

RESUMEN

La detección de olores mediante sistemas de olfato artificial, denominados narices electrónicas, es un tema de investigación actual con aplicaciones a nivel militar como la detección de sustancias explosivas. La necesidad de evitar el tráfico ilegal de este tipo de sustancias debido a temas de seguridad nacional ha motivado la implementación y optimización de un prototipo e-nose para la detección de sustancias explosivas, parte del proyecto de investigación 2016-pic-009. Sin embargo, se ha dado un mayor enfoque a la optimización del hardware y no a los modelos con los cuales el prototipo será capaz de clasificar y cuantificar sustancias explosivas como TNT y pólvora en base doble. Por lo cual, el propósito de este trabajo de investigación es generar y analizar modelos de machine learning mediante las técnicas lineales: mínimos cuadrados parciales y regresión logística, y técnicas no lineales: red neuronal perceptrón multicapa y red neuronal profunda LSTM, integrados en una interfaz gráfica de usuario para el reentrenamiento o prueba de los modelos. Los resultados del proyecto muestran un mejor desempeño en la clasificación de sustancias explosivas con concentraciones entre 3 y 5gr con 1mL de sustancia dopante que con concentraciones entre 0.1 y 3gr con 2mL de sustancia dopante. Además, en cuanto a la cuantificación el R^2 no supero el 0.57 para las condiciones iniciales del prototipo y el 0.22 para las actuales.

PALABRAS CLAVE:

- **MACHINE LEARNING**
- **MÍNIMOS CUADRADOS PARCIALES**
- **REGRESIÓN LOGÍSTICA**
- **RED NEURONAL ARTIFICIAL PERCEPTRÓN MULTICAPA**
- **RED NEURONAL ARTIFICIAL PROFUNDA LSTM**

ABSTRACT

The detection of odors by artificial smell systems, called electronic noses, is a subject of current research with military-level applications such as the detection of explosive substances. The need to prevent illegal trafficking of these substances due to national security issues has motivated the implementation and optimization of an e-nose prototype for the detection of explosive substances, part of the 2016-pic-009 research project. However, greater focus has been given to hardware optimization and not to the models with which the prototype will be able to classify and quantify explosive substances such as TNT and double-base gunpowder. Therefore, the purpose of this research work is to generate and analyze machine learning models with linear techniques: partial least squares and logistic regression, and nonlinear techniques: multilayer perceptron neural network and LSTM deep neural network, integrated into a graphical user interface for retraining or testing models. The results of the project show a better performance in the classification of explosive substances with concentrations between 3 and 5gr with 1mL of doping substance than with concentrations between 0.1 and 3gr with 2mL of doping substance. In addition, in terms of quantification, R^2 does not exceed 0.57 for the initial conditions of the prototype and 0.22 for the current conditions.

KEY WORDS:

- **MACHINE LEARNING**
- **PARTIAL LEAST SQUARE**
- **LOGISTIC REGRESSION**
- **MULTILAYER PERCEPTRON ARTIFICIAL NEURONAL NETWORK**
- **LSTM ARTIFICIAL DEEP NEURONAL NETWORK**