GERMÁN CARLOS SANTOS QUISPE

**RECONHECIMENTO DE PADRÕES EM SENSORES
INTEGRADOS**

**Tese apresentada à Escola Politécnica
da Universidade de São Paulo para
obtenção do título de Doutor em
Engenharia.**

São Paulo

2005

GERMÁN CARLOS SANTOS QUISPE

**RECONHECIMENTO DE PADRÕES EM SENSORES
INTEGRADOS**

**Tese apresentada à Escola Politécnica
da Universidade de São Paulo para
obtenção do título de Doutor em
Engenharia.**

**Área de Concentração:
Microeletrônica**

**Orientador:
Prof. Dr. Walter Jaimes Salcedo**

São Paulo

2005

AUTORIZO A REPRODUÇÃO E DIVULGAÇÃO TOTAL OU PARCIAL DESTE TRABALHO, POR QUALQUER MEIO CONVENCIONAL OU ELETRÔNICO, PARA FINS DE ESTUDO E PESQUISA, DESDE QUE CITADA A FONTE.

FICHA CATALOGRÁFICA

Quispe, Germán Carlos Santos
Reconhecimento de padrões em sensores integrados. São Paulo, 2005.
111p.

Tese (Doutorado) – Escola Politécnica da Universidade de São Paulo.
PSI - Departamento de Engenharia de Sistemas Eletrônicos.

1. Processamento de sinais 2. Nariz eletrônico PS 3. Reconhecimento de Padrões 4. Sensor de Gases.

I.Universidade de São Paulo. Escola Politécnica.
Departamento de Engenharia de Sistemas Eletrônicos.
II.t.

**Dedico esta tese a minha família por
ter sido a minha razão de vida.**

AGRADECIMENTOS

A meu orientador Prof. Dr. Walter Jaimes Salcedo e ao Prof Dr. Francisco Javier Ramirez Fernandez, pelo permanente apoio e incentivo.

Aos todos meus amigos em especial aos do grupo SIM pelo interesse e colaboração na realização deste trabalho.

Ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico **CNPq** pelo apoio e suporte fornecidos para a realização desta pesquisa.

E a todos que direta ou indiretamente colaboraram na execução deste trabalho.

SUMÁRIO

LISTA DE FIGURAS

LISTA DE TABELAS

LISTA DE SIGLAS

1. INTRODUÇÃO.....	1
2. PROCESSAMENTO DE SINAIS.	6
2.1. Sinais e Classificação de Sinais e Sistemas.....	6
2.2. Transformadas	9
2.2.1. Transformada de Fourier.	9
2.2.1.1. Transformada Discreta de Fourier:	9
2.2.1.2. Transformada Rápida de Fourier.	10
2.2.2. Transformada de Fourier de intervalo de tempo curto (STFT - Short Time Fourier Transform)	11
2.2.3. Wavelets.....	12
2.3. Métodos de Estimação espectral.....	16
2.3.1. Métodos baseados em modelamento não paramétrico.	17
2.3.1.1. Periodograma.	17
2.3.1.2. O Periodograma Modificado	18
2.3.1.3. Método de Welch.....	18
2.3.2. Métodos baseados em modelamento paramétrico.	18

2.3.2.1. Filtros Kalman.	29
3. DESCOBERTA DE CONHECIMENTO NUMA BASE DE DADOS. ..	31
3.1. Ambiente para a Descoberta de Conhecimento numa Base de dados (<i>Knowledge Discovery Database</i> - KDD).	31
3.1.1. Metadados.....	33
3.1.2. Data Warehouse.....	34
3.1.2.1. Arquitetura de uma Warehouse.	34
3.1.2.1.1. Arquitetura de um nível.....	35
3.1.2.1.2. Arquitetura de dois níveis.....	35
3.1.2.1.3. Arquitetura de três níveis.....	36
3.2. Etapas da KDD	40
3.2.1. Pré-processamento dos dados	41
3.2.2. Mineração de dados	42
3.2.2.1. Análise de Componentes Principais (PCA).....	44
3.2.2.2. Classificação e agrupamento.	49
3.2.2.2.1. Medidas de distância.	51
3.2.2.2.2. Técnicas de agrupamento	53
3.2.2.3. Inteligência Computacional:.....	54
3.2.2.3.1. Redes Neurais:.....	54
3.2.2.3.2. Algoritmos Genéticos (AG).....	59
4. PROCEDIMENTO EXPERIMENTAL	62
4.1. Medidas AC e DC em amostras de gases combustíveis.....	63
4.1.1. Medidas dinâmicas com fluxo de gás combustível contínuo.	63
4.1.1.1. Descrição do Experimento.....	63
4.1.1.2. Procedimento experimental 1.	65
4.1.1.3. Procedimento experimental 2.	66
4.1.2. Medidas estáticas com injeção de gás combustível.....	68
4.1.2.1. Descrição do Experimento.....	68
4.1.2.2. Procedimento experimental	71
4.1.2.2.1. Procedimento para a preparação de uma amostra de gás.....	71
4.1.2.2.2. Procedimento para as medições.....	72

4.2. Medidas de ruído	74
4.2.1. Medidas de ruído em amostras de álcool combustível	76
4.2.1.1. Descrição do Experimento.....	76
4.2.1.2. Procedimento experimental.	77
4.2.2. Medidas de ruído em amostras de diferentes substâncias.	78
4.2.2.1. Descrição do Experimento.....	78
4.2.2.2. Procedimento experimental.	78
5. ANÁLISE EXPERIMENTAL	80
5.1. Base de Dados.....	80
5.2. Análise AC e DC em amostras de gases combustíveis.	82
5.2.1. Análise de medidas dinâmicas com fluxo de gás contínuo.	82
5.2.1.1. Resultados e discussão.....	82
5.2.1.1.1. Identificação de concentração de gás.....	85
5.2.1.1.2. Comparação entre metodologias.....	87
5.2.2. Análise de medidas estáticas com injeção de gás combustível usando Wavelets.	88
5.3. Análise de ruído.....	92
5.3.1. Análise de ruído em amostras de álcool combustível.....	92
5.3.1.1. Resultados e discussão.....	92
5.3.2. Análise de ruído em amostras de diferentes substâncias.....	95
5.3.2.1. Resultados e discussão.....	95
6. CONCLUSÕES	102
6.1. Perspectiva futuras.....	103
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS.....	104
ANEXO A	

LISTA DE FIGURAS

Figura 1: Algumas áreas de aplicação do DSP [28].	7
Figura 2: Áreas associadas ao DSP [28]	7
Figura 3: Espaço Tempo-Frequência na transformada wavelet.	13
Figura 4: Árvore das técnicas de Estimação Espectral [42]	16
Figura 5: Modelamento AR [48]	23
Figura 6: Um ambiente simplificado de um sistema de banco de dados.	31
Figura 7: Estrutura de KDD.	32
Figura 8 Arquitetura de três níveis.	35
Figura 9: Arquitetura de DW tradicional.	36
Figura 10: Sistema “data marts”	37
Figura 11: Representação esquemática da arquitetura DWQ proposta em [80]	38
Figura 12: Representação esquemática da arquitetura de um DW de três níveis modificado.	39
Figura 13: Passos que envolve o processo da KDD.	43
Figura 14: Representação esquemática da observação de duas variáveis num certo número de objetos, e a sua representação no plano no caso de uma correlação ideal $x_1=x_2$ e sua redução a uma nova coordenada $x'=(x_1^2+x_2^2)^{1/2}$.	44
Figura 15: (a) gráfico bidimensional das variáveis x_1 e x_2 que não são perfeitamente correlacionadas (b) Coordenadas de transformação u_1 e u_2 (c) Gráfico dos pontos no novo	

sistema de coordenadas (d) Redução da representação para uma dimensão.....	45
Figura 16: (a) Gráfico da representação das componentes x_1 , x_2 e x_3 e sua projeção no plano formado pelos eixos u_1 e u_2 . (b) similarmente ao caso (a) com projeção no plano formado pelos eixos u_1' e u_2' . (c) Similarmente aos casos (a) e (b) mas com projeção no plano formado pelos eixos u_1'' e u_2'' respectivamente.	46
Figura 17: Representação da matriz de dados $\mathbf{X}$ decomposta em produto de matrizes de posto igual a um.	48
Figura 18: Uma componente principal no caso de duas variáveis: (A) loadings são os ângulos do vetor direção; (B) scores são as projeções das amostras (1 -6) na direção da componente principal. Note que os dados são centrados na média.....	48
Figura 19: Arquitetura de uma rede Multi layer perceptron.....	56
Figura 20: Esquema de uma rede feedforward.....	58
Figura 21: O diagrama de posicionamento dos rotâmetros.	64
Figura 22: Câmara de medidas.	67
Figura 23: Painel frontal do software de aquisição de sinais.	67
Figura 24: diagrama de blocos da formas de sinal adquiridas.....	68
Figura 25: Câmara de medidas.	69
Figura 26: Painel frontal do VI que: a) controla o fluxo de gás e b)controla a proporção de uma mistura gasosa.	70
Figura 27: Representação esquemática do sistema utilizado para a injeção de gás na câmara com sensores.	70
Figura 28: Painel frontal do VI utilizada para o controle da mistura de gás com nitrogênio.	72
Figura 29: Diagrama elétrico do sistema de medida.	76
Figura 30: Estrutura de Base de dados preposta.....	81

Figura 31: Exemplo de uma medida de estado estacionário da resposta dos sensores. O estado inicial (valor elevado da resposta) corresponde a injeção de fluxo só de N_2 , o estado final (valor baixo da resposta) corresponde ao fluxo da mistura gás combustível + N_2	82
Figura 32: Exemplo de uma “medida escalonada”	84
Figura 33: Gráfico em porcentagem da variância das primeiras componentes principais	86
Figura 34: Gráfico das componentes principais.	87
Figura 35: Gráfico da resposta dos sensores (razão) em função das medidas. As medidas 1 até 4 correspondem as medidas pelo método de estado estacionário, as medidas de 5 até 9 correspondem às medidas pelo método escalonado.....	88
Figura 36: Detalhes de uma decomposição da resposta transiente do sensor. O terceiro e quarto espectros são definidos como detalhes de reconhecimento 1 e 2 respectivamente.....	89
Figura 37: Curvas da resposta transiente dos sensores utilizados na análise.....	89
Figura 38: Decomposição Wavelet da resposta do sensor 1.	90
Figura 39: Análise de componentes principais das componentes wavelet.....	92
Figura 40: Medidas de álcool combustível. Na figura, “Ar lab. M1” representa a primeira medida do ar do laboratório, “Álc. 92 M1” representa a primeira medida de álcool com 92 graus de teor alcoólico, e assim sucessivamente.	93
Figura 41: Diferença entre álcoois com diferentes graus de teor alcoólico.	94
Figura 42: Comparação entre os espectros de várias medidas. Na figura, “Ar lab. M1” representa o espectro da primeira medida do ar do laboratório, “Álc. 92 M1” representa o espectro da	

primeira medida de álcool com 92 graus de teor alcoólico, e assim sucessivamente.	94
Figura 43: (a) Níveis DC das substâncias adquiridas, (b) Detalhe de uma da medidas sem a componente DC.	96
Figura 44: Espectros dos sinais.	97
Figura 45: Gráfico das amplitudes normalizadas em função da frequência dos harmônicos representativos do espectro obtido para os diferentes gases indicados no interior da Figura.	98
Figura 46: Definição dos conjuntos Fuzzy para as amplitudes e frequências.	99
Figura 47: Definição dos conjuntos Fuzzy de saída no sistema controlador Fuzzy. Os símbolos NS, alc92, Ace, Tric e AlcIso correspondem às saídas Fuzzy do ar, Álcool Combustível, Acetona, Tricloroetileno e Álcool Isopropílico respectivamente.	100
Figura 48: Resultado da simulação do reconhecedor Fuzzy para o ar utilizando um controlador Fuzzy (Mamdani).	100

LISTA DE TABELAS

Tabela 1. Propriedades e características dos diferentes métodos paramétricos utilizados no processamento de sinais [100].	28
Tabela 2: Resposta dos sensores na condição de resposta de estado estacionário. mostra os resultados experimentais da resposta dos sensores utilizando o procedimento de medida 1 (vide texto acima). Razão é definida como resposta inicial/reposta final.....	83
Tabela 3: Primeiro grupo de Medidas escalonadas.	84
Tabela 4: Segundo grupo de Medidas escalonadas.	85
Tabela 5: Componentes principais obtidas com os dados da Tabela 3.	85
Tabela 6: Componentes principais obtidas a partir dos dados da Tabela 4.....	86
Tabela 7: Extração da altura dos picos do Detalhe1 para a concentração1	90
Tabela 8: Extração da altura dos picos do Detalhe2 para a concentração1	91
Tabela 9: Extração da altura dos picos do Detalhe1 para a concentração2.....	91
Tabela 10: Extração da altura dos picos do Detalhe2 para a concentração2.....	91

LISTA DE SIGLAS

QMB	Micro balança de quartzo.
EC	Células eletroquímicas.
NE	Nariz Eletrônico.
ANN	Redes neurais artificias.
MEM	Método de Máxima Entropia.
STFT	Transformada de Fourier de janela estreita.
DFT	Transformada Discreta de Fourier.
PDS	Densidade espectral de potência.
CWT	Transformada Wavelet Continua.
AR	Autoregressão

RESUMO

Neste trabalho foram estudados e aplicados vários métodos para reconhecimento de padrões e processamento de sinais, utilizando dados obtidos a partir de diferentes montagens experimentais de um Nariz Eletrônico, onde os sinais gerados por um conjunto de sensores condutivos em regime de temperatura variável, foram analisados com o objetivo de obter conjuntos de padrões que permitam identificar substâncias químicas. Adicionalmente foram discutidas estratégias de generalização da resposta dos sensores através da análise do tempo de resposta, sensibilidade e seletividade dos sensores.

Foi discutida a utilização dos algoritmos de processamento de sinais e reconhecimento de padrões em forma conjunta com a finalidade de otimizar o processo de extração de informação e tomada de decisões a partir de um banco de dados. A utilização integrada do processamento de sinais e as técnicas de reconhecimento de padrões permitem definir e construir sistemas bem estruturados a partir dos quais pode ser extraída a informação desejada e conseqüente tomada de decisões, estas estruturas são conhecidas como “DATAWAREHOUSE”. A utilização de sistemas tipo “DATAWAREHOUSE” permitirão a manipulação rápida da informação mesmo em bancos de dados de elevada e variada quantidade de dados.

Foi proposta uma metodologia para a extração de informação a partir do sinal de ruído de um sensor de gás através da utilização de ajustes auto-regressivos conjuntamente com a aplicação do princípio de máxima entropia. Com os resultados obtidos foi proposto um sistema de Nariz Eletrônico conformado apenas por um sensor de gás onde o processo de reconhecimento dos diferentes gases foi obtido através de um controlador Fuzzy. O Nariz Eletrônico proposto desta forma apresentou-se robusto e estável.

ABSTRACT

In this work, several methods for pattern recognition and signal processing were studied and applied, using data obtained from different experimental setup of the Electronic Nose. The signals were obtained from the array of conductive sensor into de Nose system, which worked under variable temperature condition. The signal analyses results were used to obtain patterns in order to identify different chemical substances. In addition it was discussed the possibility of the generalization of sensors response, in this sense the response time, sensibility and selectivity of each gas sensors were analyzed.

It was discussed using together the signal processing algorithm and pattern recognition process in order to obtain an optimum process of the information extraction and make decision from the data bank. The integrated use of the signal process and pattern recognition promotes the definition and building of the well data banks structures known as DATAWAREHOUSE. These systems will promote the rapid and efficient data manipulation even with high and heterogeneous data banks.

It was proposed an information extraction methodology from the noise signal of the gas sensor throughout auto – regressive fitting process together with the Maximum Entropy Method. The Electronic Nose was proposed as consequence of the experimental results, the Nose system proposed contained only one gas sensor. The gas recognition process was made by Fuzzy controller system. This Electronic Nose showed a robust and stable behavior.

1. INTRODUÇÃO

O rápido avanço no processamento de sinais tem permitido seu uso em diversas aplicações, nos últimos tempos. Nas últimas décadas as publicações que usam técnicas de processamento de sinais e de reconhecimento de padrões têm crescido significativamente. Isto tem sido intensificado pelo rápido desenvolvimento da capacidade computacional de computadores pessoais e sistemas inteligentes [1].

Limitações de sensibilidade e seletividade dos dispositivos sensores ou transdutores em sistemas poderão não ser fatores limitantes da resposta do sistema através do uso de técnicas de processamento de sinais, um claro exemplo disto é o Nariz Eletrônico (NE) que basicamente é um sistema capaz de discriminar entre uma variedade de tipos de gases fazendo uso de técnicas de processamento de sinais e reconhecimento de padrões. Os sensores comumente utilizados nos sistemas de nariz eletrônico correspondem a sensores do composto de Óxido de estanho (SnO_2), Micro balança de quartzo (QMB - Quartz Micro-Balances), sensores semicondutores, células eletroquímicas (EC - Electrochemical Cells) ou polímeros orgânicos e sensores baseados em óxido de metal [2], que junto com o processamento de sinais e algoritmos de reconhecimento de padrões conformam o sistema nariz eletrônico. A literatura reporta o uso do nariz eletrônico no reconhecimento da fragrância de materiais [3], avaliação de componentes ativos em plantas medicinais assim como seu controle de qualidade [4], detecção de substâncias tóxicas e não tóxicas em

aplicações industriais [5], reconhecimento de aromas em compostos de perfumaria [6], aplicações na indústria alimentícia [7,8] e aplicações na prevenção de falsificação de cigarros [9].

Pardo et. al. [10] tem avaliado comparativamente o rendimento de diversos tipos de sensores num sistema de nariz eletrônico para o reconhecimento de alimentos, obtendo resultados satisfatórios com um arranjo de microbalanças de quartzo (QMB); importante indicar que neste trabalho os autores não utilizaram técnicas elaboradas de processamento de sinais, sendo importante neste caso a seletividade e sensibilidade dos sensores. A capacidade seletiva dos NE tem sido testada em vários trabalhos, mais recentemente J. P. Santos et. al [11] reportaram o rendimento de um sistema NE conformada por um arranjo de 16 sensores de SnO_2 para o reconhecimento de vinhos de “Madrid”. O resultado apontado pelos autores deste trabalho indicou uma capacidade de reconhecimento similar ao obtido utilizando-se um cromatógrafo de gases com espectrômetro de massas; novamente aqui não foi utilizado um processamento de sinais mais elaborado e o número de sensores utilizados neste sistema foi elevado. Apesar do potencial de reconhecimento dos NE, estes instrumentos não são genéricos e sim de aplicação específica. Uma proposta interessante de nariz eletrônico reportado por Y. S. Kim et al. [12] consistiu de um arranjo de 16 sensores fabricados com filmes de compósitos de carbono preto (Carbon –Black) e polímeros, a proposta de reconhecimento consistiu numa comparação dinâmica (em tempo) na resposta dos sensores gerando-se um espaço 16 dimensional. Os resultados reportados neste trabalho apontaram um elevado potencial de reconhecimento do NE mesmo considerando efeitos de ruído. Neste trabalho também foi apenas considerada uma análise de componentes principais simples, mas de características dinâmicas (em função do tempo de resposta dos sensores). A desvantagem deste sistema proposto radica no elevado número de sensores que associado ao efeito de deriva na resposta dos sensores poderá provocar respostas caóticas após alguma sequência de medidas. Assim diversos efeitos nos sensores do NE são estudados com a finalidade de conhecer e encontrar uma forma de compensar efeitos não desejados como o efeito de deriva na resposta dos sensores [13] ou efeitos de mascaramento no reconhecimento de propriedades desejadas como

por exemplo o reconhecimento de aromas em bebidas alcoólicas onde o etanol promove um efeito de mascaramento na resposta dos sensores do NE [14]. Dentro deste cenário, a comunidade científica nesta área trabalha intensamente na definição de NEs mais genéricos, incorporando no sistema técnicas de processamento de sinais e reconhecimento de padrões.

Entre as técnicas de reconhecimento de padrões mais populares, aplicadas a um NE podemos mencionar a de análise de componentes principais (PCA – Principal Components Analysis) [14] e as redes neurais artificiais (ANN – Artificial Neural Networks) [15] ou uma combinação de ambas técnicas [16]. Para o uso deste tipo de técnicas uma das principais considerações é a escolha das características da sequência temporal do sinal [17].

Além das técnicas de reconhecimento de padrões também cada vez mais são usadas as técnicas de processamento de sinal, assim existem propostas de algoritmos para a restauração de sinais ou dados perdidos [18], já em [19] se usa a transformada Wavelet em sinais provenientes de uma QMB. Um método novo para a extração de características em sensores químicos, baseado no ajuste da resposta temporal do sensor a modelos paramétricos analíticos tem sido reportado. Neste método os parâmetros ótimos de ajuste foram utilizados como elementos representativos para o reconhecimento de padrões.[20]. Algoritmos baseados em modelos analíticos do sistema olfativo biológico, onde são considerados 300 elementos de detecção, foram propostos para o NE. Neste caso foi definida uma função de resposta dos sensores que depende do tipo de substância e da sua concentração, sendo este sistema treinado para a identificação de “n” diferentes tipos de substâncias utilizando um arranjo de “m” sensores. Este sistema proporciona informação se a substância está entre as n que foram utilizadas para o treino ou não [21].

No presente trabalho foram utilizados sensores de SnO_2 no sistema do NE propondo-se uma estratégia de minimizar o número de sensores (caso extremo um só sensor) de tal forma a otimizar o desempenho do NE, isto é, otimizar a rapidez de resposta do sistema no processo de reconhecimento. Para tal fim foram estudados discutidos e aplicados diferentes algoritmos de processamento de sinais e

reconhecimento de padrões. Devido às respostas características dos sensores utilizados no presente trabalho, principal destaque foi dado aos métodos de processamento de sinais de Wavelet, métodos auto-regressivos (AR) e métodos de máxima entropia (MEM). Adicionalmente às respostas de estado estacionário dos sensores foi proposto o uso do sinal do ruído do sensor após os instantes iniciais de exposição dos sensores à substância a ser identificada, já que os processos de absorção ou desorção dos gases na superfície do sensor apresentam um caráter estocástico [22].

A contribuição do presente trabalho radica na proposta de uma metodologia de análise de sinais ruídos como fonte de informação em sistemas de nariz eletrônico que podem ser simplificados em sistemas conformados apenas por um sensor o que resulta importante na aplicação de sistemas de reconhecimento de gases embarcados e compactos. Adicionalmente foi discutida a implementação de algoritmos de processamento de sinais e algoritmos de reconhecimento de padrões. Um destaque importante foi dado à discussão da utilização conjunta da técnica de processamento de sinais e de reconhecimento de padrões estruturadas dentro das “DATAWAREHOUSE”, ampliando desta forma as fronteiras de aplicação existentes na área de análise de dados.

Muitas das técnicas de processamento de sinais, não se adaptam satisfatoriamente a quaisquer estrutura de dados, o que dificulta o seu uso, assim como propicia erros na interpretação de resultados. Dentro deste cenário o presente trabalho compara e discute os vários métodos de processamento de sinais como algoritmos auto-regressivos (AR), Wavelets e MEM, para estabelecer diferenças, vantagens e desvantagens enquanto a sua aplicação ao experimento. O uso de outras fontes de informação também é considerado. Neste caso foi utilizado o ruído como fonte de informação do sistema de nariz eletrônico conformado por um só sensor, já que pesquisas mostram que o ruído gerado nos sensores é devido a fenômenos de absorção e desorção do sensor o que está diretamente relacionado com a ação de gases no sensor [22].

Neste trabalho primeiramente são explicados os algoritmos de processamento de sinais como marco teórico para os algoritmos que são utilizados (capítulo 2). A seguir, no capítulo 3 são abordadas as técnicas de reconhecimento de padrões. Os principais temas abordados são redes neurais artificiais (Artificial Neural Networks - ANN), e Lógica Fuzzy na parte de reconhecimento de padrões e o Método de Entropia Máxima (MEM) e Transformada Wavelet na parte de Processamento de sinal. O capítulo 4 diz respeito à descrição do trabalho experimental, para logo no capítulo 5 fazer uma análise e discussão dos resultados. Finalmente o capítulo 6 apresenta-se as conclusões desta tese.

2. PROCESSAMENTO DE SINAIS.

A correta análise dos dados é um desafio de muita importância devido a que os sistemas de NE visam ser aplicados no monitoramento de ambientes variados. Neste capítulo será apresentado e discutido o marco teórico das diferentes técnicas de processamento que são utilizadas nos sistemas de NE. Na primeira parte de esta revisão será explorada a forma clássica de processamento dos sinais. Na segunda parte abordaremos métodos avançados de processamento cuja característica principal é a elevada resolução espectral.

2.1. Sinais e Classificação de Sinais e Sistemas.

O processamento de sinais é uma das ferramentas mais poderosas utilizadas no reconhecimento de padrões em sistemas de NE. No entanto, a literatura reporta apenas aplicações com validade específica, sendo um desafio encontrar soluções mais genéricas. Para cada campo de aplicação têm sido desenvolvidas técnicas especializadas para lidar com problemas específicos das respectivas áreas de atuação [23]. As técnicas de processamento de sinais apresentam a possibilidade de aplicação num grande número de problemas de reconhecimento que resumidamente são apresentadas na Figura 1.

Figura 1: Algumas áreas de aplicação do DSP [28].

Figura 2: Áreas associadas ao DSP [28]

O processamento de sinais como seu nome indica trata um sinal, entendendo-se sinal como a descrição da relação de um parâmetro com outro, um exemplo típico de sinal é a voltagem que varia no tempo. Já que ambos parâmetros (voltagem e tempo) podem assumir valores em uma faixa contínua, chamamos a este tipo de sinal: “sinal contínuo”. Se este sinal passa por um conversor analógico digital os dois

parâmetros são discretizados, passando a uma condição discreta denominada de sinal digital. O processamento aplicado no sinal digital denomina-se processamento digital de sinais (DSP: “Digital signal processing”).

Os sinais são denominados como sendo determinísticos, quando suas características futuras podem ser determinadas através de uma função analítica linear ou não linear. Os sinais são conhecidos como sendo aleatórios, quando os dados individuais do sinal acontecem em qualquer ordem e sem possibilidade de ser determinada através de uma função analítica de maneira única [24, 23, 25 ,26].

Os sinais, sejam discretos ou contínuos, determinísticos ou aleatórios, são processados em sistemas. Onde consideramos um sistema como qualquer processo que produz um sinal de saída em resposta a um sinal de entrada. Nos sistemas contínuos os sinais de entrada e saída são contínuos, em analogia com os sistemas de eletrônica analógica. Em sistemas discretos as entradas e as saídas são discretas tais como programas de computadores onde os valores são armazenados em matrizes.

Sistemas podem ser classificados em primeira aproximação como lineares e não lineares. Um sistema é considerado linear se cumpre as propriedades de adição e de homogeneidade. Existe uma terceira propriedade conhecida como “invariância de deslocamento” a qual não é um requerimento absolutamente necessário para a linearidade, mas é uma propriedade obrigatória para a maioria das técnicas de DSP (Digital Signal Processing).

A propriedade de homogeneidade estabelece que qualquer mudança na amplitude do sinal de entrada resulta em uma mudança correspondente na amplitude do sinal de saída.

$$\text{Se } x[n] \rightarrow y[n] \text{ então } kx[n] \rightarrow ky[n]$$

Na propriedade de adição, dois sinais passam por um sistema sem interagir um com o outro.

$$\text{Se } x_1[n] \rightarrow y_1[n] \text{ e } x_2[n] \rightarrow y_2[n] \text{ então } x_1[n] + x_2[n] \rightarrow y_1[n] + y_2[n]$$

Invariância ao deslocamento significa que se existe um deslocamento no sinal de entrada então existirá um deslocamento idêntico no sinal de saída. Esta propriedade é importante porque mostra que o sistema não muda com o tempo. Na maioria de técnicas de DSP um sinal é dividido em componentes simples, estas componentes são processadas independentemente para finalmente integra-los numa única solução. Este tipo de estratégia só pode ser aplicada a sistemas lineares.

Na análise de sistemas não lineares a estratégia mais utilizada é fazer uma transformação do sistema não linear num sistema linear o que permite aplicar todo o ferramental utilizado em sistemas lineares. A não linearidade do sistema depende em geral da amplitude do sinal, então um recurso utilizado para evitar efeitos não lineares é através do controle da amplitude dos sinais em valores pequenos.

2.2. Transformadas

O método de transformadas é uma das técnicas amplamente utilizadas no processamento de sinais, entre as transformadas mais difundidas podemos mencionar a transformada de Fourier, a transformada de Hilbert, a Transformada de Fourier de janela estreita (short-time Fourier transform - STFT), as funções de distribuições de Wigner, e a transformada Wavelet. Todas as transformadas podem ser utilizadas para o ajuste de um sinal particular, mas algumas transformações terão melhor desempenho num sinal particularizado, isto é, dependendo do problema poderá ser utilizado uma ou outra transformada de tal forma a atingir um ótimo desempenho.

2.2.1. Transformada de Fourier.

2.2.1.1. Transformada Discreta de Fourier:

A Transformada Discreta de Fourier (DFT) é uma das ferramentas mais importantes no processamento digital de sinais. A importância da DFT reside no fato que possibilita a análise da resposta em frequência de um sistema. A transformada de Fourier é provavelmente a transformada mais popular, sendo utilizada praticamente em todos os ramos da engenharia, como por exemplo no reconhecimento de padrões, onde um sinal com resposta transiente de um sensor ou matriz de sensores é

transformada num espectro de Fourier a partir do qual serão extraídos parâmetros que permitirão definir o padrão característico da resposta dos sensores representados no espaço de fases [27].

A Transformada Discreta de Fourier (DFT), em uma dimensão (1D), de um sinal composta de uma sucessão discreta de pontos no tempo $\mathbf{x}[\mathbf{n}]$, definida na faixa $0 \leq \mathbf{n} \leq (\mathbf{N} - \mathbf{1})$ pode ser expressa pela seguinte equação:

$$X[k] = \sum_{n=0}^{N-1} x[n] W_N^{nk} \quad (2.1)$$

$$\text{onde: } W_N^{nk} = e^{\frac{-j2\pi}{N}nk} \quad (2.2)$$

com: $0 \leq k \leq (\mathbf{N} - \mathbf{1})$

Se a equação (2.1) é usada para calcular valores adicionais de $X[k]$ fora da faixa $0 \leq k \leq (\mathbf{N} - \mathbf{1})$ obteremos replicas do espectro finito gerando-se assim uma seqüência espectral periódica. Da mesma forma, se usarmos a equação (2.2) para calcular valores adicionais de $\mathbf{x}[\mathbf{n}]$ fora da faixa $0 \leq \mathbf{n} \leq (\mathbf{N} - \mathbf{1})$ obtemos uma versão periódica do sinal. De fato, a DFT considera um sinal (ou seqüência) aperiódico como se fosse periódico para propósitos de cálculo [28, 29, 30].

2.2.1.2. Transformada Rápida de Fourier.

A FFT é um algoritmo (grupo de algoritmos) que permite calcular a DFT otimizando o tempo de processamento, este algoritmo consiste na decomposição da DFT em pequenas DFTs recursivamente [28].

A FFT trabalha decompondo um sinal de N pontos no domínio do tempo em N sinais no domínio da freqüência cada uma obtida a partir de um ponto elementar da seqüência de dados. Já que o espectro de freqüência de um sinal de um ponto é igual a si mesmo, nenhum passo adicional é requerido. O último passo para o cálculo

da FFT é combinar o espectro de frequência de ordem N seguindo uma ordem reversa (embaralhamento) em relação à decomposição no domínio do tempo, embora, este não tenha que ser necessariamente o último passo, senão que também pode ser o primeiro [31].

Quando o sinal analisado é aleatório, ao invés de calcular a densidade de energia espectral, calculamos a densidade espectral de potência (PDS–Power Density Spectrum). Esta função sempre apresenta um valor positivo [32].

2.2.2. Transformada de Fourier de intervalo de tempo curto (STFT - Short Time Fourier Transform)

A transformada de Fourier proporciona informação das componentes de frequência de um sinal sem indicar a evolução temporal destas componentes espectrais, na maioria dos casos pode se considerar que este aspecto não é importante principalmente quando o sinal é de caráter estacionário. A transformada que proporciona informação de tempo frequência é chamada de transformada de Fourier em intervalo de tempo curto STFT (Short Time Fourier Transform), esta transformada pode ser entendida no campo das distribuições tempo-frequência como a localização da energia do sinal no tempo.

Sabemos que a transformada de Fourier convencional é definida pela seguinte expressão:

$$X(f) = \int_{-\infty}^{\infty} x(t) e^{-2j\pi \cdot f \cdot t} dt \quad (2.3)$$

$$x(t) = \int_{-\infty}^{\infty} X(f) e^{2j\pi \cdot f \cdot t} df \quad (2.4)$$

A partir da expressão acima, a STFT é definida como:

$$STFT_X^{(\omega)}(t', f) = \int_t [x(t) \omega^*(t - t')] e^{-2j\pi \cdot f \cdot t} dt \quad (2.5)$$

Onde, $x(t)$ é o sinal a ser analisado, $w(t)$ a janela, e “*” indica o complexo conjugado da função. Como pode ser observado, a STFT é definida como sendo a FT do sinal multiplicada pela janela. A transformada STFT apresenta problemas de resolução espectral relacionadas ao tamanho da janela temporal escolhida, janelas estreitas proporcionam boa resolução no tempo, mas com resolução pobre em frequência, janelas longas proporcionam boa resolução em frequência, mas pobre resolução no tempo, adicionalmente estas janelas podem não satisfazer à condição de estacionaridade. Para superar desvantagens como esta foram desenvolvidas outras transformadas como a transformada Wavelet.

2.2.3. Wavelets.

Como descrito acima, sinais não estacionários podem ser analisados utilizando janelas temporais (STFT) que eventualmente poderão promover uma dispersão do espectro de frequências. Nesse sentido a análise de sinais utilizando funções chamadas de wavelet permitirão localizar os domínios temporal e de frequências, isto porque, as funções wavelet são localizáveis tanto no tempo quanto em frequência. Este procedimento permitirá obter informação do sinal tanto no tempo quanto na frequência, desta maneira poderá obter-se informação de uma componente espectral particular num determinado intervalo de tempo [33].

A transformada continua wavelet é definida como:

$$CWT_x^\psi(\tau, s) = \Psi_x^\psi(\tau, s) = \frac{1}{\sqrt{|s|}} \int x(t) \psi^*\left(\frac{t - \tau}{s}\right) dt \quad (2.6)$$

Onde: τ e s , que são os parâmetros de translação e a escala, respectivamente. $\psi(t)$ é a função de transformação chamada de wavelet mãe, e a função $x(t)$ é o sinal a ser analisado. A wavelet mãe é escolhida como protótipo para todas as janelas no processo, isto é, todas as janelas utilizadas são versões dilatadas da wavelet mãe que vão sendo deslocadas. Existem muitas funções disponíveis para servir de wavelet mãe, as mais comuns são a “wavelet de Morlet” e a “wavelet de Haar”. As funções wavelet podem ser utilizadas como bases para analisar sinais que contenham

transitórios de curta duração ou em sinais onde existe uma grande variação das frequências envolvidas.

A análise da transformada wavelet do ponto de vista matemático é semelhante à transformada STFT, no sentido de que a transformada é obtida como a integral do sinal multiplicado por uma função (wavelet), similar à janela na STFT. Uma das principais diferenças entre a STFT e a CWT (Continuous Wavelet Transform) é que no caso da transformada wavelet o fator de escala da função wavelet permitirá modular o tamanho da janela temporal a qual é provavelmente a característica mais relevante da transformada wavelet.

À diferença da STFT, que possui uma resolução constante em todos os tempos e frequências, a WT (Wavelet Transform) tem boa resolução em tempo e baixa resolução em frequência em altas frequências, e boa resolução em frequência e baixa resolução em tempo em baixas frequências.[34]

Figura 3: Espaço Tempo-Frequência na transformada wavelet.

Na figura anterior pode-se apreciar uma representação do espaço tempo-frequência, onde pode-se ver que a largura e a altura das caixas mudam, mas a área permanece constante. Cada caixa representa uma porção igual do plano tempo-frequência. Pode-se ver que à baixas frequências, a altura das caixas é menor (o que

corresponde a uma melhor resolução em frequência, desde que existe menos ambigüidade no valor a frequência exata), mas a largura é maior (o que corresponde a uma resolução pobre no tempo, desde que o valor exato do tempo é mais ambíguo). A altas frequências a largura das caixas decresce, isto é, a resolução no tempo é melhor, e a altura das caixas se incrementa, isto é, a resolução em frequência é menor. Assim a informação que não pode ser vista no domínio do tempo pode ser vista no domínio da frequência [35, 36].

A transformada Wavelet pode ser calculada por computadores simplesmente discretizando a CWT. No entanto isto traz vários problemas, um deles é a carga computacional, já que existe redundância nos cálculos, ocasionadas pelas funções usadas nos contínuos deslocamentos e o contínuo escalonamento sobre o sinal, que não formam uma base ortogonal, gerando coeficientes wavelet altamente redundantes. Outro problema é o número infinito de wavelets que têm que ser calculadas na WT, além disso, a maioria das wavelets não tem uma solução analítica senão que usam métodos numéricos. A transformada wavelet discreta (DWT – Discrete Wavelet Transform) está para a transformada wavelet assim como a FFT está para a transformada de Fourier, isto é, ela reduz consideravelmente o tempo de computação proporcionando informação suficiente para a análise e síntese do sinal.

Muitos estudos que usam esta transformada mostram uma aparente falta de resultados quantitativos. Isto envolve a transformação de séries temporais unidimensionais (ou espectros de frequência) para uma imagem difusa bidimensional tempo frequência. Esta difusividade tem sido exacerbada pelo uso de normalizações arbitrárias e a falta de testes de significância estatística [37].

A técnica de análise wavelet pode ser aplicada em sinais com componentes altamente aleatórios, por exemplo em geo-física é possível remover as componentes aleatórias de sinais sísmicos e examinar sua similaridade no domínio tempo frequência [38]. Sob determinadas condições, as Wavelets também podem ser usadas para determinar concentrações de substâncias (glucose em solução aquosa) a partir do espectro infravermelho como reportado em [39].

Por outro lado, a técnica de wavelet está sendo utilizada com sucesso em sinais que aparentemente são considerados ruídos segundo as técnicas convencionais, um exemplo de aplicação disto, foi a proposta de análise de ruído eletrônico num transistor [40]. Devido à característica de multiresolução da transformada wavelet, foi possível separar o sinal de ruído a partir de 250 kHz, desta forma os autores conseguiram identificar os diferentes tipos de ruídos na operação do transistor.

A comunidade científica envolvida no processamento de sinais utilizando a técnica de wavelet ficou satisfeita com os resultados qualitativos fornecidos por esta técnica, neste sentido, foram propostas metodologias que permitam uma análise quantitativa, uma dessas propostas bem sucedidas foi o cálculo da entropia wavelet que é a combinação da análise wavelet e o método de máxima entropia como reportado em [41]. Não obstante a análise de ruído pelas técnicas convencionais da transformada de Fourier também foram reportados [42, 43].

O estudo e análise da componente ruidosa do sinal pode ser de elevada importância desde que esta componente considera efeitos de segunda ou terceira ordem no sistema, proporcionando, desta forma, informação de elevada especificidade em relação às características do sistema[44]. Por exemplo, a origem fenomenológica do ruído em sensores químicos é devido a fragmentos químicos absorvidos de ambientes gasosos. Depois que o sensor entra em equilíbrio com o ambiente, tanto as moléculas capturadas quanto as moléculas livres produzem um processo estocástico estacionário sendo esta a fonte principal da componente ruidosa do sinal [44].

Uma outra aplicação da transformada wavelet está relacionada à metodologia de compressão de dados e remoção de componentes ruidosas em processos de análise química.

Existe uma grande variedade de funções base disponíveis para a transformada wavelet, o que nos proporciona a possibilidade de processar os dados em alta velocidade. Na grande maioria dos casos, o desempenho computacional utilizando a transformada wavelet é muito melhor do que com a transformada de Fourier.[45, 46].

2.3. Métodos de Estimação espectral.

Em geral os sinais estão constituídos de uma sequência finita de dados já que são resultado de uma aquisição num intervalo finito de tempo, ocasionalmente o número destes dados não é suficiente como para que métodos tradicionais, como a transformada de Fourier, nos proporcionem informação suficientemente precisa. Adicionalmente, estes dados contêm componentes de sinais de ruído. Dentro deste cenário o ajuste para algum modelo escolhido resulta complexo. Nesse sentido existem métodos estatísticos que possibilitam ajustes com a precisão otimizada, um desses métodos de ajuste denomina-se método de estimação espectral.

Na estimação espectral podemos encontrar os métodos convencionais ou não paramétricos e os métodos paramétricos. Os métodos não paramétricos são aqueles baseados no cálculo da transformada de Fourier (seja do sinal janelado ou da função de auto-correlação, considerando nulos os dados fora da janela). Os métodos paramétricos estão baseados no cálculo dos parâmetros sobre algum modelo previamente definido. O cálculo consiste no ajuste do modelo com os dados experimentais. Uma das grandes vantagens do método radica em que não existe interferência do efeito do tamanho da janela, é dizer, extensão da sequência de dados, que nos métodos convencionais resultam altamente sensíveis. [32].

Figura 4: Árvore das técnicas de Estimação Espectral [42]

A Figura 4 apresenta um diagrama esquemático do fluxo seguido pelos métodos baseados na FFT e AR (autoregressão) na ‘árvore familiar’ das técnicas utilizadas para a estimação espectral.

2.3.1. Métodos baseados em modelamento não paramétrico.

Os métodos não paramétricos possuem pouca resolução em frequência, e mostram uma perda de energia no lóbulo lateral devido à aplicação de janelas [23], em compensação são computacionalmente eficientes. Em geral estes métodos apresentam resultados satisfatórios quando os sinais são periódicos ou possuem uma seqüência de dados significativamente elevada.

2.3.1.1. Periodograma.

Uma forma de determinar o espectro de potência de um processo consiste na obtenção da transformada de Fourier do conjunto de amostras para finalmente calcular a magnitude ao quadrado do resultado. Esta estimativa é chamada de periodograma.

O cálculo do PSD usando o periodograma para um sinal $x[n]$ de longitude N é dada por:

$$\hat{P}_{xx}[k] = \frac{1}{N} |X[k]|^2 \quad (2.7)$$

$$\text{onde: } X[k] = \sum_{n=0}^{N-1} x[n] e^{-\frac{j2\pi kn}{N}} \quad (2.8)$$

$X[k]$ pode ser calculado só com um número finito de pontos N , e usualmente usa-se a FFT.

2.3.1.2. O Periodograma Modificado

O periodograma modificado seleciona uma parte do sinal no domínio do tempo antes de calcular a transformada rápida de Fourier (FFT) com o intuito de suavizar as bordas do sinal. Isto reduz a altura dos lóbulos laterais ou “spectral leakage”. Este fenômeno dá a interpretação que “lóbulos laterais” são frequências espúrias introduzidas no sinal devido a que o sinal é truncado abruptamente quando se aplica uma janela retangular.

2.3.1.3. Método de Welch.

O estimador proposto por Welch [30] é um estimador melhorado do PSD. O método consiste em dividir a série de tempo em segmentos (possivelmente sobrepostos), calcular o periodograma modificado de cada segmento, e depois usar a média dos PSD estimados. O cálculo do periodograma de cada segmento foi obtido após o uso de uma janela Hamming.

A média dos periodogramas modificados promove a diminuição da variância estimada, se comparada à variância estimada quando se aplica um periodograma modificado simples. Embora a sobreposição entre segmentos introduza informação redundante, este efeito é reduzido pelo uso de janelas não retangulares, as quais reduzem a importância ou peso dado às amostras finais dos segmentos. O uso combinado de dados curtos e janelas não retangulares resulta em uma redução da resolução do estimador. Em resumo existe um compromisso entre a redução da variância e perda de resolução. Os parâmetros no método de Welch podem ser manipulados para obter estimativas melhoradas com respeito ao periodograma, especialmente quando a relação sinal ruído (SNR) é baixa.

2.3.2. Métodos baseados em modelamento paramétrico.

Modelamento paramétrico é uma técnica que serve para analisar séries temporais, nas quais um modelo matemático é escolhido para um sinal de amostra. Se o modelo resulta em uma boa aproximação do comportamento do sinal observado este pode ser usado em várias aplicações tais como estimação espectral, LPC (Linear

Prediction Coding) para compressão de dados, síntese de voz, e extração de características para classificação de padrões.

Sem considerar o método para processar um sinal, o número de coeficientes usados para descrever um sinal pode ser truncado o suficiente para ajudar na tarefa de classificação sem deteriorar a informação relevante contida nele [47]. Quando a sequência de dados adquirida é elevada, os ajustes com transformadas fornecem resultados satisfatórios. Já para o caso de uma sequência de dados reduzida existem alguns métodos estatísticos que permitem o cálculo dos parâmetros com a precisão desejada, estes métodos são conhecidos como paramétricos. Na estimação espectral baseada no modelamento paramétrico, os métodos mais utilizados são: O método de auto-regressivo (AR), relacionado com as equações de Yule Walker, que são resolvidas utilizando o algoritmo de Levinson Durbin, e o método AR de máxima entropia, implementado pelo algoritmo de Burg.

As vantagens da estimação espectral AR sobre a FFT são diversas, particularmente quando se usa o algoritmo de Burg numa sequência pequena de dados correspondente a sinais não estacionários [48], exemplos deste tipo de aplicação podem ser apreciados em [49,50], onde foram utilizados basicamente os métodos de Burg e FFT para a análise do ruído dos nêutrons e parâmetros de extinção, respectivamente. O resultado obtido pelo método de Burg neste caso mostrou-se eficiente se comparado com o resultado do método de FFT, já que a FFT apresentou resultados contraditórios.

Farina, Merletti [51] reportaram os resultados da análise de sinais eletromiográficos (EMG) obtidos durante contrações voluntárias dos músculos. Este tipo de sinais apresentam características ruidosas comprometendo desta forma uma análise consistente com os métodos FFT e de periodogramas. Neste artigo os autores mostraram que o método AR ajusta-se com maior precisão em relação aos outros métodos e que a ordem do modelo não é um parâmetro sensível no ajuste. Adicionalmente, mostraram que o tamanho da janela de varredura, na aquisição dos sinais EMG, não compromete a precisão da análise o que sim acontece com o método da FFT.

A adaptabilidade dos métodos paramétricos para resolver diferentes problemas foi mostrada em [52] onde foi ajustada uma seqüência de amostras irregulares semelhante a um grupo de observações de um processo linear estocástico. Nesta aplicação se usa uma técnica de generalização da aproximação do erro de predição, considerado nos métodos de Burg e covariância, a funcional correspondente à predição de erro é minimizada com respeito aos coeficientes AR.

O uso do método de máxima entropia (MEM) junto aos modelos paramétricos tem-se mostrado muito eficiente e está bastante estendido em diferentes linhas de pesquisa. Experiências usando algumas destas técnicas para analisar sinais têm sido feitas em vários campos da ciência, como medicina, geofísica, física, lógica Fuzzy, economia, química [52, 53, 54, 55, 56, 57, 58, 59, 60, 61], entre outros.

Uma função paramétrica genérica pode ser definida através da seguinte equação:

$$H(z) = \frac{B(z)}{A(z)} = \frac{S(z)}{E(z)} \quad (2.9)$$

$$S(z) = H(z)E(z) \quad (2.10)$$

A função de transferência $H(z)$ para uma estimação AR, é uma representação matemática de um sinal, sendo, na maioria dos casos, uma função de transferência racional como mostrada na equação (2.9). Esta função pode ser interpretada como o modelo de um filtro alimentado por ruído branco. A forma desta função é determinada estimando-se valores adequados para os parâmetros das funções $S(z)$ e/ou $E(z)$. Se $H(z) = 1/E(z)$ então o modelo é chamado de todo pólos (all-pole) ou modelo AR (auto-regresivo), se $H(z) = S(z)$, é chamado de todo zeros (all-zero) ou modelo MA (moving average). Um modelo com parâmetros, tanto no numerador quanto no denominador se denomina pólo-zero ou modelo ARMA (autoregressive moving average). A escolha do modelo está baseada no conhecimento de algumas características iniciais do sinal. O modelo paramétrico resultante, na maioria dos casos mostrará uma melhor estimativa do espectro do sinal se comparado com o dos

métodos não paramétricos principalmente no que diz respeito à resolução do espectro.

Em modelos adaptativos os valores dos parâmetros livres são atualizados com a chegada de cada nova amostra, já nos modelos não adaptativos os parâmetros são calculados ajustando o modelo a uma sequência de dados de amostras fixa. Os modelos não adaptativos precisam que o sinal seja estacionário, isto é, que características estatísticas, tais como média da amplitude e frequência, não mudem com o tempo. Uma das desvantagens mais importantes deste tipo de métodos está relacionada com a sua menor eficiência computacional em relação aos métodos tradicionais.

A PSD da função de saída de um filtro ARMA cuja entrada é de tipo ruído branco com variância σ^2 pode ser expressa pela seguinte equação:

$$S_x(\omega) = \sigma^2 \left| \frac{B(z)}{A(z)} \right|^2 \bigg|_{z=e^{j\omega k}} = \sigma^2 \frac{\left| \sum_{k=0}^q b[k] e^{-j\omega k} \right|^2}{\left| \sum_{k=0}^p a[k] e^{-j\omega k} \right|^2} \quad (2.11)$$

Onde p e q estão relacionados ao número de polos e zeros respectivamente.

As características do espectro da PSD servirão de auxílio na definição do modelo a ser utilizado no ajuste do sinal. Se o PDS apresenta picos de banda estreita o modelo mais adequado será o AR, no caso de espectros com predominância de vales, o modelo MA se ajusta mais eficientemente. Se o espectro apresentar ambas as características apontadas, então deve optar-se pelo modelo ARMA [30]. A escolha do modelo está baseada no conhecimento preliminar da forma provável do espectro, e se dois ou mais modelos podem representar razoavelmente um espectro, deve-se escolher intuitivamente o modelo que apresenta o menor número de parâmetros.

A modelagem AR é frequentemente escolhida, ainda quando as características espectrais não apresentam picos bem definidos, e isto é possível devido às seguintes razões:

1. A carga computacional para calcular os parâmetros dos modelos AR tende a ser menor que os usados para os modelos MA e ARMA.
2. Os modelos MA e ARMA podem ser representados por um modelo AR se a ordem do modelo é alta o suficiente (teorema de Wold) [62, 23].

A ordem do modelo é um parâmetro importante que pode ser muito sensível na exatidão do ajuste, por exemplo, a escolha de uma ordem baixa pode comprometer significativamente a resolução em frequência. Já no caso de uma ordem muito elevada existe o risco de gerar picos espúrios com alta instabilidade estatística [29, 30].

Desenvolveram-se alguns critérios de selecção da ordem do modelo. Estes, encontram-se descritos na bibliografia, mas provou-se também que produziam uma selecção não muito diferente da que era produzida pelo critério de ‘Final Prediction Error’ (FPE) [12].

O problema da predição linear diz respeito à predição de dados $x[n]$ não observados, considerando que os dados constituem um modelo AR. O modelamento AR pode ser formulado no domínio da frequência como um problema de matching espectral ou no domínio do tempo como um problema de predição linear. Geralmente o tratamento no domínio do tempo é utilizado por ser mais intuitivo. Uma aplicação deste último caso, pode ser formalizado no seguinte exemplo, considerando uma amostra qualquer $x[n]$, pertencente à sequência de dados $x[1] x[2] \dots x[N]$, $x[n]$ pode ser predita por uma combinação linear das “k” amostras mais recentes $x[n-1], x[n-2], \dots, x[n-k]$. Assim, denotando $\hat{x}[n]$ o valor predito de $x[n]$, a equação de predição linear posterior (Forward) pode ser expressa por:

$$\hat{x}^f[n] = -\sum_{i=1}^k a^f[i] x[n-i] \quad (2.12)$$

Onde $a^f[i]$ são os coeficientes de predição linear da predição posterior. Uma representação esquemática da predição posterior é mostrada na Figura 5.

Figura 5: Modelamento AR [48]

O erro de predição linear posterior (‘forward linear prediction error’) pode ser expresso pela seguinte equação:

$$e^f[n] = x[n] - \hat{x}^f[n] \quad (2.13)$$

O valor médio do quadrado dos erros de predição para a toda sequência de dados $x[1], x[2], \dots, x[N]$ é definida equação (2.14), sendo importante indicar que para o cálculo deste valor médio assume-se que o valor de $x[0]=0$ o que permitirá determinar $\hat{x}[1], \hat{x}[2], \dots, \hat{x}[k]$.

$$E[|e^f[n]|^2] = E[|x[n] - \hat{x}^f[n]|^2] = \rho^f \quad (2.14)$$

Onde ρ^f designa a potência do erro preditivo posterior (‘forward prediction error power’). No cálculo de $\hat{x}[1], \hat{x}[2], \dots, \hat{x}[k]$ se assume que valores anteriores a $x[1]$ são iguais a zero [29].

O problema principal da predição linear está vinculado à determinação dos coeficientes $a^f[i]$ de tal forma a otimizar a aproximação dos valores da sequência $\hat{x}^f[n]$ à sequência $x[n]$. Este cálculo é obtido através da minimização da funcional ρ^f em relação aos parâmetros $a^f[i]$ [30], isto é:

$$\frac{\partial \rho^f}{\partial a^f[i]} = 0 \quad (2.15)$$

para $1 \leq i \leq k$

O resultado desta operação nos fornecerá equações de $a^f[1], a^f[2], \dots, a^f[k]$ que substituídas na expressão da funcional E, proporcionam a seguinte equação:

$$E_p = \left(\frac{1}{N} \sum_{n=1}^N x^2[n] \right) + \sum_{i=1}^k \left(\frac{1}{N} \sum_{n=1}^N x[n]x[n-i] \right) a^f[i] \quad (2.16)$$

Onde E_p representa a potência do erro preditivo mínimo. Os termos entre parêntese da equação acima estão relacionados com os coeficientes de auto-correlação $r[k]$ da sequência de dados $x[n]$. Assim podemos expressar a resolução da equação (2.15) e equação (2.16) em termos de funções de auto-correlação e rearranjar as equações em forma matricial, obtendo:

$$\begin{bmatrix} r_{xx}[0] & r_{xx}[1] & \dots & r_{xx}[k] \\ r_{xx}[1] & r_{xx}[0] & \dots & r_{xx}[k-1] \\ \vdots & \vdots & \dots & \vdots \\ r_{xx}[k] & r_{xx}[k-1] & \dots & r_{xx}[0] \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 1 \\ a^f[1] \\ \vdots \\ a^f[k] \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \rho^f \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix} \quad (2.17)$$

Os coeficientes satisfazem à seguinte condição $r_{xx}[-k] = r_{xx}^*[k]$ indicando ser funções pares em relação ao índice “k” [30]. Este sistema é conhecido como a equação de Yule-Walker para um processo AR.

O modelo AR pode ser aplicado à mesma sequência de dados, mas em forma reversa. Assim a equação de predição linear anterior (Backward), se expressa como:

$$\hat{x}^b[n] = - \sum_{i=1}^k a^b[i] \cdot x[n+i] \quad (2.18)$$

e o erro preditivo linear anterior pode ser representado pela seguinte equação:

$$e^b[n] = x[n-k] - \hat{x}^b[n-k] \quad (2.19)$$

Seguindo um procedimento análogo ao utilizado no cálculo dos coeficientes $a^f[i]$, usamos a equação da potência do erro preditivo anterior:

$$\rho^b = E\left[|e^b[n]|^2\right] \quad (2.20)$$

para obter a matriz:

$$\begin{bmatrix} r_{xx}[0] & r_{xx}^*[1] & \cdots & r_{xx}^*[0] \\ r_{xx}[1] & r_{xx}[0] & \cdots & r_{xx}^*[k-1] \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ r_{xx}[k] & r_{xx}[k-1] & \cdots & r_{xx}[0] \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} a^b[k] \\ \vdots \\ a^b[1] \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ \rho^b \end{bmatrix} \quad (2.21)$$

de donde podemos obter os coeficientes preditivos lineares anteriores $a^b[i]$.

A resolução da equação de Yule-Walker pode ser feita de várias formas como, por exemplo, usando o algoritmo de Levison-Durbin que é uma técnica recursiva computacionalmente eficiente, já que explora o fato de que a matriz de auto-correlação da equação anterior é simétrica e “toeplitz”. Neste algoritmo são usados os chamados coeficientes de reflexão expressos pela equação:

$$K_k = \frac{-E\left[e_{k-1}^f[n] \cdot (e_{k-1}^b[n-1])^*\right]}{\sqrt{E\left[|e_{k-1}^f[n]|^2\right]} \cdot \sqrt{E\left[|e_{k-1}^b[n-1]|^2\right]}} \quad (2.22)$$

onde os erros preditivos lineares são determinados recursivamente por:

$$e_k^f[n] = e_{k-1}^f[n] + K_k \cdot e_{k-1}^b[n-1] \quad (2.23)$$

$$e_k^b[n] = e_{k-1}^b[n-1] + K_k^* \cdot e_{k-1}^f[n] \quad (2.24)$$

$$\text{com: } x[n] = e_0^f[n] = e_0^b[n] \quad (2.25)$$

Estas expressões possibilitam o uso de técnicas superiores para a estimação de parâmetros AR, como o método de entropia máxima (MEM). Como o método de auto-correlação, o MEM é uma técnica de estimação recursiva baseada no critério de

erro mínimo quadrado, onde os erros preditivos, $e_k^f[n]$ e $e_k^b[n]$, são aplicados apenas aos dados disponíveis.

Neste método não só é minimizada a potência do erro preditivo posterior como também a média aritmética ($\rho_k = (\rho_k^f + \rho_k^b)/2$) da potência do erro preditivo anterior ρ_k^b e posterior ρ_k^f .

$$\rho_k^f = \frac{1}{N-k} \cdot \sum_{n=k}^{N-1} \left| x[n] + \sum_{i=1}^k a_k^f[i] \cdot x[n-i] \right|^2 = \frac{1}{N-k} \cdot \sum_{n=k}^{N-1} \left| e_k^f[n] \right|^2 \quad (2.26)$$

$$\rho_k^b = \frac{1}{N-k} \cdot \sum_{n=0}^{N-1-k} \left| x[n] + \sum_{i=1}^k a_k^{f*}[i] \cdot x[n+i] \right|^2 = \frac{1}{N-k} \cdot \sum_{n=k}^{N-1} \left| e_k^b[n] \right|^2 \quad (2.27)$$

Assim, fazendo: $\frac{\partial \rho_k}{\partial K_k}$

obtemos:

$$K_k = \frac{-2 \cdot \sum_{n=k}^{N-1} e_{k-1}^f[n] \cdot e_{k-1}^b[n-1]^*}{\sum_{n=k}^{N-1} \left(\left| e_{k-1}^f[n] \right|^2 + \left| e_{k-1}^b[n-1] \right|^2 \right)} \quad (2.28)$$

Usando a equação anterior sujeita às restrições da recursão de Levinson-Durbin, obtemos o algoritmo de Burg.

Entre as vantagens do método de Burg podemos citar:

1. Elevada resolução em frequência.
2. Modelo AR estável.
3. Computacionalmente eficiente.

Entre as desvantagens do método de Burg podemos mencionar as seguintes:

1. O método de Burg algumas vezes fornece como resultado uma curva separada fazendo com que um pico simples seja replicado introduzindo artificialmente duas frequências juntas.
2. Modelos de ordem alta podem resultar na geração de picos espúrios.

Um problema fundamental na estimação da densidade espectral de potência de um sinal reside na restrição prática de analisá-la sobre um intervalo de tempo finito (seqüência de dados finita). Se o sinal é estatisticamente estacionário, a estimação pode ser comodamente completada tomando uma seqüência de dados suficientemente grande, para que os efeitos de janelamento do tempo sejam desprezíveis. A estimação espectral AR tem-se mostrado apropriada para uma seqüência de dados de comprimento pequeno [63], razão pela qual tem sido aplicada com sucesso em problemas tais como estimação espectral Doppler [64,65] apesar do comprometimento na precisão da estimação no caso de uma baixa relação sinal ruído.

O método de Burg está relacionado com a determinação ótima da ordem do modelo AR utilizando o critério de informação de Akaike (AIC-Akaike Information Criterion)

O AIC é obtido através da seguinte equação:

$$AIC(p) = N \ln(\rho_p) + 2p \quad (2.29)$$

Onde p é a ordem do modelo, N é o comprimento da seqüência de dados, e ρ_p é o erro de variância para o modelo de ordem p . A ordem ótima do modelo p é aquela que minimiza o critério de informação de Akaike. [32]

Na Tabela 1 são apresentadas as comparações de desempenho dos diferentes processos paramétricos.

Tabela 1. Propriedades e características dos diferentes métodos paramétricos utilizados no processamento de sinais [100].

	Burg	Covariância	Covariância Modificada	Yule-Walker
Características	Não aplica janela aos dados.	Não aplica janela aos dados.	Não aplica janela aos dados.	Aplica janela aos dados.
	Minimiza a predição dos erros posterior e anterior usando mínimos quadrados, com os coeficientes AR condicionados a satisfazer a recursão de L-D.	Minimiza a predição do erro posterior usando mínimos quadrados.	Minimiza a predição dos erros posterior e anterior usando mínimos quadrados.	Minimiza a predição do erro posterior usando mínimos quadrados.(também chamado "Método de Auto-correlação")
Vantagens	Alta resolução para sequência de dados pequenas.	Melhor resolução que Y-W para sequência de dados pequenas (estimações mais exatas)	Alta resolução para sequência de dados pequenas.	Desempenho tão bom quanto os outros métodos para sequência de dados grandes.
	Apresenta uma solução estável.	Capaz de resolver frequências de dados consistentes de "p" ou mais sinais senoidais puros.	Capaz de resolver frequências de dados consistentes de "p" ou mais sinais senoidais puros.	Apresenta uma solução estável.
			Não tem divisão espectral linear.	
Desvantagens	A localização de picos é altamente dependente da fase inicial	Pode gerar soluções não estáveis.	Pode gerar soluções não estáveis..	Desempenho relativamente pobre para sequências de dados pequenas.
	Pode sofrer divisão espectral linear para senoide com ruído, ou quando a ordem é muito grande.	Influência da frequência para estimativas de senoide com ruído.	As localizações dos picos ligeiramente dependentes da fase inicial	Influência da frequência para estimativas de senoide com ruído.
	Influência da frequência para estimativas de senoide com ruído.		Menor influência da frequência para estimativas de senoide com ruído.	
Condições de não singularidade.		A Ordem deve ser menor ou igual à metade do tamanho da entrada.	A Ordem deve ser menor ou igual à 2/3 do tamanho da entrada.	

2.3.2.1. Filtros Kalman.

O método baseado num Filtro de Kalman é um método recursivo para a estimação de parâmetros de um sistema através da observação de uma medida corrompida por um ruído intrínseco e um ruído adicionado pelo sistema de observação. Uma das vantagens deste método é sua eficiência computacional, se comparado com métodos clássicos como, por exemplo, os métodos baseados nos mínimos quadrados. Nos métodos clássicos, geralmente todas as medidas devem ser conhecidas para a estimação, enquanto que no método de Filtro de Kalman os cálculos são atualizados a cada nova entrada de dados no sistema. Adicionalmente o sistema permite extrapolar e prever uma nova entrada de dados.

O Filtro de Kalman estima o estado de um processo para algum instante e então obtém a realimentação na forma de medidas (ruidosas). Assim, o Filtro de Kalman possui dois grupos de equações, uma de atualização de tempo e outra de atualização de medida. As equações de atualização de tempo são responsáveis para projetar na frente o estado atual e obter um estimador da covariância a priori por o próximo instante. As equações de atualização de medida são responsáveis pela realimentação do sistema, isto é, incorporar um novo dado de medida na estimativa a priori obtendo-se assim um estimador melhorado posteriormente.

As equações de atualização de tempo também podem ser consideradas como equações de predição, enquanto as equações de atualização de medida podem ser consideradas como equações de correção. Realmente o algoritmo final de estimação se assemelha a um algoritmo de predição-correção para resolver problemas numéricos [30].

3. Descoberta de Conhecimento numa Base de dados.

3.1. Ambiente para a Descoberta de Conhecimento numa Base de dados

(*Knowledge Discovery Database - KDD*).

A extração de conhecimento em bancos de dados grandes tem grande demanda na atualidade devido ao seu potencial intrínseco contido e a quantidade de dados neles armazenados [66]. A dificuldade de extrair informação útil da forma tradicional, devido ao volume dos dados, gera a necessidade de processos automáticos de extração de conhecimento.

Os dados são considerados como fatos conhecidos com um significado implícito. O armazenamento dos dados em bancos de dados pode ser feito de várias formas (em diferentes tipos de mídia). Estes bancos de dados podem ser definidos como coleções de dados que possuem um significado e uma relação entre si. Até alguns anos atrás os bancos de dados eram considerados como simples repositórios de dados, mas atualmente são um importante patrimônio da organização que os possui [67], já que auxiliam de maneira eficiente na procura de informação útil. Seu gerenciamento é feito por um SGBD (Sistema Gerenciador de Banco de Dados) que é um programa ou uma coleção deles que permite manipular, criar ou modificar a estrutura do banco de dados .

O processo de descoberta de conhecimento (ou informação) em um banco de dados é chamado de KDD do inglês *Knowledge Discovery Database*, tornando-se na atualidade uma ciência multidisciplinar que utiliza conceitos de bases de dados, métodos estatísticos, inteligência artificial entre outros. Uma das etapas que compõe a KDD é a mineração de dados, encarregada de transformar dados em informações [84] que permitem identificar padrões num conjunto de dados. O processo de mineração de dados utiliza uma grande variedade de algoritmos de análise de dados que serão descritos posteriormente. Para obter melhores resultados nesta etapa é preciso contar com um tipo de dado especial chamado de metadado, que atuam como mapas para o minerador, que os usa não para descrever o conteúdo da informação, mas sim o contexto dela [68]. Na Figura 6 é mostrado um sistema de banco de dados estruturada de forma simples.

Figura 6: Um ambiente simplificado de um sistema de banco de dados [72].

Figura 7: Estrutura de KDD [72].

3.1.1. Metadados

Os Metadados são definidos como uma abstração dos dados, ou como dados de mais alto nível que descrevem dados de um nível inferior. São os metadados os que permitem uma organização para poder procurar e entender os dados [69].

Os metadados constituem-se no principal recurso para a administração dos dados e assumem uma maior relevância no ambiente de um “Data Warehouse” (DW), definidas como estruturas de armazenamento utilizadas para reduzir o tempo de realização da KDD.

Em um ambiente operacional, os metadados são importantes para os desenvolvedores e administradores do banco de dados porque ajudam à organização dos dados simplificando o processo de busca da informação desejada. Por outro lado, num ambiente de apoio à tomada de decisão, os metadados auxiliam os analistas de dados na procura por fatos não usuais. Neste ambiente, os usuários precisam examinar seus dados e, para isso, devem conhecer sua estrutura e significado [70].

Os Metadados geralmente incluem:

1. Um arquivo indicando o conteúdo da data warehouse. O arquivo indica o endereço dos dados armazenados, facilitando assim a procura da informação.
2. Uma guia para mapear os dados a partir de sua forma operacional até sua forma final na data warehouse.
3. Regras para serem utilizadas na escrita de resumos [71].

Para reduzir o tempo de realização da KDD geralmente se utilizam estruturas de armazenamento conhecidas como Data warehouse.

3.1.2. Data Warehouse

Pode-se definir um DW (Data Warehouse) como uma coleção de dados orientada por assunto (subject oriented), integrada, variável no tempo e não volátil, para dar suporte à tomada de decisões [72, 71]. Embora a DW varie no tempo ela raramente é alterada num período de vários anos mantendo assim um histórico dos eventos, isto é, quando algo é modificado um novo item é criado a fim de representar as mudanças ocorridas nos dados. Uma DW está organizada por temas específicos, e deve ser capaz de integrar dados provenientes de diversas fontes, isto é, fontes heterogêneas de dados, para depois representá-las em forma multidimensional [68,70, 73]. Por natureza, um DW inclui dados integrados, dados detalhados e resumidos, dados históricos e metadados [68].

O “Data Warehousing” é conhecido como o processo de construção, acesso e manutenção de um Data Warehouse. Uma coleção de tecnologias de suporte de tomada de decisões orientadas a auxiliar o analista ou usuário a tomar melhores decisões num curto período de tempo [74].

3.1.2.1. Arquitetura de uma Warehouse.

Para a formação de um DW, vários tipos de arquiteturas têm sido propostos procurando diversas vantagens de acordo com necessidades específicas. Tipicamente

uma DW possui três componentes, a primeira é o próprio DW que contém os dados e o software associado ao DW sendo freqüentemente chamado de “base de dados alvo”. A segunda componente é o Software de aquisição de dados (back-end) que serve para extrair dados de sistemas herdados e fontes externas consolidadas resumindo e carregando-os dentro da DW. O último componente é o software cliente (front-end) que permite aos usuários acessar e analisar os dados na DW [71]. Estas componentes podem estar situadas em diferentes plataformas ou não. Considerando as partes que compõem a estrutura da DW, existem várias arquiteturas propostas na literatura entre os principais tipos de arquiteturas podemos mencionar:

3.1.2.1.1. Arquitetura de um nível.

Esse tipo de DW possui uma topologia simples, pois estão inseridos nele todas as informações disponíveis da organização, ou seja, a DW contém os dados de todas as áreas e processos executados pela estrutura. Neste tipo de arquitetura cada peça de dados é armazenada uma vez [75], sendo que o nível intermediário funciona como meio de comunicação entre os usuários e as bases operacionais. Esta arquitetura tem a vantagem de que pode ser rapidamente implementada a baixo custo, no entanto é necessário planejar atividades para cada evento, carece de históricos e o tempo de acesso do usuário final é imprevisível [77].

3.1.2.1.2. Arquitetura de dois níveis.

Este tipo de arquitetura baseia-se na separação dos dados fonte em relação aos dados derivados. Nesta arquitetura o primeiro nível contém dados fonte, o segundo nível contém os dados derivados que podem ser uma cópia dos dados fonte ou uma abstração deles ou ainda dados fonte com algum agregado [75,76]. Este tipo de arquitetura é utilizada quando as fontes operacionais são basicamente homogêneas. Apesar de sua fácil estruturação esta DW promove a duplicação de uma significativa quantidade de dados. Este tipo de arquitetura é também conhecida como Data Mart tendo como objetivo ordenar cada seção de uma organização, sendo que cada seção possui seu próprio depósito de informações. Estas podem ser independentes de um DW, possuindo dados apenas de uma determinada seção de

uma organização, ou podem ser dependentes, onde vários Data Marts são criados a partir de um Data Warehouse.

3.1.2.1.3. Arquitetura de três níveis.

A arquitetura de três níveis [77] é obtida considerando que os dados derivados são obtidos em duas fases: a primeira fase considera a “harmonização” dos dados operacionais provenientes de diferentes fontes, e a segunda fase considera a derivação de dados de auxílio à decisão a partir dos dados “harmonizados”. Neste modelo, o primeiro nível armazena os dados operacionais, o segundo nível armazena os dados “harmonizados” e o terceiro nível os dados de auxílio de decisões. A estrutura deste modelo é mostrada na Figura 8.

Figura 8 Arquitetura de três níveis [81].

Geralmente a arquitetura de três níveis é aceita como a arquitetura clássica de DW, assim ela é ilustrada de forma mais detalhada na seguinte figura.

Figura 9: Arquitetura de DW tradicional [80].

Fisicamente um sistema de DW consiste de bases de dados fonte, de agentes de transporte que levam os dados de uma fonte para outra, e de um depósito que armazena os metadados. Neste tipo de arquitetura, fontes de informação heterogênea são acessíveis em forma uniforme através de mecanismos de extração chamados “wrappers”, sendo que os mecanismos conhecidos como “mediadores” são os encarregados da integração da informação e da resolução de conflitos. Os dados resultantes, padronizados e integrados são armazenados no DW em forma de agregados de tal forma a facilitar seu uso em posteriores análises. Para domínios específicos de interesse são implementados “data marts” que são estruturas de dados agregados personalizados [78,79]. Na Figura 10 é mostrada uma representação esquemática deste sistema.

Figura 10: Sistema “data marts” [80].

As arquiteturas acima descritas correspondem a estruturas clássicas de DWs. No estágio atual a comunidade científica tem reportado a introdução de modificações nos tipos de arquiteturas existentes procurando otimizar o seu desempenho. Um exemplo de arquiteturas modificadas foi reportado em [80]. Neste trabalho foi reportada uma arquitetura DWQ (Data Warehouse Quality) num marco de gerenciamento de qualidade cuja implementação está embasada numa metabase de dados. O objetivo principal desta proposta consiste na definição de um esquema de metabase de dados as quais possam capturar e conectar todos os aspectos relevantes de uma arquitetura DW de qualidade. A funcionalidade desta arquitetura resulta otimizada devido a que considera três perspectivas diferentes associadas ao desempenho de tarefas específicas. Na Figura 11 é mostrada uma representação esquemática desta arquitetura onde as três perspectivas diferentes referem-se a: Uma perspectiva de empresa conceptual, uma perspectiva de modelamento de dados lógico, e uma perspectiva física e de fluxo.

Figura 11: Representação esquemática da arquitetura DWQ proposta em [80]

Uma outra modificação foi proposta em [81], nesta nova DW foi proposta uma arquitetura de três níveis onde os esquemas operacionais não foram integrados diretamente para construir um esquema global. A nova proposta considera uma coleção de sub grupos de esquemas operacionais em aglomerados homogêneos integrando-os logo na base de integração de aglomerado - aglomerado. Cada esquema integrado obtido desta forma é resumido, para construir um esquema global representando o aglomerado. O processo anterior é iterativamente executado no conjunto de aglomerados obtidos, até ficar somente com um esquema final. Se o esquema resultante continua com um elevado grau de complexidade, passos de abstração adicionais podem ser realizados de tal forma a simplificar o esquema final. A execução destes procedimentos resulta numa estrutura hierárquica a qual foi chamada de repositório de dados. Assim, um repositório de dados é uma estrutura ordenada de catálogos de uma base de dados complexa organizando a descrição dos dados envolvidos e toda a informação do esquema nos vários níveis de abstração. Adotando tal repositório de dados como um esquema global de nível de reconciliação, obter-se-á uma arquitetura de DW como mostrado na Figura 12.

A otimização na execução do processo “Data Warehousing” adicionalmente, deverá considerar banco de dados classificados por proposições lógicas e, em alguns casos, pelo seu estado físico relativo à fonte de dados. Essa separação se deve às

diferenças encontradas nos dados manipulados por cada sistema, na tecnologia envolvida, nos usuários e nas características de processamento.

Figura 12: Representação esquemática da arquitetura de um DW de três níveis modificado [81].

Existe uma estreita relação entre a atividade de mineração de dados e o DW. O DW estabelece as condições necessárias para uma mineração de dados efetiva. Uma mineração de dados pode ser levada a cabo sem uma DW, mas a DW melhora significativamente as probabilidades de sucesso numa mineração de dados [68].

3.2. Etapas da KDD

Dentro das principais etapas da KDD podemos mencionar o pré-processamento de dados, a mineração de dados (*Data Mining*) e o pós-processamento dos dados. Sendo que cada um destes procedimentos são executados em várias sub-etapas tais como a definição do problema; seleção dos dados; limpeza dos dados, enriquecimento dos dados no pré-processamento de dados e interpretação dos resultados na etapa de pós-processamento dos dados, neste texto nos referiremos basicamente às etapas principais envolvidas no processo KDD.

No processo da KDD cada fase pode apresentar uma interseção com as demais. Desse modo, os resultados produzidos numa fase podem ser utilizados para

melhorar os resultados das próximas fases. O processo da KDD deverá ser iterativo, buscando sempre aprimorar os resultados a cada iteração.

A definição do problema é de fundamental importância para o processo da KDD. Essa definição requer que a pessoa que solicita a tarefa da KDD entenda perfeitamente o problema existente e tenha um objetivo bem especificado, ou seja, aquilo que se deseja conhecer ou extrair.

3.2.1. Pré-processamento dos dados

Existem numerosos fatores a serem considerados antes de submeter um grupo de dados à etapa de mineração de dados, como por exemplo, a verificação da consistência dos dados, a seleção do grupo de dados que serão submetidos ao algoritmo minerador, entre outros.

Quando os dados são adquiridos (dados brutos), em geral apresentam erros como, por exemplo, ausência de dados, dados redundantes, dados corrompidos ou inconsistentes com o experimento. A fonte destes erros na sequência de dados está associada ao processo experimental utilizado ou à forma de aquisição de dados. Neste sentido a limpeza dos dados poderá ser realizada melhorando a etapa de aquisição conjuntamente com processos computacionais a serem discutidos a seguir.

Além de verificar e “limpar” os dados, ainda pode ser necessário aplicar procedimentos de normalização desde que em alguns casos os dados disponíveis não apresentam as mesmas unidades de medida ou ordem de grandeza, neste caso o procedimento tradicional é normalizar os dados relativo à unidade utilizando como referência o desvio padrão dos dados. O procedimento de normalização pode apresentar algumas desvantagens como por exemplo a diluição das diferenças entre os diferentes grupos e perdas de efeitos de correlação entre as variáveis. Existem várias formas de minimizar estes problemas, entre os principais podemos mencionar por exemplo, o uso de coeficientes de similaridade que incluem informação dos diferentes tipos de variáveis, a análise por separado do mesmo grupo de objetos, isto é, fazer uma análise para cada tipo de variável para depois sintetizar os resultados, e utilizar métodos de análise que minimizam esses efeitos como os métodos de

agrupamento baseados em modelos [82, 83]. Alguns problemas de reprodutibilidade, que são os primeiros a aparecer em aplicações como no nariz eletrônico, são aparentemente resolvidos proporcionando algumas condições de normalização (padronização).

Uma outra forma comum de tratar os dados antes de se fazer uma análise é ponderar as variáveis ou estabelecer diferentes pesos para as variáveis, com o objetivo de dar maior importância a algumas variáveis em relação as outras. O problema com este tipo de método é a dificuldade para estabelecer um peso adequado para as variáveis sem que a escolha possa parecer subjetiva, assim é possível que o uso deste método tire as características importantes apontadas por outro método, como por exemplo no caso do método de agrupamento.

Os dados poderão ser selecionados para poder passar à etapa de mineração, já que em alguns casos não será necessário analisar todos os dados e sim apenas aqueles que contenham informações relevantes à análise a ser executada, o que diminuirá também o tempo de processamento.

Um conjunto de dados pode passar por todas as etapas antes mencionadas ou só por algumas delas, dependendo do conjunto de dados e do tipo de análise que se deseja. A maioria das etapas pode ser feita automaticamente usando algumas da grande variedade de ferramentas computacionais disponíveis.

O conjunto destas etapas forma parte do pré-processamento dos dados que tem por finalidade preparar e gerar as informações relevantes para o algoritmo minerador, ajudando a reduzir a complexidade do problema, evitando-se desta forma posteriores consultas na etapa de mineração de dados, em caso de dúvida, o que aumentaria seu tempo de execução.

3.2.2. Mineração de dados

A Mineração de dados (DM), considerada como uma etapa no processo da KDD, consiste num conjunto de técnicas computacionais restritas à eficiência computacional com a finalidade de produzir um particular conjunto de padrões [84]. A Mineração de dados permite novas formas de interação com as bases de dados,

especificando pedidos numa forma muito mais abstrata do que um nível simples de requisição (SQL: Single query level). A DM permite também aliviar a dificuldade que os humanos têm para visualizar e entender grandes conjuntos de dados.

O objetivo principal da DM é o reconhecimento de padrões [84], padrões que têm que ser novos, pelo menos para o sistema, de utilidade, e compressíveis, mesmo que seja só depois de um pós-processamento. Esta tarefa resulta viável para o ser humano quando o número de variáveis é pequena, já que o aprendizado está baseado na capacidade do cérebro humano de identificar, isolar, associar e reconhecer formas sons ou conceitos. No entanto, com o avanço da tecnologia, a quantidade de dados assim como número de parâmetros a analisar cresceu muito, tornando-se uma tarefa difícil para um ser humano sem o auxílio de DM, tal é o caso da análise de séries temporais.

O processo de identificação de padrões é complexo e interativo, isto é, pode-se fazer a DM a partir de um conjunto de dados apenas para identificar a necessidade de repetir um passo do processo, seja no DM ou em alguma parte do KDD. Tudo isto tem levado ao desenvolvimento de várias técnicas de análise de dados e de inteligência artificial como as redes neurais.

Os métodos de análise de dados podem ser classificados como métodos supervisionados e não supervisionados. Dentro dos não supervisionados, também conhecidos como métodos exploratórios ou de Análise Exploratória de Dados (EDA - *Exploratory Data Analysis*), estão o “Star Plot”, “Scatter Plot Matrix”, “Conditioning Plot”, “Profile Plot”, Componentes Principais, Agrupamento (Clustering) e Discriminação ou Classificação. Onde o objetivo principal é encontrar uma estrutura de correlação entre os dados [85].

Dentro dos métodos supervisionados podemos mencionar a análise de discriminantes (DA- Discriminant Analysis), Análise de funções discriminantes (DFA- Discriminant Function Analysis) e a Análise de Variância Canônica (CVA – Canonical Variate Analysis). Em cada caso o propósito é formar combinações lineares por peso dos dados [86]

Comumente a análise dos dados se faz combinando alguns dos métodos mencionados anteriormente [87].

A seguir, serão apresentados os fundamentos de alguns dos principais métodos de análise de dados. Dentro da parte de análise exploratória veremos alguns métodos de agrupamento, os quais reduzem a quantidade de dados agrupando-os, e métodos que reduzem a dimensionalidade dos dados, chamados de métodos de projeção, cujo objetivo é representar os dados num espaço dimensional menor, de tal forma que algumas propriedades importantes dos dados sejam preservadas [88]. A este último método, pertence a Análise de Componentes Principais (PCA – Principal Components Analysis), que reduz a dimensionalidade dos dados sujeita a uma variância predefinida. Na parte dos métodos supervisionados será descrita a análise de discriminantes.

Existem muitos outros métodos de usados para o reconhecimento de padrões como Redes Neurais Artificiais (ANN), classificação através de teoria Fuzzy, etc.

Figura 13: Passos que envolve o processo da KDD.

3.2.2.1. Análise de Componentes Principais (PCA)

A análise de componentes principais (PCA - Principal Component Analysis), é um método para reduzir dimensões, isto é, converter um conjunto grande de variáveis num conjunto pequeno que contenha ainda a maior parte da informação do conjunto original. Para reduzir as dimensões, o grupo multidimensional de dados

originais é transformado numa configuração nova, mais simples e fácil de interpretar. O propósito deste método é simplificar os dados, analisar correlações entre as variáveis e identificar possíveis padrões nos dados.

Se duas variáveis são perfeitamente correlacionadas ($x_1=x_2$), significa que estudar uma ou outra é equivalente. Desta forma a informação pode ser condensada utilizando um só eixo, como mostrado na Figura 14. Neste caso a melhor redução será a que considera a distância dos pontos no plano em relação à origem, é dizer, $x' = (x_1^2 + x_2^2)^{1/2}$, obtendo-se desta forma uma redução dimensional de 2 para 1.

Figura 14: Representação esquemática da observação de duas variáveis num certo número de objetos, e a sua representação no plano no caso de uma correlação ideal $x_1=x_2$ e sua redução a uma nova coordenada $x' = (x_1^2 + x_2^2)^{1/2}$.

No caso de duas variáveis não perfeitamente correlacionadas como mostrada na Figura 15 (a-d), ainda será possível a redução da dimensão através de uma transformação de rotação para novos eixos u_1 e u_2 respectivamente. Se após esta transformação a informação contida no eixo u_2 é muito pequena em relação ao eixo u_1 (Figura 15 (c)) então o sistema pode ser representado somente pelo eixo u_1 como apresentado na Figura 15 (d). Ou seja considerando apenas uma variável u_1 , reduzimos a dimensão do espaço sem grande perda de informação.

Figura 15: (a) gráfico bidimensional das variáveis x_1 e x_2 que não são perfeitamente correlacionadas (b) Coordenadas de transformação u_1 e u_2 (c) Gráfico dos pontos no novo sistema de coordenadas (d) Redução da representação para uma dimensão.

No caso de três variáveis, podem existir várias formas de reduzir a dimensão, em todos os casos procura-se sempre a melhor representação dos dados (Figura 16).

(a)

(b)

(c)

Figura 16: **(a)** Gráfico da representação das componentes x_1 , x_2 e x_3 e sua projeção no plano formado pelos eixos u_1 e u_2 . **(b)** similarmente ao caso (a) com projeção no plano formado pelos eixos u_1' e u_2' . **(c)** Similarmente aos casos (a) e (b) mas com projeção no plano formado pelos eixos u_1'' e u_2'' respectivamente.

A representação da Figura 16 (a) parece sem dúvida a melhor, e o conceito subjacente para a escolha é o de manter a dispersão dos pontos. Parece razoável,

ainda que, por enquanto apenas intuitivamente, considerar que uma mudança de eixos deva conservar a variabilidade traduzida por cada um dos eixos originais, (variáveis), de forma a não perder a compreensão dessas mesmas características. Comparando as opções da Figura 16 (a) e (b) , observa-se que ambas parecem conservar a variabilidade entre x_1 e x_2 e x_1 , x_3 respectivamente. A tendência de considerar melhor a representação da Figura 16 (a) consiste (eventualmente) num erro. A terceira variável pode ser apenas uma variável de ruído pelo que a projeção dos dados num eixo que diminuísse a sua representatividade não constituiria um erro. No entanto não se deve esquecer que cada variável pode referir-se a unidades físicas diferentes, pelo que, a importância de uma variável pode mascarar-se devido exatamente a uma igualdade de escalas. Uma forma de "equilibrar" a importância de cada variável consiste em normalizar os dados [89].

O formalismo matemático da análise dos componentes principais, é um método que consiste na decomposição de uma matriz de dados $\mathbf{X}$ de posto r (ou “rank” r), como uma soma de matrizes de posto igual a 1, onde posto é um número que expressa a dimensão de uma matriz.

Essas novas matrizes de posto 1, são produtos de vetores chamados “scores” $\mathbf{t}_h$ e “loadings” $\mathbf{p}_h$. Estes “scores” e “loadings” podem ser calculados par a par por um processo iterativo, como na equação (3.1).

$$\mathbf{X} = \mathbf{t}_1 \mathbf{p}_1' + \mathbf{t}_2 \mathbf{p}_2' + \dots + \mathbf{t}_h \mathbf{p}_h' \quad (3.1)$$

Na Figura 17 tem-se a representação da matriz de dados decomposta em matrizes “scores” e “loadings”.

$$\begin{matrix} m \\ \boxed{\mathbf{X}} \\ n \end{matrix} = \begin{matrix} 1 & m \\ \boxed{\mathbf{t}_1} & \boxed{\mathbf{p}'_1} \\ r & 1 \end{matrix} + \begin{matrix} 1 & m \\ \boxed{\mathbf{t}_2} & \boxed{\mathbf{p}'_2} \\ r & 1 \end{matrix} + \dots + \begin{matrix} 1 & m \\ \boxed{\mathbf{t}_r} & \boxed{\mathbf{p}'_r} \\ r & 1 \end{matrix}$$

Figura 17: Representação da matriz de dados $\mathbf{X}$ decomposta em produto de matrizes de posto igual a um.

Para exemplificar $\mathbf{t}_h$ e $\mathbf{p}'_h$, temos a Figura 18 que ilustra no plano bidimensional duas variáveis x_1 e x_2 . A Figura 18A mostra uma componente principal que é a reta que aponta na direção de maior variabilidade das amostras apresentadas na Figura 18B. Os “scores” $\mathbf{t}_h$ são as projeções das amostras na direção da componente principal e os $\mathbf{p}'_h$ “loadings” são os cossenos dos ângulos formados entre a componente principal e cada variável.

Figura 18: Uma componente principal no caso de duas variáveis: (A) loadings são os ângulos do vetor direção; (B) scores são as projeções das amostras (1 - 6) na direção da componente principal. Note que os dados são centrados na média.

Em síntese, a PCA é um método que tem por finalidade básica, a redução de dados a partir de combinações lineares das variáveis originais [88].

3.2.2.2. Classificação e agrupamento.

Uma das formas mais fáceis na interpretação de grandes conjuntos de dados é classificando-os ou agrupando-os. Nos métodos de classificação, tenta-se descobrir alguma relação entre os dados não classificados e grupos pré-estabelecidos, de modo a poder incluir esses dados nos grupos existentes a partir de uma série limitada de parâmetros. A taxa de acertos, que é a proporção de observações bem classificadas, é uma forma de medir a qualidade de um método de classificação.

Os métodos de agrupamento (clusterização), também conhecidos como métodos de segmentação, separam os dados que têm alguma semelhança em grupos, ou “clusters”. A diferença com os métodos de classificação radica na indefinição do número de grupos a serem obtidos pelo método. Estas pequenas diferenças fazem com que alguns autores considerem o agrupamento como um tipo especial de classificação [90]. O método de agrupamento é utilizado quando não existem hipóteses a priori que são elementos necessários nos métodos estatísticos. O algoritmo deste método consiste primeiro em identificar os possíveis membros de um agrupamento para finalmente escolher os melhores grupos [84]. Testes de significância estatística não são apropriados no caso dos métodos de agrupamento, mesmo em casos em que exista vários níveis como no caso de k-means clustering [90].

Existem inúmeras formas de classificar os métodos de agrupamento, mas de forma bem genérica podem ser classificados em dois tipos básicos, o agrupamento hierárquico e o agrupamento particional. Dentro de cada tipo existe uma grande variedade de subtipos e diferentes algoritmos para encontrar agrupamentos.

A análise hierárquica de agrupamentos (HCA - hierarchical cluster analysis), é considerado um método multivariado de aprendizagem não supervisionada e pode agrupar grupos menores em grupos maiores ou reversamente dividir grandes grupos. Os métodos hierárquicos de agrupamento se diferenciam pela forma na qual dois grupos pequenos são fundidos ou pela forma como clusters grandes são divididos. O

resultado do agrupamento pode ser representado em forma de dendogramas que mostram os diferentes níveis de agrupamento dos dados.

O agrupamento particional tenta decompor os dados diretamente em grupos disjuntos. O critério que os algoritmos de agrupamento tentam minimizar pode-se centrar na estrutura local dos dados ou na estrutura global. Assim um aglomerado (cluster) pode ser formado por exemplo, pela identificação de regiões de alta densidade no espaço de padrões ou atribuindo um padrão a um grupo e a seus k vizinhos mais próximos [90]. Tipicamente o critério é tentar minimizar uma medida de dissimilaridade nas amostras dentro do cluster enquanto maximiza a medida de dissimilaridade entre clusters diferentes [88]. Assim primeiramente são estabelecidos centros arbitrários de grupos, e cada elemento é agrupado em torno ao centro mais próximo, depois são calculados novos centros e cada elemento se move para o grupo cujo centro esteja mais próximo. Este processo continua iterativamente até os grupos ficarem estáveis [91].

Os métodos hierárquicos são usados geralmente em áreas biológicas, sociais, e ciências do comportamento pela necessidade de construir taxonomias (classificação). Por outro lado os métodos particionais são usados em aplicações de engenharia onde partições simples são importantes, estes métodos também são apropriados para representar e compreender melhor grandes bases de dados [93]. Métodos de agrupamento alternativos foram propostos [92], como por exemplo o método de agrupamento chamado “Evolving clustering method” o qual, segundo os autores, pode superar os métodos como “fuzzy C-means” e “subtractive clustering method” e que tem sido utilizado com sucesso em ciências da informação para análises fonológicas.

É recomendável usar vários algoritmos de agrupamento no mesmo grupo de dados já que a análise de agrupamentos é uma ferramenta descritiva ou exploratória, à diferença dos testes estatísticos, os quais são levados a cabo geralmente para propósitos dedutivos (inferencial) ou confirmativos. A escolha dos algoritmos a serem usados é um tanto quanto complicada desde que existe uma quantidade muito grande de algoritmos de agrupamento. Assim esta escolha é geralmente subjetiva, e

deve estar baseada na experiência do usuário. Os algoritmos descritos nesta tese são considerados como alguns dos mais robustos e com maior consistência lógica [93].

As medidas de similaridade mais usadas são a distância euclidiana e o coeficiente de correlação. As técnicas de agrupamento mais usadas são as baseadas na distância ao vizinho mais próximo e na distância média dos outros pontos, e os algoritmos de Ward's e o "Average linkage" [86].

3.2.2.2.1. Medidas de distância.

Existem vários coeficientes de similaridade, com a função de indicar relações entre pares de dados. A forma mais direta de calcular uma distância entre dois objetos em um espaço multidimensional é calcular as distâncias euclidianas.

3.2.2.2.1.1. Distância Euclidiana

A Distância Euclidiana entre dois pontos, distância mais comumente usada, é uma distância geométrica num espaço multidimensional expressa por:.

$$\text{Distância } (x,y) = \{ \sum_i (x_i - y_i)^2 \}^{1/2} \quad (3.2)$$

Este tipo de distância é geralmente calculada de dados crus e não de dados padronizados. As vantagens deste método são variadas, entre elas que este tipo de distância não é afetada pela adição de novos dados. No entanto pode ser afetada pela diferença de escalas entre as dimensões das quais as distâncias são calculadas.

3.2.2.2.1.2. Distância euclidiana quadrada

Este tipo de distância é usada para dar progressivamente um peso maior a objetos que se encontram mais apartados. Esta distância é aplicada também em dados binários, já que sendo uma medida de dissimilaridade tem a vantagem que dá mais importância à diferença entre os indivíduos do que ao número de atributos em que eles diferem.

$$\text{Distância } (x,y) = \sum_i (x_i - y_i)^2 \quad (3.3)$$

3.2.2.2.1.3. *Distância potenciada.*

Esta medida é usada se se deseja incrementar ou decrementar progressivamente o peso em dimensões nas quais se encontram objetos muito diferentes.

$$\text{Distância } (x,y) = (\sum_i |x_i - y_i|^p)^{1/r} \quad (3.4)$$

Onde r e p são parâmetros definidos pelo usuário, p controla o peso progressivo nas diferenças em dimensões individuais, r controla o peso progressivo nas grandes diferenças entre objetos. Se r e p são iguais a 2, então a distância é igual à distância Euclidiana.

Uma aplicação de distância euclidiana pode ser encontrada em [94]

3.2.2.2.2. Técnicas de agrupamento

3.2.2.2.2.1. *Ligação Simples ou do Vizinho mais Próximo*

Neste método, as distâncias entre dois grupos é determinada pela distância entre os dois objetos que se encontram mais perto em diferentes grupos. Os grupos resultantes tendem a ser longos se comparados aos grupos formados por outros métodos de agrupamento.

3.2.2.2.2.2. *Ligação Completa ou do Vizinho mais Longe*

Neste método, a distância entre grupos é determinada pela maior distância entre dois objetos, os que menos se parecem, em diferentes grupos. Com este método, geralmente, se obtém grupos compactos. Mas se os grupos obtidos são um tanto alongados ou em forma de cadeia (corrente), então o método não é apropriado.

3.2.2.2.2.3. *Centróide (Unweighted pair-group centroid)*

O centróide de um cluster é o ponto médio num espaço multidimensional , isto é, o centro de gravidade para o respectivo grupo. Neste método a distância entre dois grupos é definida como a distância entre os seus respectivos centróides.

3.2.2.2.2.4. *Mediana (Weighted pair-group centroid)*

Neste método é igual ao anterior só que pesos são introduzidos nos cálculos para levar em consideração diferenças nos tamanhos dos grupos. Quando esta diferença de tamanho acontece este método deve ser preferido ao anterior.

3.2.2.2.2.5. *Variância mínima (Método de Ward)*

Este método minimiza a soma de quadrados de dois grupos que podem ser formados em cada passo. Assim ele usa a variância para avaliar a distância entre grupos. Este método tende a criar grupos de pequeno porte [87].

3.2.2.3. **Inteligência Computacional:**

A Inteligência Computacional (IC) é um conjunto de técnicas que procuram gerar Máquinas Inteligentes através do modelamento do comportamento e os seus mecanismos, inerentes aos organismos inteligentes. A IC tenta resolver problemas em várias áreas de pesquisa, para isso utiliza vários métodos tais como: Redes Neurais Artificiais (ANN-Artificial Neural Networks), Teoria Nebulosa (Lógica Fuzzy) e Computação Evolutiva (Algoritmos Genéticos).

3.2.2.3.1. **Redes Neurais:**

As ANN são algoritmos que imitam Redes neurais biológicas, com o objetivo de desenvolver sistemas capazes de lidar com problemas abstratos ou pouco definidos, simulando o comportamento humano, isto é, aprendendo, errando e fazendo descobertas. Assim não existem procedimentos ou regras, apenas a relação entre entradas e saídas.

As redes neurais decompõem informação complexa em elementos básicos processados de forma paralela e não seqüencialmente como outros algoritmos. Assim, do ponto de vista estrutural, uma rede neural pode ser vista como sistema composto de vários elementos de processamento simples operando em paralelo, cuja função é determinada pela estrutura da rede, as conexões (pesos sinápticos), e o processamento realizado nos elementos computacionais ou nós.[95]

As ANNs têm sido aplicadas a um grande número de problemas de uma complexidade considerável. Talvez a vantagem mais importante das ANN seja sua capacidade de resolver problemas que são demasiados complexos para as tecnologias convencionais, como por exemplo, problemas que não têm um algoritmo para sua solução ou cujo algoritmo é muito complexo para ser encontrado. Em geral as redes neurais, devido à sua inspiração nas redes biológicas, são excelentes alternativas para resolver problemas que as pessoas também conseguem resolver e os computadores não, entre esses problemas encontramos o reconhecimento de padrões e a predição [96, 95].

As redes neurais são compostas por uma parte estrutural e uma funcional. A parte estrutural, ou arquitetura, define a estrutura da rede, isto é, o número de neurônios na rede e a sua interconectividade. As ANNs podem ter vários tipos de arquiteturas formadas por camadas que por sua vez estão formadas por nós ou neurônios. Tipicamente as redes neurais consistem de vários neurônios interconectados, com entradas, pesos sinápticos, ativação, saídas e polarização. Do ponto de vista da arquitetura as ANN podem ser de alimentação para frente (feedforward) ou recorrentes. Nas redes feedforward, a informação se desloca em um único sentido, isto é, da entrada para saída através das camadas. Nas redes recorrentes, não existe um sentido para o deslocamento da informação, podendo ter ainda processos de realimentação. Não existem regras para a escolha do número de camadas ou nós numa rede neural, isso geralmente depende da experiência do projetista, embora existam alguns poucos critérios.

A parte funcional ou neurodinâmica das redes neurais define suas propriedades, isto é, como a rede neural aprende, rechaça, associa, compara nova

informação com o conhecimento existente, como classifica nova informação e como desenvolve novas classificações, se necessário.

O processo de aprendizado de uma rede neural requer treinamento. Assim o treinamento de uma rede neural pode ser: supervisionado ou não supervisionado. O treinamento supervisionado precisa de um conjunto de dados de treinamento formado por pares de vetores de entrada e de saída. O treinamento não supervisionado, não precisa dos vetores de saída, somente dos vetores de entrada. Para o treinamento de uma rede neural existem vários tipos de algoritmos assim como o algoritmo de Back-Propagation ou retropropagação, a contrapropagação (counterpropagation), o aprendizado competitivo, utilizado nas redes de Kohonen e os algoritmos genéticos [97,98,99].

Dentro dos tipos mais conhecidos de ANN podemos mencionar: Perceptrons geralmente usada no reconhecimento de caracteres porém limitada a padrões simples. A Multi Layer Perceptron com o algoritmo de retro-propagação (Backpropagation) é o tipo de rede mais popular pela sua simplicidade e eficiência, no entanto precisa de um treinamento supervisionado para o qual exige dados de treino e teste, além de precisar de um longo período de tempo para o treinamento. A rede tipo “Counterpropagation” é geralmente utilizada no reconhecimento de padrões sendo uma rede de rápido treinamento, mas de topologia complexa o que dificulta sua implementação. As redes Hopfield por outro lado, são utilizadas entre outras coisas para recuperação de dados como fragmentos de imagens e não precisam de treinamento já que possuem pesos preestabelecidos. As redes Kohonen são também muito utilizadas no agrupamento de dados para o reconhecimento de padrões, em geral este tipo de rede não precisa de dados de treino, já que é uma rede auto-organizável.

A continuação apresentaremos alguns tipos de redes neurais importantes.

3.2.2.3.1.1. Multi Layer Perceptron

Este tipo de rede (feedforward) possui vários níveis de camadas de neurônios, com uma camada de entrada, uma ou mais camadas escondidas com funções sigmóides e uma camada de saída com funções lineares. As camadas múltiplas de neurônios com funções de transferência não lineares permitem que a rede aprenda a estabelecer relações não lineares e lineares entre os vetores de entrada e saída. A camada de saída linear induz a rede a produzir valores na faixa de -1 a $+1$. Para saídas da rede entre 0 e 1, a função mais adequada na camada de saída será a função sigmóide [100]. Esta função, por ser derivável em todos os pontos, é muito utilizada como função de ativação no algoritmo de retropropagação devido à necessidade do cálculo do gradiente do vetor de erro. Um diagrama esquemático desta rede é mostrada na Figura 19.

Figura 19: Arquitetura de uma rede Multi layer perceptron.

O algoritmo de retropropagação é um dos mais conhecidos para o treinamento supervisionado sendo amplamente utilizado como algoritmo de treinamento em redes neurais “feed-forward”. Também este algoritmo pode ser considerado como uma generalização da regra delta para redes “feed-forward” com mais de duas camadas.

O algoritmo de retropropagação tem como objetivo principal o cálculo dos pesos sinápticos das camadas escondidas restrito a um valor predefinido do erro na saída, este algoritmo pode ser descrito da seguinte forma:

1. Alimenta-se à rede com um vetor correspondente às amostras de entrada, neste estágio os pesos sinápticos da rede são inicializados aleatoriamente com valores pequenos.
2. Obtém-se a saída correspondente.
3. Calcula-se o vetor de erro que consiste na diferença entre a saída obtida e a saída esperada.
4. Calcula-se o gradiente do vetor de erro e atualiza-se, utilizando a regra delta, os pesos da camada de saída.
5. Propaga-se para trás os valores desejados para poder atualizar os pesos das demais camadas, até a camada de entrada.
6. Uma vez atualizados todos os pesos sinápticos, se repete os passos anteriores alimentando a rede com uma nova amostra de entradas[101].

A desvantagem mais significativa do algoritmo de retropropagação está relacionada com seu longo tempo de treinamento, razão pela qual esta rede não é universalmente utilizada. Os problemas com o treinamento têm sua origem em duas fontes, a primeira está relacionada ao ajuste dos pesos sinápticos em valores muito elevados originando um estancamento da rede; devido a que valores altos nos pesos sinápticos provocarão valores altos nas entradas dos neurônios, na(s) camada(s) escondida(s) e de saída. A saídas com uma função sigmóide podem apresentar valores de ativação muito próximos a zero ou a um, o que por sua vez originará que o ajuste dos pesos esteja muito próximo de zero, o que virtualmente estancará a rede. O outro problema é a existência de mínimos locais nos quais a rede pode ser capturada evitando a obtenção do mínimo absoluto. Isto algumas vezes é superado aumentando o número de neurônios na camada escondida, no entanto este aumento tem um limite

ainda não bem definido já que, uma vez superado este limite a rede pode novamente cair num mínimo local [102, 103, 104].

Figura 20: Esquema de uma rede feedforward.

3.2.2.3.1.2. Redes de Kohonen

Este tipo de rede possui apenas duas camadas, um treinamento não supervisionado, e uma aprendizagem competitiva, assim estas redes podem ter somente um neurônio ativo a cada momento. Na fase de treinamento os neurônios da camada de saída competem entre si para estar na condição ativa em resposta a um conjunto de treinamento. Assim a cada entrada são modificados os pesos sinápticos de acordo com as entradas, isto é, cada neurônio na camada de saída se especializa numa área diferente do espaço de entradas e suas saídas podem ser utilizadas para representar a estrutura do espaço de entradas.

A competição pode ser de dois tipos, uma “competição dura”, onde só um neurônio consegue ficar ativo ou uma “competição branda”, onde o vencedor compartilha com seus vizinhos uma pequena percentagem desta ativação.

Esse aprendizado, em resumo, são as modificações sucessivas nos pesos dos neurônios de forma que estes classifiquem as entradas apresentadas. Dizemos que a rede neural "aprendeu" quando ela passa a reconhecer todas as entradas apresentadas durante a fase de treinamento.

Uma vez treinada a rede, existirá pelo menos um neurônio que represente uma determinada informação (um estímulo apresentado na entrada). Sempre que este estímulo for apresentado a esta rede neural, aquele neurônio que foi treinado para

representá-lo, automaticamente irá ser disparado, informando assim, qual o estímulo que foi apresentado para a rede neural.

Lembramos ainda que, uma forte característica das redes neurais é a capacidade de reconhecer variações dos estímulos treinados. Isto significa, por exemplo, que apresentando um estímulo X qualquer, semelhante a um estímulo Y que fez parte do conjunto de treinamento, existe uma grande probabilidade de que o estímulo X seja reconhecido como o estímulo Y treinado, revelando assim a capacidade de generalização da rede neural artificial.[101].

3.2.2.3.2. Algoritmos Genéticos (AG)

Algoritmos Genéticos são modelos estocásticos e probabilísticos de busca e otimização, inspirados no princípio Darwiniano de seleção natural e reprodução genética.

Os algoritmos computacionais imitam princípios tais como o princípio de seleção que privilegia os indivíduos mais aptos com maior longevidade e, portanto, com maior probabilidade de reprodução. Os indivíduos com mais descendentes têm mais chances de transmitir seus códigos genéticos às próximas gerações.

Os algoritmos genéticos podem gerar uma série de possíveis soluções, aleatoriamente, dando um valor maior (peso) às melhores soluções para, em seguida, originar novas gerações. Nos AG, a melhor hipótese é aquela que otimiza seu ajuste aos valores esperados. Para tal fim é definida uma função de avaliação que servirá como uma métrica de ajuste.

Algoritmos Genéticos (AG) e Programação Genética (PG) são as duas principais frentes de pesquisa em computação evolutiva [105, 106].

Técnicas baseadas em heurísticas como Algoritmos Genéticos não podem garantir a solução ótima, porém conseguem soluções próximas, ou aceitáveis (sub-ótimas). Além disso, Algoritmos Genéticos são mais facilmente aplicados em

problemas complexos onde estão envolvidas muitas variáveis e restrições ou com grandes espaços de busca.

Os AGs possuem uma larga aplicação em diferentes áreas científicas, entre as quais podem ser citados problemas de otimização de soluções, aprendizado de máquinas, desenvolvimento de estratégias e fórmulas matemáticas, análise de modelos econômicos, problemas de engenharia, diversas aplicações na Biologia como simulação em populações de bactérias, sistemas imunológicos, ecossistemas, descoberta de formato e propriedades de moléculas orgânicas [105].

O AG padrão pode se expressar em pseudocódigo através do seguinte ciclo:

1. Gerar aleatoriamente a população inicial dos indivíduos $P(0)$.
2. Enquanto (número _ gerações $\leq$ máximo _ número _ gerações)

Fazer:

```
{
  Avaliação;
  Seleção;
  Reprodução;
  Geração ++;
}
```

3. Mostrar resultados

4. Fim da geração

No algoritmo, Avaliação define o critério para ordenar as hipóteses que potencialmente podem passar a formar parte da seguinte geração. A seleção das hipóteses que formarão parte da seguinte geração ou que serão utilizadas na aplicação dos operadores genéticos, podem realizar-se de várias formas.

Os cruzamentos mais conhecidos são o cruzamento simples e o cruzamento uniforme. No cruzamento simples define-se n pontos de cruzamento onde na primeira faixa do cruzamento são considerados os valores do primeiro pai e na

seguinte os valores do segundo pai continuando assim sucessivamente com os outros pontos do cruzamento. O cruzamento uniforme é um caso especial do cruzamento simples, já que neste caso os pontos de cruzamento são realizados em cada ponto do arranjo dos parentes (pais). Neste caso por exemplo a escolha do primeiro valor no arranjo do filho é decidida pela probabilidade do lançamento da moeda ser cara ou coroa, se a moeda dar como resultado cara o primeiro valor é tomado do primeiro pai caso contrário do segundo pai, segue-se este procedimento até completar todo o arranjo de valores. Uma vez gerado o arranjo dos filhos pelo método de cruzamento, agora se aplica o processo de mutação que consiste em inverter os valores de cada ponto do arranjo ($0 \rightarrow 1$ ou $1 \rightarrow 0$) sujeito a uma probabilidade “p” de que isto aconteça. O processo de mutação evitará efeitos de perda de características transmitidas pelos pais.

4. PROCEDIMENTO EXPERIMENTAL

A proposta deste trabalho é usar técnicas de processamento de sinais para o reconhecimento de padrões que permitam identificar as substâncias químicas a partir de atributos específicos.

Este capítulo se dedica à descrição de todas as montagens experimentais e procedimentos utilizados nos ensaios, de onde foram obtidos os sinais para posterior análise. Os experimentos permitiram a aquisição de vários tipos de sinais como AC, DC e ruído, usando diferentes câmaras de ensaio, sensores e vários gases.

Este capítulo está dividido em duas partes, a primeira (seção 4.1) se dedica à medição de valores AC e DC em sinais provenientes de sensores de óxido de estanho (SnO_2) quando se injeta amostras de gases combustíveis. A segunda parte (seção 4.2) está dedicada aos experimentos feitos para a aquisição e caracterização de ruído, em sinais que foram gerados como respostas, provenientes de sensores de Óxido de estanho (SnO_2), à injeção de amostras gasosas no ambiente experimental montado. Nesta seção foram feitos dois tipos de experimentos; um para discriminar entre amostras de álcool combustível com diferentes teores alcoólicos e outro para discriminar vários tipos de substâncias alcoólicas. Estas discriminações estão baseadas na análise do ruído adquirido.

4.1. Medidas AC e DC em amostras de gases combustíveis.

4.1.1. Medidas dinâmicas com fluxo de gás combustível contínuo.

4.1.1.1. Descrição do Experimento

Este experimento foi montado num projeto de formatura [107] desenvolvido como parte de uma verificação específica para determinar o poder calorífico de um gás. Nesta experiência foi testada uma metodologia de medição em forma dinâmica, isto é, sensores de óxido de estanho foram submetidos a um fluxo contínuo de gás que atravessa a câmara com os sensores.

Neste experimento usou-se uma montagem experimental baseada em rotâmetros como se mostra na Figura 21. Os rotâmetros foram usados para o controle do fluxo tanto do gás combustível quanto do nitrogênio (N_2). Assim, mediante uma combinação do nível dos rotâmetros foi possível obter misturas de gás combustível com N_2 , possibilitando a injeção na câmara de gás combustível com diferentes graus de diluição, com a finalidade de verificar se os sensores eram sensíveis a mudanças da concentração do gás. A aquisição de dados foi feita com base em um computador PXI da National Instrument, projetado para trabalho em campo e com uma taxa de aquisição de 1,2 milhões de amostras por segundo através de uma placa de aquisição de sinais no computador conectada à câmara de ensaios através de um conector DB9.

Foram utilizados um conjunto de oito sensores sendo seis sensores de gás, um de temperatura e um de umidade. Os sensores de gás usados foram os seguintes:

Sensor 1 (S1)= TGS2442 Sensibilidade: Monóxido de Carbono

Sensor 2(S2)= TGS2600 Sensibilidade: Etanol, Metanol, Butano, Propano

Sensor 3(S3)= TGS2602 Sensibilidade: Etanol, Tolueno, Amónia

Sensor 4(S4)= TGS2610 Sensibilidade: Propano, Butano

Sensor 5(S5)=TGS2611 Sensibilidade: Metano

Sensor 6(S6)= Tipo: TGS2622 Sensibilidade: Etanol, Tolueno, Xileno, Solventes Orgânicos

Figura 21: O diagrama de posicionamento dos rotômetros.

Além disso foram utilizadas 3 fontes de alimentação. Para alimentar o sensor de temperatura, os aquecedores dos sensores de gás e a fonte de corrente usada para polarizar os sensores.

Neste grupo de medidas dinâmicas foram feitos dois procedimentos de medidas.

4.1.1.2. Procedimento experimental 1.

Neste procedimento foram utilizadas medidas em estado estacionário dos diferentes sensores, isto é, o estado inicial de resposta dos sensores foi obtido com um fluxo contínuo de gás de N₂ puro, posteriormente foi aplicada uma mistura do gás combustível + N₂ numa concentração inicial do gás medindo-se a resposta dos sensores após elas atingirem seu estado estacionário (Figura 31). Posteriormente para realizar novas medidas a câmara foi limpa apenas utilizando o fluxo de N₂. Após a resposta dos sensores atingirem sua condição inicial, foi injetada a nova mistura do gás combustível (mantendo a mesma concentração) para obter outra medição.

O procedimento experimental é o seguinte:

1. Se liga o equipamento PXI, para aquisição de sinais.
2. Se roda o aplicativo para aquisição de sinais (Figura 23).
3. Para efetuar a limpeza da câmara (Figura 22), se deixa passar um fluxo de N₂ de aproximadamente 1000sccm. Para isso, se abre o rotâmetro R2.
4. No PXI se observa uma mudança na resposta dos sensores. Espere os mesmos se estabilizarem (considera-se que os sensores estão estabilizados, quando a variação das resistências dos mesmos não ultrapasse a porcentagem de 0.05% da variação medida entre os 15 pontos sucessivos (para uma amostragem de 0.5s, equivale a um tempo de 7.5s) para iniciar as medidas).
5. No PXI escolha um nome de arquivo em formato texto no padrão: <data>_<fluxo>sccmGAS_<fluxo>sccmN2_T<temperatura>_UR<umidade relativa>_med<número da medida>.txt. Por exemplo, para uma medição de uma amostra feita no dia 08 de agosto de 2003, segundo 200sccm de gás, 1000sccm de nitrogênio por um tempo de 10s, volume de injeção de 1ml, temperatura de 20°C, Umidade Relativa de 14%, e número da medida 15, o nome do arquivo

recomendado para a próxima medição será:

8-08-03_200sccmGAS_1000sccmN2_T20_UR14_med16.txt.

6. Clique em gravar, e abrir R7 deixando passar o gás combustível.
7. Uma vez que a resposta dos sensores estabilizar clique em Parar.

Para efetuar uma nova leitura, basta fechar R7, esperar estabilizar e repetir os passos 5 a 7.

Após terminar as medições, desligar os registros do gás e do Nitrogênio. Além disso, desligue a fonte de alimentação. Porém a fonte que alimenta os sensores de gás, não deve ser desligada.

4.1.1.3. Procedimento experimental 2.

Com o objetivo de fazer um maior número de medições num tempo menor foram testadas medidas escalonadas, isto é, se injeta mistura de gás combustível + N₂ após certos períodos de tempo, é dizer que neste caso não foi esperado que os sensores atingissem seus estados estacionários iniciais para fazer uma nova medida. Um exemplo da forma como as medidas escalonadas foram adquiridas é mostrada na Figura 32.

O procedimento experimental é o seguinte:

1. Se ligar o equipamento PXI, para aquisição de sinais.
2. Se roda o aplicativo para aquisição de sinais (Figura 23).
3. Para efetuar a limpeza da câmara (Figura 22), se deixa passar um fluxo de N₂ de aproximadamente 1000sccm. Para isso, se abre o rotâmetro R2.
4. No PXI se observa uma mudança na resposta dos sensores. Espere os mesmos se estabilizarem (considera-se que os sensores estão estabilizados, quando a variação das resistências dos mesmos não

ultrapasse a porcentagem de 0.05% da variação medida entre os 15 pontos sucessivos (para uma amostragem de 0.5s, equivale a um tempo de 7.5s) para iniciar as medidas).

5. No PXI escolha um nome de arquivo em formato texto no padrão: <data>_<fluxo>sccmGAS_<fluxo>sccmN2_T<temperatura>_UR<umidade relativa>_med<número da medida>Escal.txt. Da mesma forma como foi descrita no procedimento anterior.
6. Clique em gravar, e abrir R7 deixando passar o gás combustível.
7. Uma vez que a resposta dos sensores estabilizar clique em Parar.

Para efetuar uma nova leitura, se espera a estabilizar e se repetem os passos 5

a 7.

Figura 22: Câmara de medidas.

Figura 23: Painel frontal do software de aquisição de sinais.

4.1.2. Medidas estáticas com injeção de gás combustível.

Figura 24: diagrama de blocos da formas de sinal adquiridas.

4.1.2.1. Descrição do Experimento

Neste experimento seis sensores de óxido estanho da série TGS 2000 do fabricante Taguchi foram colocados dentro de uma câmara de aproximadamente 250ml conforme o diagrama mostrado na Figura 25. Os sensores foram polarizados com uma corrente de 200 microampéres provenientes de um circuito de polarização desenvolvido no laboratório que consta de 6 fontes independentes e ajustáveis de corrente constante. Para o circuito de polarização dos sensores foram utilizados resistores com valores de resistências entre 2 e 20 Kohms, consideradas apropriadas para uma aquisição de sinal dentro da faixa permitida pelo sistema de aquisição de sinais.

Figura 25: Câmara de medidas.

Duas fontes de tensão foram utilizadas para alimentar o circuito de polarização. A primeira delas foi de 12Vcc e a segunda, que foi utilizada para polarizar os aquecedores dos sensores, foi de 5Vcc. O sistema também consta de um sensor de temperatura e um sensor de umidade que são polarizados com a fonte de 5Vcc.

A amostra do gás foi colocada na câmara utilizando-se uma seringa hipodérmica para injetar a amostra de gás a ser analisado através de uma tampa de borracha colocada na câmara. O sistema de aquisição foi montado com base ao sistema usado na experiência anterior, isto é, em um computador PXI, através de uma placa de aquisição de sinais no computador conectada à câmara de ensaios através de um conector DB9. Para preparar a câmara para novas medidas se usou uma bomba de sucção de ar.

Foram desenvolvidos vários softwares para realizar o processo de aquisição de sinais. Usando o software LabView foi desenvolvida uma interface VI chamada “medidas” (Figura 26) encarregada de gerenciar os controladores do sistema enquanto à quantidade de fluxo de gás em sccm (scc=standart cubic centimeter per minute; 1000sccm = 1litro/min), e o tempo durante o qual este fluxo deve entrar na bexiga para a mistura. Usando Visual Basic foi desenvolvido o software de coleta de dados (Figura 23), isto é, salva os sinais fornecidos pelos sensores óxido de estanho, assim como a temperatura e a umidade relativa dentro da câmara.

a)

b)

Figura 26: Painel frontal do VI que: a) controla o fluxo de gás e b) controla a proporção de uma mistura gasosa.

Figura 27: Representação esquemática do sistema utilizado para a injeção de gás na câmara com sensores.

4.1.2.2. Procedimento experimental

4.1.2.2.1. Procedimento para a preparação de uma amostra de gás

A preparação das amostras de gás a serem injetadas na câmara com sensores foi realizada através do seguinte procedimento:

1. Ligar a fonte de tensão para alimentar o controlador de fluxo (MKS186A) de gás, logo esperar durante 5 minutos para o controlador aquecer até atingir uma condição operacional normal de modo a ter garantias de fornecer a precisão necessária.
2. Abrir a VI “medidas” (Figura 26). Se o programa começar enviando uma mensagem de erro, seguir o procedimento sugerido na mesma mensagem.
3. Acionar a chave de controle de fluxo do gás nitrogênio e só depois em sequência abrir o fluxo de gás GLP.

Na condição normal de um ensaio típico previsto, foi estabelecido que a VI “medidas” controle um fluxo padrão de 1000sccm de nitrogênio e uma faixa de fluxo de GLP de 10 a 500sccm. A mistura assim obtida encherá uma bexiga de onde será extraída uma amostra da mistura utilizando-se uma seringa, espetando-a no tubo de borracha.

Figura 28: Painel frontal do VI utilizada para o controle da mistura de gás com nitrogênio.

A mistura que se encontra na bexiga pode ser utilizada para fazer até 3 medidas no máximo, depois a bexiga tem que ser esvaziada e uma nova mistura deve ser preparada executando novamente o aplicativo VI “medidas”. Para medir a resposta das resistências dos sensores ao gás puro, somente se fixa no campo nitrogênio o valor de 0sccm. Para medir as respostas das resistências dos sensores quando expostos ao gás nitrogênio puro, fixar 0sccm no campo Gás.

4.1.2.2.2. Procedimento para as medições

O procedimento a ser aplicado para as medições é o seguinte:

1. Ligar o equipamento PXI,
2. Efetuar a limpeza da câmara. Para isso, liga-se a bomba de sucção de ar que irá extrair o ar dentro da câmara. Observe no PXI a resposta dos sensores. Espere os mesmos se estabilizarem (considera-se que os sensores estão estabilizados, quando a variação das resistências dos

mesmos não ultrapasse a porcentagem de 0.05% da variação medida entre os 15 pontos sucessivos (para uma amostragem de 0.5s, equivale a um tempo de 7.5s) para iniciar as medidas).

3. Desligue a bomba de vácuo. Espere os sensores se estabilizarem novamente, observando suas respostas no PXI.
4. Extrair uma amostra de gás combustível, seguindo o “Procedimento para preparação de amostra de gás”, descrito anteriormente. Espetar a seringa na mangueira de borracha, e extrair a amostra do gás (recomenda-se retirar um volume de 1ml). Pare a execução na VI “medidas”, clicando em “STOP”.
5. No PXI escolha um nome de arquivo em formato texto no padrão: `<data>_<fluxo>sccmGAS_<fluxo>sccmN2<tempo>s_<volume>ml-injetado_T<temperatura>_UR<umidade relativa>_med<número da medida>.txt`. Por exemplo, para uma medição de uma amostra feita no dia 08 de agosto de 2003, segundo 200sccm de gás, 1000sccm de nitrogênio por um tempo de 10s, volume de injeção de 1ml, temperatura de 20°C, Umidade Relativa de 14%, e número da medida 15, o nome do arquivo recomendado para a próxima medição será: `08-08-03_200sccmGAS_1000sccmN2_10s_1ml-injetado_T20_UR14_med16.txt`.
6. Clique em gravar, e insira o gás da seringa na câmara com os sensores. Espere estabilizar a resposta dos mesmos observando o PXI, e clique em Parar.
7. Para efetuar uma nova leitura, repita os passos de 2 a 6.

Após terminar as medições, assegure-se de desligar os registros do gás e do Nitrogênio. Além disso, desligue a fonte de alimentação do controlador de fluxo (MKS186A). Porém NÃO DESLIGUE a fonte que alimenta os sensores de gás.

4.2. Medidas de ruído

Ruído, na conceituação geral, implica um fenômeno aleatório ou é simplesmente um fenômeno indesejável. Na grande maioria dos casos as fontes de ruído são aleatórias e apesar disso, repetitivas num determinado período de tempo e caracterizadas por um valor rms [108].

Existem várias definições de ruído dependendo da área de estudo, em circuitos integrados [109], acústica [110], teoria de controle de ruído [111,112], em eletrônica e teoria da informação[108] que são aceitáveis dentro das suas respectivas áreas de influência. Neste trabalho consideramos o ruído como o efeito de vários fenômenos físicos que dependem dos mecanismos de condução elétrica e que participam no princípio de funcionamento do transdutor usado como sensor de gás. No caso desta Tese o princípio de transdução é basicamente condutivo e por esse motivo há fundamentos suficientes para considerar que o ruído possui informação do dispositivo [113] que neste caso está associado aos sensores de gás. O ruído pode ter sua origem devido a fontes internas, tais como resistores a temperaturas finitas, ou externas como, flutuações eletromagnéticas como a interferência da linha AC de 60Hz embora não seja aleatória. O ruído externo chega a ser mais importante quanto menor é o nível de potência na qual funciona o transdutor [114]. A origem exata das componentes de ruído microscópicas, devido a ambientes químicos, atualmente não é suficientemente clara. Elas podem estar associadas a flutuações da mobilidade e densidade dos portadores, devido a flutuações da concentração e movimento de moléculas químicas originadas no ambiente químico. As flutuações da resistência resultante proporcionam um sinal AC com uma ampla largura de banda de frequência a qual obviamente carrega mais informação que a resistência DC que é normalmente registrada no sensor [115]. A origem fenomenológica do ruído em sensores químicos é devido às moléculas químicas absorvidas de ambientes gasosos e que intervém na condução elétrica do dispositivo. Depois que o sensor entra em equilíbrio com o ambiente, tanto as moléculas capturadas quanto aquelas livres produzem um processo estocástico estacionário bem determinado.

O estudo do ruído pode ser usado também para avaliar as características próprias do comportamento do sensor como, por exemplo o fenômeno de adsorção e desorção usando a Variância Allan e uma microbalança de quartzo [116]

Existem quatro classificações de fontes de ruído em semicondutores: térmica (Johnson), disparo (shot noise), geração-recombinação (r-g), e o ruído flicker ($1/f$). Os três primeiros são bem entendidos enquanto a origem do quarto com respeito a semicondutores ainda não tem sido completamente explicada.

O ruído térmico é uma fonte de ruído branco cuja origem está baseada nas leis físicas fundamentais da termodinâmica. O ruído térmico é causado pelo movimento aleatório dos portadores de carga os quais produzem uma flutuação da força eletromotriz nos terminais de saída. Está presente em todos os componentes resistivos [114].

O ruído de disparo é devido à descontinuidade da carga dos portadores e está relacionado à natureza estatística de sua injeção no semicondutor sobre uma barreira Schottky. A origem da densidade espectral pode ser encontrada considerando o teorema de Carson [114].

O ruído de combinação-recombinação pode ser entendido considerando um semicondutor com um número de sítios onde há captura de portadores de cargas. A contínua captura e não captura dos portadores de carga causam uma flutuação aleatória no número de portadores nas bandas de condução e valência, e na resistência. O ruído r-g é um ruído intermitente [114].

A baixas frequências, um excesso na densidade de portadores de carga elétrica, com uma dependência da amplitude de $1/f$ é observado em semicondutores, o qual é conhecido como ruído de modulação ou “Flicker noise”. Este tipo de ruído tem uma densidade espectral que varia inversamente com a frequência sendo muito grande a baixas frequências. A causa exata deste ruído ainda não está suficientemente entendida [117]. Experimentos sugerindo flutuações no número de portadores de carga ou flutuações na mobilidade dos portadores ainda não são

conclusivos [114]. Na prática, o ruído gerado no transdutor usualmente não é o fator limitante na precisão da medida [118, 119].

Os experimentos incluídos nesta seção tiveram como objetivo adquirir o ruído de um sinal e, através do seu espectro, estabelecer uma base de informação suficiente para uma posterior identificação de padrões. Neste caso usamos o ruído como o sinal a ser analisado. Considerando o tipo de resposta obtido em experimentos com o nariz eletrônico, foi medido o nível de ruído antes e depois da injeção de uma amostra conhecida de álcool combustível.

4.2.1. Medidas de ruído em amostras de álcool combustível

Este tipo de medidas tem por objetivo testar a capacidade dos sensores de identificar diferentes concentrações de uma mesma substância.

4.2.1.1. Descrição do Experimento

Um sensor de óxido de estanho (TGS 824) do tipo Taguchi, foi colocado numa câmara de aproximadamente 275ml sem vedação, e polarizado com 5V DC de acordo com as recomendações dadas pelo fabricante. O sensor foi submetido, por 2 minutos, à ação do vapor de álcool combustível (0,5 ml.), injetado na câmara, por uma seringa hipodérmica de 1 ml.

Para o experimento se dispôs de duas amostras de álcool combustível, uma com álcool com 94.6 graus de teor alcoólico e outra com álcool com 92.3 graus de teor alcoólico. Ambas substâncias foram comparadas entre si e em relação ao ar do laboratório. Para ter garantias dos teores alcoólicos das amostras, estas foram proporcionadas pelo Instituto de Pesquisas Tecnológicas - IPT como amostras certificadas de álcool.

considerado o nível característico da substância injetada assim como da sua quantidade. Uma vez o novo nível é ajustado à tela do osciloscópio, a nova condição é adquirida. A aquisição dos sinais é feita salvando os dados na memória do osciloscópio num arquivo com extensão *.csv, para sua posterior transferência a um computador pessoal (PC) por meio de um disquete. No PC o arquivo é importado e tratado em programas de processamento de sinal.

5. Antes de realizar uma nova medida se abre a câmara de ensaios completamente, com a finalidade de fazer a limpeza da câmara. Esta condição é mantida durante aproximadamente 2 minutos.

Este experimento foi repetido cinquenta vezes, para cada concentração de amostra.

4.2.2. Medidas de ruído em amostras de diferentes substâncias.

Neste experimento foram usados vários tipos de substâncias, na procura da melhor forma de identificar padrões de gases combustíveis.

4.2.2.1. Descrição do Experimento.

Para esta análise foram usadas como substâncias representativas: álcool com 92 graus de teor alcoólico, acetona, tricloroetileno e álcool isopropílico. A montagem experimental é a mesma descrita no experimento anterior.

4.2.2.2. Procedimento experimental.

O procedimento experimental é parecido ao procedimento experimental da experiência anterior, assim:

1. O osciloscópio é ligado e calibrado de modo que o sinal ruidoso (V_{RL}) na saída do sensor (Figura 29) possa ser observado na tela do osciloscópio.

2. Se faz uma aquisição do sinal, para determinar o nível inicial do sinal elétrico, que servirá como referência na etapa de análise de dados.
3. Usando uma seringa de 1 ml, se extrai 0,5 ml de ar saturado com a amostra contida em uma garrafa, e logo em seguida ela é injetada na câmara com os sensores.
4. Uma queda no nível de tensão dos sensores é observada no osciloscópio.
5. Se espera aproximadamente 5 segundos e o osciloscópio é calibrado novamente até identificar o novo nível atingido pelo sinal o qual é considerado o nível característico da substância injetada assim como da sua quantidade. Uma vez o novo nível é ajustado à tela do osciloscópio, a nova condição é adquirida. A aquisição dos sinais é feita salvando os dados na memória do osciloscópio num arquivo com extensão *.csv, para sua posterior transferência a um computador pessoal (PC) por meio de um disquete. No PC o arquivo é importado e tratado em programas de processamento de sinal. Este experimento foi repetido cinquenta vezes, para cada amostra de substância.

Duas formas diferentes de fazer as medidas foram testadas. Na primeira delas foram feitas vinte e cinco medidas com uma substância só, uma após a outra, isto se repetiu para cada substância. A outra forma de medição foi feita de forma intercalada, isto é, primeiro foi injetada uma substância, depois outra diferente, até usar todas as substâncias disponíveis para esta experiência. Isto foi repetido até completar vinte e cinco medidas com cada substância.

5. ANÁLISE EXPERIMENTAL

No capítulo anterior foram descritos os experimentos realizados neste trabalho. Neste capítulo serão mostrados e discutidos os resultados das análises dos experimentos. Para cada experimento vários tipos de análises foram realizadas. Os experimentos foram feitos com base na formação de uma base de dados proposta.

5.1. Base de Dados

Na Figura 30 é mostrado um diagrama esquemático da proposta de uma estrutura de base de dados que pode ser utilizada no reconhecimento de substâncias através de um Nariz Eletrônico. O primeiro bloco representa a montagem experimental, o segundo bloco corresponde ao processo de aquisição de dados através de uma placa de aquisição e um osciloscópio dependendo do tipo de experimento como mostrado no capítulo anterior. Uma vez realizada a aquisição de dados, estes deverão ser armazenados numa base de dados primária, encarregada de guardar os dados crus e dados pré-processados. Os dados crus passam por uma seleção, separando os dados inconsistentes e mal adquiridos, posteriormente estes passam por algum tipo de transformação como, por exemplo, padronização segundo a informação contida neles. Esta informação também é armazenada na base de dados primária acompanhada de metadados.

Os dados pré-processados passam para o processamento de sinais que adaptará os dados para um reconhecimento de padrões. Uma vez concluída a etapa de reconhecimento de padrões, os dados são armazenados numa base de dados secundária para uma posterior interpretação e análise dos resultados por parte dos usuários da base de dados.

Figura 30: Estrutura de Base de dados preposta.

5.2. Análise AC e DC em amostras de gases combustíveis.

5.2.1. Análise de medidas dinâmicas com fluxo de gás contínuo.

5.2.1.1. Resultados e discussão.

A melhor resposta dos sensores foi obtida para a condição do rotâmetro R7 (indicado na Figura 21) com alturas de 0 e 8 que correspondem a 0 ppm e 5,15 ppm de gás atravessando a câmara de ensaios, respectivamente. Mantendo os valores de $R_5=100$, $R_3=72$ e $R_2=100$ fixos.

Figura 31: Exemplo de uma medida de estado estacionário da resposta dos sensores. O estado inicial (valor elevado da resposta) corresponde a injeção de fluxo só de N_2 , o estado final (valor baixo da resposta) corresponde ao fluxo da mistura gás combustível + N_2 .

A Tabela 2 mostra os resultados experimentais da resposta dos sensores usando o procedimento de medida 1 (secção 4.1.1.2). Onde medida 1 representa um grupo de medidas adquiridas num dia, medida 2 representa o outro grupo de medidas adquiridas num outro dia, e assim sucessivamente. Esta metodologia foi adotada porque foi observado que as medidas feitas num mesmo dia mantinham

comportamentos similares, à diferença do que acontece com medidas adquiridas em diferentes dias. Levando tudo isto em conta, podemos considerar estas medidas (medida 1, medida 2....) como aglomerados representativos de um grupo de medidas.

Tabela 2: Resposta dos sensores na condição de resposta de estado estacionário. mostra os resultados experimentais da resposta dos sensores utilizando o procedimento de medida 1 (vide texto acima). Razão é definida como resposta inicial/reposta final.

	R7	Sensor 1	sensor 2	sensor 3	sensor 4	Sensor 5	sensor 6
medida 1	0	0.79346	28.80859	2.53906	48.7793	32.49512	45.44678
	8	0.79346	5.09033	1.89209	3.72315	13.0127	7.97119
	Razão	1.00000	5.659474	1.341934	13.10162	2.497185	5.70138
medida 2	0	0.78125	45.28809	3.44238	48.04688	30.22461	49.98779
	8	0.79346	7.62939	2.57568	19.2627	16.19873	12.59766
	Razão	0.984612	5.936004	1.336494	2.494296	1.865863	3.968022
medida 3	0	0.78125	49.98779	3.35693	49.98779	31.33545	49.98779
	8	0.78125	8.72803	2.58789	19.28711	16.76025	14.36768
	Razão	1.00000	5.727271	1.297169	2.591772	1.869629	3.479183
medida 4	0	0.78125	46.92383	3.25928	49.98779	34.82666	49.98779
	8	0.80566	13.08594	2.73438	31.99463	22.5708	22.09473
	Razão	0.969702	3.58582	1.191963	1.562381	1.542996	2.26243

Usando o procedimento experimental 2 (secção 4.1.1.3) obtiveram-se resultados da resposta dos sensores, mostrados na Tabela 3.

Figura 32: Exemplo de uma “medida escalonada”

Tabela 3: Primeiro grupo de Medidas escalonadas.

	R7	sensor 1	sensor 2	Sensor 3	sensor 4	sensor 5	sensor 6
medida 1	início em 0	0.79346	42.02881	1.94092000	49.98779	27.23389	49.98779
	Final em 8	0.78125	7.25098	1.66016	4.99268	13.68408	12.23145
	Razão	1.015629	5.7962937	1.1691162	10.01222	1.990188	4.086825
medida 2	início em 0	0.97656	49.98779	2.53906	49.98779	37.3169	49.98779
	Final em 8	0.80566	6.90918	1.80664	21.83838	14.84375	10.05859
	Razão	1.212124	7.2349816	1.4054045	2.288988	2.513981	4.969662
medida 3	início em 0	0.88477	49.98779	2.92969	49.98779	42.28516	49.98779
	Final em 8	0.80566	7.32422	1.81885	12.01172	14.4165	9.24072
	Razão	1.098193	6.8249984	1.6107376	4.161585	2.933109	5.409512
medida 4	início em 0	0.76904	24.57275	4.6264600	3.03955	33.05664	49.98779
	Final em 8	0.79346	6.01807	2.97852	6.05469	16.16211	13.11035
	Razão	0.969223	4.0831612	1.5532748	0.502016	2.045317	3.812849
medida 5	início em 0	0.75684	48.69385	2.02637	45.58105	18.32275	49.98779
	Final em 8	0.78125	7.727051	1.77002	15.34424	11.41357	12.34131
	Razão	0.968755	6.3017379	1.1448289	2.970565	1.605347	4.050445

Em posteriores medidas foram colocadas diluições menores do gás com nitrogênio. Assim se obteve a seguinte tabela:

Tabela 4: Segundo grupo de Medidas escalonadas.

	R7	sensor 1	sensor 2	sensor 3	sensor 4	sensor 5	sensor 6
Medida 1	início em 0	0.817871	49.98779	2.075195	49.98779	28.16162	49.98779
	final em 8	0.805664	7.910156	1.818848	16.60156	12.52441	11.41357
	Razão	1.015151	6.319445	1.140939	3.011029	2.248538	4.379679
Medida 2	início em 0	0.78125	47.69287	2.429199	40.52734	14.5874	49.98779
	final em 8	0.793457	5.822754	2.160645	8.776855	8.569336	9.130859
	Razão	0.984615	8.190776	1.124293	4.617525	1.702279	5.474599
Medida 3	início em 0	0.756836	48.69385	2.026367	45.58106	18.32275	49.98779
	final em 8	0.78125	7.727051	1.77002	15.34424	11.41357	12.34131
	Razão	0.96875	6.301738	1.144827	2.970565	1.605348	4.050445

5.2.1.1.1. Identificação de concentração de gás.

Para comparar medidas com diferentes concentrações e tentar discriminá-las se usaram as tabelas das medidas escalonadas (Tabela 3, Tabela 4). A Tabela 4 foi truncada a só três grupos de medidas antes de fazer a comparação. Para a análise se usou PCA. Assim, antes deste processo os dados foram padronizados, dividindo cada coluna por seu desvio padrão.

Foram geradas as Tabelas 5 e 6 que, contém os seis componentes principais referentes aos seis sensores usados na análise. Estas tabelas são combinações lineares das variáveis originais que geram novas variáveis. Cada coluna representa uma componente principal.

Tabela 5: Componentes principais obtidas com os dados da Tabela 3.

0.3542	-0.6152	0.5980	0.3454	0.1316	0.0437
0.4238	-0.3167	0.7438	-0.3541	-0.1145	-0.1684
0.4027	0.4354	0.2973	0.1205	-0.5533	-0.4890
-0.4297	0.2725	0.0255	0.8569	0.0442	0.0654
0.4072	0.4138	-0.0029	0.0458	0.7921	-0.1830
0.4270	0.2935	-0.0099	0.0671	-0.1845	0.8324

Tabela 6: Componentes principais obtidas a partir dos dados da Tabela 4.

-0.1115	-0.7060	0.4899	0.2330	-0.3986	-0.1894
0.4934	-0.0400	0.2429	-0.2573	0.4051	-0.6824
-0.4815	0.1626	0.3280	0.5222	0.5952	-0.0844
0.4929	-0.0497	-0.4011	0.7623	-0.0496	-0.1004
-0.2062	-0.6586	-0.5391	-0.1601	0.4546	0.0280
0.4762	-0.1931	0.3766	-0.0092	0.3369	0.6932

Este procedimento também determina a criação de um novo sistema de coordenadas, definido pelas componentes principais. Levando isto em consideração foram calculadas as variâncias para cada componente principal. Esta variância pode ser apreciada melhor através do gráfico proposto por Cattell (por ex Figura 33) para determinar graficamente o número ótimo de componentes que podemos usar.

Figura 33: Gráfico em porcentagem da variância das primeiras componentes principais

Neste gráfico podemos observar que as duas primeiras componentes principais contêm quase o 100% da informação. Assim pode se gerar um gráfico de duas dimensões (Figura 34) para obter uma representação melhor dos dados.

Figura 34: Gráfico das componentes principais.

Como pode se observar, embora tenham sido analisadas poucas medidas, não se aprecia diferenças entre estas, então podemos concluir que a diluição do gás feita para obter a Tabela 4 não foi suficiente como para que, os sensores mostrassem uma diferença na concentração do gás. O que mostra uma falta de sensibilidade do método.

5.2.1.1.2. Comparação entre metodologias.

Foram comparadas as razões dos sensores obtidos, utilizando a metodologia de “medidas estacionárias” e metodologia de “medidas escalonadas”, neste caso usou-se as Tabela 2 e a Tabela 3 correspondente às medidas obtidas pelo método de “medidas estacionárias” e “medidas escalonadas” respectivamente.

Na Figura 35 são mostrados os comportamentos das respostas dos sensores (Razões). Nesta figura no eixo horizontal as medidas 1, 2, 3 e 4 correspondem às medidas obtidas pelo método estacionário (Tabela 2) e as 5, 6, 7, 8 e 9 correspondem às medidas obtidas pelo método escalonado (Tabela 3). Na Figura observa-se que, a

resposta dos sensores é parecida exceto a do sensor 4, o que nos leva a concluir que não existe muita diferença entre usar uma metodologia ou outra.

Figura 35: Gráfico da resposta dos sensores (razão) em função das medidas. As medidas 1 até 4 correspondem as medidas pelo método de estado estacionário, as medidas de 5 até 9 correspondem às medidas pelo método escalonado.

5.2.2. Análise de medidas estáticas com injeção de gás combustível usando Wavelets.

Neste experimento foi utilizada a resposta transiente dos sensores, com o objetivo de identificar diferentes concentrações de gás, assim decomposições dos sinais foram feitas para obter resíduos como mostrados na Figura 36.

Figura 36: Detalhes de uma decomposição da resposta transiente do sensor. O terceiro e quarto espectros são definidos como detalhes de reconhecimento 1 e 2 respectivamente.

Estes resíduos geram espectros que foram usados para a análise. Foram considerados três sensores, cujos gráficos se mostram na Figura 37.

Figura 37: Curvas da resposta transiente dos sensores utilizados na análise.

A escolha destes sensores foi devido ao fato que eles apresentavam uma variação significativa à exposição do gás injetado, os outros sensores utilizados não

mostraram uma variação significativa pelo que não foram usados para a análise. Para o primeiro sensor temos a decomposição Wavelet mostrada na Figura 39.

Figura 38: Decomposição Wavelet da resposta do sensor 1.

Foram geradas tabelas contendo dados das alturas dos picos dos espectros. Estas alturas foram comparadas mediante PCA, com o objetivo de encontrar padrões, gráficando-se os detalhe 1 e detalhe 2 das medidas.

Tabela 7: Extração da altura dos picos do Detalhe1 para a concentração1

Detalhe1	Sensor1	Sensor2	Sensor3
med1	0.4	1.5	0.175
med2	0.33	1.15	0.04
med3	0.7	1.3	0.35

Tabela 8: Extração da altura dos picos do Detalhe2 para a concentração1

Detalhe2	Sensor1	Sensor2	Sensor3
med1	0.145	0.55	0.7
med2	0.125	0.4	0.02?
med3	0.25	0.48	0.14

Tabela 9: Extração da altura dos picos do Detalhe1 para a concentração2

Detalhe1	Sensor1	Sensor2	Sensor3
med1	0.22	0.99	0.17
med2	0.35	1.3	0.2
med3	0.42	1.8	0.3

Tabela 10: Extração da altura dos picos do Detalhe2 para a concentração2

Detalhe2	Sensor1	Sensor2	Sensor3
med1	0.079	0.37	0.075
med2	0.13	0.5	0.075
med3	0.16	0.65	0.115

Figura 39: Análise de componentes principais das componentes wavelet.

Como pode se ver no gráfico anterior, não se pode apreciar diferenças para permitir uma identificação. Para posteriores medidas foram adotadas outras metodologias na procura de melhores resultados

5.3. Análise de ruído

5.3.1. Análise de ruído em amostras de álcool combustível.

5.3.1.1. Resultados e discussão.

Um gráfico dos sinais adquiridos, no osciloscópio, se mostra na Figura 40, nela pode-se observar uma mudança no nível DC do sinal quando é injetado um gás. Assim, pode-se observar diferenças entre os níveis DC do álcool com 94,6 graus de teor alcoólico e o álcool com 92,3 graus de teor alcoólico. No entanto, estes níveis nem sempre permanecem estáveis, já que é bem sabido que fatores ambientais, como temperatura e umidade e fatores de medida, como a forma de injeção do gás, podem fazer mudar estes níveis, fazendo com que uma identificação das substâncias através destes níveis seja difícil, caso não se tenha um bom controle destes fatores. O efeito de todos estes fatores pode se perceber na diferença entre o nível DC para uma mesma substância. Para ilustrar isto na Figura 40 se apresentam três medidas de cada substância.

Na Figura 41 se apresenta o gráfico dos espectros dos sinais obtido aplicando a transformada rápida de Fourier. A figura se apresenta com escala logarítmica no eixo horizontal e o eixo vertical multiplicado pela frequência, para uma melhor apreciação da figura. Nela pode-se ver uma diferença de amplitude dos harmônicos

para as diferentes substâncias, assim o álcool com 94,6 graus de teor alcoólico mostra um nível maior que o álcool com 92,3 graus de teor alcoólico e que o ar do laboratório.

A Figura 42 se mostra a comparação entre os espectros de várias medidas. Nesta figura pode-se ver que existe uma pequena diferença entre os espectros de diferentes medidas de uma mesma substância, embora na Figura 40 se tenha uma diferença maior entre várias medidas de uma mesma substância. Isto mostra que embora existindo grandes variações no nível DC das medidas, mostradas no espaço do tempo, estas não afetam em grande medida a discriminação das substâncias no domínio da frequência.

Figura 40: Medidas de álcool combustível. Na figura, “Ar lab. M1” representa a primeira medida do ar do laboratório, “Álc. 92 M1” representa a primeira medida de álcool com 92 graus de teor alcoólico, e assim sucessivamente.

Figura 41: Diferença entre álcoois com diferentes graus de teor alcoólico.

Figura 42: Comparação entre os espectros de várias medidas. Na figura, “Ar lab. M1” representa o espectro da primeira medida do ar do laboratório, “Álc. 92 M1” representa o espectro da primeira medida de álcool com 92 graus de teor alcoólico, e assim sucessivamente.

Observou-se que a diferença entre os espectros das substâncias analisadas se mantém, mesmo tendo diferenças maiores nos níveis DC dos sinais. Assim, embora a diferença entre os álcoois analisados seja pequena, é suficiente para discriminar ambas substâncias, o que pode ser especialmente observado no primeiro harmônico. Deve ser levado em consideração que nas medidas feitas, não se controlou parâmetros como temperatura, umidade e a forma de injeção da substância, já que a câmara não se encontrava vedada, isto resulta vantajoso pensando na eventual implementação de um instrumento portátil.

5.3.2. Análise de ruído em amostras de diferentes substâncias.

5.3.2.1. Resultados e discussão

Um gráfico dos sinais adquiridos, no osciloscópio, se mostra na Figura 43 (a). Nela pode-se observar uma mudança no nível DC do sinal quando é injetado um gás. Assim, pode-se observar diferenças entre os níveis DC das substâncias álcool com 92,3 graus de teor alcoólico, acetona, tricloroetileno e álcool isopropílico, no entanto, estes níveis nem sempre permanecem estáveis, já que é bem sabido que fatores ambientais, como temperatura e umidade e fatores de medida, como a forma de injeção do gás, podem fazer mudar estes níveis, fazendo com que uma identificação das substâncias através destes níveis seja difícil, se não se tem um bom controle destes fatores..

Na Figura 44 se apresenta o gráfico dos espectros dos sinais obtidos aplicando o MEM. Nesta figura pode-se ver que os espectros para as substâncias álcool com 92,3 graus de teor alcoólico, tricloroetileno e álcool isopropílico assim com a medida do ar do laboratório são similares, diferenciadas basicamente pelos picos entre 100 e 200KHz, tanto em amplitude como em frequência dos harmônicos. Já o espectro para a acetona se mostra completamente diferente ao resto das substâncias fazendo fácil sua discriminação

Os dados adquiridos mostram uma diferença em relação ao nível de corrente DC, isto é as diferentes substâncias mostram níveis DC diferentes. No entanto é sabido que este nível DC se vê seriamente comprometido com variações de

temperatura e umidade, entre outros diversos fatores. Portanto é pouco confiável, já que neste experimento, não se considerou um controle destes fatores.

(a)

(b)

Figura 43: (a) Níveis DC das substâncias adquiridas, (b) Detalhe de uma da medidas sem a componente DC.

A Câmara sem gás.

B Câmara com álcool 92 graus.

C Câmara com acetona.

D Câmara com tricloroetileno.

E Câmara com álcool isopropílico.

Figura 44: Espectros dos sinais.

Para a identificação entre as substâncias com espectros parecidos utilizamos Lógica Fuzzy. Importante mencionar que se este processo for realizado utilizando uma RNA ficaria complexo já que o número de entradas requeridas seria maior para conseguir uma boa discriminação.

O procedimento experimental utilizado não garante o conhecimento exato da concentração de vapor de substância injetada na câmara, já que, a amostra foi obtida do gás saturado com vapor da substância. A quantidade de vapor na amostra pode

variar ligeiramente dependendo de diversos fatores como a temperatura, e a manipulação da amostra.

Adicionalmente a todos estes fatores devem ser considerados os efeitos da temperatura e a umidade dentro da câmara. O resultados destas interferências poderão promover variações nos harmônicos dos sinais, que devem ser tratados como valores fuzzy, isto é, cada harmônico será caracterizado por uma amplitude e frequência que pode flutuar dentro de uma faixa predefinida dependendo principalmente da temperatura, umidade e concentração da amostra.

Para a análise do sistema serão considerados só os parâmetros de amplitude, frequência de cada harmônico e do tipo de gás injetado.

Figura 45: Gráfico das amplitudes normalizadas em função da frequência dos harmônicos representativos do espectro obtido para os diferentes gases indicados no interior da Figura.

As regras Fuzzy dos parâmetros de amplitude e frequência foram definidas considerando a dispersão experimental de cada parâmetro na curva do espectro obtido pelo método de máxima entropia. A Figura 46 mostra os conjuntos fuzzy da variável lingüística amplitude. Este conjunto foi definido por uma função triangular

cujo centro corresponde ao valor da amplitude máxima da linha espectral e de largura definida pela dispersão experimental deste parâmetro. No caso do conjunto Fuzzy para a variável lingüística de frequência, a função utilizada foi também a triangular cujo centro foi determinado pela posição em frequência do máximo de amplitude da linha espectral.

A faixa do universo de discurso das variáveis lingüísticas de amplitude e frequência é de 0-0.013V e 0-250000Hz respectivamente.

Figura 46: Definição dos conjuntos Fuzzy para as amplitudes e frequências

O processo de reconhecimento foi realizado utilizando-se o controlador Fuzzy Mamdani onde as entradas foram os valores de amplitude e frequência das linhas espectrais. O treino do controlador foi realizado predefinido-se os conjuntos Fuzzy de saída como mostrado na Figura 47.

Figura 47: Definição dos conjuntos Fuzzy de saída no sistema controlador Fuzzy. Os símbolos NS, alc92, Ace, Tric e AlcIso correspondem às saídas Fuzzy do ar, Álcool Combustível, Acetona, Tricloroetileno e Álcool Isopropílico respectivamente.

Figura 48: Resultado da simulação do reconhecedor Fuzzy para o ar utilizando um controlador Fuzzy (Mamdani).

Na Figura 48 pode-se observar um exemplo de como o controlador Fuzzy consegue reconhecer o ar como sendo a substância no interior da câmara, este reconhecimento foi bem definido mesmo existindo dúvida de comparação em alguns harmônicos do espectro, isto é, o bom resultado da classificação foi produto da combinação do comportamento dos diferentes harmônicos no classificador Fuzzy.

As regras utilizadas para gerar o controlador foram as seguintes:

If (amplitude1 is lowTri) and (frequency1 is f3) and (amplitude2 is middleTri) and (frequency2 is f5) and (amplitude3 is highTri) and (frequency3 is f7) then (substância is Tric).

O resultados das simulações realizadas com o controlador Fuzzy (Mamdani) mostrou que as diferenças entre os espectros aparecem acima dos 100KHz. Este resultado mostrou-se em contraposição a resultados reportados pela literatura onde se reporta que as diferenças estão geralmente na região de baixas frequências. Interessante mencionar que mesmo existindo apenas uma pequena diferença entre os álcoois analisados, o controlador Fuzzy conseguiu reconhecer e discriminar ambas substâncias.

O método utilizado mostra ser confiável já que vários parâmetros (harmônicos) são levados em conta, incrementando-se o grau de certeza de identificar uma substância conforme mais harmônicos são analisados.

Deve ser levado em consideração que nas medidas feitas, não se controlou parâmetros como temperatura, umidade e a forma de injeção da substância, já que a câmara não se encontrava vedada, isto resulta vantajoso pensando na eventual implementação de um instrumento portátil.

6. CONCLUSÕES

Neste trabalho nós investigamos e aplicamos vários métodos para reconhecimento de padrões e processamento de sinais, auxiliando o correto entendimento e sua correta aplicação. Foram mostradas também formas como estes algoritmos podem ser usados em conjunto para obter melhores resultados na análise de dados, ampliando as fronteiras de aplicação existentes na área de análise de dados.

Foram elaboradas metodologias de análise, explorando o potencial das técnicas conjuntas de processamento de sinais e reconhecimento de padrões, contribuindo no campo de processamento de sinais em NEs.

Através das técnicas aplicadas a diversos tipos de dados experimentais, observou-se diferença entre os espectros das substâncias analisadas, conseguindo desta forma fazer o reconhecimento de padrões. Neste sentido também foram feitas contribuições no sentido de estabelecer metodologias e estratégias para a discriminação de substâncias como os gases combustíveis. Em vários casos não foi necessário o controle de parâmetros como temperatura, umidade e a forma de injeção da substância o que resulta vantajoso pensando na eventual implementação de um instrumento portátil. Outras estratégias, como a redução do número de sensores, também foram aplicadas na procura de um instrumento portátil.

Foi desenvolvido um ambiente para análise de dados automático, usando controladores de fluxo, o que permitiu e permitirá a montagem de experimentos com maior facilidade.

6.1. Perspectiva futuras

Como mencionado anteriormente, um dos objetivos do desenvolvimento do NE é o desenvolvimento de instrumentos portáteis. Assim para implementar os algoritmos de análise espectral usados nesta tese são necessários dispositivos que possam atingir um alto desempenho, já que a tendência é o processamento em tempo real dos sinais para serem usados imediatamente, o que em alguns casos inclui a necessidade de transmissão desses dados a uma distância longa seja através da internet ou mais recentemente usando comunicação sem fio.

Entre os dispositivos que podem nos fornecer um alto desempenho podemos mencionar os processadores dedicados, DSP ou FPGAs. O desempenho obtido dependerá também do aproveitamento das diversas técnicas recursivas que envolvem estes métodos. A melhor escolha enquanto a dispositivos, parecem ser os FPGAs principalmente porque permite uma escalabilidade maior, podem assim atualizar ou expandir um projeto utilizando projetos anteriores, sem grandes mudanças.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [1] HENRY BALTES; DIRK LANCE; ANDREAS KOLL. The Electronic Nose in Lilliput; **IEEE SPECTRUM**, pp. 35-38, September 1998 .
- [2] V.D. JUNCU; J.V. HATFIELD; On-chip spectrum analyser interrogation of sensors which exhibit impedance changes; **Sensors and Actuators B** 103, pp. 136–138, 2004.
- [3] GAO DAQI, WANG SHUYAN, JI YAN. An electronic nose and modular radial basis function network classifiers for recognizing multiple fragrant materials; **Sensors and Actuators B** 97, pp. 391–401, 2004.
- [4] R. BABY. Et al. Quality control of medicinal plants with an electronic nose; **Sensors and Actuators B** no prelo, 2004.
- [5] QAISAR AMEER; SAMUEL B. ADELOJU. Polypyrrole-based electronic noses for environmental and industrial analysis; **Sensors and Actuators B** no prelo, 2004.
- [6] A. BRANCA. et al. Electronic nose based discrimination of a perfumery compound in a fragrance; **Sensors and Actuators B** 92, pp. 222–227, 2003.
- [7] S. STRATHMANN; S. PASTORELLI; C. SIMONEAU. Investigation of the interaction of active packaging material with food aroma compounds; **Sensors and Actuators B** no prelo, 2004.
- [8] K. BRUDZEWSKI; S. OSOWSKI; T. MARKIEWICZ. Classification of milk by means of an electronic nose and SVM neural network; **Sensors and Actuators B** 98, pp. 291–298, 2004.
- [9] D. LUO; H. GHOLAM HOSSEINI; J. R. STEWART. Application of ANN with extracted parameters from an electronic nose in cigarette brand identification; **Sensors and Actuators B** 99, pp. 253–257, 2004.
- [10] M. PARDO. et al. Data analysis for a hybrid sensor array; **Sensors and Actuators B** no prelo, 2004.
- [11] J.P. SANTOS. et al. A comparative study of sensor array and GC–MS: application to Madrid wines characterization; **Sensors and Actuators B** 102, pp. 299–307, 2004.
- [12] Y. S. YANG; SEUNG-CHUL HA; Y. S. KIM. A matched-profile method for simple and robust vapor recognition in electronic nose (E-nose) system; **Sensors and Actuators B** no prelo, 2004.
- [13] M. ZUPPA. et al. Drift counteraction with multiple self-organising maps for an electronic nose; **Sensors and Actuators B** 98, pp. 305–317, 2004.
- [14] J.A. RAGAZZO-SANCHEZ; P. CHALIER; C. GHOMMIDH. Coupling gas chromatography and electronic nose for dehydration and desalcoholization of alcoholized beverages Application to off-flavour detection in wine; **Sensors and Actuators B** no prelo, 2004.
- [15] H. ZHANG; M. Ö. BALABAN; J. C. PRINCIPE. Improving pattern recognition of electronic nose data with time-delay neural networks; **Sensors and Actuators B** 96, pp. 385–389, 2003.
- [16] M. PENZA; G. CASSANO. Application of principal components analysis and artificial neural networks to recognize the individual VOCs of methanol/2-

- propanol in a binary by SAW multi-sensor array; **Sensors and Actuators B** 89, pp. 269–284, 2003.
- [17] E. MARTINELLI. et al. Chemical sensors clustering with the dynamic moments approach; **Sensors and Actuators B** 101, pp. 346–352, 2004.
 - [18] L. CARMEL. Electronic nose signal restoration—beyond the dynamic range limit; **Sensors and Actuators B** no prelo, 2004.
 - [19] G.J. GOUWS; D.J. GOUWS. Analyte identification using concentration modulation and wavelet analysis of QCM sensors; **Sensors and Actuators B** 91, pp. 326–332, 2003.
 - [20] L. CARMEL. et al. A feature extraction method for chemical sensors in electronic noses; **Sensors and Actuators B** 93, pp. 67–76, 2003.
 - [21] L. CARMEL. et al. An eNose algorithm for identifying chemicals and determining their concentration; **Sensors and Actuators B** 93, pp. 77–83, 2003.
 - [22] A. K. VIDYBIDA. Adsorption–desorption noise can be used for improving selectivity; **Sensors and Actuators A** 107, pp. 233–237, 2003.
 - [23] PROAKIS J., MANOLAKIS, D., **Introduction to digital signal processing**, MacMillan Publishing Company, 1988.
 - [24] R. CHALLIS; R. KITNEY, Biomedical signal processing. Part I: time-domain methods, **Medical & Biological Engineering & Computing** 28, pp.509-524, 1990.
 - [25] R. CHALLIS; R. KITNEY, Biomedical signal processing. Part II: the frequency transforms and their inter-relationships, **Medical & Biological Engineering & Computing** 29, pp.1-17, 1991.
 - [26] R. CHALLIS; R. KITNEY, Biomedical signal processing. Part III: the power spectrum and coherence function, **Medical & Biological Engineering & Computing** 29, pp.225-241, 1991.
 - [27] K. CAI; T. MAEKAWA; T. TAKADA. Identification of Odors Using a Sensor Array With Kinetic Working Temperature and Fourier Spectrum Analysis; **IEEE SENSORS JOURNAL**, VOL. 2, NO. 3, JUNE 2002.
 - [28] P. A. LYNN; W. FUERST; **Introductory Digital Signal Processing with computer applications**; John Wiley & Sons; Second Edition 1998.
 - [29] HAYES, M.H. **Statistical Digital Signal Processing and Modeling**. New York: John Wiley & Sons, 1996.
 - [30] OPPENHEIM, ALAN V; SCHAFER, RONALD W.; **Discrete-time Signal Processing**. Englewood Cliffs, N.J. : Prentice Hall, c1989.
 - [31] STEVEN W. SMITH; **The Scientist and Engineer's Guide to Digital Signal Processing**; Second Edition 1999 California Technical Publishing San Diego, California
 - [32] S. KAY. **Modern spectral estimation – theory & application**, Prentice-Hall, 1998
 - [33] C. TORRENCE; P. J. WEBSTER. Interdecadal Changes in the ENSO–Monsoon System; **Journal of climate**, Volume 12; pp2679-2690, august 1999.
 - [34] J. Z. WANG. Wavelets and Imaging Informatics: A Review of the Literature, **Journal of Biomedical Informatics** 34, pp 129–141, 2001.

- [35] C. TASWELL. The what, how, and why of wavelet shrinkage denoising; **Tech. Rep. CT-1998-09, computational Toolsmiths**, Aug. 1998.
- [36] A. GRAPS. An introduction to wavelets; **IEEE Computational Science and Engineering**, vol.2, No. 2, 1995.
- [37] C. TORRENCE; G. P. COMPO. A Practical Guide to Wavelet Analysis, **Bulletin of the American Meteorological Society**, Vol. 79, No. 1, pp 61-78, January 1998.
- [38] A. LESNIAK; H. NIITSUMA. Resolution of time-frequency analysis for seismic crosshole measurements, **Journal of applied Geophysics** 35, pp. 105-11, 1996.
- [39] C. S. MCNULTY; G. MAUZE; Applications of wavelet analysis for determining glucose concentration of aqueous solutions using NIR spectroscopy; **BiOS '98 (Biomedical Optics)**, San Jose, California, January 29, 1998.
- [40] YISONG DAI; The time-frequency analysis approach of electric noise based on the wavelet transform; **Solid State Electronics** 44, pp. 2147-2153, 2000.
- [41] O. A. ROSSO. et al. Wavelet entropy: a new tool for analysis of short duration brain electrical signals, **Journal of Neuroscience Methods** 105, pp. 65–75, 2001.
- [42] T. SCHAUER; H. GREISIGER; L. DULOG; Details on MEM analysis of electrochemical noise data and correlation with impedance measurements for organic coatings on metals, **Electrochimica Acta**, Vol. 43, Nos 16±17, pp. 2423±2433, 1998.
- [43] F. MANSFELD. et al. The effect of asymmetric electrodes on the analysis of electrochemical impedance and noise data; **Corrosion Science**, Vol. 38 No. 3 pp. 497-513, 1996.
- [44] L.B. KISH; R. VAJTAI; C.G. GRANQVIST. Extracting information from noise spectra of chemical sensors: single sensor electronic noses and tongues; **Sensors and Actuators B** 71, pp. 55±59, 2000.
- [45] A. KAI-MAN LEUNG; F. CHAU, J. GAO. **A review on applications of wavelet transform techniques in chemical analysis**, Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems 43, 165–184, 1998.
- [46] E. LLOBET. et al. Multicomponent Gas Mixture Analysis Using a Single Tin Oxide Sensor and Dynamic Pattern Recognition, **IEEE SENSORS JOURNAL**, Vol. 1, No. 3, October 2001.
- [47] L. RATTON. et al. A comparative study of signal processing techniques for clustering microsensors data (a first step towards an artificial nose); **Sensors and Actuators B** 41, pp. 105-120, 1997.
- [48] J. PARDEY; S. ROBERTS; L. TARASSENKO. A review of parametric modelling techniques for EEG analysis; **Med. Eng. Phys.** Vol. 18 , No. 1, pp. 2-11, 1996.
- [49] C. M. SIM. et al. Burg spectrum estimation of neutron noise for the monitoring of reactor internal vibration with a hypothesis test; **International Journal of Pressure Vessels and Piping** 77, pp. 27–33, 2000.

- [50] V.P. DIMRI *, M. RAVI PRAKASH; Scaling of power spectrum of extinction events in the fossil record, **Earth and Planetary Science Letters** 186, pp. 363-70, 2001.
- [51] D. FARINA; R. MERLETTI. Comparison of algorithms for estimation of EMG variables during voluntary isometric contractions, **Journal of Electromyography and Kinesiology** 10, pp. 337–349, 2000.
- [52] R.J. MARTIN. Autoregression and irregular sampling: Spectral estimation; **Signal Processing** 77, pp. 139-157, 1999.
- [53] J. D. DIMANDJA. et al. Maximum entropy chromatogram reconstruction; **Analytica Chimica Acta** 371, pp. 1-8, 1998.
- [54] A. L. BALANDIN; Tomographic Analysis of Sign-Altering Functions by Maximum Entropy Method; **Computer & Matematics with applications** 39, pp. 15-24, 2000.
- [55] A. LESNIAK; H. NIITSUMA. Resolution of time-frequency analysis for seismic crosshole measurements, **Journal of applied Geophysics** 35, pp. 105-115, 1996.
- [56] E. ESLAMI; J.J.BUCKLEY. Inverse approximate reasoning II. Maximize entropy, **Fuzzy Sets and Systems** 87, pp. 219-295, 1997.
- [57] R. G. KULKARNI; R. R. STOUGH; K. E. HAYNES. Towards an Information Entropy Model of Job Approval Rating: The Clinton Presidency; **Entropy** 1, pp. 37-49, 1999.
- [58] R. BERARDI, F. SPINOZZI, C. ZANNONI. The conformations of alkyl chains in fluids. A maximum entropy approach, **Chemical Physics Letters** 260, pp. 633-638, 1996.
- [59] A. ALFONSO-FAUS. Entropy In the Universe: a New Approach, **Entropy** 2, pp. 168-171, 2000.
- [60] J. D. H. SMITH. Information Theory and its Applications to Biology, Finance and Physics at the Stefan Banach International Mathematical Center; **Entropy** 3, pp. 64-65, 2001.
- [61] M. MAALEJ. et al. Spectral analysis of sensor data in civil engineering structures, **Computers and Structures** 70, pp. 675-689, 1999.
- [62] MARPLE SL. **Digital spectral analysis with applications**. New Jersey:Prentice-Hall, 1987.
- [63] PROAKIS JG, MANOLAKIS DG. **Digital signal processing. Principles algorithms and applications**. 2nd ed. New York: Macmillan Publishing Company, 1992.
- [64] VAITKUS PJ, COBBOLD RSC, JHONSTON KW. A comparative study and assessment of Doppler ultrasound spectral estimation techniques part II: methods and results. **Ultrasound Med Biol** 14, pp. 661–672, 1988.
- [65] AHN YB; PARK SB. Estimation of mean frequency and variance of ultrasonic Doppler signals by using second-order autoregressive model. **IEEE Trans Ultrason Ferroelec Freq Cont** 38(3), pp. 172–182, 1991.
- [66] M. CHEN; J. HAN; P. S. YU. **Data Mining: An Overview from Database Perspective**, Elect. Eng. Department National Taiwan Univ. School of Computing Sci. Simon Fraser University; IBM T.J. Watson Res. Ctr. 1997.

- [67] E. J. VENTER. Knowledge Discovery in Databases Using Lattices, **Expert Systems With Applications**, Vol. 13, No. 4, pp. 259-264, 1997.
- [68] W. H. INMON. **The Data Warehouse and Data Mining**, Communications of the ACM vol. 39, no. 11, November 1996.
- [69] K. Jones; An Introduction to Data Warehousing: What Are the Implications for the Network?, **International Journal of network management**, Vol. 8, 42–56, 1998.
- [70] RAVAT; O. TESTE; G. ZURFLUH. Towards data warehouse design; **CIKM '99**, Kansas City, USA, 1999.
- [71] P. GRAY; H. J. WATSON. Present and Future Directions in Data Warehousing, **The DATA BASE for Advances in Information Systems**, Vol. 29, No. 3, Summer 1998 .
- [72] M. AURÉLIO, M. VELLASCO, C. H. LOPES. **Descoberta de Conhecimento e Mineração de Dados**. ICA - Laboratório de Inteligência Computacional Aplicada, PUC-Rio Agosto 1999.
- [73] P. VASSILIADIS. et al. Data warehouse process management, **Information Systems** 26, pp. 205–236, 2001.
- [74] S. CHAUDHURI; U. DAYAL. **An Overview of Data Warehousing and OLAP Technology**; Microsoft Research, Redmond; Hewlett-Packard Labs, Palo Alto
- [75] W.H. INMON. What is a data warehouse?, **Prism Tech**. Topic 1, 1997.
- [76] K. ORR. Understanding data warehousing, **Am. Program**. 8. pp. 2–7, 1995.
- [77] IBM, **Information Warehouse Architecture I**, IBM Corporation, 1993.
- [78] KEN ORR. **Data Warehousing Technology**, The Ken Orr Institute, 2000.
- [79] KEN ORR. **Data Quality and Systems Theory**; The Ken Orr Institute, 1997.
- [80] M. JARKE. Architecture and quality in data warehouses: an extended repository approach, **Information systems** vol. 24. no. 3, pp. 229-253. 1999.
- [81] L. PALOPOLI. et al. A novel three-level architecture for large data warehouses, **Journal of Systems Architecture** 47, pp. 937–958, 2002.
- [82] BRIAN S. EVERITT; **Cluster Analysis**; Edward Arnold 1993.
- [83] MATLAB. **Tutorial: Finding the Similarities Between Objects**, Matlab Statistics Toolbox.
- [84] U. FAYYAD, P. STOLOS. Data mining and KDD Promise and challenges; **Future Generations Computer Systems** 13, pp. 99-115, 1997.
- [85] M. MJAHER. Clustering Algorithm using Space Filling Curves for the Classification of High Energy Physics Data, **Nuclear Physics B** 119, pp. 1024-1026, 2003.
- [86] L. MARIEY. et al. Discrimination, classification, identification of microorganisms using FTIR spectroscopy and chemometrics, **Vibrational Spectroscopy** 26, pp. 151-159, 2001.
- [87] ENGINEERING STATISTIC HANDBOOK em
<<http://www.itl.nist.gov/div898/handbook/pmc/section5/pmc5.htm>. Acesso em novembro 2003.
- [88] SAMUEL KASKI; Data Exploration Using Self_Organizing Maps; Thesis for the degree of Doctor of Technology Helsinki University of Technology; ESPOO 1997 Finland

- [89] P. AMARAL. Introdução à quimiometria em <http://www.dq.fct.unl.pt/qof/chemidx1.html#index> acesso em junho 2004.
- [90] A. K. JAIN; R. C. DUBES; **Algorithms for Clustering Data**; pp. 56 Prentice Hall 1988.
- [91] MANLY, B.F.J. **Multivariate statistical metholds**. 2.ed., 215p. London: A Primer, 1994.
- [92] M. LAWS; R. KILGOUR; N. KASABOV. Modeling the emergence of bilingual acoustic clusters: a preliminary case study, **Information Sciences** 156, pp. 85–107, 2003.
- [93] L. KAUFMAN; P. J. ROUSSEEUW; **Finding Groups in Data: An Introduction Cluster Analysis**, John Wiley and Sons, Inc 1990.
- [94] S.M.A. BIERMA-ZEINSTRA. et al. Hip problems in older adults: Classification by cluster analysis; **Journal of Clinical Epidemiology** 54, pp. 1139–1145, 2001.
- [95] S. HAYKIN. **Neural Networks: A Comprehensive Foundation**, NY: Macmillan, 1994.
- [96] M. S. DOUGHERTY. M. R. COBBETT. Short-term inter-urban traffic forecasts using neural networks, **International Journal of Forecasting** 13, pp. 21-31, 1997.
- [97] C. M. FRIEDRICH. Ensembles of Evolutionary created Artificial Neural Networks; Proceedings of the 5th International Workshop on Fuzzy-Neuro-Systems. **FNS '98**, pp 250-257; Munich, Germany (1998).
- [98] C M. FRIEDRICH. Using Genetic Engineering to Find Molecular Structures for Architectures of Artificial Neural Networks, Proceedings of the 3rd International Conference on Artificial Neural Networks and Genetic Algorithms. **ICANNGA '97**; pp 375-379; Norwich, UK; April 1997.
- [99] C M. FRIEDRICH. An Evolutionary Method to Find Good Building-Blocks for Architectures of Artificial Neural Networks; Proceedings of the Sixth International Conference on Information Processing and Management of Uncertainty in Knowledge-Based Systems. **IPMU '96**, pp 951-956; Granada, Spain (1996).
- [100] MATLAB, help tool books, Matlab help.
- [101] S. V. KARTALOPOULOS. **Understanding Neural Networks and Fuzzy Logic** IEEE PRESS 1996.
- [102] G. COHEN. Neural Networks implementations to control real-time manufacturing system, **Computer Integrated manufacturing systems**, vol 11, pp 243-251 1998.
- [103] B. KRÖSE; P. VAN DER SMAGT. **An introduction to Neural Networks**; The University of Amsterdam Eighth edition November 1996.
- [104] K.-L. Du. et al. Neural methods for antenna array signal processing: a review, **Signal Processing** 82, pp. 547 – 561, 2002.
- [105] A. POZO. et al. Computação evolutiva; Departamento de Informática Universidade Federal do Paraná, Grupo de Pesquisas em Computação Evolutiva.
- [106] J. HAUSER; C. PURDY; Approximating Nonlinear Functions with Genetic Algorithms; em <www.Embedded.com> Acesso janeiro de 2004.

- [107] W. E. DA SILVA, J. RAMIREZ FERNANDEZ; Classificador de Poder Calorífico de gases. PEE 607 EP 17-02-2002.
- [108] R. MORRISON. **Noise and others Interfering Signals**; Jonh Willey & Sons Inc. 1992.
- [109] N. SHANBHAG **Noise Issues in Deep Submicron CMOS** Department of Electrical and Computer Engineering University of Illinois at Urbana-Champaign Urbana, IL-6180
- [110] ENCYCLOPEDIA BRITANICA em <<http://search.britannica.com/search?ref=A01015&query=entropy&exact>> Acesso em novembro 2004.
- [111] J. S. ANDERSON; M. BRATOS-ANDERSON. **Noise: its Measurement, Analysis, Rating and control**; Ashgate Publication Company – British Library Cataloguing in publication Data. 1993
- [112] C. M. HARRIS; **Handbook of Noise Control**; McGraw Hill Book Company 1957.
- [113] B. NERI; B. PELLEGRINI; R. SALETTI. Ultra Low-Noise Preamplifier for Low-Frequency Noise Measurements in Electron Devices, **IEEE Transactions on Instrumentation and Measurement**, Vol 40, No. 1, February 1991.
- [114] W. GÖPEL. et al. **Sensors a Comprehensive Survey, Vol 1 Fundamentals and General Aspects**; VHS , pp. 22, 1989.
- [115] L.B. KISH, R. VAJTAI, C.G. GRANQVIST. Extracting information from noise spectra of chemical sensors: single sensor electronic noses and tongues; **Sensors and Actuators B** 71, pp. 55±59 2000.
- [116] C. DI NATALE; C. GIAMPAOLO; A. D'AMICO. Study of the noise in adsorption–desorption phenomena using the Allan variance and a quartz microbalance, **Sensors and Actuators B** 65, pp. 227–231, 2000.
- [117] R.L. BATES. et al. Noise Spectra of SIU-GaAs Pad Detectors with Guard Rings; **4th workshop on GaAs detectors and related compounds**; San Miniato (Italy) 19-21 March 1995.
- [118] H.L. CHAU; K.D. WISE. Noise due to Brownian Motion in Ultrarensitive Solid-State Pressure Sensors, **IEEE Trans. Electron Devices** ED-34, p. 859, 1987 .
- [119] R.R. SPENCER. et al. A Theoretical Study of Transducer Noise in Piezoresistive and Capacitive Silicon Pressure Sensors, **IEEE Trans. Electron Devices** ED-35, p 1289, 1988.

1. Apêndice A

1.1. Descrição VI: MKS186Av1

Este instrumento virtual (VI) possui uma interface gráfica e do diagrama de blocos que consta de várias etapas: Uma etapa de início (initialize), uma de estado de espera (idle) e duas etapas de medida (test e test1).

1.1.1. Interface Gráfica

Permite ligar ou desligar os Mass Flow Meter (MFM) usando um interruptor (1), assim como alterar os valores de fluxo dos MFMs independentemente. Os valores podem ser introduzidos de duas formas, através do teclado digitando o valor em (2) ou pelo mouse mexendo o seletor (3). O valor do seletor aparecerá também em (2) quando este for colocado e vice-versa. O estado inicial dos MFMs é apagado (OFF), assim os controles de inicialização (1,2) da interface gráfica ficam bloqueados ao usuário. Uma vez que o MFM é ligado (ON) os controles de inicialização estão disponíveis, mas os valores introduzidos não são enviados ao MFM até que o botão OK seja pressionado (4). Uma vez que o botão é pressionado os valores introduzidos em 1 e 2 são enviados ao MFM, imediatamente depois, o VI automaticamente envia uma instrução de medida de fluxo ao MFM com o objetivo de verificar se os valores que introduzimos são realmente os que estão no MFM. A

resposta enviada pelo MFM pode ser visto no indicador de fluxo (5). Por último o VI possui um botão de parada (6) para deter a execução do VI.

Figura 1: VI controlador de fluxo.

1.1.2. Etapa de inicio (initialize)

Nesta etapa se inicializa os valores dos parâmetros necessários para estabelecer uma comunicação serial com o controlador dos Mass Flow Meter. Assim são inicializados valores como a taxa de transmissão, o número de bits a serem usados, a paridade etc. (1 em Figura 2). Além destes valores, são inicializados valores que serão usados na etapa de medida (test) e na etapa de espera (idle). Esta etapa também se assegura que o estado inicial dos MFMs é apagado, já que pode acontecer que inicializem ligados o que pode comprometer o experimento, saturando os sensores por exemplo, antes de fazer uma medida. Outra função desta etapa é emitir uma mensagem ao operador pedindo para aguardar 10 minutos antes de iniciar as medidas para permitir o aquecimento do Mass Flow Controller (MFC) como indicado pelo fabricante (2 em Figura 2). Depois de pressionar OK a função é liberada.

Figura 2: Etapa de início.

1.1.3. Etapa de espera (Idle)

O VI entra nesta etapa enquanto aguarda ordens de usuário. Assim o VI responde aos valores de fluxo introduzidos na interface gráfica só depois que o botão OK é pressionado (3 em Figura 1). Este estado é deixado também devido a que o VI periodicamente envia instruções de medida ao MFM para manter atualizado o indicador de fluxo (5 em Figura 1).

Etapa de medida (Test): Nesta etapá as mensagens são enviadas e recebidas ao MFC e este, por sua vez, os envia ao MFM. Segundo o volume de fluxo introduzido, a mensagem é composta de forma que possa ser entendida pelo controlador dos MFMs.

Figura 3: Etapa de espera.

Nesta etapa se encontram dois VIs o primeiro (1) esta encarregado de compor a mensagem que será enviada ao MFC e o segundo esta encarregado de receber as mensagens de resposta dos MFM. Já o modulo (3) é o encarregado de enviar as mensagens ao MFC.

Figura 4: Etapa de medida.

Figura 5: VI entrada

Figura 6: VI serial

Etapa de medida (Test1): Nesta etapa as mensagens do controlador dos MFM são interpretadas. Isto é, por exemplo, se uma mensagem de erro é enviada pelo controlador dos MFM a mensagem é apresentada ao usuário e uma mensagem de ajuda aparecerá também, com sugestões de como o problema pode ser solucionado, evitando que o usuário tenha que consultar o manual que só será útil em casos de ordem técnica. Esta etapa também de atualizar o indicador de fluxo da interface gráfica para que o usuário possa conferir sempre que esta introduzindo o fluxo de gás desejado, evitando desta forma problemas como quando a gás acaba.

Figura 7: Etapa de medida (Test1).

1.2. Descrição VI: Medidas

Este VI foi feito para automatizar as medidas do poder calorífico de um gás, isto é, é um VI especificamente para este tipo de experimento, e está baseada no VI anterior. Este VI é capaz de ativar vários MFMs ao mesmo tempo o que é necessário no experimento para ativar MFM que controla o Nitrogênio e o MFM que controla o GLP para poder fazer uma mistura homogeneia que será introduzida na câmara.

O VI tem duas partes; uma de preparação de amostra e outra de medida que é selecionada no menu (1). A parte de preparação de amostra se encarrega de preparar a mistura, e a etapa de medida controla um MFM que deixará passar a mistura preparada à câmara.

A interface gráfica possui três campos onde são colocados os valores dos fluxos do GLP, do Nitrogênio e da mistura. Na etapa de preparação de amostra só são ativados os campos de GLP e de Nitrogênio a diferença da etapa de medida onde estes campos são desabilitados e o de mistura é habilitado. Esta interface possui também um botão de inicio da opção selecionada (2) e um de termino do experimento (3).

Figura 8: VI medidas.

Figura 9 Diagrama de Blocos geral do programa, com VI mostrada na Figura 1