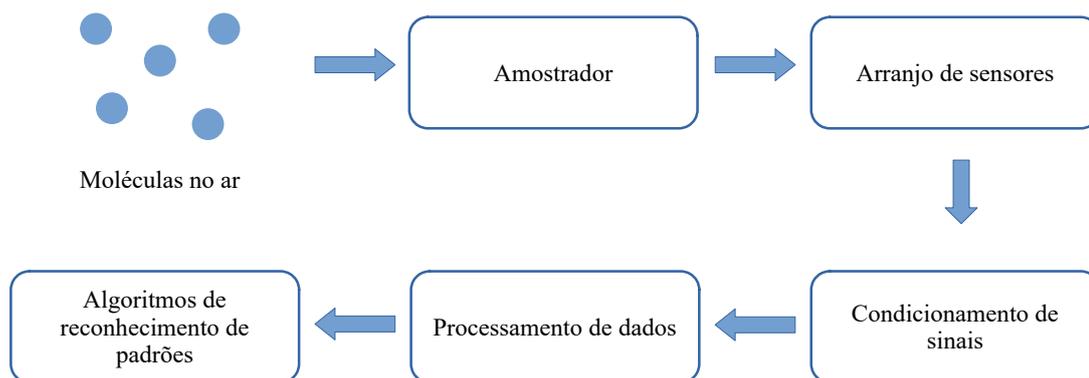


Figura 2.1 – Diagrama simplificado do funcionamento de um nariz eletrônico (fonte: autoria própria).

2.1.1 Tecnologias de sensores de gás

Existem diversas tecnologias de sensores de gás que são utilizadas atualmente na construção de narizes eletrônicos, cada uma delas com seu princípio de operação, além de apresentarem diferentes características quanto a suas velocidades de resposta, sensibilidade, sensibilidade, manutenção, capacidade de miniaturização, custo e sensibilidade a influências externas.

Um dos sensores mais comuns são os condutivos de óxido metálico. Seu funcionamento consiste na mudança de condutância nos filmes de óxido a partir da concentração de um gás. São divididos entre *n-type* e *p-type* a depender dos materiais utilizados nos filmes, o que resulta em reações de oxidação ou redução a partir dos gases presentes no ambiente e apresentam uma placa térmica para aquecer os filmes a uma determinada temperatura alvo. Esses sensores têm como vantagem uma construção simples, rápida resposta, baixo custo e alta sensibilidade, mas apresentam baixa seletividade, além de sofrerem com sensibilidade a temperatura e umidade, assim como ao fenômeno de deriva ao longo do tempo [21].

Sensores condutivos poliméricos consistem naqueles que são construídos com filmes de polímeros que, quando em contato com um dado analito, têm sua resistência modificada, o que possibilita a detecção de voláteis. Existem diversas técnicas e materiais utilizados na fabricação e deposição desses filmes. Em geral, eles também possuem respostas rápidas e baixo custo, além de poderem ser utilizados em temperatura ambiente. Da mesma forma como os sensores MOX, eles possuem uma baixa seletividade, além de terem um tempo de vida baixo devido ao desgaste dos filmes [10].

Um outro tipo de sensor que é utilizado é o de microbalança de cristal de quartzo (*quartz crystal microbalance*, QCM), o qual apresenta a característica de ter uma frequência de ressonância em seu cristal caso uma tensão alternada seja aplicada em seus terminais. A partir de uma membrana adsorvente (que possibilita a adesão de moléculas em sua super-

fície) depositada no exterior desse cristal, é possível modificar a frequência de ressonância dentro dele devido a uma mudança de massa na estrutura e, conseqüentemente, detectar a presença de um determinado volátil. A depender dos diferentes tipos de membranas colocadas em sua superfície, estes sensores podem apresentar diferentes sensibilidades e tempos de resposta, além de detectarem a presença de gases a partir de massas muito pequena, mas são sensíveis a temperatura e umidade e possuem uma construção complexa se comparada a outras tecnologias [3].

Os sensores de onda acústica de superfície (*surface acoustic wave*, SAW) são sensores que apresentam um comportamento semelhante aos QCMs, mas em vez de trabalhar com frequências de ressonância dentro de um cristal, estes sensores lidam com frequências de ressonância acústicas decorrentes das ondas mecânicas que percorrem a superfície dos mesmos. A partir da mudança de massa devido à adsorção de gases no ambiente, essa frequência de ressonância muda, evidenciando-se assim a presença de voláteis. Esses sensores apresentam um pequeno tamanho, boa sensibilidade e tempo de resposta, além de responderem a presença de diversos tipos de gases, mas, assim como os QCMs, apresentam sensibilidade a temperatura e umidade, além de dificuldades de implementação [3].

Alguns outros exemplos de tecnologias que podem ser destacadas na literatura são os sensores baseados em nanotubos de carbono, que apresentam uma grande sensibilidade, boa capacidade de adsorção e rápido tempo de resposta, mas que têm uma complexa fabricação e alto custo [10]; sensores eletroquímicos, que apresentam uma alta eficiência energética e robustez, com uma alta faixa de temperaturas de operação e sensibilidade a diversos gases, mas possuem um tamanho grande e sensibilidade limitada; sensores de pérola catalítica, que possuem alta especificidade a gases combustíveis e rápida resposta, mas que operam em altas temperaturas e respondem somente a compostos que contêm oxigênio [3]; e sensores ópticos, que apresentam imunidade a interferências eletromagnéticas, rápido tempo de resposta, baixo peso e custo, mas que necessitam de circuitos de interface mais complexos e precisam de um ambiente mais controlado para seu funcionamento efetivo [21].

2.1.2 Sinais de cheiro com sensores MOX

Há uma relação de potência entre a resistência de um sensor MOX e a reação desse sensor a determinado gás alvo [22], como apresentado na Equação 2.1:

$$R_g = R_o(1 + C_g)^{-\beta} \quad (2.1)$$

onde R_g é a resistência do sensor como resposta a uma determinada concentração de gás C_g , R_o é a resistência do sensor na presença de gases de referência e β uma dada constante do modelo.

Este modelo se atribui à ação de somente um gás alvo no ambiente com relação a condutividade do sensor. Para o caso em que há misturas de gases alvo, diversos outros modelos podem ser encontrados na literatura, mas os modelos de misturas de dois gases são alguns dos que apresentaram melhores avanços, com destaque para o modelo linear quadrático proposto em [13]. Neste trabalho, o modelo apresentou bons resultados em termos de representação, se comparado a outros, e nele é apresentada a seguinte relação:

$$x = a_1 c_1^{r_1} + a_2 c_2^{r_2} + b_1 (c_1^{r_1})^2 + b_2 (c_2^{r_2})^2 + d c_1^{r_1} c_2^{r_2} + 1 \quad (2.2)$$

$$x = \frac{R_o}{R_g} \quad (2.3)$$

em que c_1 e c_2 são as concentrações dos gases alvo; a_i , b_i , r_i e d são parâmetros do modelo; e x é a razão entre a resistência do sensor na ausência de um gás alvo, dada por R_o , e a resistência do sensor na presença de dois gases alvo (com concentrações c_1 e c_2), dada por R_g .

Para que a resposta do sensor possa ser processada, a mudança na condutividade do sensor geralmente é traduzida em sinais de tensão a partir de um circuito divisor de tensão, no qual uma tensão de entrada e uma resistência de carga são fixadas, e a tensão de saída depende principalmente da mudança de condutividade do sensor. Esses níveis de tensão podem então ser amostrados, quantizados e armazenados depois que os sensores sejam calibrados.

Uma resposta de sensores MOX à presença de um gás alvo pode ser exemplificada na Figura 2.2. Inicialmente, os sensores apresentam uma resposta aproximadamente constante aos gases de referência no ambiente e, ao haver a excitação do sensor com a presença de um gás alvo, há um intervalo transitório chamado de tempo de resposta, em que os níveis dos sensores reagem positiva ou negativamente, dependendo do tipo de reação entre gás e sensor. Por fim, quando as concentrações do gás alvo diminuem, as respostas dos sensores também tendem a voltar ao estado não-excitado, o que caracteriza o tempo de recuperação [21].

2.1.3 Métodos de extração de características e classificação

Para a extração de características de dados provenientes de narizes eletrônicos, alguns métodos são mais utilizados na definições de padrões [23]:

- Extração de características a partir da resposta temporal dos sensores, em que podem ser levado em conta valores de pico e referência, derivadas, integrais, entre outras características;

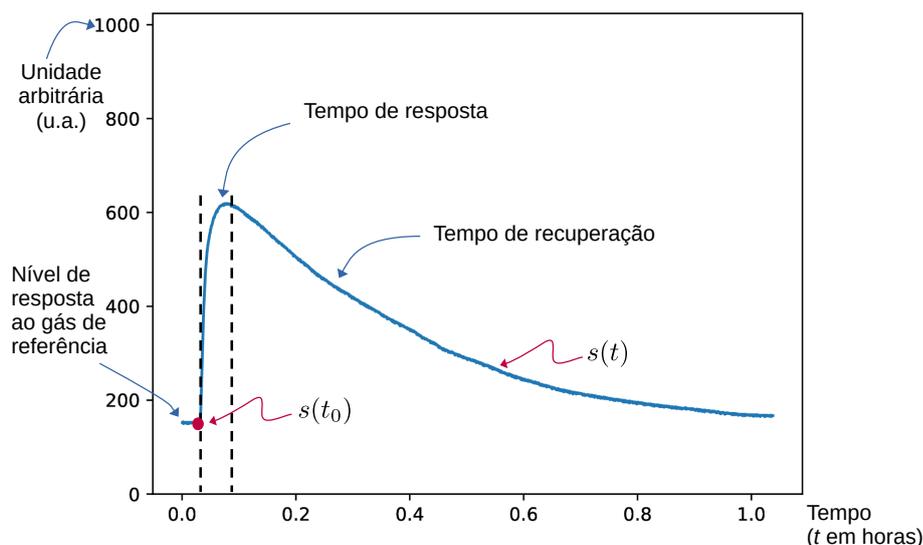


Figura 2.2 – Exemplo de resposta de um sensor MOX à presença de um gás alvo (fonte: autoria própria).

- Extração de características a partir do ajuste de funções matemáticas à resposta dos sensores a exemplo de polinômios, funções exponenciais e sigmóides;
- Extração de características a partir da transformação das series temporais a exemplo da transformada discreta de Fourier (*discrete Fourier transform*, DFT) e transformada discreta de Wavelet (*discrete wavelet transform*, DWT).

Após as etapas de pré-processamento de sinais e extração de características, os padrões podem então passar por diferentes tipos de algoritmos, a fim de detectar a presença de gases ou discriminar eventos. Alguns dos algoritmos mais empregados na análise dos dados para classificação são: análise de componentes principais (*principal component analysis*, PCA), análise de discriminante linear (*linear discriminant analysis*, LDA), máquinas de suporte vetorial (*support vector machine*, SVM), redes neurais artificiais (*artificial neural network*, ANN), redes neurais convolucionais (*convolutional neural network*, CNN), árvores de decisão e florestas aleatórias (*random forest*, RF), e sistemas baseados em *Deep Learning*, estes que vêm aumentando em popularidade [19, 23].

2.1.4 Seletividade dos sensores MOX

Pode-se definir seletividade para os sensores de gás como a capacidade de responder somente a uma variedade limitada e específica de gases no ambiente, dentro de uma mistura que possa ser desconhecida [24]. Quando se trata da seletividade de sensores MOX, estes tendem a responder não só a um gás alvo do ambiente, mas sim a uma variedade

de gases. Essa característica não é necessariamente negativa, mas quando tratamos de problemas de discriminação de gases presente em misturas, o uso individual destes sensores não é suficiente. Ao empregarmos diferentes sensores MOX (geralmente na construção de narizes eletrônicos), as respostas simultâneas desses sensores são utilizados para alimentar sistemas de reconhecimento de padrões [12].

Algumas estratégias já vêm sendo empregadas na tentativa melhorar a seletividade de sensores MOX. Algumas delas buscam alterar características físicas deles, a exemplo da modulação de temperatura, que faz com que um único sensor possa apresentar respostas diferentes em diferentes pontos de operação [13]; ou o emprego de diferentes estratégias de dopagem do substrato na etapa de fabricação do sensores [25]. Outras estratégias tendem a focar diretamente nos dados coletados desses sensores, empregando diversos métodos de aprendizado supervisionado para melhorar a classificação em problemas específicos; assim como também estratégias que envolvem redução dimensional [12].

Devido à baixa seletividade dos sensores MOX, observações simultâneas de múltiplos sensores MOX podem apresentar diversas redundâncias e dependências probabilísticas. Se considerarmos que o espaço gerado por N sensores está contido no \mathbb{R}^N , estas dependências conseqüentemente fazem com que as estruturas que representam as medições simultâneas desses sensores não abranjam esse espaço de sensores de maneira uniforme, recaindo em subespaços que podem até estar efetivamente em uma dimensão mais baixa.

Para melhor ilustração disto, podemos considerar primeiramente uma das formas mais simples de dependência entre fontes que podem ser modeladas como aleatórias (como no caso de amostras simultâneas de sensores MOX): a dependência linear. Ao serem feitas medições simultâneas de dois sensores hipotéticos, modelados como duas variáveis aleatórias (VAs), que apresentam uma dependência linear, podemos esperar uma estrutura como a vista na Figura 2.3a. Ao calcularmos a covariância entre as duas VAs, podemos esperar (para este caso) algum valor positivo, o que indica que há uma tendência de crescimento dos valores da VA X_1 com o crescimento da VA X_2 neste espaço \mathbb{R}^2 .

Utilizando um exemplo mais extremo, ilustrado na Figura 2.3b, temos novamente medições simultâneas de dois sensores hipotéticos. Agora, as medidas simultâneas, que novamente estão dispostas no \mathbb{R}^2 , aparentam estar restritas somente a um segmento de reta. De fato, para este caso, $X_1 = 2U$ e $X_2 = 3U$, para uma VA do tipo uniforme U , cujas possíveis emanações u estão contidas no intervalo $[-0.5, 0.5)$. Isso quer dizer que as emanações das VAs X_1 e X_2 apresentam dependências probabilísticas extremas, por serem dependências determinísticas, sendo essas dependentes somente da mesma VA, U . Isto implica que a dimensão intrínseca a esses dados pode ser representada somente por esta única VA independente, ou seja, por uma única dimensão.

Em muitos casos, as estruturas que são formadas por emanações simultâneas de fontes aleatórias podem apresentar estruturas complexas, cujas dependências são

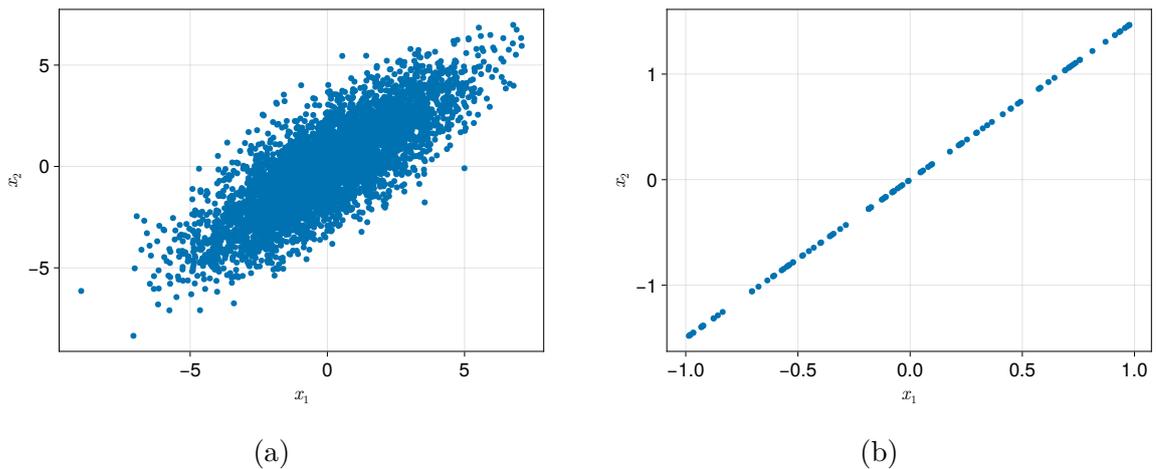


Figura 2.3 – (a) Exemplo de observação simultânea de dois sensores hipotéticos modelados como VA X_1 e X_2 que apresentam dependência linear. (b) Exemplo de observações simultâneas de dois sensores hipotéticos modelados como VAs $X_1 = 2U$ e $X_2 = 3U$, onde U é uma VA uniforme com domínio restrito ao intervalo $[-0.5, 0.5]$. As VAs X_1 e X_2 não só apresentam dependência linear, como são funções de uma única VA independente (fonte: autoria própria).

fortemente não lineares e não triviais de se obter, mas existem ferramentas que possibilitam a estimação de informações como a dimensão intrínseca (DI) e entropia diferencial (ED) dos dados, podendo assim possibilitar a inferência de características quanto ao formato dessas estruturas [26].

Idealmente, as respostas simultâneas, em regime estacionário, desses sensores deveriam ser sempre as mesmas para uma mesma excitação dos sensores, mas devido ao ruído que corrompe suas as medições, há uma incerteza associada a elas. Se ignorarmos inicialmente o efeito da deriva que afeta esses sensores, isso pode ser visto de forma análoga ao que acontece em um canal de comunicações ruidoso, em que sinais transmitidos podem ser corrompidos de forma a chegarem no receptor de uma maneira diferente do que o seria desejado.

Neste contexto, é possível constatar que há uma grande variedade de estudos que aplicam esses sensores, compondo narizes eletrônicos, em tarefas de classificação, ou estudos que tratem das problemáticas que estão relacionadas a eles, como apresentado nas subseções anteriores. No entanto, com as buscas realizadas neste estudo, não foi encontrado na literatura trabalhos que tentassem aproveitar de conceitos como a capacidade de canais de comunicação, abordado em teoria da informação, com a intenção de estabelecer limites teóricos para a quantidade máxima de classes, referente a misturas de gases, que podem ser representadas com um erro de classificação arbitrariamente baixo.

Na intenção de explorar conceitos de teoria da informação que foram importantes para o desenvolvimento deste trabalho, algumas definições são apresentadas na seção seguinte.

2.2 Teoria da informação

Os primeiros conceitos de teoria da informação foram propostos por Claud Shannon em seu artigo "*A Mathematical Theory of Communication*" [15] e serviram como uma base que permitiu que sistemas de comunicações se desenvolvessem aos patamares que existem hoje [27].

Nesta seção, inicialmente são definidos conceitos relacionados a VAs e canais de comunicação discretos que, posteriormente, são expandidos, possibilitando definir novos conceitos para os casos de VAs e canais de comunicação contínuos.

2.2.1 Entropia

Dada uma variável aleatória discreta X , com um alfabeto de possíveis símbolos \mathcal{X} e massa de probabilidade $p(x) = P(X = x)$, $x \in \mathcal{X}$, é possível definir o conteúdo de informação [28] de um símbolo do alfabeto como:

$$\hat{h}(x) = \log_b \frac{1}{p(x)} \quad (2.4)$$

onde b é uma base arbitrária.

A entropia de Shannon [27] é então representada pela esperança do conteúdo de informação de todos os símbolos da VA X :

$$H(X) = E[\hat{h}(X)] \quad (2.5)$$

$$H(X) = \sum_{x \in \mathcal{X}} p(x) \hat{h}(x) \quad (2.6)$$

$$H(X) = - \sum_{x \in \mathcal{X}} p(x) \log_b p(x) \quad (2.7)$$

onde $E[\cdot]$ é o operador de esperança. Para o caso em que a base b do logaritmo seja 2, a medida de entropia é dada em *bits*, medida que representa símbolos com 2 possíveis estados, em geral, 0 ou 1.

A entropia é uma medida de informação ou incerteza de uma dada variável aleatória e pode estar relacionada com uma "quantidade efetiva" de símbolos presentes no alfabeto da VA, chamada de cardinalidade efetiva, a partir da Equação 2.8:

$$C_X = 2^{H(X)} \quad (2.8)$$

em que $H(X)$ a entropia de Shannon para a VA X e C_X é a cardinalidade efetiva para o caso em que $H(X)$ é dada em *bits*. Chama-se de cardinalidade efetiva a cardinalidade de um conjunto de símbolos equiprováveis que possua a mesma entropia do conjunto analisado [29].

No caso em que cada um dos símbolos presentes no alfabeto sejam equiprováveis, a entropia assume seu máximo valor para aquela VA e a cardinalidade efetiva é igual ao número de símbolos presentes no alfabeto. Caso haja uma tendência nas massas de probabilidade para um dado símbolo da VA, a entropia apresenta um valor menor, assim como a cardinalidade efetiva do conjunto. A entropia de Shannon determina um limite teórico para uma dada VA em que um esquema de codificação pode ser criado, a fim de enviar o máximo de informação com um número mínimo de *bits*.

Em 1961, Rényi propôs em "*On Measures of Entropy and Information*" [30] uma definição generalizada de entropia, representada pela família de equações em 2.9, em que a entropia de Shannon é um caso especial quando é analisado o limite quando $\alpha \rightarrow 1$.

$$H_\alpha(X) = \frac{1}{1-\alpha} \log_b \left(\sum_{x \in \mathcal{X}} p(x)^\alpha \right) \quad (2.9)$$

onde X é uma VA e $\alpha \in [0, 1) \cup (1, \infty)$, $p(x)$ são as massas de probabilidade, \mathcal{X} é o alfabeto e b é uma base arbitrária.

Outra entropia importante de ser ressaltada é a de colisão, em que é analisado o caso no qual $\alpha = 2$, chegando à Equação 2.10:

$$H_2(X) = -\log_b(\text{Col}(X)) \quad (2.10)$$

onde a probabilidade de colisão de X é dada por:

$$\text{Col}(X) = \sum_{x \in \mathcal{X}} p(x)^2 \quad (2.11)$$

A partir destas definições, é possível perceber que há uma relação entre contagens de coincidências/colisões e uma medida de entropia para uma VA.

2.2.2 Entropia para mais de uma variável aleatória

Partindo-se da VA X , utilizada na subseção anterior, e adicionando-se uma nova VA, Y , com alfabeto \mathcal{Y} e massa de probabilidade $p(y) = P(Y = y)$, $y \in \mathcal{Y}$, a entropia conjunta de Shannon (ou entropia de Rényi com $\alpha \rightarrow 1$) [27] para um par de variáveis aleatórias cujas massas de probabilidade são definidas por $(X, Y) \sim p(x, y)$ é definida por:

$$H(X, Y) = - \sum_{x \in \mathcal{X}} \sum_{y \in \mathcal{Y}} p(x, y) \log_2 p(x, y) \quad (2.12)$$

$$H(X, Y) = -E[\log_2 p(X, Y)] \quad (2.13)$$

Para um par de símbolos com massa de probabilidade $(X, Y) \sim p(x, y)$, a entropia condicional $H(Y|X)$ representa a quantidade de informação ou incerteza restante de $H(Y)$, dado que a VA X é conhecida, e é representado por:

$$H(Y|X) = \sum_{x \in \mathcal{X}} p(x) H(Y|X = x) \quad (2.14)$$

$$H(Y|X) = - \sum_{x \in \mathcal{X}} \sum_{y \in \mathcal{Y}} p(x, y) \log_2 p(y|x) \quad (2.15)$$

$$H(Y|X) = -E[\log_2 p(Y|X)] \quad (2.16)$$

A partir de manipulações com as Equações 2.12 e 2.15, é possível chegar em:

$$H(X, Y) = H(X) + H(Y|X) \quad (2.17)$$

Uma outra medida importante é a entropia relativa ou distância de Kullback–Leibler entre duas massas de probabilidade $p(x)$ e $q(x)$:

$$D(p||q) = \sum_{x \in \mathcal{X}} \log_2 \frac{p(x)}{q(x)} \quad (2.18)$$

Esta é uma medida não simétrica e que apresenta valor nulo para o caso das massas de probabilidade serem idênticas, o que explica o porquê dessa medida ser muitas vezes chamada de distância, embora não seja simétrica.

Com ela, é possível definir a informação mútua, que é a entropia relativa entre a massa de probabilidade conjunta $p(x, y)$ e o produto das massas de probabilidade marginais $p(x)$ e $p(y)$, representada pela Equação 2.19:

$$I(X; Y) = \sum_{x \in \mathcal{X}} \sum_{y \in \mathcal{Y}} p(x, y) \log_2 \frac{p(x, y)}{p(x)p(y)} \quad (2.19)$$

A partir de manipulações com a Equação 2.19, chega-se em:

$$I(X; Y) = H(X) - H(X|Y) \quad (2.20)$$

$$I(X; Y) = H(Y) - H(Y|X) \quad (2.21)$$

É possível ver como todos esses conceitos se relacionam ao visualizar os diagramas presentes na Figura 2.4.

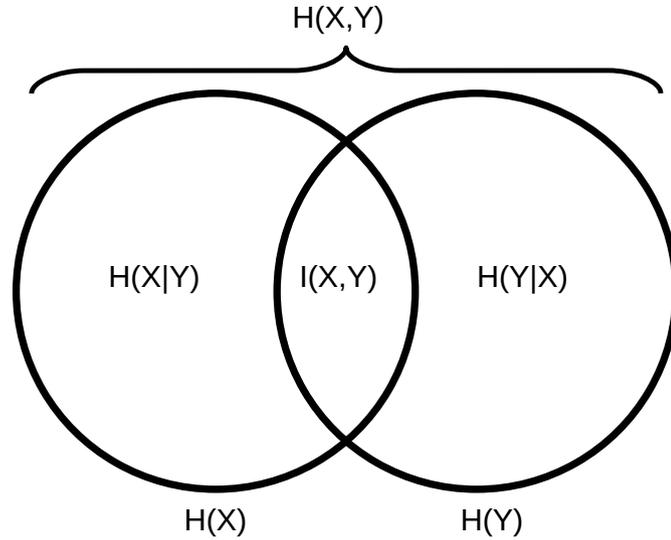


Figura 2.4 – Diagrama de relações entre entropias de duas VAs (fonte: autoria própria).

2.2.3 Canal de comunicação discreto com ruído

A partir das informações apresentadas, um esquema de comunicação pode ser idealizado com base na Figura 2.5. Com uma fonte de símbolos modelada por uma VA X , alfabeto \mathcal{X} , os símbolos são codificados e enviados por um canal de comunicação discreto em que há chances de haver algum tipo de corrupção. Esses códigos logo chegam no receptor, onde haverá a decodificação para recuperar os símbolos originais. Devido à influência e corrupção causada pelo canal ruidoso, não é garantido que todos os símbolos enviados sejam os mesmos que chegam no destino, logo este é modelado por uma VA diferente, Y . Com base na Equação 2.20, temos que a capacidade de transmissão de informação desse canal é dada pela máxima informação mútua alcançável, considerando todas as possibilidades de distribuições de probabilidade $p(x)$ para X [15]:

$$C = \max_{p(x)} (H(X) - H(X|Y)) \quad (2.22)$$

Uma maneira de interpretar isso é: a partir da taxa informação fornecida pela fonte $H(X)$, é subtraída dela a quantidade de informação referente ao erro ou ambiguidade causado pelo ruído do canal $H(X|Y)$. Caso hajam mecanismos de correção dos erros causados pelo canal, esta quantidade é a que deve ser fornecida adicionalmente para que

ocorra esse processo de correção, diminuindo-se assim a taxa de envio de informação pelo canal.

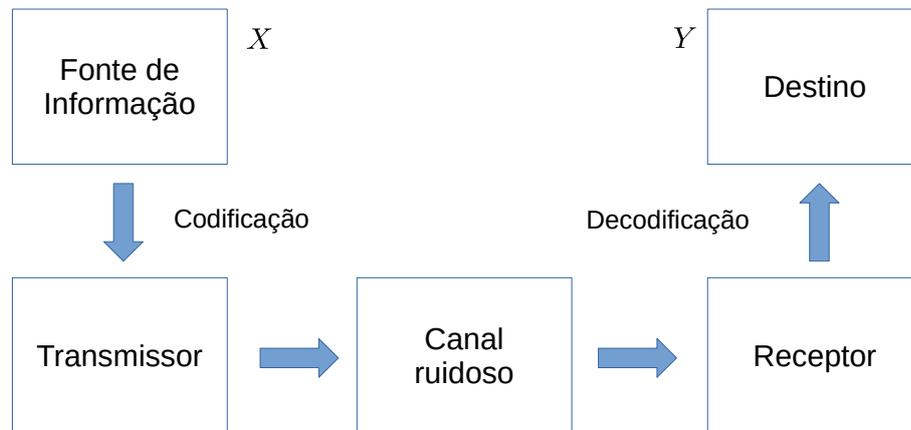


Figura 2.5 – Esquema de comunicação (fonte: autoria própria).

2.2.4 Entropia diferencial

Para uma VA aleatória contínua X , é possível definir uma quantidade semelhante a de entropia discreta de Shannon, chamada entropia diferencial [27], e ela é definida pela Equação 2.23:

$$h(X) = - \int_S f(x) \log_2 f(x) dx \quad (2.23)$$

em que $f(x)$ é a função de densidade de probabilidade (*probability distribution function*, PDF) da VA X e S é o conjunto suporte de todos os possíveis valores desta VA. Diferente da entropia discreta, esta nova medida pode apresentar valores negativos a depender da distribuição que está sendo analisada. De maneira análoga a entropia discreta que está relacionada com uma quantidade efetiva de símbolos que podem ser representados, a entropia diferencial está relacionada com o volume efetivo (comprimento ou área, a depender da dimensão do conjunto suporte) descrito na Equação 2.24, ou seja, o volume equivalente de um hipercubo em um espaço uniformemente distribuído que possua o mesmo conteúdo de informação médio.

$$V_X = 2^{h(X)} \quad (2.24)$$

Assim como no caso discreto, é possível apresentar definições [27] para entropia diferencial conjunta (Equação 2.25), condicional (Equações 2.26 e 2.26)), relativa (equações 2.28) e informação mútua (Equação 2.29, 2.30 e 2.31) para o caso contínuo:

$$h(X, Y) = - \int f(x, y) \log_2 f(x, y) dx dy \quad (2.25)$$

$$h(X|Y) = - \int f(x, y) \log_2 f(x|y) dx dy \quad (2.26)$$

$$h(X|Y) = h(X, Y) - h(Y) \quad (2.27)$$

$$D(f||g) = \int f(x) \times \log_2 \left(\frac{f(x)}{g(x)} \right) dx \quad (2.28)$$

$$I(X; Y) = \int f(x, y) \log_2 \frac{f(x, y)}{f(x)f(y)} dx dy \quad (2.29)$$

$$I(X; Y) = h(X) - h(X|Y) \quad (2.30)$$

$$I(X; Y) = h(Y) - h(Y|X) \quad (2.31)$$

2.2.5 Canal de comunicação contínuo com ruído

Da mesma forma que em um canal discreto, podemos tentar transmitir informação através de sinais contínuos em um canal ruidoso de maneira semelhante ao apresentado na Figura 2.5. Assumindo que o sinal a ser enviado e o ruído que o afeta sejam independentes entre si, a capacidade desse canal é representado por:

$$C = \max_{p(x)} h(y) - h(n) \quad (2.32)$$

onde C é a capacidade do canal, $p(x)$ é a distribuição de probabilidade do sinal da fonte, $h(y)$ é a entropia do sinal que chega no destino e $h(n)$ é a entropia do ruído aditivo causado pelo canal. Como a entropia do ruído é independente da distribuição de X , o máximo refere-se a distribuição $p(x)$ que maximize $h(y)$, considerando as devidas restrições que podem ser impostas pela fonte [15].

2.3 Estimadores de dependências

2.3.1 Autocorrelação

Para um amostra de um processo estocástico (PE) $\{\mathbf{X}(n)\}$ estacionário com N instâncias $\{\mathbf{x}(n)\}$, onde $n \in \{0, 1, \dots, N - 1\}$, a função de autocorrelação [31] pode ser estimada pela Equação 2.33:

$$\hat{R}(m) = \frac{1}{(N-m)} \sum_{n=0}^{N-m-1} \mathbf{x}(n+m)\mathbf{x}(n) \quad (2.33)$$

Essa medida consiste no resultado de diversas correlações de uma amostra do processo $\{\mathbf{x}(n)\}$ com ela mesma $\{\mathbf{x}(n+m)\}$ em diversos valores de atraso m . Espera-se que essa medida estime dependências lineares para o PE $\{\mathbf{X}(n)\}$.

2.3.2 Método de correntropia padrão

A função de correlação generalizada (*generalized correlation function*, GCF) [32, 33], também chamada de função de correntropia, é uma medida capaz de determinar dependências que podem não ser normalmente identificadas com a função de autocorrelação convencional para determinados tipos de PEs.

Dada uma amostra de um PE $\{\mathbf{X}(n)\}$ estacionário com N instâncias $\{\mathbf{x}(n)\}$, onde $n \in \{0, 1, \dots, N-1\}$, uma possível forma de estimar correntropia pode ser definida pela Equação 2.34 com um *kernel* gaussiano representado na Equação 2.35:

$$\hat{V}(m) = \frac{1}{N-m} \sum_{n=0}^{N-m-1} \kappa(\mathbf{x}(n+m) - \mathbf{x}(n)) \quad (2.34)$$

$$\kappa(\mathbf{x}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp\left(\frac{-\|\mathbf{x}\|^2}{2\sigma^2}\right) \quad (2.35)$$

O parâmetro σ nessa equação deve ser otimizado para se obter melhores medidas, mas algumas escolhas arbitrárias também podem ser utilizadas para estimar dependência entre amostras do PE com cópias deslocadas das mesmas. Para identificar a partir de quantos atrasos não há mais dependência, a função de correntropia deve ser comparada à correntropia da amostra do PE em que é feita uma permutações entre suas instâncias, a fim de forçar uma independência entre elas.

2.3.3 Função de correntropia por detecção de coincidências

Neste método [33], é apresentada uma nova forma de estimar a correntropia (Equação 2.36), em que não é utilizado funções de *kernel*, mas uma contagem de coincidências. Ele permite estender essa medida para sinais categóricos e, para o caso de sinais não categóricos, a contagem de coincidências é estimada pela Equação 2.37, onde Δ é um valor arbitrário que determina um pequeno volume ao redor de um ponto em que possa ser considerado a coincidência entre dois pontos.

$$\hat{V}(m) = \frac{1}{N-m} \sum_{n=0}^{N-m-1} \delta(\mathbf{x}(n+m) - \mathbf{x}(n)) \quad (2.36)$$

$$\delta(\mathbf{x}(n+m) - \mathbf{x}(n)) = \begin{cases} 1, & \text{se } \|\mathbf{x}(n+m) - \mathbf{x}(n)\| \leq \Delta \\ 0, & \text{caso contrário} \end{cases} \quad (2.37)$$

Semelhante ao caso anterior, a função resultante deve ser comparada com a estimada por uma permutação das instâncias de amostras do processo em análise para determinar para quais valores de atraso não há uma dependência temporal entre as instâncias.

2.4 Estimador de dimensão intrínseca e entropia diferencial

O método proposto em [26] para a estimação de dimensão intrínseca (DI) e entropia diferencial (ED) se baseia em dois estudos distintos [34, 35] que focam na estimação dessas medidas separadamente, mas que podem ser unidos para a estimação conjunta de ambas.

Dado um conjunto de N observações $\{\mathbf{x}(1), \mathbf{x}(2), \dots, \mathbf{x}(N)\}$, um determinado intervalo de comprimento r , a dimensão de informação dos dados [26, 35] pode ser identificada a partir da proporcionalidade descrita pela Equação 2.38, em que $C(r)$ é a integral de correlação representado pela Equação 2.39 com $r \rightarrow 0$:

$$C(r) \propto r^d \quad (2.38)$$

$$C(r) = \frac{1}{N(N-1)} \sum_{i < j}^N I(\|\mathbf{x}(i) - \mathbf{x}(j)\| \leq r) \quad (2.39)$$

onde $I(\cdot)$ é uma função detectora de coincidências representada por:

$$I(\lambda) = \begin{cases} 1, & \text{quando } \lambda \text{ é verdade} \\ 0, & \text{quando } \lambda \text{ é falso} \end{cases} \quad (2.40)$$

Espera-se que $C(r)$ escale linearmente com r^d quando $r \rightarrow 0$, em que d é a dimensão real dos dados, logo:

$$\log_2 C(r) \approx d \log_2(r) - h \quad (2.41)$$

em que h é o logaritmo da constante de proporcionalidade.

Com essa relação, é possível determinar a dimensão d a partir do ângulo de inclinação do gráfico $(\log_2(r), \log_2(C(r)))$.

Para o caso da estimação de entropia diferencial, um outro estudo [26, 34] é apresentado em que primeiro é calculado o número de coincidências $n_c(r)$ entre todos os $N_t = N(N - 1)/2$ pares de instâncias $\mathbf{x}(i)$ e $\mathbf{x}(j)$, com $i < j$, a partir da condição $\|\mathbf{x}(m) - \mathbf{x}(n)\|_\infty < r/2$. Com isso, é calculado a razão entre o número de comparações e o número de coincidências:

$$Q(r) = \frac{N_t}{n_c(r)} \quad (2.42)$$

O volume efetivo é estimado pela Equação 2.43:

$$\hat{V} = r^d Q(r) \quad (2.43)$$

Por fim, a ED é estimada a partir do logaritmo deste volume efetivo estimado, chegando em:

$$\hat{h} = d \log_2(r) + \log_2(Q(r)) \quad (2.44)$$

A partir da da função $C(r)$, é possível relacionar essas duas quantidades a partir da relação $C(r) = 1/Q(r)$, chegando em:

$$\hat{h} = \hat{d} \log_2(r) - \log_2(C(r)) \quad (2.45)$$

Com base nestes resultados, o método que é proposto em [26] demonstra que a DI dos dados pode ser estimada pela inclinação da relação entre $(\log_2(r), \log_2(C(r)))$ e a ED pode ser estimada pela distância entre essa reta e uma outra padrão para uma dada dimensão.

Um outro problema apresentado nesse mesmo estudo é o da compensação do viés que ocorre quando essas medidas são estimadas com poucos dados em comparação com a dimensão em que eles estão realmente presentes. A partir de diversas análises baseadas em [36], [26] propôs a compensação de viés a partir das seguintes equações:

$$\bar{r}(N, d) = \frac{1}{1 + N^{\frac{1}{d}}} \quad (2.46)$$

$$d_0(N, d) = d \times \left(1 - \frac{\bar{r}(N, d)}{2 - \bar{r}(N, d)} \right) \quad (2.47)$$

São escolhidos alguns valores de dimensão d próximos ao inicialmente estimado e é calculado $\bar{r}(N, d)$ com base na Equação 2.46 com um número de amostras N . Após isso, é escolhida como dimensão intrínseca aquela em que o cálculo de $d_0(N, d)$ mais se aproxima da dimensão intrínseca inicialmente calculada pelo método.

Com a nova estimativa da dimensão intrínseca dos dados \bar{d} , é calculado $\Delta h(N, d)$ a partir da Equação 2.48, e a nova estimativa de entropia diferencial é dada pela Equação 2.49:

$$\Delta h(N, d) = d \left(\left(\frac{\bar{r}(N, d)}{2 - \bar{r}(N, d)} \right) \log_2(\bar{r}(N, d)) + \log_2(2 - \bar{r}(N, d)) \right) \quad (2.48)$$

$$\bar{h} = \hat{h} - \Delta h(N, \bar{d}) \quad (2.49)$$

Capítulo 3

Definição da Capacidade de Representação

Neste capítulo é apresentado como a capacidade de representação foi conceptualizada com base na capacidade de um canal de comunicação com ruído e o que ela representa.

3.1 Canal de comunicação com ruído

Ao considerarmos tanto um canal contínuo ou discreto, a taxa de transmissão, R , é dada pela informação mútua:

$$R = I(X; Y) = H(X) - H(X|Y) \quad (3.1)$$

em que $I(X; Y)$ é a informação mútua entre a fonte X e destino Y , $H(X)$ é a entropia da fonte e $H(X|Y)$ é a entropia do erro causado pelo ruído presente no canal. Para canais de comunicação, essa medida representa a quantidade de informação restante da fonte quando é subtraída a quantidade de informação perdida devido ao erro.

Através de algumas manipulações, apresentadas na Seção 2.2, a informação mútua também pode ser descrita como:

$$I(X; Y) = H(Y) - H(Y|X) \quad (2.21 \text{ revisitada})$$

em que $H(Y)$ é a entropia do destino e $H(Y|X)$ é a entropia do erro de espalhamento que ocorre devido ao canal ruidoso, ou seja, de como uma mensagem x pode ser confundida em diferentes mensagens y no destino.

Como descrito no final da Seção 2.2, a capacidade do canal é o valor máximo que R pode alcançar ao considerar as estatísticas da fonte e do ruído, este representado pelas probabilidades condicionadas:

$$C = \max_{p(x)} (I(X; Y)) \quad (3.2)$$

em que $p(x)$ refere-se as distribuição da fonte. Enquanto o cálculo da capacidade é dado pela subtração de duas medidas de entropia, caso estas sejam as que maximizem a informação mútua, é possível enxergar a capacidade de um canal a partir de uma outra ótica.

Podemos considerar um canal estendido como N usos de um canal original, ou seja, assumindo a transmissão N símbolos de uma VA X . Para esse canal, determina-se $|\mathcal{X}|^N$ como o número de possíveis símbolos de entrada x e $|\mathcal{Y}|^N$, o número de possíveis símbolos de saídas y . Caso N seja grande o suficiente, pode-se definir um subconjunto de \mathcal{X}^N dos símbolos típicos, que é chamado de conjunto típico da entrada, assim como também é possível definir um conjunto típico para a saída considerando os símbolos contidos em \mathcal{Y}^N . Estes símbolos presentes nos conjuntos típicos possuem probabilidades quase equiprováveis (no caso discreto), ou estão dispostos em uma densidade de probabilidade quase uniforme (no caso contínuo). O erro causado pelo ruído também apresenta uma distribuição próxima da uniforme, que representa o conjunto de elementos y típicos quando um elemento típico x de entrada é enviado [28].

Para o caso discreto, o número de elementos típicos de saída y é aproximadamente $2^{NH(Y)}$. Também é possível esperar que o número de "elementos y típicos dados por x típicos" é aproximadamente $2^{NH(Y|X)}$ como exemplificado na Figura 3.1. Caso queiramos obter o número de entradas x que não apresentem confusão selecionadas do conjunto típico, dividimos respectivamente as quantidades apresentadas anteriormente, logo a quantidade de entradas sem confusão é $\leq 2^{N(H(Y)-H(Y|X))} = 2^{NI(X;Y)}$. Para o caso em que $I(X;Y)$ maximiza a entropia da fonte, essa quantidade é $\leq 2^{NC}$, em que C é a capacidade do canal. Logo, de maneira assintótica, até a quantidade de C bits por ciclo, é possível transmitir nesse canal com um erro de confusão cada vez mais próximo de zero [28].

Na Figura 3.1, o retângulo interno representa o conjunto típico de saídas y e cada círculo representa os possíveis y típicos que podem chegar ao destino, devido à ação do ruído, para cada x típico que se deseja enviar. Para que possamos selecionar uma quantidade de entradas típicas que não vão gerar sobreposições/erros, devemos então dividir a quantidade de saídas típicas pela quantidade de elementos da distribuição causada pelo ruído. Como estamos assumindo um N grande o suficiente, de forma a poder assumir que todos os elementos desses conjuntos são quase equiprováveis; ao dividirmos essas quantidades, podemos obter o número de círculos que cabem nesse espaço, sem sobreposições, conseqüentemente, a capacidade deste canal.

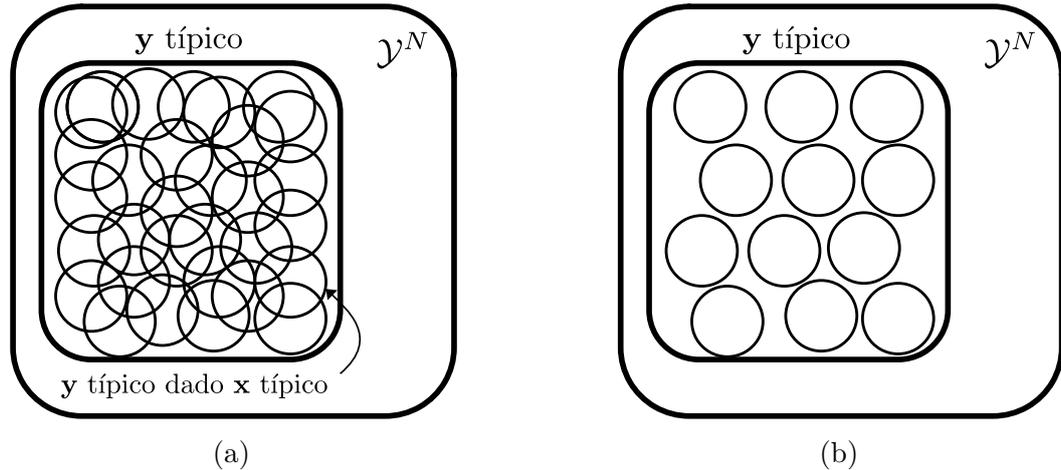


Figura 3.1 – Diagramas que mostram o conjunto de possíveis elementos \mathcal{Y}^N . Dentro deste, há um subconjunto dos $2^{NH(Y)}$ elementos y típicos da saída e vários conjuntos de $2^{NH(Y|X)}$ elementos típicos de erro (y típicos dado x típicos) (a) com sobreposição (gerando erro de confusão) e (b) sem sobreposição (sem erros de confusão). (Fonte: autoria própria, baseado em [28]).

De maneira análoga, para o caso contínuo, a noção de quantidade de elementos típicos pode ser substituída pelos volumes de distribuições de probabilidade aproximadamente uniformes típicos. Com isso, a noção da capacidade do canal emerge da razão não entre quantidades de elementos, mas entre os volumes da distribuição típica de saída y pelo volume típico da distribuição que representa o erro típico, este representado pelas distribuições condicionadas. Mesmo que inicialmente esses sinais contínuos de entrada x pudessem assumir infinitos possíveis valores, somente uma quantidade discreta e finita de valores pode ser representada sem erro para um N suficientemente grande.

3.2 Paralelo entre canal de comunicação e capacidade de representação

A partir da Figura 3.2, é possível adaptar o canal contínuo de ruído gaussiano branco aditivo (*Additive White Gaussian Noise*, AWGN) e traçar os seguintes paralelos: a fonte de informação corresponde às respostas idealizadas dos sensores MOX, ignorando qualquer equivocação que possa ocorrer; o destino é a respostas dos sensores da maneira como elas podem ser medidas, já corrompidas por um ruído, e existe um elemento de ruído, inicialmente desconhecido, que faz com que $H(Y|X) \neq 0$, que posteriormente seria caracterizado como aditivo e branco, na Seção 4.2.

A partir dessas considerações, a capacidade de representação C_R pode ser determinada de uma forma similar a capacidade de um canal: seja pela estimação $h(X)$ e $h(X|Y)$ ou $h(Y)$ e $h(Y|X)$, calculando a máxima informação mútua e, neste caso, escolhendo este

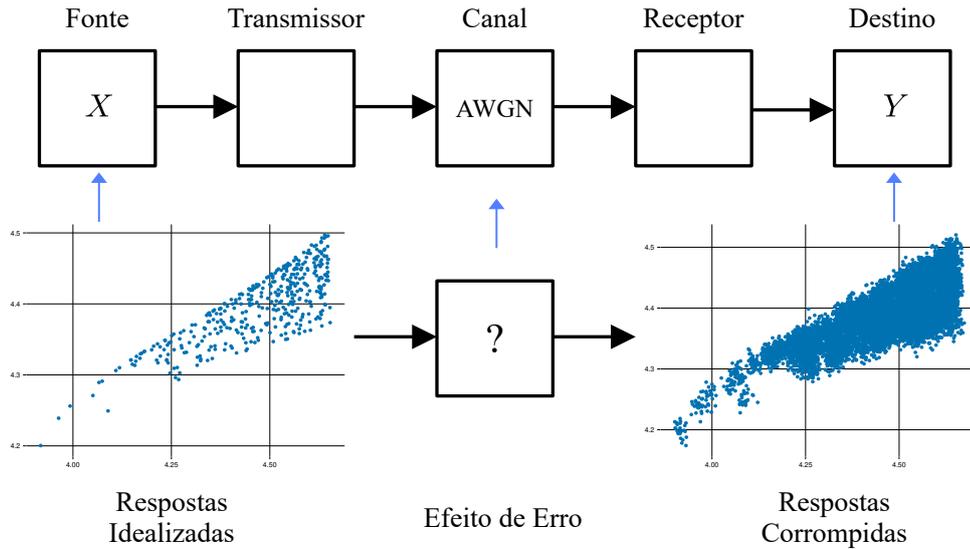


Figura 3.2 – Esquema simplificado de um canal de comunicação contínuo AWGN (acima) e sistema envolvendo as estruturas das respostas simultâneas de arranjos de sensores MOX (abaixo) (fonte: autoria própria).

valor como o expoente da base presente no logaritmo das entropias diferenciais estimadas. Neste trabalho, as entropias são determinadas em *bits*, logo C_R é dado pela Equação 3.3.

$$C_R = 2^{I(X;Y)} \tag{3.3}$$

em que $I(X; Y)$ é a informação mútua descrito na Equação 2.31.

Uma outra forma de visualizar o cálculo da capacidade de representação proposta é relembrando que a ideia de volume efetivo de uma determinada VA mostrada na Equação 2.24. Logo, os volumes efetivos da saída corrompida e do ruído que afeta os sensores são calculados, respectivamente, por:

$$V_Y = 2^{h(Y)} \tag{3.4}$$

$$V_{Y|X} = 2^{h(Y|X)} \tag{3.5}$$

Por fim, a capacidade de representação é dada então pela razão:

$$C_R = \frac{V_Y}{V_{Y|X}} \tag{3.6}$$

No contexto de estruturas baseadas nas respostas de sensores MOX, espera-se que essa relação represente um limite teórico para o número de respostas simultâneas de sensores (correspondentes a concentrações e/ou substâncias, ao que chamaremos de classes de sinalizações) que podem ser representadas com um erro de classificação próximo de zero,

mesmo que um esquema de quantização ótimo desse espaço de sensores que possibilite isso não seja conhecido. Isso quer dizer que, mesmo que inicialmente as respostas simultâneas de sensores pudessem assumir infinitos valores, devido à presença do ruído e a restrições estatísticas das estruturas, há uma quantidade finita de classes que podem ser representadas sem ambiguidades, logo podem ser classificadas sem erros.

Em um sistema real, $h(Y)$ e $h(Y|X)$ são as quantidades mais prováveis de serem obtidas, já que as medidas que obtemos dos sensores já estão corrompidas pelo ruído. Devido a isto, essas quantidades foram as escolhidas a serem estimadas para determinar a capacidade de representação de uma dada estrutura. Adicionalmente, ao contrário da estrutura referente aos sinais de entrada que podem recair em subespaços de dimensões menores do que a aparente (referente ao número de sensores), as estruturas de ruídos brancos tendem a querer preencher todas as dimensões. Com isso, é de interesse apenas estimar a dimensão intrínseca de Y .

O método proposto que busca determinar a capacidade pode ser resumido nos seguintes passos:

1. Estimar a dimensão intrínseca e entropia diferencial $h(Y)$ da estrutura corrompida;
2. Caracterizar o ruído que afeta o arranjo de sensores;
3. Estimar a entropia diferencial $h(Y|X)$ para o ruído aditivo;
4. Computar a informação mútua a partir da Equação 2.31;
5. Aplicar a Equação 3.3 e arredondar o valor obtido para baixo.

Para demonstrar a estimação desta quantidade proposta, foi escolhido trabalhar com simulações devido à escassez de bases de dados que consistissem em respostas de arranjos de sensores MOX à presença de diferentes misturas de concentrações de gases de forma a se obter uma estrutura representativa. Devido a isto, foi necessário identificar modelos validados e simular respostas idealizadas de sensores MOX, como a entrada X ; entender como o erro ocorre neste sistema e, conseqüentemente, como simular as respostas corrompidas, como o destino Y .

Capítulo 4

Abordagem Proposta e Simulações

Neste capítulo são demonstradas estimativas de capacidade de representação de estruturas simuladas seguindo modelos previamente validados na literatura, assim como o estudo e caracterização do ruído que afeta a resposta de sensores MOX. Também são realizados teste experimentais (por meio de simulações) para julgar as capacidades de representação teóricas estimadas. Todos os algoritmos e simulações foram desenvolvidos em linguagem de programação Julia [37] por ser *open source*, apresentar rápido desempenho, além da facilidade de manipulação de dados.

4.1 Modelo de respostas idealizadas

Para simular dados que representem respostas idealizadas de sensores MOX, foi necessário escolher um modelo que relacionasse a concentração de gases alvo presentes no ambiente com valores de resistência dos sensores.

De modo geral, os modelos de misturas para dois gases são os que apresentam melhores avanços se comparados a modelos de misturas mais complexos, logo, o modelo linear quadrático proposto em [13] foi escolhido por apresentar um bom desempenho dentre os modelos de misturas de dois diferentes gases:

$$x = a_1 c_1^{r_1} + a_2 c_2^{r_2} + b_1 (c_1^{r_1})^2 + b_2 (c_2^{r_2})^2 + d c_1^{r_1} c_2^{r_2} + 1 \quad (2.2 \text{ revisitada})$$

$$x = \frac{R_o}{R_g} \quad (2.3 \text{ revisitada})$$

Neste mesmo trabalho, é possível identificar parâmetros validados para dois sensores virtuais baseados no SB-30 (FIS, Japão), quando operado em dois pontos de operação diferentes ao controlar sua temperatura. Estes parâmetros de modelo podem ser encontrados na tabela 4.1.

Tabela 4.1 – Parâmetros do modelo de dois sensores virtuais.

	a_1	a_2	b_1	b_2	d	r_1	r_2
Sensor 1	0.80	0.32	0.15	0.41	-0.16		
Sensor 2	1.61	1.47	-0.13	0.01	-0.22	0.60	0.44

Foi assumido que cada um desses sensores foi acoplado a um resistor de carga R_L e submetido a uma fonte de tensão V_c em uma configuração de divisor de tensão a fim de condicionar o sinal R_g em uma tensão V_g . Mostrado na Figura 4.1, a configuração presente em [13] foi utilizada neste trabalho para modelar o condicionamento de sinal, onde, para cada sensor, o sinal condicionado é dado por:

$$V_g = \left(1 - \frac{R_g}{R_g + R_L}\right) V_c \quad (4.1)$$

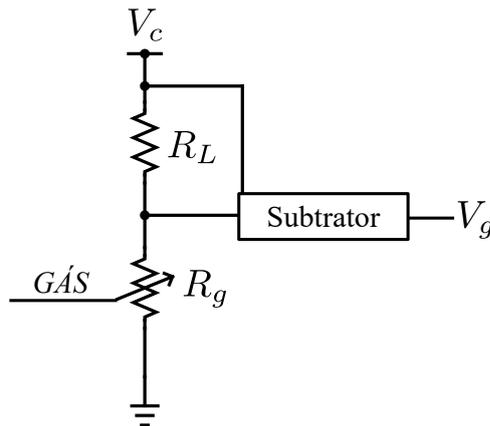


Figura 4.1 – Diagrama de circuito simplificado, como recomendado pela fabricante para ser usado com o sensor MOX (SB-30 da FIS, Japan) (fonte: autoria própria).

Considerando as características de funcionamento do sensor SB-30 e o circuito de condicionamento de sinais apresentado, foram assumidos valores de $R_L = 10\text{ k}\Omega$, $R_o = 10\text{ k}\Omega$ e $V_C = 5\text{ V}$. Com isso, é possível simular as respostas em regime estacionário idealizadas de sensores MOX em níveis de tensão, ignorando efeitos adversos como o de deriva ou flutuações de medições que possam vir a ocorrer. Esses valores foram escolhidos de forma a maximizar o espaço abrangido pela a respostas simultâneas dos sensores virtuais nos intervalos de concentrações de gases para os quais os modelos foram ajustados.

4.2 Estudo do ruído

Sabe-se que as respostas que são obtidas de sensores MOX reais apresentam um ruído que corrompe suas medições, o que ocasiona incertezas e erros. Devido a isso,

para aplicar o modelo de canal AWGN, como apresentado na Seção 3.2, foi necessário caracterizar o ruído que afeta esses sensores. Assim, algumas perguntas foram levantadas para avaliar o ruído que afeta esse sistema:

Q1: A intensidade do ruído varia com a mudança em concentrações de gases alvo presente no ambiente?

Q2: Há dependência temporal entre amostras?

Q3: Há interdependência entre ruídos de diferentes sensores?

Para responder a cada uma dessas perguntas, um estudo foi realizado utilizando dados reais, obtidos por meio de cooperação entre o IMT Nord-Europe (França) e a Universidade Federal de Sergipe (UFS) por intermédio do professor Jugurta Montalvão (UFS) e do então aluno, e agora doutor, Luiz Miranda (IMT Nord-Europe), com o objetivo de analisar de forma mais aprofundada os dados obtidos durante os experimentos realizados no andamento e precedente à tese de Luiz. Foram assumidos que as conclusões relacionadas ao ruído presente nesses sensores MOX também são válidas para outros sensores construídos a partir da mesma tecnologia.

A base de dados usada consiste em séries temporais de respostas de arranjos de sensores, incluindo quatro diferentes sensores MOX: MICS 5524 (SGX Sensortech, Suécia), MICS 5914 (SGX Sensortech, Suécia), CCS801 (Cambridge CMOS Sensors Ltd., Reino Unido) and TGS8100 (Figaro, Japão). Estes arranjos de sensores foram colocados em uma câmara de exposição (estrutura em vidro de 36L) onde eram injetadas diferentes misturas de gases a diferentes concentrações e sinais eram adquiridos a cada 10 segundos em diferentes ensaios experimentais. Apesar do controle de temperatura, umidade e isolamento do sistema, haviam pequenas variações de temperatura de 1 a 2 °C, para mais e para menos. Além disso, junto às misturas de gases que eram injetadas no sistema, também era injetado ar que era extraído do ambiente externo, o que pôde levar a pequenas variações indesejadas nas respostas dos sensores.

Para cada ensaio experimento presente na base, considerando as séries temporais de cada um dos quatro sensores MOX estudados, inicialmente foi efetuado um janelamento de cada uma das séries temporais, com janelas referentes a 3 minutos, sem superposição, de respostas de sensores. Para cada uma dessas janelas, foram ajustadas curvas polinomiais de segunda ordem, utilizando o método de erro quadrático médio, na intenção de capturar as tendências de resposta lenta. Após isso, foram obtidos sinais residuais a partir da subtração entre as curvas ajustadas e os sinais originais. Por fim, esses sinais residuais foram utilizados como estimativas dos ruídos, como demonstrado na Figura 4.2. Com isso, é possível descrever o ruído de interesse em questão como as variações rápidas que corrompem as respostas desses sensores MOX.

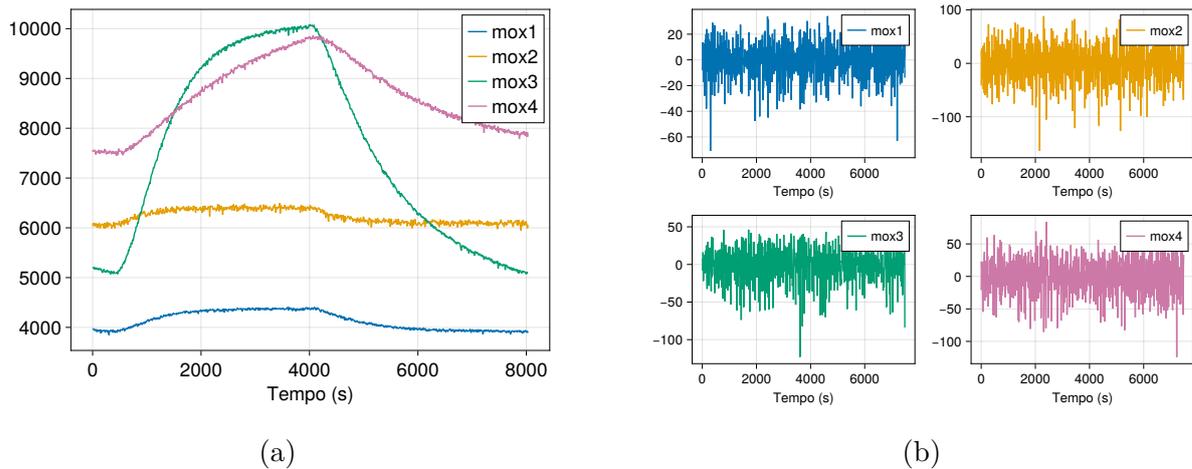


Figura 4.2 – (a) Exemplo de série temporal referente a reposta dos quatro sensores MOX em um experimento. (b) Ruído extraído de cada um dos quatro sensores MOX para o mesmo experimento. Sensores: MICS 5524 (mox1), MICS 5914 (mox2), CCS801 (mox3) e TGS8100 (mox4) (fonte: autoria própria).

4.2.1 Sobre a dependência a diferentes concentrações de gases

Para o primeiro conjunto de testes, janelas de 50 amostras foram selecionadas para estimar a variância dos ruídos extraídos para cada sensor ao longo do tempo, com superposição, em diferentes ensaios experimentais analisados na base. Através de inspeções visuais com as curvas originais, nenhuma correlação foi encontrada entre os valores de variância estimadas do ruído com a mudança da respostas dos sensores a diferentes concentrações de gás. Na Figura 4.3, é possível ver um exemplo das curvas que eram comparadas para cada um dos sensores MOX analisados em um ensaio experimental.

Com inspeções visuais, também ficou claro que as variâncias dos ruídos não se mantinham constantes ao longo de um mesmo ensaio experimental, mas que tendiam a se manter em um intervalo limitado de valores para um mesmo módulo sensor em diferentes experimentos.

4.2.2 Sobre a dependência temporal

Para o segundo conjunto de testes, a função de correntropia do ruído extraído foi estimada para cada sensor, seguindo a metodologia presente em [33], descrita na Subseção 2.3.3, ao longo de diferentes ensaios experimentais presentes na base. Após ser feita a permutação das amostras do ruído extraído, sua função de correntropia também foi estimada e assumida como referencial, e então duas funções foram comparadas. Este comparativo pode ser visualizado na Figura 4.4.

Para o ruído original (não permutado), houve uma diminuição considerável nos valores de correntropia, após somente um atraso, similar ao que ocorreu com o caso

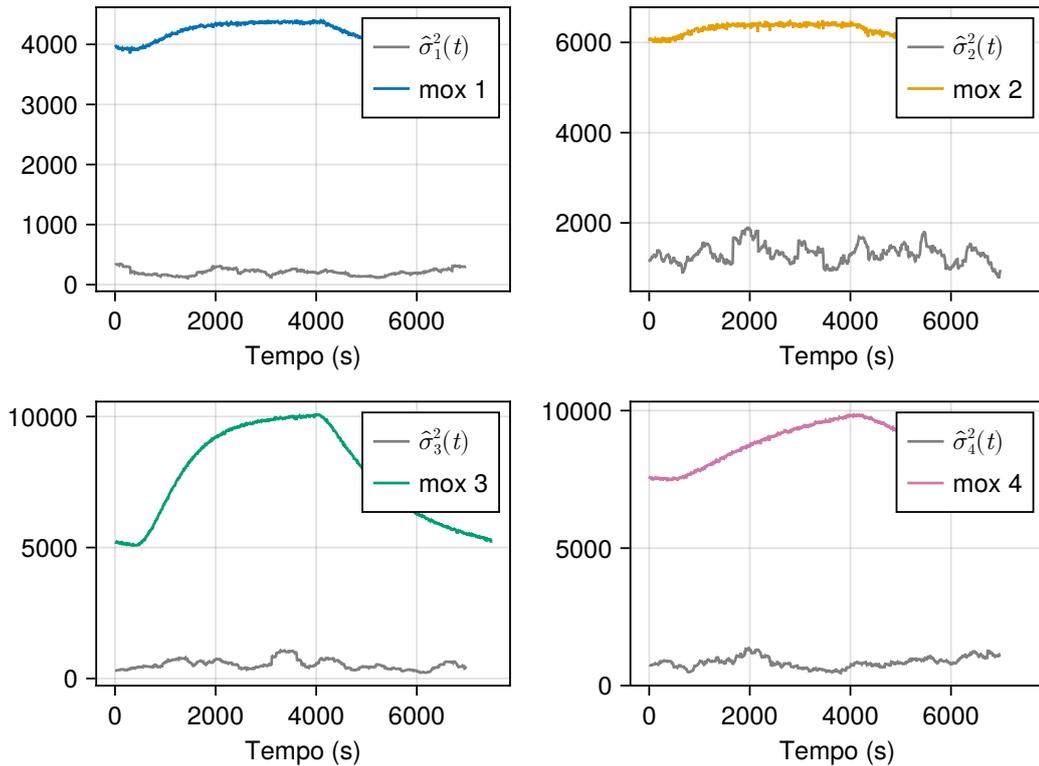


Figura 4.3 – Variâncias estimadas ao longo do tempo (cinza) e séries temporais originais cada um dos quatro sensores MOX em um mesmo experimento. Sensores: MICS 5524 (mox1), MICS 5914 (mox2), CCS801 (mox3) e TGS8100 (mox4) (fonte: autoria própria).

permutado (que é considerado branco), para todos os sensores. Esse resultado se repetiu em outros ensaios experimentais testados na base. Isto é um indício que o PE que modela o ruído que afeta esses sensores não apresenta dependências temporais.

4.2.3 Sobre a interdependência entre sensores

Para o terceiro conjunto de testes, uma adaptação dos métodos propostos em [34, 35], apresentada por [26], foi utilizada como metodologia de estimação para a dimensão intrínseca. Para um mesmo ensaio experimental, valores de ruído simultâneos ao longo do tempo para os quatro sensores MOX foram utilizados, o que implica que a dimensão aparente desses dados é $D = 4$.

Com a relação apresentada na equação 2.41, sabe-se que é possível determinar a dimensão intrínseca das observações a partir do ângulo de inclinação do gráfico $(\log_2(r), \log_2(C(r)))$. Com isso, é possível analisar os gráficos apresentados na Figura 4.5, em que a curva $\log_2(C(r))$ estimada tem sua inclinação comparada com a de retas padrão cujas inclinações estão relacionadas a diferentes dimensões.

Por inspeção visual, a inclinação da curva $\log_2(C(r))$ se assemelhou mais à da

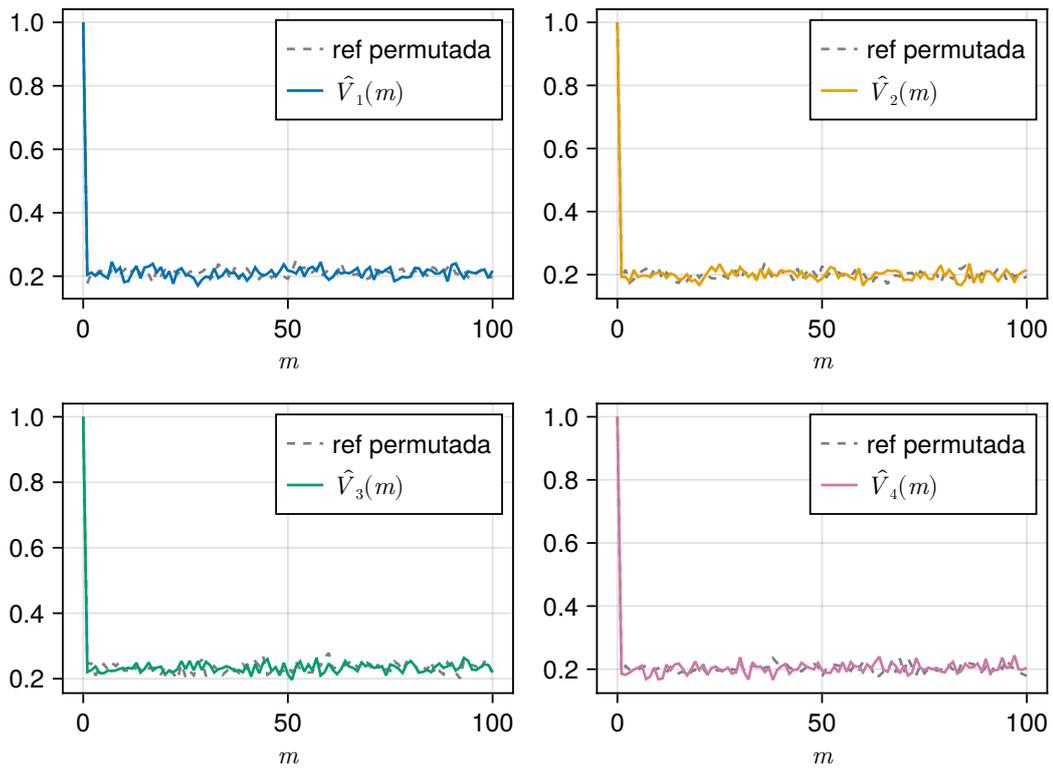


Figura 4.4 – Exemplo de comparação entre as funções de correntropia do sinal original e do ruído permutado para cada um dos quatro sensores MOX em um mesmo experimento. Sensores: MICS 5524 (\hat{V}_1), MICS 5914 (\hat{V}_2), CCS801 (\hat{V}_3) e TGS8100 (\hat{V}_4) (fonte: autoria própria).

reta relacionada a de dimensão quatro, o que implica que a dimensão intrínseca local do ruído multivariado analisado é a mesma da aparente. Isso quer dizer que, caso haja dependências estatísticas entre os ruídos que afetam esses sensores, as repostas desses não podem ser expressas por menos que quatro VAs independentes. Com isso, também foram calculadas operações de correlação entre os ruídos presentes em diferentes sensores para mesmos ensaios experimentais e não foi constatado relações de dependência linear entre esses sensores. Todos esses resultados implicam que não há relação de dependência entre o ruído que afeta diferentes sensores.

4.2.4 Resultados

Com base nestes resultados, resumidos na Tabela 4.2, o ruído que afeta estes sensores foi considerado aditivo, independente e identicamente distribuído do tipo Gaussiano $\mathcal{N}(0, \Sigma)$, em que Σ é a matriz de covariância diagonal com valores de variância na ordem de magnitude próxima ao do ruído observado e valores de covariância nulos. Devido ao fato que a potência do ruído não foi constante, como visto nos primeiros testes, pode-se então assumir uma faixa de possíveis valores para a variância, variando entre dois extremos.

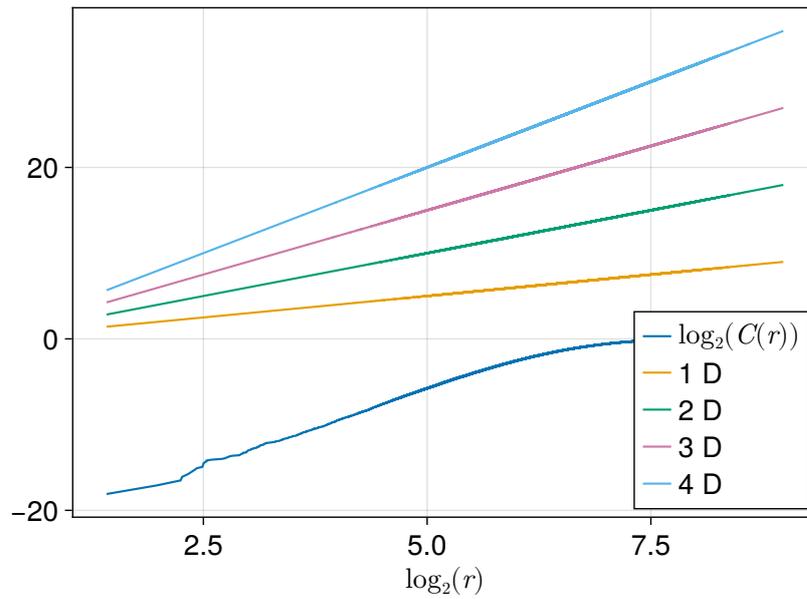


Figura 4.5 – Curva $\log_2(C(r))$ estimada ao longo do eixo $\log_2(r)$, cuja inclinação é comparada a das retas padrão cujas inclinações são referentes a dimensões entre 1 e 4 (fonte: autoria própria).

Logo, deve ser esperado que, para os valores mais baixos de variância, a capacidade de representação será maior; e o oposto deve ser esperado para os valores mais altos de variância.

Tabela 4.2 – Resumo dos testes realizados para caracterização do ruído.

Condições testadas	Métodos seguidos	Conclusões
Dependência de concentrações de gás	Estimação de variância ao longo do tempo	Nenhuma dependência a concentrações de gás e variância variável ao longo do tempo
Dependência temporal	Função de Correlação Generalizada [33]	Nenhuma dependência temporal
Interdependência	Estimação de dimensão intrínseca [26] e correlação	Nenhuma dependência entre ruídos de sensores diferentes

4.3 Estimação da capacidade de representação

Para finalmente explorar a abordagem de estimação proposta no fim do capítulo 3, uma estrutura representando a resposta de dois sensores MOX virtuais foi simulada. Através da simulação de sensores cujos modelos e parâmetros foram experimentalmente validados, os seguintes experimentos se restringiram a somente dois sensores MOX, sob uma faixa limitada de concentrações de acetona e etanol.

Inicialmente, pares (c_1, c_2) de misturas de concentrações de acetona (variando de 6 ppm a 40 ppm) e etanol (de 0 ppm a 40 ppm) foram escolhidas. Estas faixas de valores foram selecionadas porque os parâmetros do modelo presentes em [13] foram experimentalmente validados nestes intervalos. Logo, a equação do modelo de misturas foi aplicada a (c_1, c_2) , seguindo os parâmetros dos dois sensores virtuais baseados no SB-30 (FIS, Japão), obtendo uma projeção em (x_1, x_2) . Através do circuito divisor de tensão nas condições apresentadas na Seção 4.1, x_1 foi convertido em v_{g1} e x_2 em v_{g2} . Os pares de valores (v_{g1}, v_{g2}) foram assumidos como a entrada (x_1, x_2) no sistema. A partir dos resultados presentes na Seção 4.2, instâncias de $\mathcal{N}(0, \Sigma)$, com Σ diagonal e $\sigma_1 = \sigma_2 = 0.01$ (valores representativos da intensidade de ruído experimentalmente observada), foram adicionados a cada par de entrada (x_1, x_2) , obtendo a estrutura corrompida Y composta por pares de valores (y_1, y_2) . Essas etapas estão representadas na Figura 4.6.

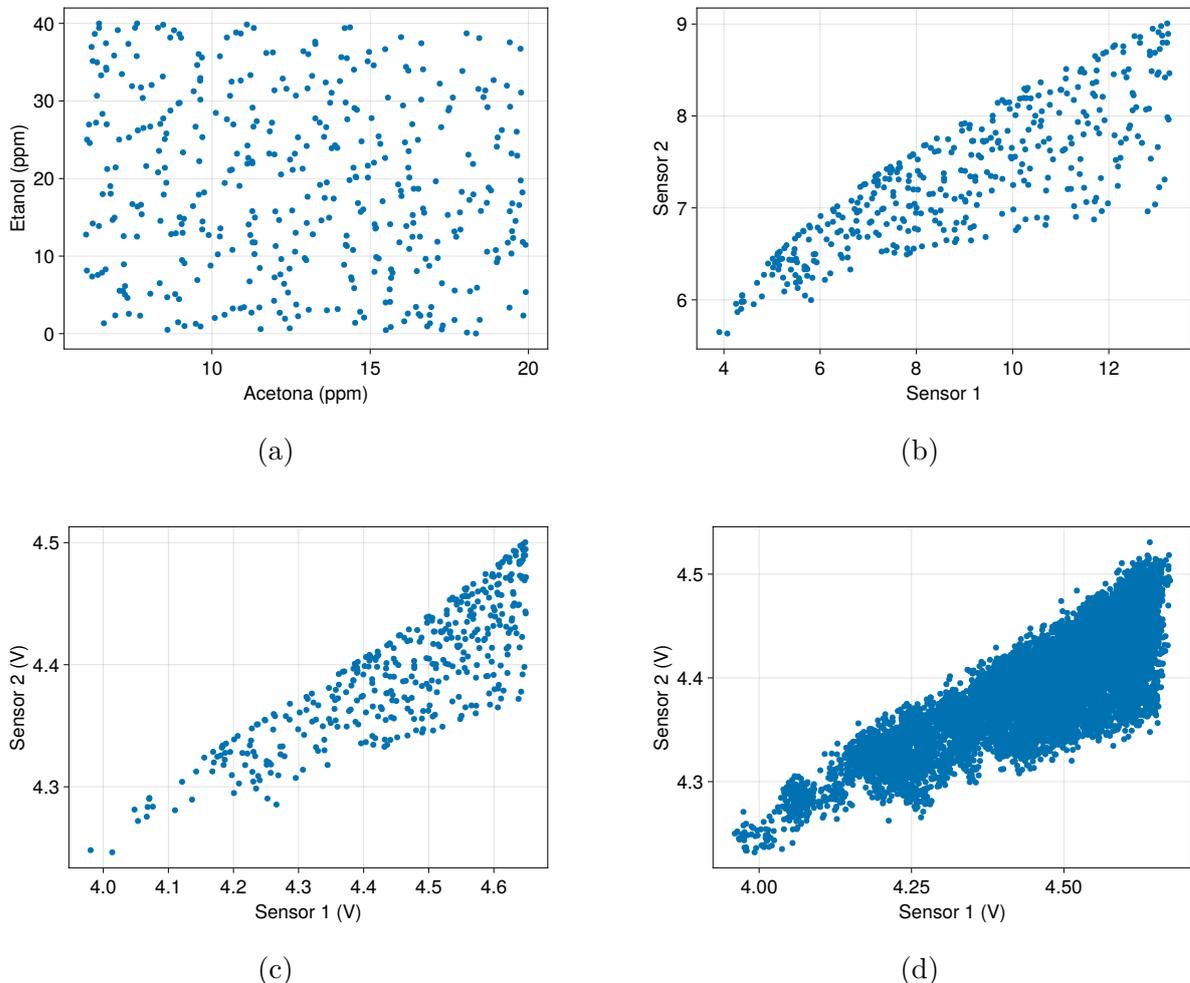


Figura 4.6 – Etapas de simulação dos dados. (a) Pares de concentrações (c_1, c_2) de acetona e etanol. (b) Pares (x_1, x_2) de razões de condutâncias de dois sensores virtuais. (c) Pares (v_{g1}, v_{g2}) das respostas convertidas das sensores em sinais de tensão usados como entrada (x_1, x_2) . (d) Pares (y_1, y_2) utilizados como a saída corrompida com intensidades de ruído que foram experimentalmente determinadas para sensores desse tipo (fonte: autoria própria).

Após aplicar o procedimento proposto no Capítulo 3, seguindo a metodologia de [26], a entropia diferencial estimada da estrutura foi de $h(Y) = -4.56 \text{ bits}$, enquanto a entropia diferencial referente ao erro foi assumida como a do ruído gaussiano, $h(Y|X) = -9.62 \text{ bits}$, possibilitando calcular a capacidade de representação para esta simulação, que foi em torno de $C_R = 33$. Isto implica que para a estrutura formada por estes dois sensores virtuais, sob as condições de ruído apresentadas, existem apenas 33 possíveis pares (x_1, x_2) , escolhidos otimamente, que podem ser representados com uma taxa de erro de classificação próxima de zero.

Para testar a mudança na capacidade de representação com a variância do ruído, o procedimento foi executado mais quatro vezes para a mesma distribuição de entrada, X , para diferentes valores de σ , onde $\sigma_1 = \sigma_2 = \sigma$ e com Σ diagonal. Os resultados para as estimações de capacidade de representação são mostrados na Tabela 4.3 e são consistentes com as ideias propostas no final da Subseção 4.2.4.

Tabela 4.3 – Estimação de capacidade de representação para diferentes níveis de ruído para uma mesma distribuição de entrada.

σ	0.008	0.009	0.010	0.011	0.012
C_R	50	42	33	28	24

4.4 Simulação de erro de quantização

Para testar a capacidade de representação teoricamente encontrada, inicialmente é válido lembrar os resultados apresentados por Shannon [15], no qual é descrito que, até a capacidade do canal, é possível codificar a mensagem transmitida de maneira a obter um erro de transmissão próximo de zero, para uma cadeia em bloco de N símbolos que seja grande o suficiente. Em contraste, em uma transmissão/recepção instantânea, o erro é provavelmente maior, até mesmo se for utilizada uma taxa de transmissão menor que a capacidade.

Para ilustrar isso, foi feito o seguinte experimento simulado: dada uma região de possíveis valores projetados no espaço de sensores virtuais, diferentes quantizações vetoriais desta região foram obtidas, utilizando o algoritmo *k-means*, com k variando de 1 até 100, como exemplificado na Figura 4.7. Para cada quantização, uma simulação de Monte Carlo foi realizada para estimar o erro de confusão entre classes, estas representadas pelos k centros:

- Para o conjunto de k centros de agrupamentos $(x_1, x_2)_i$, com $i \in \{1, \dots, k\}$, um grande número de amostras é sorteado aleatoriamente, com reposição;

- Cada amostra é corrompida por um ruído $\mathcal{N}(0, \Sigma)$, com Σ diagonal e $\sigma_1 = \sigma_2 = 0.01$;
- As amostras corrompidas são atribuídas aos centros de agrupamentos mais próximos, se assemelhando a um classificador 1-NN (*1-nearest neighbors*);
- Por fim, estima-se o de erro de confusão como a razão entre as amostras que não são corretamente atribuídas aos centros de agrupamentos originais dividido pelo número de amostras sorteadas.

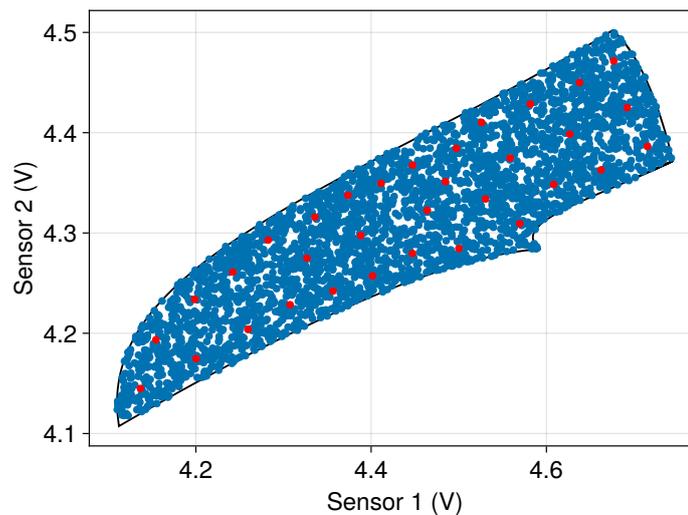


Figura 4.7 – Região de resposta dos sensores delimitada pela linha preta e centros de agrupamentos em vermelho para um $k = 33$. Com essa quantização, pontos nessa região são atribuídos aos seus centros mais próximos. Os eixos representam medidas simultâneas para os sensores 1 e 2, em *Volts* (fonte: autoria própria).

Os resultados são mostrados na Figura 4.8, onde o erro de classificação (para um classificador do tipo um vizinho mais próximo sem memória) começa a aumentar significativamente para números de quantização anteriores da capacidade de representação (representada pela linha tracejada), o que é consistente com o que foi lembrado no início desta seção. A quantização do espaço utilizada a partir do *k-means* muito provavelmente não é a ótima para esta estrutura, mas, ainda assim, exemplifica bem as estimativas de erro de classificação que podem ocorrer nesta estrutura.

É válido notar que a capacidade de representação é uma quantidade que está relacionada à estrutura das respostas do arranjo de sensores. Dada a não linearidade da projeção do espaço de mistura de gases para o espaço de sensores, as regiões na estrutura do espaço de concentrações, que estão relacionadas a aglomerações no espaço de sensores, podem apresentar uma variedade de distorções, como mostrado na Figura 4.9. Logo, uma hipótese importante de ser destacada é a de que a capacidade de representação proposta neste trabalho pode ser uma superestimação na grande maioria dos casos, já que classes que se deseja discriminar em tarefas de classificação podem não ser bem acomodadas nas

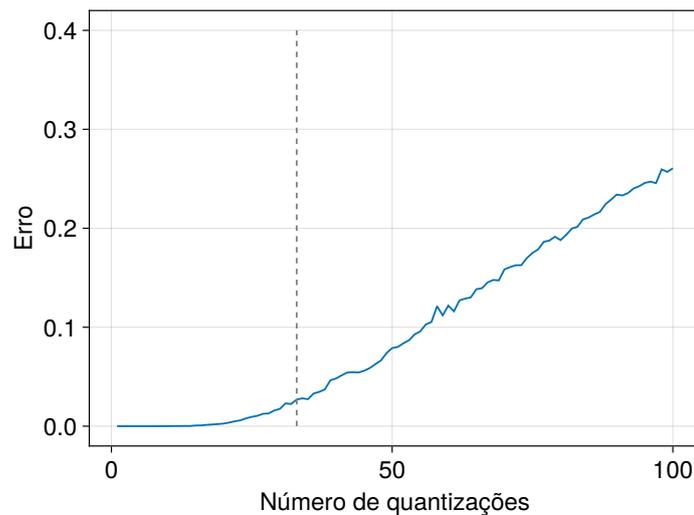


Figura 4.8 – Gráfico do erro de confusão de classes estimado para cada número de quantizações vetoriais do espaço de respostas simultâneas dos sensores. A linha vertical tracejada indica a capacidade de representação de 33 classes (fonte: autoria própria).

partições resultantes no espaço de concentrações para uma quantização ótima no espaço de sensores. Na verdade, esta capacidade estimada provavelmente só deve ser alcançada nos casos em que as classes que se deseja discriminar sejam representadas pelos pontos considerados uma mesma parte (da partição irregular do espaço de concentrações).

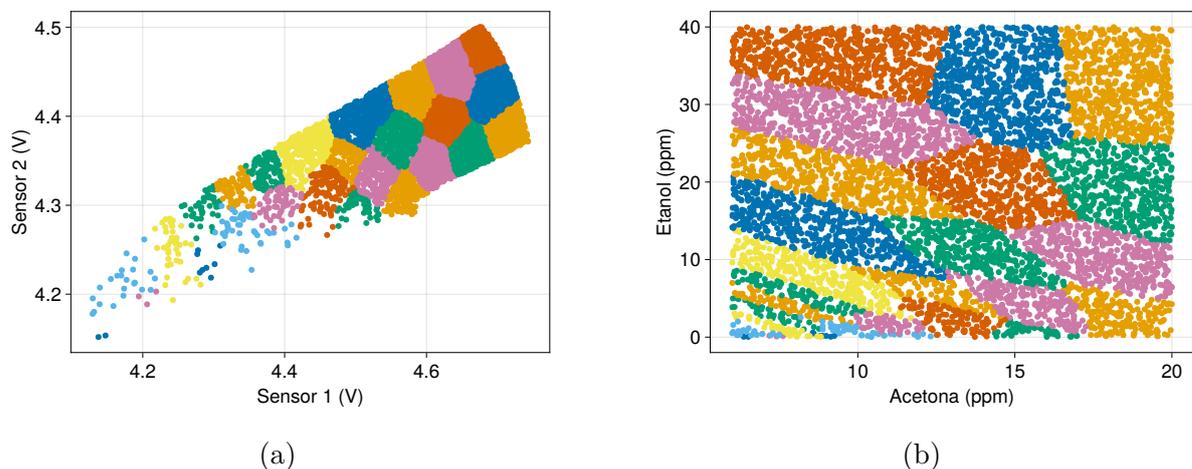


Figura 4.9 – Ilustração da não uniformidade das regiões no espaço de concentrações relacionadas às escolhas de aglomerações no espaço de sensores. (a) Agrupamentos obtidos a partir da quantização vetorial com $k = 33$. Todos os pontos próximos entre si que apresentam uma mesma cor estão relacionados a um mesmo rótulo. (b) Particionamento correspondente no espaço de concentrações relacionados aos agrupamentos para $k = 33$ (fonte: autoria própria).

Para ilustrar isso, podemos trazer o seguinte exemplo: deseja-se classificar 32 combinações diferentes de misturas de acetona e etanol, dentro das faixas de concentração de 6 a 40 ppm e 0 a 40 ppm, respectivamente. Dentre essas faixas, foram escolhidos

4 valores igualmente espaçados para acetona e 6 para etanol, de forma a obter as 32 combinações desejadas, como exemplificado na Figura 4.10a. Ao assumir que os mesmos sensores virtuais foram utilizados na aquisição desses dados para classificação, sob as mesmas condições de ruído definidas previamente, para uma quantização vetorial com $k = 33$, é perceptível que há classes que se encontram em regiões iguais, o que pode ser constatado na Figura 4.10b. Isso mostra que essas classes não foram bem ajustadas às regiões.

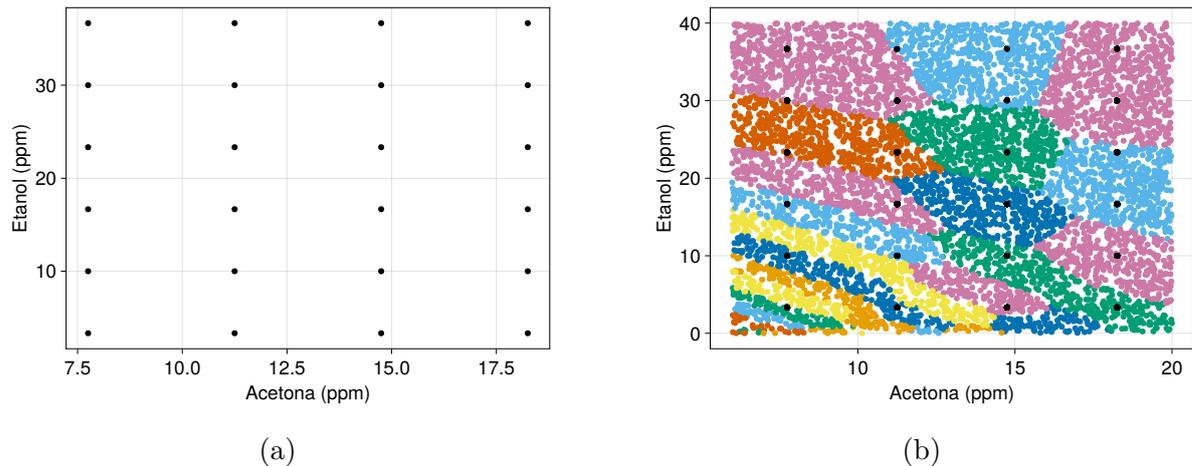


Figura 4.10 – (a) 32 Classes que deseja-se discriminar representadas no espaço de mistura de concentrações de Acetona e Etanol (pontos pretos). (b) Disposição das 32 classes que deseja-se discriminar (pontos pretos) e as regiões no espaço de concentrações referentes ao particionamento realizado no espaço de sensores através do k -means com $k = 33$ (fonte: autoria própria).

De fato, essas classes foram escolhidas de maneira arbitrária, e outras infinitas combinações de 32 concentrações diferentes poderiam ser desejadas de se classificar. Ademais, classes podem não estar restritas a somente um ponto no espaço, mas serem compostas por um conjunto de pontos que formem uma estrutura. Com isso, fica evidente que mesmo que haja uma quantização vetorial ótima, sob o critério da menor taxa de confusão de classes, para o espaço de sensores, na maioria dos casos, as classes que se deseja discriminar provavelmente não estarão bem acomodadas nas regiões agrupadas no espaço original de concentrações.

Capítulo 5

Conclusão

Neste trabalho, uma medida baseada em teoria de informação é proposta para quantificar e comparar diferentes estruturas de sinais abrangidas por medidas de respostas multivariadas simultâneas de arranjos de sensores MOX. A quantidade proposta, a capacidade de representação, é potencialmente útil em tarefas de classificação utilizando narizes eletrônicos, podendo ser estimada sem a necessidade de dados rotulados.

Este trabalho demonstrou a estimação dessa quantidade através de simulações de respostas simultâneas de dois sensores virtuais de modelos previamente validados. A abordagem proposta para esta estimação pode ser expandida para arranjos mais complexos de sensores, se estes sensores puderem ser modelados e seus modelos validados em pontos de operação de interesse, como feito neste trabalho.

Esta capacidade é afetada por quão amplamente os sensores em um arranjo podem responder a diferentes combinações de gases (a partir do volume efetivo da estrutura gerada por eles), assim como pelo ruído (a partir de sua potência) que afeta as leituras para cada sensor. Diferentes estimativas para a capacidade foram demonstradas neste trabalho e uma faixa de valores é esperada, considerando a natureza variável da potência do ruído em cada sensor ao longo de um experimento. Ademais, o efeito de deriva que afeta esses sensores, que não foi levado em conta neste trabalho, pode alterar o formato da distribuição do próprio sinal, consequentemente alterando a estimativa original.

Com a adição de mais sensores em um arranjo, espera-se que a capacidade de representação aumente, assim como sua dimensão espacial também, mas, devido às dependências probabilísticas entre os sensores, as estruturas formadas acomodadas em espaços de dimensão mais altas podem estar de fato restritas a dimensões intrínsecas mais baixas. Isto pode diminuir o espaço efetivo que pode ser abrangido por esses sensores e, combinado com a intensidade do ruído que os afetam, reduzir sensivelmente a contribuição que cada sensor adicional tem na capacidade de representação do nariz eletrônico, podendo inclusive chegar ao ponto de uma relação custo benefício desfavorável ao aumento do número de sensores no arranjo.

A quantidade proposta é baseada na capacidade de um canal ruidoso proposto por Shannon [15], e alcança um erro próximo de zero para comprimentos de bloco de símbolos suficientemente grandes, logo, para classificadores sem memória, é de se esperar que o erro da classificação não seja nulo, mesmo trabalhando com quantidades de classes menores que o valor de capacidade estimado. Além disso, devido a natureza não linear das projeções que ocorrem no espaço de misturas de concentrações para o espaço de sensores; mesmo que seja obtida uma quantização vetorial ótima que maximizaria a capacidade de representação no espaço de sensores, estas regiões correspondentes no espaço de concentrações podem ser bastante irregulares, fazendo com que as classes no espaço de concentrações levem a fronteiras de classificação irregulares, difíceis de se obter na prática.

Uma hipótese que pode levantada neste trabalho é a de que a estimação da capacidade proposta pode ser utilizada tanto em ambientes controlados como não controlados, desde que tempo suficiente seja dado para estatisticamente "aprender" a estrutura do sinal correspondente a todas as interdependências entre os sensores, para a maior variedade de diferentes concentrações de odores, já que estas misturas de concentrações de gases desconhecidos devem ser projetadas de um espaço N -dimensional (de N gases) para um espaço D -dimensional (de D sensores).

Um possível próximo passo que pode ser seguido deste trabalho é o desenvolvimento de uma base de dados que inclua respostas de séries temporais para diferentes misturas a fim de testar o método de estimação proposto utilizando dados reais. Não menos importante seria continuar com a motivação inicial do trabalho e testar como essa capacidade estimada se comporta ao se adicionar mais sensores MOX na análise, além de incluir outros sensores condutivos, a exemplo dos poliméricos.

Por fim, espera-se que esta capacidade possa ser útil na compreensão de como diferentes sensores MOX, e talvez até outros tipos de sensores condutivos, contribuem para a construção de um nariz eletrônico, possibilitando estabelecer limites teóricos quanto aos seus usos em sistemas voltados a reconhecimento de padrões.

Referências

- [1] GUYTON, A. C.; HALL, J. E. *Tratado de fisiologia médica*. 13. ed. Rio de Janeiro: Elsevier, 2017. ISBN 9788535262858. Citado na página 1.
- [2] SILVERTHORN, D. U. et al. *Human physiology: an integrated approach*. 8. ed. New York: Pearson Education, Inc, 2019. ISBN 978-0-13-460519-7. Citado na página 1.
- [3] KARAKAYA, D.; ULUCAN, O.; TURKAN, M. Electronic Nose and Its Applications: A Survey. *International Journal of Automation and Computing*, v. 17, n. 2, p. 179–209, abr. 2020. ISSN 1476-8186, 1751-8520. Citado nas páginas 1, 5 e 7.
- [4] GARDNER, J. W.; SHURMER, H. V.; TAN, T. T. Application of an electronic nose to the discrimination of coffees. *Sensors and Actuators B: Chemical*, v. 6, n. 1, p. 71–75, jan. 1992. ISSN 0925-4005. Citado nas páginas 1 e 5.
- [5] LÄNGKVIST, M. et al. Fast Classification of Meat Spoilage Markers Using Nanostructured ZnO Thin Films and Unsupervised Feature Learning. *Sensors*, v. 13, n. 2, p. 1578–1592, jan. 2013. ISSN 1424-8220. Citado nas páginas 1 e 5.
- [6] GUO, D. et al. A Novel Breath Analysis System Based on Electronic Olfaction. *IEEE Transactions on Biomedical Engineering*, v. 57, n. 11, p. 2753–2763, nov. 2010. ISSN 0018-9294. Citado nas páginas 1 e 5.
- [7] KANT, K. D. V. D. et al. Clinical use of exhaled volatile organic compounds in pulmonary diseases: a systematic review. *Respiratory Research*, v. 13, n. 1, p. 117, 2012. ISSN 1465-9921. Citado nas páginas 1 e 5.
- [8] STETTER, J. R.; JURIS, P. C.; ROSE, S. L. Detection of hazardous gases and vapors: pattern recognition analysis of data from an electrochemical sensor array. *Analytical Chemistry*, v. 58, n. 4, p. 860–866, abr. 1986. ISSN 0003-2700, 1520-6882. Citado nas páginas 1 e 5.
- [9] DANG, L. et al. A novel classifier ensemble for recognition of multiple indoor air contaminants by an electronic nose. *Sensors and Actuators A: Physical*, v. 207, p. 67–74, mar. 2014. ISSN 09244247. Citado nas páginas 1 e 5.

- [10] LIU, X. et al. A Survey on Gas Sensing Technology. *Sensors*, v. 12, n. 7, p. 9635–9665, jul. 2012. ISSN 1424-8220. Citado nas páginas 1, 6 e 7.
- [11] DENNLER, N. et al. Drift in a popular metal oxide sensor dataset reveals limitations for gas classification benchmarks. *Sensors and Actuators B: Chemical*, v. 361, p. 131668, jun. 2022. ISSN 09254005. Citado na página 2.
- [12] DJEZIRI, M. et al. Review on data-driven approaches for improving the selectivity of MOX-sensors. *Microsystem Technologies*, v. 30, n. 7, p. 791–807, jul. 2024. ISSN 0946-7076, 1432-1858. Citado nas páginas 2 e 10.
- [13] MADROLLE, S.; GRANGEAT, P.; JUTTEN, C. A Linear-Quadratic Model for the Quantification of a Mixture of Two Diluted Gases with a Single Metal Oxide Sensor. *Sensors*, v. 18, n. 6, p. 1785, jun. 2018. ISSN 1424-8220. Citado nas páginas 2, 8, 10, 27, 28 e 34.
- [14] CAMASTRA, F.; VINCIARELLI, A. Estimating the intrinsic dimension of data with a fractal-based method. *IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence*, v. 24, n. 10, p. 1404–1407, out. 2002. ISSN 0162-8828. Citado na página 2.
- [15] SHANNON, C. E. A Mathematical Theory of Communication. *The Bell System Technical Journal*, v. 27, p. 379–423, 1948. Citado nas páginas 3, 12, 15, 17, 35 e 40.
- [16] BALDINI, C. et al. Electronic Nose as a Novel Method for Diagnosing Cancer: A Systematic Review. *Biosensors*, v. 10, n. 8, p. 84, jul. 2020. ISSN 2079-6374. Citado na página 5.
- [17] WILSON, A.; BAIETTO, M. Applications and Advances in Electronic-Nose Technologies. *Sensors*, v. 9, n. 7, p. 5099–5148, jun. 2009. ISSN 1424-8220. Citado na página 5.
- [18] BONAHA, E. et al. Application of electronic nose as a non-invasive technique for odor fingerprinting and detection of bacterial foodborne pathogens: a review. *Journal of Food Science and Technology*, v. 57, n. 6, p. 1977–1990, jun. 2020. ISSN 0022-1155, 0975-8402. Citado na página 5.
- [19] TAN, J.; XU, J. Applications of electronic nose (e-nose) and electronic tongue (e-tongue) in food quality-related properties determination: A review. *Artificial Intelligence in Agriculture*, v. 4, p. 104–115, 2020. ISSN 25897217. Citado nas páginas 5 e 9.
- [20] GUADARRAMA, A. et al. Array of conducting polymer sensors for the characterisation of wines. *Analytica Chimica Acta*, v. 411, n. 1-2, p. 193–200, maio 2000. ISSN 00032670. Citado na página 5.

- [21] ARSHAK, K. et al. A review of gas sensors employed in electronic nose applications. *Sensor Review*, v. 24, n. 2, p. 181–198, jun. 2004. ISSN 0260-2288. Citado nas páginas 6, 7 e 8.
- [22] CLIFFORD, P.; TUMA, D. Characteristics of semiconductor gas sensors I. Steady state gas response. *Sensors and Actuators*, v. 3, p. 233–254, 1982. ISSN 02506874. Citado na página 7.
- [23] YAN, J. et al. Electronic Nose Feature Extraction Methods: A Review. *Sensors*, v. 15, n. 11, p. 27804–27831, nov. 2015. ISSN 1424-8220. Citado nas páginas 8 e 9.
- [24] ZIPSER, L. Selectivity of sensor systems. *Sensors and Actuators A: Physical*, v. 37-38, p. 286–289, jun. 1993. ISSN 09244247. Citado na página 9.
- [25] ACHARYYA, S.; BHOWMICK, P. K.; GUHA, P. K. Selective identification and quantification of VOCs using metal nanoparticles decorated SnO₂ hollow-spheres based sensor array and machine learning. *Journal of Alloys and Compounds*, v. 968, p. 171891, dez. 2023. ISSN 09258388. Citado na página 10.
- [26] MONTALVÃO, J.; CANUTO, J.; MIRANDA, L. Bias-Compensated Estimator for Intrinsic Dimension and Differential Entropy: A Visual Multiscale Approach. *Journal of Communication and Information Systems*, v. 35, n. 1, p. 300–310, 2020. ISSN 19806604, 19806604. Citado nas páginas 11, 19, 20, 31, 33 e 35.
- [27] COVER, T. M.; THOMAS, J. A. *Elements of information theory*. 2. ed. Hoboken, N.J: Wiley-Interscience, 2006. OCLC: ocm59879802. ISBN 978-0-471-24195-9. Citado nas páginas 12, 13 e 16.
- [28] MACKAY, D. J. C. *Information theory, inference, and learning algorithms*. Cambridge, UK ; New York: Cambridge University Press, 2003. ISBN 978-0-521-64298-9. Citado nas páginas 12 e 23.
- [29] MONTALVÃO, J.; CANUTO, J.; CARVALHO, E. On the minimum probability of classification error through effective cardinality comparison. *Journal of Communication and Information Systems*, v. 31, n. 1, p. 304–312, 2016. ISSN 19806604, 19806604. Citado na página 13.
- [30] RÉNYI, A. On Measures of Entropy and Information. In: *Proceedings of the Fourth Berkeley Symposium on Mathematical Statistics and Probability*. Berkley: University of California Press, 1961. v. 1, p. 547–561. Citado na página 13.
- [31] KAY, S. M. *Intuitive probability and random processes using MATLAB*. New York: Springer, 2006. ISBN 978-0-387-24157-9 978-0-387-24158-6. Citado na página 17.

-
- [32] SANTAMARIA, I.; POKHAREL, P. P.; PRINCIPE, J. C. Generalized correlation function: definition, properties, and application to blind equalization. *IEEE Transactions on Signal Processing*, v. 54, n. 6, p. 2187–2197, jun. 2006. ISSN 1053-587X. Citado na página 18.
- [33] MONTALVÃO, J.; CANUTO, J.; CARVALHO, E. A correntropy function based on coincidence detection. *Pattern Recognition Letters*, v. 85, p. 84–88, jan. 2017. ISSN 01678655. Citado nas páginas 18, 30 e 33.
- [34] MA, S. K. Calculation of entropy from data of motion. *Journal of Statistical Physics*, v. 26, n. 2, p. 221–240, out. 1981. ISSN 0022-4715, 1572-9613. Citado nas páginas 19, 20 e 31.
- [35] GRASSBERGER, P.; PROCACCIA, I. Characterization of Strange Attractors. *Physical Review Letters*, v. 50, n. 5, p. 346–349, jan. 1983. ISSN 0031-9007. Citado nas páginas 19 e 31.
- [36] SMITH, L. A. Intrinsic limits on dimension calculations. *Physics Letters A*, v. 133, n. 6, p. 283–288, nov. 1988. ISSN 03759601. Citado na página 20.
- [37] BEZANSON, J. et al. Julia: A Fresh Approach to Numerical Computing. *SIAM Review*, v. 59, n. 1, p. 65–98, jan. 2017. ISSN 0036-1445, 1095-7200. Citado na página 27.