



HAL
open science

Optimisation de techniques de reconnaissance de formes pour le traitement du signal en sortie d'un système de capteurs multi-gaz

Chaouki Regoui, Olivier Ramalho, Séverine Kirchner

► **To cite this version:**

Chaouki Regoui, Olivier Ramalho, Séverine Kirchner. Optimisation de techniques de reconnaissance de formes pour le traitement du signal en sortie d'un système de capteurs multi-gaz. Colloque Automatique, Génie informatique, Image, Signal, AGIS'97, Dec 1997, Angers, France. hal-00697212

HAL Id: hal-00697212

<https://hal.science/hal-00697212>

Submitted on 14 May 2012

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

OPTIMISATION DE TECHNIQUES DE RECONNAISSANCE DE FORMES POUR LE TRAITEMENT DU SIGNAL EN SORTIE D'UN SYSTÈME DE CAPTEURS MULTI-GAZ

Chaouki REGOUI ❶❷, Olivier RAMALHO ❷, Séverine KIRCHNER ❷

- ❶ Laboratoire SIP, UFR Mathématiques-Informatique, Université Paris V, 45 rue des saints pères 75006 Paris, France, ☎:33.1.44.55.35.56, fax:33.1.44.55.35.36, e-mail: regc@math-info.univ-paris5.fr
- ❷ Centre Scientifique & Technique du Bâtiment, CSTB, service EAE, BP02 77421 Marne-la-Vallée Cedex2, France, ☎:33.1.64.68.82.66, fax:33.1.64.68.84.73, e-mail: kirchner@cstb.fr

1. Objectif:

Un signal multi dimensionnel est produit par la procédure d'acquisition d'un système de capteurs multi gaz (''nez électronique''), permettant l'assignation, à chaque échantillon odorant, d'une signature unique: l'*empreinte* du produit analysé.

Nous nous intéressons à l'optimisation d'outils de reconnaissance de formes (en particulier les techniques neuronales). Notre but est l'amélioration du pouvoir discriminant du système multi gaz, utilisé pour la reconnaissance de profils gazeux odorants, émis par les matériaux de construction.

Il s'agit, plus précisément, de compenser les défauts des capteurs par des techniques d'analyse de données et d'apprentissage afin d'obtenir un système de capteurs discriminant, répondant en temps réel (quelques minutes) et jouissant d'une robustesse de réponse vis à vis de conditions perturbantes [1].

Mots-clés: signal multi dimensionnel, ''nez électronique'', réseaux de neurones, reconnaissance de formes.

2. Problématique

L'utilisation de nouveaux matériaux synthétiques telles moquettes, dalles plastiques, peintures etc., dans les locaux à usage d'habitation ou commerciaux, a pris une ampleur ces dernières années en relation avec l'amélioration du confort, de la réduction du bruit, de la maîtrise de l'énergie et même comme facteur d'amélioration du bien être. Au même moment, le nombre des plaintes de différents effets (notamment l'aspect odorant) sur le confort et la santé dus à l'usage de tels matériaux n'a cessé de croître. L'émission, par ces matériaux, de composés organiques volatiles (COVs) étant fréquemment incriminée, en tant que cause. Ceci a entraîné le

besoin de disposer d'une qualification globale de la qualité de l'air intérieur en vue de répondre à différentes applications (qualification de matériaux sur critère de confort, asservissement de ventilation...).

Plusieurs techniques physico-chimiques (Chromatographie en phase gazeuse, spectroscopie de masse etc.) ont été utilisées dans le but d'évaluer la qualité de l'air intérieur en évaluant les composés organiques volatiles (COVs) émis par les matériaux [2, 3]. Ces techniques demeurent cependant coûteuses et lourdes à mettre en oeuvre. D'autre part, l'aspect odorant peut difficilement être pris en charge par ces techniques du fait même de leurs principes de fonctionnement car la détermination de la composition chimique d'un gaz ne rend pas compte de son caractère odorant.

Le processus subjectif et complexe qui permet d'en rendre compte le plus fidèlement est le recours aux panels de sujets humains. Cette méthode prêche cependant par sa lourdeur (sélection des sujets, logistique), son coût et le temps nécessaire à sa mise en oeuvre.

C'est pourquoi, pour allier la disponibilité de la première méthode (techniques physico-chimiques) à l'efficacité de la seconde, des travaux ont été réalisés, pour évaluer les composés odorants des matériaux de construction par des techniques physico-chimiques couplées à l'analyse sensorielle [4]. Il s'agissait d'examiner la relation entre composés odorants chimiques et réponse sensorielle (en intensité d'odeur). Cette approche, tout en permettant de cerner cette relation, ne permettait pas pour autant de s'affranchir du panel humain.

3. Démarche

Nous nous intéressons à la caractérisation odorante (reconnaissance, classification de profils odorants) des

différentes sources de pollution dues aux matériaux de construction et de décoration utilisés dans les locaux. Un système multi capteurs de gaz ("nez électronique") est utilisé pour l'acquisition des profils de certains composés émis par les matériaux de construction permettant l'évaluation de la qualité de l'air intérieur.

L'odeur est traduite en un ensemble de descripteurs mono dimensionnels différents (les signaux issus des capteurs multi-gaz).

Notre travail compte, à terme, utiliser des données sensorielles et des analyses physico-chimiques de matériaux pour guider l'apprentissage du système de capteurs multi-gaz (figure 1).

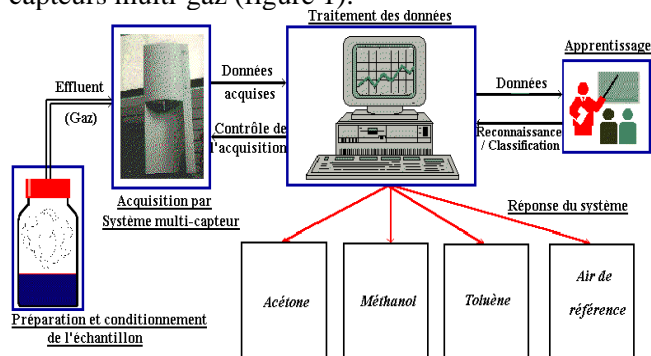


Figure 1: Principe général de notre démarche

Une fois l'apprentissage exécuté, le but est d'obtenir un système de capteurs portable, répondant en temps-réel (quelques minutes) et s'affranchissant de tout instrument analytique ou aide sensorielle pour une analyse d'ambiance intérieure.

Mathématiquement, cela revient à trouver une application entre l'espace des capteurs et l'espace des caractéristiques sensorielles (espace des impressions odorantes), le critère primordial étant de respecter la proximité dans l'espace sensoriel en travaillant dans l'espace des capteurs.

3.1 Le matériel utilisé: un "nez électronique"

De prometteuses techniques d'analyse des propriétés aromatiques (les capteurs multi-gaz), ont vu le jour et commencent à trouver application dans l'agro-alimentaire, l'emballage, les cosmétiques....

Récemment, des applications environnementales ont été abordées notamment concernant la qualité de l'air. Leur développement pour l'analyse des ambiances intérieures est entrepris. Ces systèmes utilisent des capteurs à base de différents types de matériaux actifs (oxydes métalliques, phtalocyanines, polymères conducteurs, cristaux de quartz...).

Pour un usage en "capteurs d'odeurs", il est exigé des capteurs individuels de répondre à un large éventail de gaz de sorte qu'en utilisation en réseaux ou groupes

de capteurs, ils permettent de discriminer des mélanges chimiques complexes sans le recours à une séparation des composés individuels.

Dans une telle optique, un tel instrument tend à imiter l'olfaction humaine d'où le surnom de *nez électronique*.

Un système de capteurs multi-gaz doit en outre être doté d'un outil approprié de reconnaissance de formes permettant de traiter le signal multi dimensionnel issu des capteurs et reconnaître des odeurs simples ou complexes.

Fonctionnellement, un tel système se décompose en trois procédures distinctes (figure 2):

- l'échantillonnage ou préparation de l'échantillon,
- la mesure proprement dite et
- le traitement des données.

Le signal d'acquisition issu de ces capteurs dépend donc de plusieurs paramètres relatifs à la nature de l'odeur elle-même (type, concentration) mais aussi aux procédures d'échantillonnage (système de livraison du flux d'odeur, gaz porteur, conditions ambiantes de température et humidité...), aux capteurs utilisés et aux techniques de traitement de l'information choisies.

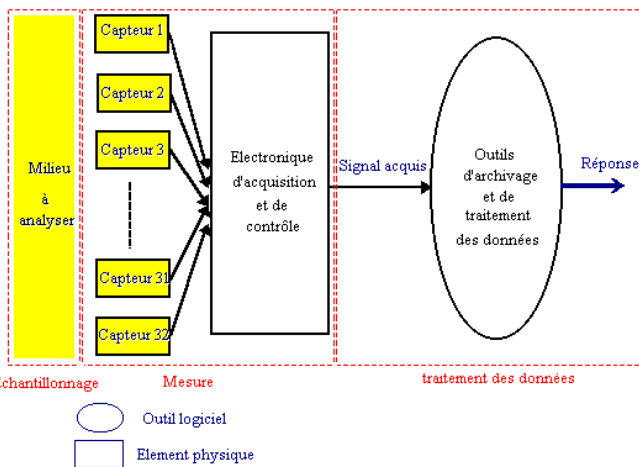


Figure 2: Schéma de principe d'un système multi-capteur (32 capteurs)

Ces systèmes souffrent cependant de plusieurs imperfections et plusieurs aspects restent à améliorer:

- **la mauvaise reproductibilité des réponses:** dans un laps de temps relativement court (quelques mois), dû à l'empoisonnement chimique (par certains composés agressifs) des capteurs et/ou à la dérive temporelle de leur caractéristiques,
- **les conditions expérimentales:** à maîtriser et à simplifier, afin de s'affranchir des perturbations,
- **la grande sensibilité des capteurs à des composés volatiles non odorants:** qui perturbe et masque la reconnaissance des substances odorantes,

- **le choix de la ligne de base:** peu aisé car il s'agit de définir une ambiance "sans odeur".

- **la reproductibilité de la fabrication des capteurs:** qui pose le problème de la pérennité des bases de données acquises sur de longues périodes.

Le choix de la technologie de capteurs est de ce fait un compromis sensibilité/dérive/durée de vie.

3.2 Acquisition du signal

Le système que nous utilisons comporte 32 capteurs chimiques à technologie polymères conducteurs ayant des gammes de sensibilité aux molécules ciblées qui se chevauchent et qui produisent un signal multi dimensionnel [5]. Chaque capteur polymère du système multi capteurs présente des changements spécifiques de sa résistance électrique, suite à l'exposition à différentes substances. Les données acquises représentent la variation relative de résistance des 32 capteurs durant la phase d'acquisition. Cette réponse est globale à toutes les molécules dans le cas d'un mélange, et correspond à la somme (intégration) des interactions de ces différentes molécules avec les capteurs [6]. Une analyse par des techniques statistiques et une classification neuronale serviront au traitement des données.

Protocole d'acquisition:

Se basant sur les seuils de concentration minimum permettant une réponse des capteurs aux différents gaz, l'acquisition a été effectuée. Pour chaque gaz, après une phase de stabilisation du signal des capteurs de 30 secondes (ligne de base du système correspondant à l'air ambiant), des échantillons de gaz sont soumis aux capteurs durant 120 secondes pour opérer l'acquisition. Après chaque acquisition, un lavage des capteurs au moyen d'une solution appropriée est effectué et le retour à la ligne de base opéré. La fréquence d'échantillonnage du signal d'entrée est de 1 Hertz et la sensibilité limite de détection est de 0.01% (en variation relative de résistance).

Données acquises:

La base des données acquises comporte 74 échantillons, représentant quatre substances chimiques: Acétone (14 échantillons), méthanol (15 échantillons), toluène (31 échantillons) et un air de référence (14 échantillons). Ces composés chimiques ont été choisis car représentatifs de ceux émis par les matériaux de construction. L'acétone et le toluène figurant parmi ceux émis par les revêtements de sol et de mur par exemple.

Le découpage des échantillons a été effectué sans a priori. La préparation des échantillons ayant été un

peu ardue (détermination des seuils de détection des capteurs nécessitant plus de manipulations, mise au point du protocole de préparation des échantillons eux-mêmes pour éviter, autant que possible, l'influence de paramètres externes...) ont limité le nombre d'échantillons acquis. Ceci a poussé à l'utilisation des toutes les acquisitions disponibles notamment pour le toluène qui avait servi à une première caractérisation des capteurs d'où la prépondérance des échantillons de ce gaz.

4. Traitement des données

Étant donné la récente utilisation de ce type d'instrumentation en évaluation de la qualité de l'air intérieur, ce travail est avant tout axé sur une évaluation des réponses du système aux différents composés chimiques rencontrés en ambiances intérieures et une estimation de l'influence des différentes conditions perturbantes notamment de température et d'humidité. Les techniques utilisées pour traiter les données sont de deux types:

- descriptif ou exploratoire (non supervisé) afin d'évaluer l'applicabilité du système au type de données manipulées. Il s'agira essentiellement d'analyse en composantes principales (A.C.P) et de classification hiérarchique,

- classifieur, afin d'opérer une tâche déterminée (reconnaissance, classification) sur les données étiquetées. Il s'agira dans ce cas, d'analyse discriminante et de classification neuronale.

A ce niveau de l'étude et afin de garder toute l'information utile, le signal n'est pas pré traité et l'analyse est effectuée sur le signal d'acquisition brut. Les données sont analysées par comparaison des deux phases du signal (figure 3) :

a)- la phase dynamique: correspondant au début du processus d'adsorption/désorption du gaz sur la matériau actif du capteur, entraînant une importante variation de la réponse. L'information considérée, a été la pente sur les 10 premières secondes sur la montée dynamique.

b)- la phase statique: correspondant à l'équilibre du processus d'adsorption/désorption donnant lieu à un seuil stabilisé de réponse. L'information considérée a été la moyenne sur les trente deux composantes du signal.

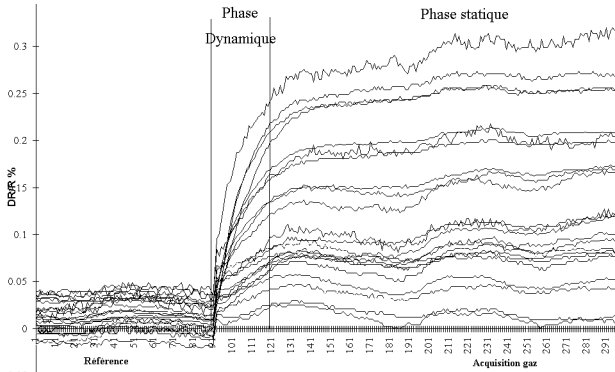


Figure 3: Réponse du système multi capteurs au toluène: phases statique et dynamique

L'espace de représentation choisi est celui des capteurs, à 32 dimensions. Chaque échantillon est représenté par un vecteur descriptif à 32 composantes correspondant aux trente deux canaux ou capteurs du système. Chaque composante du vecteur est une valeur réelle.

4.1 Analyse statistique des données

Pour explorer le nuage d'échantillons, il a été procédé à une analyse en composantes principales normée (A.C.P), par souci de réduction de dimensionnalité et afin d'utiliser les premières coordonnées factorielles créées pour une classification hiérarchique de l'ensemble des échantillons (résultats: voir annexe). La classification hiérarchique servira ultérieurement à l'analyse de proximité des échantillons afin notamment de déceler des erreurs expérimentales éventuelles (manipulation, conditions expérimentales...).

Phase statique:

L'analyse en composantes principales a exhibé un premier axe factoriel caractéristique des échantillons de méthanol. Cependant, elle dénote une importante confusion entre les échantillons (figure 4).

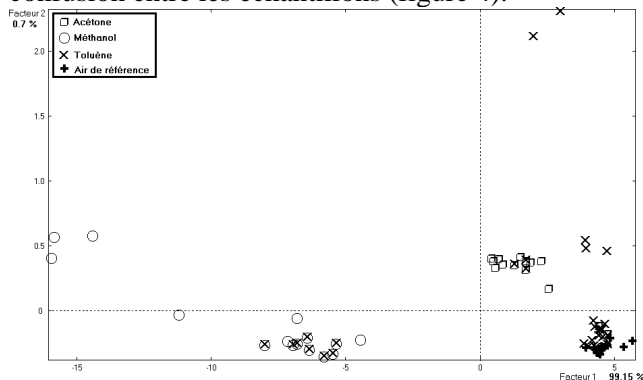


Figure 4: Analyse en composantes principales sur plateau statique

Le système est donc nettement plus sensible au méthanol comparativement aux autres composés.

En étiquetant les données, les résultats de l'analyse discriminante par arbre de décision binaire permettent de voir que les erreurs de classification sont dues aux échantillons de toluène confondus avec ceux des autres composés comme explicité dans la table de confusion (tableau 1). Les chiffres entre parenthèses renvoient au nombre d'échantillons utilisés en test c'est à dire n'ayant pas concouru au calcul de la fonction discriminante. Sur les 74 échantillons, 38 ont servi à l'apprentissage (calcul de la fonction discriminante) et 36 au test.

Classe d'origine d'affectation	acétone (7)	méthanol (7)	toluène (15)	air réf. (7)
acétone	6	0	2	0
méthanol	0	7	4	0
toluène	0	0	5	0
air réf.	1	0	4	7

Tableau 1: Table de confusion de l'analyse discriminante (information statique)

Phase dynamique:

L'étude de la phase dynamique par A.C.P montre une séparation des échantillons sensiblement meilleure qu'en statique. Le premier axe factoriel caractéristique des échantillons de méthanol permet cette fois la totale séparation de ceux-ci des autres composés. Le reste des échantillons présente une meilleure séparation qu'en statique (figure 5).

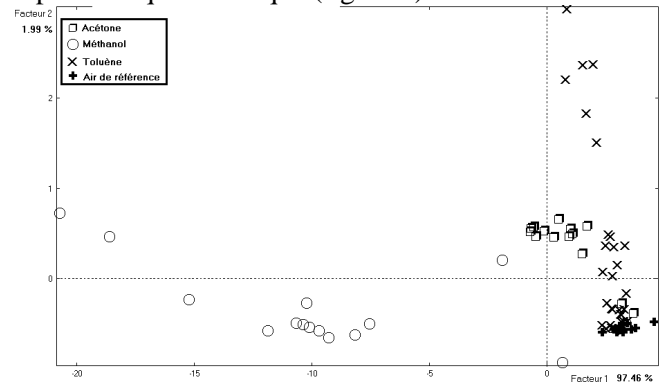


Figure 5: Analyse en composantes principales sur information dynamique

Les résultats de l'analyse discriminante opérée sur information dynamique améliorent ceux obtenus par l'information statique surtout concernant les échantillons de toluène tout en dégradant ceux de l'air de référence (tableau 2). L'importance numérique des échantillons de toluène utilisés, n'a pas cependant permis de lever l'ambiguïté entre toluène et air de référence. Ceci est peut être inhérent à la qualité des échantillons, car même pour une base d'échantillons comptant autant (7) de toluène que de chacun des autres composés, les résultats sont sensiblement les mêmes.

Classe d'origine d'affectation	acétone (7)	méthanol (7)	toluène (15)	air réf. (7)
acétone	6	0	0	0
méthanol	0	7	0	0
toluène	1	0	15	5
air référence	0	0	0	2

Tableau 2: Table de confusion de l'analyse discriminante (information dynamique)

Phase globale:

En utilisant les deux phases du signal, statique et dynamique (information globale), les résultats de l'A.C.P. exhibent une meilleure séparation (que pour chaque information séparément) des échantillons d'acétone et de méthanol (figure 6).

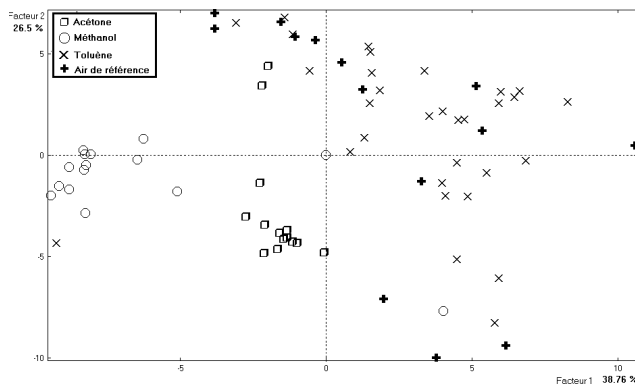


Figure 6: Analyse en composantes principales sur information globale

La source d'erreur demeure le toluène avec l'air de référence et la confusion des échantillons de ces deux classes subsiste (tableau 3).

Classe d'origine d'affectation	acétone (7)	méthanol (7)	toluène (15)	air réf. (7)
acétone	6	0	0	0
méthanol	0	6	0	0
toluène	0	1	10	6
air référence	1	0	5	1

Tableau 3: Table de confusion de l'analyse discriminante (information globale)

Le tableau ci-dessous résume les résultats de l'analyse discriminante avec les différentes informations utilisées (statique, dynamique et globale), en pourcentage d'échantillons bien classés de la base de test (tableau 4):

	statique	dynamique	globale
acétone	86 %	86 %	86 %
méthanol	100 %	100 %	86 %
toluène	33 %	100 %	67 %
air réf.	100 %	29 %	14 %
Totalité	69 %	83 %	64 %

Tableau 4: Taux d'échantillons de test bien classés en analyse discriminante

4.2 Classification neuronale des données

Les réseaux de neurones permettent non seulement de trouver des relations fortement non linéaires liant les données, mais aussi de remédier à la dérive des capteurs en opérant un apprentissage incrémental du système qui intégrerait ces variations.

Les réseaux que nous avons utilisé sont des perceptron multi couches utilisant l'algorithme de rétro propagation du gradient, l'initialisation des poids synaptiques étant aléatoire à valeurs normalisées [7]. L'architecture optimale de réseau trouvée était avec une couche d'entrée composée de 32 neurones (un par canal ou capteur) pour l'information statique et dynamique et 64 en global, une couche cachée et une couche de sortie avec un codage (un neurone par classe).

Le calcul des paramètres du réseau de neurones (apprentissage et évaluation) sont effectués sur les mêmes bases d'apprentissage (38 échantillons) et de test (36 échantillons) que celles utilisées par l'analyse discriminante (tableau 5).

	Échantillons d'apprentissage	Échantillons de test
Acétone	7	7
Méthanol	8	7
Toluène	16	15
air de référence	7	7
Total	38	36

Tableau 5: Nombre d'échantillons d'apprentissage et de test

Les taux d'échantillons de test bien classés présentés ci-dessous, ont nécessité, une fois le réseau neuronal optimal configuré pour la base de test utilisée, une dizaine de minutes d'apprentissage sur une machine de type P.C. dotée d'un processeur Pentium cadencé à 100 Mhz. Les résultats obtenus étaient les suivants:

	Statique	Dynamique	globale
Acétone	100 %	100 %	100 %
Méthanol	100 %	86 %	100 %
Toluène	73 %	87 %	87 %
air réf.	86 %	100 %	100 %
Totalité	86 %	92 %	94 %

Tableau 6: Classification neuronale sur phases statique, dynamique et globale

5. Discussion des résultats et perspectives

L'exploration statistique des données (A.C.P) a permis d'entamer une investigation des phénomènes chimiques ayant lieu au niveau des capteurs et d'envisager l'application de tels système dans le domaine nous intéressant. Le premier facteur, englobant une grande partie de l'inertie du nuage d'échantillons, marque une séparation des échantillons de méthanol par rapport aux autres échantillons, ce qui dénoterait une très grande sensibilité des capteurs à ce composé comparativement à tous les autres.

Les résultats obtenus par analyse discriminante ont montré une bonne reconnaissance des échantillons de méthanol puis d'acétone par rapport au toluène et à l'air de référence qui restent confus entre eux. L'information dynamique améliorant les performances du système par rapport au statique. Les résultats obtenus en utilisant l'information globale ont été paradoxalement dégradés par rapport à ceux utilisant chaque information séparément. ceci pourrait être due à la normalisation opérée pour fusionner les deux types d'information. Ces résultats, pas très bons dans l'ensemble, ont nécessité une classification plus fine des échantillons en utilisant des techniques à base d'apprentissage (réseaux de neurones) pour traiter ces données.

L'approche neuronale a permis d'atteindre des taux de classification très satisfaisants. Les erreurs constatées étaient toujours dues principalement à la confusion des échantillons de toluène et de l'air de référence. Ces résultats mettent en avant les relations très complexes et non linéaires régissant les interactions composés-capteurs.

En conclusion, il a été mis en évidence l'importance de l'information dynamique dans la séparation des différents composés. Concernant les erreurs constatées (confusion toluène-air de référence), nous avançons deux hypothèses pour les expliquer:

- soit que l'air de référence sensé être neutre était passablement chargé de molécules gazeuses diverses (traces perceptibles par le système),
- soit la sensibilité du système au toluène est trop faible pour donner une réponse caractéristique de ce gaz. Cette hypothèse étant étayée par la faible amplitude de la réponse du système au toluène comparativement aux autres composés.

Les perspectives de ce travail portent sur l'optimisation de l'outil de reconnaissance de formes ainsi développé et sa validation (en cours) sur une

autre base de composés, de la famille des aromatiques, choisis en fonction de certains critères chimiques structurels. Nous nous intéressons à la sensibilité du système aux variations de ces critères.

Les résultats obtenus démontrant la faisabilité de telles techniques pour notre application, nous entamons l'évaluation du système développé sur une nouvelle base de données plus conséquente (plusieurs centaines d'échantillons) et procédons à l'apprentissage du réseau de neurones avec une classification sensorielle. Cette classification des échantillons sur la base de leur intensité est effectuée par un panel humain formé afin d'étalonner le système.

Bibliographie

1. REGOUI Chaouki, RAMALHO Olivier, KIRCHNER Séverine, Septembre 1997 "*Discrimination of volatile organic compounds emitted by building materials using an electronic nose*" Healthy Buildings/IAQ'97, Washington D.C.,. Accepté.
2. Karpe P., Kirchner S. et Rouxel P., 1995. "*Thermal desorption-gas chromatography-mass spectrometry-flame ionization detection-sniffer multi-coupling: a device pour the determination of odorous volatile organic compounds in air*", Journal of Chromatography A, vol. 708, p. 105.
3. Zellweger C., Hill M., Gehrig R. et Hofer P., Janvier 1997. "*Emissions of volatile organic compounds (VOC) from building materials*", EMPA report.
4. Karpe P., décembre 1995 "*Analyses physico-chimiques des phases volatiles émises par les revêtements de sol et de mur. Caractérisation des composés odorants et des odeurs des matériaux*", thèse de doctorat de l'université Paris 6, spécialité: spectrochimie organique.
5. Gardner J.W. & Bartlett P.N., 1994. "*A brief history of electronic noses*", Sensors & Actuators B, 18-19, 211-220.
6. NATO advanced research workshop, aout 1991 "*Sensors and sensory systems for an electronic nose*", Reykjavik Iceland, Kluwer ed.
7. CHEN C.H., 1996 "*Fuzzy logic & neural network handbook*" Mc Graw Hill series on computer engineering.

Annexe

