

Aplicação de Técnicas de Aprendizado de Máquina para Análise de Dados de Língua Eletrônica [★]

L. P. O. Sousa ^{*} D. D. Ferreira ^{*} D. S. Correa ^{**} J. E. Oliveira ^{***}

^{*} Departamento de Automática, Universidade Federal de Lavras, Minas Gerais, Brasil (e-mails: lpsousa14@gmail.com e danton@deg.ufla.br).

^{**} Empresa Brasileira de Pesquisa Agropecuária, EMBRAPA, São Paulo, Brasil (e-mail: daniel.correa@embrapa.br)

^{***} Departamento de Engenharia de Materiais, Universidade Federal de Lavras, Minas Gerais, Brasil (e-mail: juliano.oliveira@ufla.br)

Abstract: Devices that resemble biological recognition systems, that is, inspired by the functioning of human organs, have made important advances in recent decades. Therefore, interest in the concept of electronic tongues has increased considerably in recent years. This study uses this type of device in order to identify different samples of flavor enhancers (Glutamate, Guanylate and Inosinate). The applied methodology employs different computational techniques for the identification such as Principal Curves and three types of Artificial Neural Networks. The best results reached 95,4% accuracy through models implemented with Self Organization Maps.

Resumo: Dispositivos que se assemelham a sistemas de reconhecimento biológico, ou seja, inspirados no funcionamento de órgãos humanos, tiveram avanços importantes nas últimas décadas. Por isso, o interesse no conceito de línguas eletrônicas aumentou consideravelmente nos últimos anos. Este estudo usa esse tipo de dispositivo com o intuito de identificar diferentes amostras de realçadores de sabor (Glutamato, Guanilato e Inosinato). A metodologia aplicada emprega diferentes técnicas computacionais para a identificação como *Principal Curves* e três tipos de *Artificial Neural Networks*. Os melhores resultados atingiram 95,4% de precisão através dos modelos implementados com *Self Organization Maps*.

Keywords: E-tongue; classification model; artificial neural networks; principal curves.

Palavras-chaves: Língua Eletrônica; modelos de classificação; redes neurais artificiais; curvas principais.

1. INTRODUÇÃO

Os primeiros sistemas baseados em órgãos gustativos foram apontados na década de 1980. A língua eletrônica (LE) é um sistema que usa técnicas sensoriais e instrumentais para determinar os gostos e/ou as substâncias presentes nas amostras analisadas. Esses sistemas se assemelham aos sistemas de reconhecimento biológico. Em razão dessa capacidade, o interesse em LE aumentou consideravelmente nos últimos anos, com intuito de modelar e melhorar esses sistemas (Nery and Kubota, 2016; Wei and Wang, 2014).

Conforme o parecer técnico da *International Union of Pure and Applied Chemistry* (IUPAC), uma LE é composta por vários sensores selecionáveis e usa métodos matemáticos e reconhecimento de padrões ou processamento de sinais baseado em análise multivariada de dados (Vlasov et al., 2005). Em resumo, um arranjo de sensores é imerso em uma amostra para aferir seus componentes solúveis e os sinais de resposta característicos globais gerais da solução.

^{*} Agradecimento à CNPq (Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico) e a FAPEMIG (Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de Minas Gerais).

Assim, esses sinais são enviados para um sistema de processamento para análise usando diferentes métodos estatísticos (Ross, 2021).

Apesar da LE ser uma tendência recente da área sensorial, ocorreram avanços importantes no projeto desses sensores, direcionados para a implementação de novos conceitos, projetos ou configurações. Já existe uma grande quantidade de aplicações envolvendo LE em diversos segmentos, muito utilizada na indústria alimentar, em questões de controle de qualidade, monitoramento de processos, controle de envelhecimento e controle automatizado de gosto. Na indústria química, pode-se aplicar na detecção de grupos funcionais e avaliação de pureza. A LE também pode se empregada na área medicinal, em monitoramento clínico, diagnóstico não-invasivo, avaliação de produtos farmacêuticos e crescimento de culturas celulares (Sousa et al., 2019).

Pesquisando na literatura, nota-se que os métodos mais utilizados para análise de dados da LE são *Principal Component Analysis* (PCA) e *Partial Least Squares* (PLS). PCA é um método matemático que utiliza a ortogonalização de vetores para converter um conjunto de observações de variáveis possivelmente correlacionadas num conjunto

de valores de variáveis linearmente não correlacionadas, chamadas de componentes principais. PLS é um método estatístico multivariável similar ao PCA, que estima um modelo de regressão linear projetando as variáveis observáveis e preditas em um novo espaço (Guedes et al., 2021). Porém, esses métodos possuem algumas limitações, como: (i) o PCA não é a ferramenta mais adequada na classificação das amostras, mesmo que seja possível observar uma separação nítida, o recomendado é empregar uma técnica supervisionada em paralelo; (ii) usando PLS, as classes são divididas usando partições lineares no espaço de classificação que podem ser problemáticas se a separação entre classes for não linear e também o ruído aleatório aumenta à medida que mais variáveis latentes são adicionadas (Zielinski et al., 2014).

O objetivo principal dessa pesquisa é comparar e analisar modelos de classificação que sejam capazes de discriminar amostras de diferentes realçadores de sabor. Esses modelos empregam técnicas de reconhecimento de padrões utilizando *machine learning* como *Single Layer Perceptron*, *Radial Basis Function*, *Self-Organization Maps* e *Principal Curves*, os quais estão descritos no decorrer deste.

O restante do artigo está organizado da seguinte forma: a Seção 2 traz a revisão da literatura com o intuito de exemplificar os estudos que têm sido realizados nessa área de pesquisa. A Seção 3 apresenta a configuração do experimento para obtenção dos dados e a fundamentação dos métodos aplicados. Os resultados e as análises alcançados são descritas na Seção 4. E por fim, na Seção 5, as conclusões do estudo e os possíveis trabalhos futuros.

2. ESTADO DA ARTE

Inicialmente, a LE foi desenvolvida para discriminar os cinco gostos básicos (doce, azedo, salgado, amargo e umami¹). No entanto, com suas características de baixa seletividade, alta eletividade cruzada e análise estatística de múltiplos sensores, a mesma provou ser uma ferramenta valiosa para cientistas de alimentos e evoluiu gradualmente para uma ferramenta útil na detecção de diferentes substâncias (Ross, 2021).

O trabalho apresentado por Cheng et al. (2021) utiliza uma LE com intuito de revelar variações no perfil químico para a qualidade do sabor de cinco chás escuros típicos (chá Puerh, Fuzhuan, Qingzhuán, Kangzhuán e chá de Liubao). Foram realizadas duas classificações, uma relacionada aos fenótipos químicos e outra aos fenótipos de sabor. PCA foi aplicada para obter uma visão geral da variação química entre vários chás escuros e PLS foi usado para discriminar os metabólitos diferenciais correspondentes à variação de qualidade do chá escuro.

Ainda no ramo alimentício, Chen et al. (2020) traz um estudo que usa os dados de uma LE para classificar a qualidade de amostras de chá em sete graus diferentes. O método PCA e o modelo PLS adaptado foram usados para distinguir e identificar os graus de chá. Segundo o autor, o PCA não conseguiu distinguir completamente os sete graus de chá, enquanto o modelo de classificação PLS alcançou uma alta precisão de classificação e identificou

¹ Umami é uma palavra japonesa que significa saboroso e é considerado um dos cinco gostos básicos do paladar humano.

com precisão os graus de chá no conjunto de calibração ou previsão.

A LE possui a capacidade de análise de diferentes amostras, por exemplo, Zhang et al. (2019) relata o uso de LE para classificar 13 tipos diferentes de amostras líquidas, como chá, vinho, bebida, materiais funcionais, etc. Assim, os classificadores para reconhecimento de sabor propostos foram modelos usando *Support Vector Machine* (SVM), *Extreme Learning Machine* (ELM) e *Kernelized ELM* (KELM). Os resultados experimentais demonstram que a proposta é eficaz para o reconhecimento de vários sabores.

Conforme já mencionado, a LE pode ser usada em diversos segmentos, como para analisar discriminar três produtos químicos desreguladores endócrinos: bisfenol A, estrona e 17- β -estradiol, e suas misturas. Os modelos *Multilayer Perceptron* (MLP), *Random Forest* e *Extreme Gradient Boosting* (XGBoost) foram aplicados para prever a concentração de contaminantes individuais e suas misturas (Christinelli et al., 2021).

Um sistema de LE foi implementado para investigar e detectar metais pesados, como cádmio, chumbo, estanho e níquel no óleo comestível de girassol. PCA foi usado para classificar os metais pesados e os resultados obtidos mostraram que o sistema foi capaz de detectar bem os dados. SVM e *K-Nearest Neighbor* (K-NN) foram usados para classificação (Kiani et al., 2021). Conforme o autor, pode-se dizer que a língua fabricada combinada com métodos quimiométricos pode classificar metais pesados, em óleo comestível, com alta precisão.

Outra aplicação é descrita por Lvova et al. (2020) que emprega um sistema LE para monitorar os poluentes causadores de sabor e odor, geosmina (GE) e 2-metil-isoborneol (MIB), em água potável. Com auxílio da técnica de regressão PLS para a previsão de concentração de GE/MIB, mostrou a possibilidade de discriminar amostras de água da torneira contendo esses compostos em dois níveis de concentração. Com base nos resultados, o sistema desenvolvido pode ser considerado uma ferramenta promissora para avaliação expressa de espécies GE/MIB e para fornecer uma detecção oportuna de situações de alarme em caso de poluição extrema antes que a água potável seja entregue aos usuários finais.

No segmento medicinal, os dados da LE podem ser usados para diagnosticar câncer na boca analisando amostras de saliva (Braz et al., 2022). Neste estudo, a distinção entre indivíduos saudáveis e pacientes com câncer no assoalho da boca ou cavidade oral foi realizada utilizando-se modelos SVM com *kernel* de *Radial Basis Function* (RBF) e *Random Forest* (RF), onde a acurácia atingiu mais de 80%.

Também existem pesquisas relacionadas a análise sensorial do paladar em comprimidos. Por exemplo, a pesquisa realizada por Rahman et al. (2013) que projeta e avalia comprimidos de desintegração oral do novo sal de lamotrigina-ciclamato avaliando o mascaramento de sabor usando LE. Os resultados da LE foram analisados por PCA. Em resumo, o autor conclui que o sal de lamotrigina fornece outro caminho para a formulação pediátrica amigável para crianças e aumentará a adesão à paciência.

3. MATERIAIS E METODOS

3.1 Língua Eletrônica

A LE pode ser considerada como instrumento analítico baseado em uma série de sensores químicos de baixa seletividade e com o auxílio de processamentos matemáticos é capaz de caracterizar amostras líquidas complexas. Se for configurada e treinada, a mesma é capaz de reconhecer a composição qualitativa e quantitativa de soluções multi-espécies de diferentes naturezas (Peris and Escuder-Gilabert, 2013).

Os sistemas de LE são geralmente compostos por três componentes (vide Figura 1): (1) uma matriz de sensores químicos com diversos seletivos; (2) um amplificador e gerador de sinal e (3) um software com o algoritmo apropriado para processar os sinais e analisar os resultados (Wei and Wang, 2014).

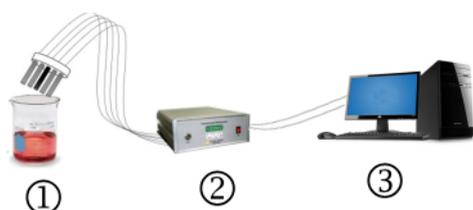


Figura 1. Elementos de uma LE.

O desenvolvimento do sistema da LE baseia-se nos mecanismos do sistema gustativo do ser humano, onde a língua humana é o órgão responsável por fornecer informações sobre o gosto, textura e temperatura dos alimentos, o que ocorre através do conceito de seletividade global.

Em uma LE, os sensores interagem com as propriedades dos analitos em solução e fornecem respostas características da solução que está sendo avaliada, sendo considerado uma impressão digital da solução, semelhante à língua humana (Wei and Wang, 2014). O uso subsequente de análise confere ao sistema capacidades de classificação e predição fazendo uso de técnicas multivariadas que incluem algoritmos e métodos estatísticos (Ross, 2021).

As LEs desenvolvidas nos últimos anos podem ser classificadas em três tipos: as que são baseados em eletrodos de espectroscopia potenciométrica, voltamétrica e de impedância (usada neste). A LE utilizada nesse estudo, foi desenvolvida em Fukushima (2017), onde a matriz de sensores utilizada é composta por eletrodos interdigitados de ouro fabricados sobre lâminas de vidro e modificados através da técnica de automontagem (*Layer-by-Layer*). Os eletrodos interdigitados de ouro foram elaborados de acordo com as arquiteturas² apresentadas na Tabela 1.

Tabela 1. Arquiteturas dos eletrodos da LE.

Id	Camadas	Arquitetura
E1	2 tetra camadas	PAH/rGO/PANI/CuTsPc
E2	2 tetra camadas	PAH/AgNPs/PAH/CuTsPc
E3	4 bi camadas	PAH/CuTsPc

² Poli-alilamina hidrocloreada (PAH), óxido de grafeno reduzido (rGO), poli-anilina (PANI), ftalocianina tetrassulfonada de cobre (CuTsPc) e nanopartículas de prata (AgNPs)

3.2 Amostras

As amostras analisadas nesse estudo são compostas por diferentes realçadores de sabor, que são aditivos alimentares usados para causar um efeito de gosto e sabor mais marcante nos alimentos ao paladar do consumidor. Esses realçadores proporcionam o quinto sabor básico, o umami, que em japonês significa saboroso. Tais aditivos normalmente são adicionados aos produtos cárneos, sopas, *snacks*, temperos e molhos (Milani, 2013).

Um dos realçadores usados foi o Glutamato Monossódico (GM), que é um aminoácido não essencial encontrado naturalmente em alimentos e em organismos vivos, como peixes, carnes vermelhas, leite e diversos vegetais. Os outros foram o Inosinato Dissódico (ID) e o Guanilato Dissódico (GD), que são nucleotídeos encontrados em sardinhas secas, atum, carnes suína, bovina e de frango ou em alguns cogumelos (Milani, 2013). As amostras de realçadores de sabor utilizados foram: GM, ID, e uma mistura 1:1 (50% m/m) de GD com ID (Fukushima, 2017).

Os dados medidos pela LE foram coletados usando três unidades sensoriais conectadas nos canais para as leituras, realizadas em triplicata utilizando os softwares *Zplot 2.6* e *Zview 2.6*. Os dados foram coletados a partir das medidas de resistência elétrica em função da frequência de 10Hz a 1MHz utilizando uma tensão aplicada de 50mV (Fukushima, 2017).

Como o intuito do presente artigo é analisar e comparar os resultados obtidos pelo sistema LE com diferentes ferramentas, os detalhes sobre o preparo e a caracterização das soluções e dos filmes utilizados estão disponíveis no estudo realizado por Fukushima (2017). A seguir é apresentada uma breve explicação teórica das técnicas computacionais (modelos matemáticos) utilizadas nos classificadores.

3.3 Single Layer Perceptron (SLP)

Uma das diversas definições de *Artificial Neural Networks* (ANN) encontradas na literatura, é que são técnicas computacionais que apresentam um modelo matemático inspirado na estrutura neural de organismos inteligentes e que adquirem conhecimento através da experiência.

Assim, através da informação de uma resposta desejada, a rede tenta aproximar um sinal alvo durante seu processo de aprendizagem. Essa aproximação é obtida através do ajuste, de forma sistemática, de um conjunto de parâmetros livres, característico de cada rede neural. A Figura 2 apresenta o modelo de um neurônio básico de uma ANN (Haykin, 1999).

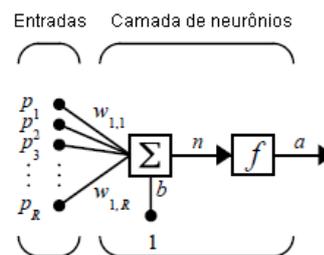


Figura 2. Modelo de um neurônio.

Esse neurônio é composto por um sinal de entrada (\mathbf{p}) ponderada pelo peso sináptico (\mathbf{W}). Há também um combinador linear para somar os sinais ponderados por suas respectivas sinapses e a função de ativação para limitar a amplitude da saída do neurônio ($f(\cdot)$), somado a uma polarização externa $bias$ (b), a qual tem o efeito de aumentar ou diminuir o argumento da função de ativação, resultando no sinal de saída do neurônio (a). Em termos matemáticos, pode ser descrito pela Equação 1 (Haykin, 1999).

$$a = f(\mathbf{W}\mathbf{p} + b). \quad (1)$$

A arquitetura da ANN é tipicamente organizada em camadas e pode ser dividida em: (1) camada de entrada, que recebe estímulos do meio externo; (2) camada interna ou oculta, responsável por intervir entre a entrada e a saída da rede, tornando a rede capaz de extrair estatísticas de ordem elevada das entradas e (3) camada de saída, que se comunica com o exterior. A camada de neurônios ocultos quando compõe uma ANN composta por uma única camada denomina-se *Single Layer Perceptron* (SLP), conforme pode ser observado na Figura 3.

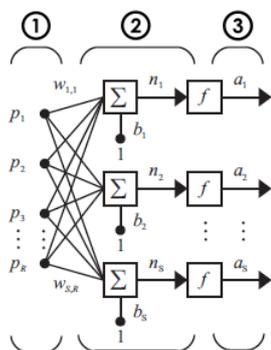


Figura 3. Representação da estrutura de uma ANN do tipo SLP.

3.4 Radial Basis Function (RBF)

O projeto de uma rede neural RBF pode ser visto como um problema de aproximação de funções em um espaço de alta dimensionalidade. O aprendizado de uma RBF é equivalente a encontrar uma superfície em um espaço multi-dimensional que melhor se ajuste ao conjunto de dados de treinamento, sendo o critério para o “melhor ajuste” medido em algum sentido estatístico (Haykin, 1996).

Seu processo de generalização equivale a usar esta superfície multi-dimensional para interpolar outros pontos que não pertençam ao conjunto de treino, mas estejam em sua vizinhança (Haykin, 1996). A Figura 4 traz o modelo básico de um neurônio utilizado no projeto de uma rede RBF.

A expressão para a entrada de um neurônio RBF é diferente da de outros neurônios. Aqui, a entrada de rede para a função de transferência é a distância vetorial entre seu vetor de peso \mathbf{w}_R e o vetor de entrada \mathbf{p}_R , multiplicado pelo $bias$, conforme a Equação 2.

$$a = \text{radbas}(\|\mathbf{w} - \mathbf{p}\| b), \quad \text{onde } \text{radbas}(n) = e^{-n^2}. \quad (2)$$

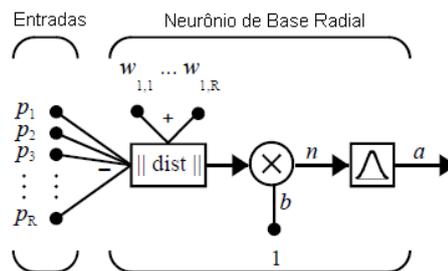


Figura 4. Neurônio do tipo RBF.

A rede RBF também é organizada em camadas, porém sua camada oculta é definida por um conjunto de funções de base radial (Figura 5).

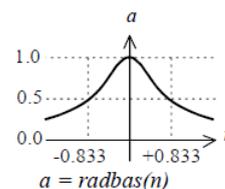


Figura 5. Função de Base Radial.

Quando uma RBF é usada para executar uma tarefa complexa de classificação de padrões, o problema é basicamente resolvido transformando-o em um espaço de alta densidade de maneira não linear. De acordo com Haykin (1999), um problema de classificação de padrões lançado em um espaço de alta dimensão é mais provável de ser linearmente separável do que em um espaço de baixa dimensão.

3.5 Self-Organization Maps (SOM) 1D

O modelo de rede SOM, é um método de rede neural competitiva que aprende a classificar os vetores de entrada de acordo com a forma que eles são agrupados no espaço de entrada. As localizações espaciais (ou coordenadas) dos neurônios no espaço de saída são indicativos de características estatísticas inerentes contidos no espaço de entrada (Beale et al., 2012; Asan and Ercan, 2012).

O objetivo principal da rede SOM é transformar um espaço complexo de alta dimensionalidade em um espaço de baixa dimensionalidade, mas com suas relações preservadas. A rede aprende tanto a distribuição quanto a topologia dos vetores de entrada em que são treinados. Veja na Figura 6 o modelo de um neurônio do tipo SOM que tem a expressão matemática resultante a Equação 3.

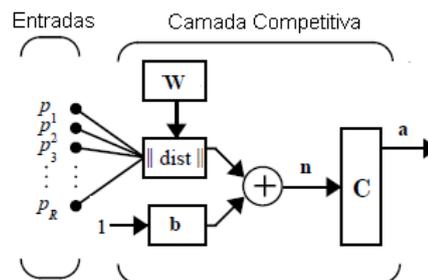


Figura 6. Neurônio do tipo SOM.

$$a = \operatorname{argmin}_i \| \mathbf{p} - \mathbf{w}_i \| . \quad (3)$$

A formação dessa rede envolve três processos característicos: a concorrência, a cooperação e a adaptação (conforme traz a Figura 7) (Beale et al., 2012; Asan and Ercan, 2012). A concorrência é onde os neurônios de saída competem uns com os outros para melhor representar a amostra de entrada particular. Assim, o neurônio específico com seus pesos de conexão mais semelhantes à amostra de entrada é declarado vencedor da competição (denominado como *Best-Matching Unit* - BMU).

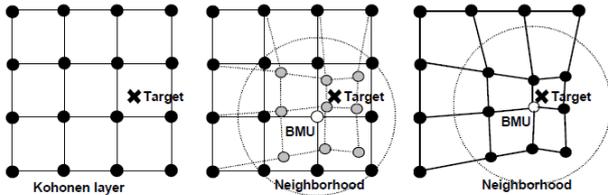


Figura 7. Etapas de uma rede SOM em 2 dimensões.

A cooperação é quando o BMU determina a localização espacial de uma vizinhança de neurônios cooperantes, onde os mesmos compartilham recursos comuns estimulando uns aos outros a aprender algo a partir da mesma entrada. Por fim, a adaptação, onde os vetores de peso do BMU e suas unidades vizinhas no mapa são ajustados e os neurônios relevantes tornam-se mais semelhantes à amostra de entrada (Asan and Ercan, 2012; Vesanto et al., 2000).

Desse modo, os neurônios que têm uma resposta forte a uma determinada peça de dados de entrada terão uma chance maior de responder a dados de entrada semelhantes no futuro. Todos os processos descritos são repetidos para os dados de treinamento restantes até os pesos convergirem e não haja alterações perceptíveis na camada de saída de baixa dimensão. Os nós na camada de saída da rede são dispostos de acordo com uma função topológica, como na Figura 7 (Asan and Ercan, 2012; Beale et al., 2012).

3.6 Principal Curves (PC)

Principal Curves foram apresentadas em (Hastie and Stuetzle, 1989) como uma ferramenta capaz de fornecer uma descrição não linear de um conjunto de dados de alta dimensão em uma única dimensão. As PCs são curvas unidimensionais que passam no “meio” de um conjunto de dados no espaço multi-dimensional, fornecendo uma descrição não linear dos dados, ou seja, sua forma é sugerida pelo conjunto de dados (Hastie and Stuetzle, 1989).

Para entender este conceito é necessário definir o índice de projeção de um ponto x_i em uma curva \mathbf{f} . Uma curva unidimensional no espaço d -dimensional é um vetor $\mathbf{f}(t)$ de d funções contínuas e uma única variável t , ou seja, $\mathbf{f}(t) = [f_1(t), f_2(t), \dots, f_d(t)]^T$, conforme a Figura 8. Essas funções são denominadas funções de coordenadas e o parâmetro t está relacionado ao ordenamento ao longo da curva. Seja \mathbf{f} uma curva suave no intervalo fechado $I \subseteq \mathbb{R}^1$ que não intercepta a si própria, isto é, $t_1 \neq t_2 \rightarrow f(t_1) \neq$

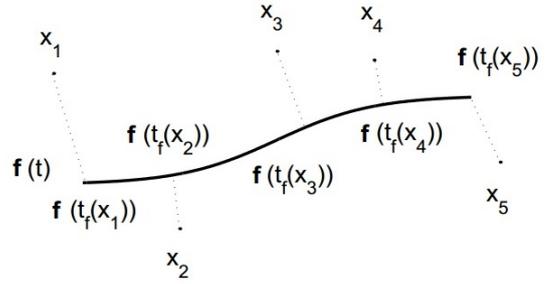


Figura 8. Extração da curva.

$f(t_2)$ e com seu comprimento finito dentro de uma esfera de dimensões finitas em \mathbb{R}^d .

Assim, de acordo com a definição de Hastie and Stuetzle (1989), a PC é auto-consistente, ou melhor, os pontos que compõem a curva principal constituem a média dos dados que nela projetam, conforme:

$$\mathbf{f}(t) = E[x | t_f(x) = t], \quad \forall t. \quad (4)$$

Diversos algoritmos foram propostos para extrair as CPs, neste trabalho, o algoritmo que foi utilizado para a extração das curvas foi o k -segmentos não suave, definido por Verbeek et al. (2002). Essa escolha é justificada pelo algoritmo ser robusto e ter convergência garantida além de ser menos susceptível a mínimos locais. O k -segmentos não suave (também referido como k -seg) propõe a construção passo a passo da curva principal criando-se primeiramente um único segmento e posteriormente o número de segmentos é aumentado progressivamente de acordo com os parâmetros do algoritmo. Todos os segmentos são interligados por segmentos independentes da curva principal.

3.7 Modelos de Classificação

A metodologia aqui proposta foi desenvolvida através da linguagem de programação MatLab, que é uma linguagem de alto nível orientada a diversos tipos de análises. O mesmo é um *software* científico para computação numérica que fornece um poderoso ambiente computacional para aplicações diversas.

Os dados resultantes do sistema de LE são manipulados com ferramentas matemáticas e estatísticas. A estrutura dos dados gerados pela LE utilizada, consiste em cinco variáveis medidas, agrupadas em um vetor linha $x_k = [x_{k1}, x_{k2}, \dots, x_{k5}]^T$, $x_k \in \mathbb{R}^n$. As variáveis obtidas pela LE foram: Frequência em Hertz (F), Impedância real (Zr), Impedância Imaginária (Zi), Capacitância (C) e Resistência (R). O conjunto possui 3672 observações, ou seja, 1224 para cada classe.

Antes de realizar a análise estatística ou aplicar algum método de classificação, recomenda-se que os dados obtidos por um sistema de LE tenham algum tipo de pré-processamento (Liu et al., 2013). Então, todo o banco de dados foi normalizado por meio da técnica z -scores. Essa técnica centraliza os resultados removendo o valor médio de cada recurso (\bar{x}) e, em seguida, os mesmos são dimensionados dividindo os recursos não constantes pelo seu desvio padrão (s), como mostra a Equação 5.

$$\mathbf{x} = \frac{\mathbf{x}_{old} - \bar{x}}{s}, \quad (5)$$

onde \mathbf{x}_{old} é o vetor de observações original e \mathbf{x} é o vetor normalizado. Como resultado, os dados ficam normalizados com média nula e variância unitária.

Após a normalização dos dados, os mesmos são divididos em conjuntos de treino e teste. E então, os dados são apresentados aos classificadores, os quais foram projetados fazendo o uso das técnicas apresentadas anteriormente, que foram ANN dos tipos SLP, RBF, SOM (1 dimensão) e PC.

Assim sendo, em seguida, as respectivas redes são criadas e treinadas. Com isso, os dados de validação são apresentados a rede, que os processa e sua resposta é interpretada para determinar a pertinência desses eventos as respectivas classes, como pode ser observado na Figura 9, que traz um fluxograma com os procedimentos realizados nos modelos que usam redes do tipo SLP ou RBF.

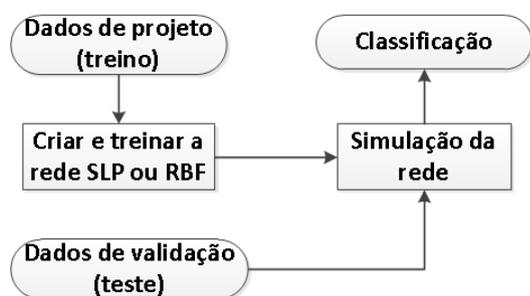


Figura 9. Modelos com SLP ou RBF.

A Figura 10 mostra o modelo projetado usando rede SOM 1D. Os dados são divididos e com isso a rede SOM é criada e treinada. Logo após a rede SOM ser treinada, os BMUs são determinados e cada classe é representada por uma quantidade de BMU. Assim ao apresentar os dados de teste a rede, é calculado a distância entre os os BMUs e os novos eventos (neste estudo foi adotado a norma de distância Euclidiana). A pertinência do evento é definida ao BMU que gere essa menor distância.

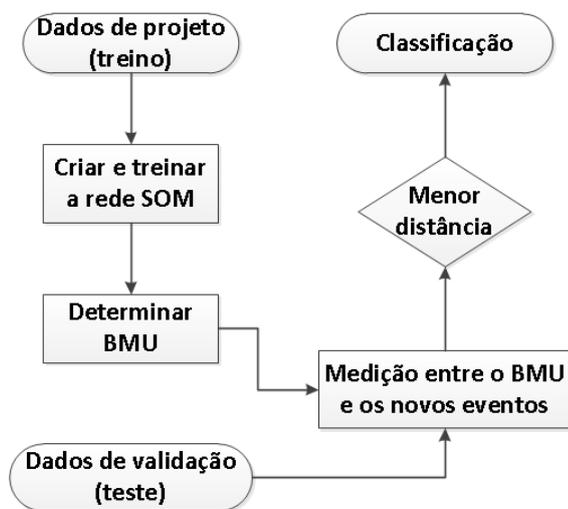


Figura 10. Modelos com SOM 1D.

As etapas do classificador projetado que usa PC estão expostas na Figura 11. O modelo inicia com a divisão dos

dados em conjuntos de treino e de validação e assim a extração das curvas é realizada, utilizando o algoritmo k-seg. É feito o cálculo da distância entre os novos eventos (dados de validação) e as curvas definidas. A métrica adotada foi a norma Euclidiana. Esse evento pertence a classe representada pela curva que atingir o menor valor.

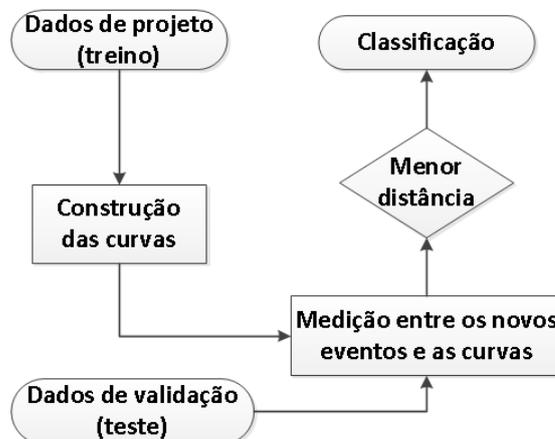


Figura 11. Modelos com PC.

4. RESULTADOS E DISCUSSÕES

A validação cruzada é usada para estimar a capacidade de generalização de um classificador, analisando o desempenho em dados previamente não vistos. Assim, o método escolhido foi o *hold-out* estratificado, o qual reserva um conjunto para teste e seu complemento para treinamento e assegura que cada classe seja representada com a mesma distribuição em ambos conjuntos.

A separação das amostras para as etapas de treinamento e validação foi antecedida por um procedimento de embaralhamento dos dados. Assim, a cada nova utilização do conjunto de amostras existentes, uma combinação diferente é associada a cada uma das etapas do algoritmo classificador. Então, esse processo foi aplicado vinte vezes, assim gerando uma boa estimativa dos resultados. Os percentuais de precisão equivalem à média mais o desvio padrão dos diferentes conjuntos gerados nas vinte execuções do método.

Para os modelos que usam redes SLP os parâmetros que tiveram melhor acurácia foram: 100 épocas de treinamento; a função de treinamento de Levenberg Marquardt; 25 neurônios na camada oculta; e os demais, como o gradiente de desempenho mínimo, foram usados seus respectivos padrões. Utilizando redes RBF, 100 é o número máximo de neurônios, 0.0 sendo a meta de erro quadrático médio e a taxa de propagação igual a 1.0.

Os modelos projetados com SOM (1 dimensão) utilizam os seguintes parâmetros: 100 épocas de treinamento e 100 neurônios; 3 o tamanho inicial da vizinhança; 'linkdist' a função de distância; e o número de etapas de treinamento para cobertura inicial do espaço de entrada e a função de topologia foram usados os valores padrões (Sousa et al., 2019). Já os modelos implementados com PC, utilizando o algoritmo k-seg, requer apenas o número de segmentos da curva como parâmetro de entrada, sendo 25 segmentos o valor adotado (Sousa et al., 2020).

A Tabela 2 traz os resultados obtidos usando a metodologia e as especificações aqui descritas em função dos eletrodos da LE utilizada (E1, E2 e E3). Lembrando que os resultados apresentados foram calculados conforme a validação cruzada já definida (*hold-out* estratificado com vinte conjunto de dados).

Tabela 2. Resultados da precisão (%).

Modelos	E1	E2	E3
SLP	73,5±4,2	70,9±2,6	63,5±3,1
RBF	83,9±1,3	72,2±1,1	69,8±2,1
SOM	95,4±1,1	83,4±1,6	79,2±2,1
PC	90,1±0,8	83,8±1,4	83,4±1,2

Analisando os modelos nota-se que os que usam SOM (1 dimensão) e PC foram os que atingiram melhor acurácia, atingindo de 79,2 a 95,4% e de 83,4 a 90,1% de precisão na classificação de novos eventos, respectivamente. Modelos projetados usando redes RBF tiveram resultados satisfatórios, ficando entre 69,8 e 83,9% de precisão e os modelos com SLP, de 63,5 a 73,5%, sendo o pior desempenho de classificação.

Com relação às arquiteturas dos eletrodos da LE observa-se que E1 foi o que gerou as melhores classificações, em todos os modelos. Ressaltando os que foram implementados com SOM e PC que obtiveram a melhor acurácia, atingindo 95,4% e 90,1% de precisão na classificação de novos eventos, respectivamente. Além disso, vale ressaltar que o desvio padrão desses modelos foram baixos, comparado aos demais, 1,1% e 0,8%, de modo respectivo, o que mostra pouca variância na classificação dos modelos projetados.

As demais arquiteturas, E2 e E3, ficaram com percentuais similares, onde os modelos implementados com SLP e RBF tiveram os piores resultados, ficando entre 63,5 a 72,2% de precisão. E, os melhores, empregando SOM e PC, com percentuais de 79,2 a 83,8% de acurácia.

Um diagnostico importante, quando se trata de problema de classificações, é a análise da matriz de confusão. Essa matriz diz respeito do percentual de classificações confundidas com as demais classes. A seguir, as matrizes dos melhores resultados obtidos que foram utilizando a arquitetura E1 e os modelos empregando SOM e PC. Recordando que os percentuais apresentados equivalem às médias e os desvios padrões das matrizes de confusão obtidos pelos vinte bancos de dados utilizados nas análises.

Tabela 3. Matriz de confusão: E1 com modelo SOM (%).

	GM	GD/ID	ID
GM	93,3±2,3	2,7±1,9	0,4±0,6
GD/ID	4,9±2,1	95,2±2,5	2,0±1,1
ID	1,8±1,1	2,1±1,1	97,6±1,1

A Tabela 3 mostra a matriz de confusão usando o modelo SOM (1 dimensão), que os percentuais ficaram a cima de 93,0% de precisão, o que mostra um percentual baixo de confusão. O maior percentual de confusão foi entre as amostras de GM e GD/ID, com 4,9% de confusão entre si. Os demais ficaram abaixo de 2,7%.

A Tabela 4 traz a matriz de confusão com modelo PC, observe que todas as classes GM, GD/ID e ID tiveram bons desempenhos, com percentuais acima de 88,0%. As classes que tiveram maiores índices de confusão foram ID e GD/ID, com 8,5% e as demais classes foram confundidas entre si ficando com índices na faixa de 3,0 a 6,0%.

Tabela 4. Matriz de confusão: E1 com modelo PC (%).

	GM	GD/ID	ID
GM	93,9±1,6	5,9±1,7	3,0±1,0
GD/ID	4,0±1,4	88,1±1,9	8,5±2,1
ID	2,0±1,0	5,9±1,4	88,4±2,3

A Figura 12 mostra exemplo do espaço de características formado pela combinação das variáveis Zi, C e R, para as substâncias analisadas (GM, GD/ID e ID). Os dados apresentam uma disposição no espaço de características de forma alongada e não linear. Essa disposição característica dos dados pode ser uma justificativa dos melhores resultados de acurácia terem sido obtidos usando as técnicas SOM (1 dimensão) e PC, compreendendo que com essas técnicas é possível gerar uma boa representação destes dados.

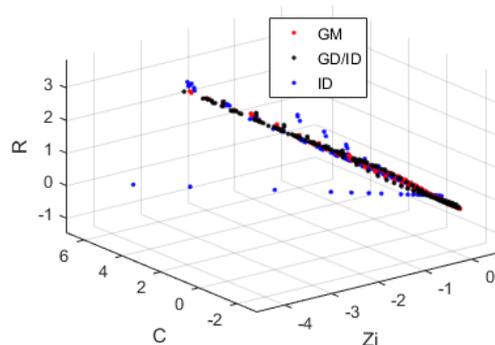


Figura 12. Espaço de características.

5. CONCLUSÃO

O intuito desse trabalho era comparar a aplicação de diferentes ferramentas para classificar amostras de três realçadores de sabor (Glutamato, Guanilato e Inosinato).

Após a metodologia determinada e após a aplicação da mesma no banco de dados resultante de uma língua eletrônica, os resultados alcançados através de cálculos de precisão demonstraram que os modelos chegaram a atingir a precisão de 95%. Precisão alcançada com o modelo usando redes SOM.

Outra observação que foi realizada é com relação as arquiteturas dos eletrodos, onde todos os modelos obtiveram melhores percentuais de acurácia analisando o E1, indicando ser o eletrodo mais discriminante no sistema.

Como trabalhos futuros, os autores pretendem fazer novos testes combinando os eletrodos e envolvendo máquinas de vetor de suporte, ensembles e redes profundas.

AGRADECIMENTOS

Agradecimento à CNPq (Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico) pela bolsa de mestrado concedida e a FAPEMIG (Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de Minas Gerais).

REFERÊNCIAS

- Asan, U. and Ercan, S. (2012). *Computational Intelligence Systems in Industrial Engineering: With Recent Theory and Applications*, volume 6. Atlantis Press.
- Beale, M.H., Hagan, M.T., and Demuth, H.B. (2012). Neural network toolbox 7 user's guide. In *R2012a, The MathWorks Inc.*
- Braz, D.C., Neto, M.P., Shimizu, F.M., Sá, A.C., Lima, R.S., Gobbi, A.L., Melendez, M.E., Arantes, L.M.B., Carvalho, A.L., Paulovich, F.V., and Oliveira Jr, O.N. (2022). Using machine learning and an electronic tongue for discriminating saliva samples from oral cavity cancer patients and healthy individuals. *Talanta*, 243, 123327.
- Chen, X., Xu, Y., Meng, L., Chen, X., Yuan, L., Cai, Q., Shi, W., and Huang, G. (2020). Non-parametric partial least squares–discriminant analysis model based on sum of ranking difference algorithm for tea grade identification using electronic tongue data. *Sensors and Actuators B: Chemical*, 311, 127924.
- Cheng, L., Wang, Y., Zhang, J., Xu, L., Zhou, H., Wei, K., Peng, L., Zhang, J., Liu, Z., and Wei, X. (2021). Integration of non-targeted metabolomics and e-tongue evaluation reveals the chemical variation and taste characteristics of five typical dark teas. *LWT*, 150, 111875.
- Christinelli, W.A., Shimizu, F.M., Facure, M.H., Cerri, R., Oliveira Jr., O.N., Correa, D.S., and Mattoso, L.H. (2021). Two-dimensional mos2-based impedimetric electronic tongue for the discrimination of endocrine disrupting chemicals using machine learning. *Sensors and Actuators B: Chemical*, 336, 129696.
- Fukushima, K.L. (2017). *Desenvolvimento de sensores nanoestruturados para análise de realçadores de sabor em água*. Master's thesis, Programa de Pós-Graduação em Engenharia de Biomateriais, Universidade Federal de Lavras.
- Guedes, M.D.V., Marques, M.S., Guedes, P.C., Contri, R.V., and Guerreiro, I.C.K. (2021). The use of electronic tongue and sensory panel on taste evaluation of pediatric medicines: a systematic review. *Pharmaceutical Development and Technology*, 26(2), 119–137.
- Hastie, T. and Stuetzle, W. (1989). Principal curves. *Journal of the American Statistical Association*, 84(406), 502 – 516.
- Haykin, S. (1996). *Adaptive Filter Theory*. Prentice Hall, 3 edition.
- Haykin, S. (1999). *Neural Networks - A Comprehensive Foundation*. Prentice Hall, 2 edition.
- Kiani, H., Beheshti, B., Borghai, A.M., and Rahmati, M.H. (2021). Application of a voltammetric electronic tongue combined with chemometric approaches for the early classification of heavy metals in sunflower oil. *Journal of Food Processing and Preservation*, 45(9), e15563.
- Liu, M., Wang, M., Wang, J., and Li, D. (2013). Comparison of random forest, support vector machine and back propagation neural network for electronic tongue data classification: Application to the recognition of orange beverage and chinese vinegar. *Sensors and Actuators B: Chemical*, 177(Supplement C), 970 – 980.
- Lvova, L., Jahatspanian, I., Mattoso, L.H., Correa, D.S., Oleneva, E., Legin, A., Di Natale, C., and Paolesse, R. (2020). Potentiometric e-tongue system for geosmin/isoborneol presence monitoring in drinkable water. *Sensors*, 20(3).
- Milani, T.M.G. (2013). *Estudo da aromatização pré-extrusão e das condições de extrusão sobre as características físicas e retenção de aroma em proteína isolada de soja*. Master's thesis, Instituto de Biociências, Letras e Ciências Exatas, Universidade Estadual Paulista Julio de Mesquita Filho.
- Nery, E.W. and Kubota, L.T. (2016). Integrated, paper-based potentiometric electronic tongue for the analysis of beer and wine. In *Analytica Chimica Acta*, volume 918, 60 – 68. Elsevier.
- Peris, M. and Escuder-Gilabert, L. (2013). On-line monitoring of food fermentation processes using electronic noses and electronic tongues: a review. In *Analytica chimica acta*, volume 804, 29 – 36. Elsevier.
- Rahman, Z., Siddiqui, A., and Khan, M.A. (2013). Orally disintegrating tablet of novel salt of antiepileptic drug: Formulation strategy and evaluation. *European Journal of Pharmaceutics and Biopharmaceutics*, 85(3, Part B), 1300–1309.
- Ross, C.F. (2021). Considerations of the use of the electronic tongue in sensory science. *Current Opinion in Food Science*, 40, 87–93.
- Sousa, L.P.O., Ferreira, D.D., Fukushima, K., and Oliveira, J. (2019). Análise de dados de língua eletrônica baseada em redes som 1d. In *14^o Simpósio Brasileiro de Automação Inteligente*, 1091 – 1096. Galoá.
- Sousa, L.P.O., Fukushima, K.L., Scagion, V.P., Facure, M.H., Correa, D.S., Oliveira, J.E., and Ferreira, D.D. (2020). A principal curves-based method for electronic tongue data analysis. *IEEE Sensors Journal*, 21(4), 4957–4965.
- Verbeek, J.J., Vlassis, N., and Krose, B. (2002). A k-segments algorithm for finding principal curves. *Pattern Recognition Letters*, 23(8), 1009 – 1017.
- Vesanto, J., Himberg, J., Alhoniemi, E., and Parhankangas, J. (2000). Som toolbox for matlab 5. *Helsinki University of Technology*.
- Vlasov, Y., Legin, A., Rudnitskaya, A., Di Natale, C., and D'amico, A. (2005). Nonspecific sensor arrays ("electronic tongue") for chemical analysis of liquids (iupac technical report). *Pure and Applied Chemistry*, 77(11), 1965–1983.
- Wei, Z. and Wang, J. (2014). Tracing floral and geographical origins of honeys by potentiometric and voltammetric electronic tongue. In *Computers and Electronics in Agriculture*, volume 108, 112 – 122. Elsevier.
- Zhang, L., Wang, X., Huang, G.B., Liu, T., and Tan, X. (2019). Taste recognition in e-tongue using local discriminant preservation projection. *IEEE Transactions on Cybernetics*, 49(3), 947–960.
- Zielinski, A.A., Haminiuk, C.W., Nunes, C.A., Schnitzler, E., Ruth, S.M., and Granato, D. (2014). Chemical composition, sensory properties, provenance, and bioactivity of fruit juices as assessed by chemometrics: a critical review and guideline. *Comprehensive reviews in food science and food safety*, 13(3), 300 – 316.