

19



OFICINA ESPAÑOLA DE
PATENTES Y MARCAS

ESPAÑA



11 Número de publicación: **3 021 879**

51 Int. Cl.:

G06N 3/02 (2006.01)

G06N 3/08 (2013.01)

G01N 33/00 (2006.01)

12

TRADUCCIÓN DE PATENTE EUROPEA

T3

86 Fecha de presentación y número de la solicitud internacional: **29.01.2019** **PCT/IB2019/000107**

87 Fecha y número de publicación internacional: **01.08.2019** **WO19145791**

96 Fecha de presentación y número de la solicitud europea: **29.01.2019** **E 19743153 (9)**

97 Fecha y número de publicación de la concesión europea: **22.01.2025** **EP 3746800**

54 Título: **Sistema de detección de sustancias químicas**

30 Prioridad:

29.01.2018 US 201862623440 P

45 Fecha de publicación y mención en BOPI de la traducción de la patente:

27.05.2025

73 Titular/es:

STRATUSCENT INC. (100.00%)
7171 Rue Frederick Banting
Saint-Laurent Montreal, Quebec H4S 1Z9, CA

72 Inventor/es:

KHOMAMI ABADI, MOJTABA;
GAHROOSI, AMIR, BAHADOR;
GOULD, MATTHEW, V. y
MASILAMANI, ASHOK, PRABHU

74 Agente/Representante:

IZQUIERDO BLANCO, María Alicia

ES 3 021 879 T3

Aviso: En el plazo de nueve meses a contar desde la fecha de publicación en el Boletín Europeo de Patentes, de la mención de concesión de la patente europea, cualquier persona podrá oponerse ante la Oficina Europea de Patentes a la patente concedida. La oposición deberá formularse por escrito y estar motivada; sólo se considerará como formulada una vez que se haya realizado el pago de la tasa de oposición (art. 99.1 del Convenio sobre Concesión de Patentes Europeas).

DESCRIPCIÓN

Sistema de detección de sustancias químicas

5 SOLICITUDES RELACIONADAS

Esta solicitud reivindica prioridad en virtud de 35 U.S.C §119(e) a la solicitud provisional de Estados Unidos 62/623.440, titulada, "Systems and Methods for Accurate Estimation of Concentration of Selected Fluid Analytes in Open Environments", presentada el 29 de enero de 2018.

10

ANTECEDENTES

Las interacciones directas e indirectas con sustancias químicas en el ambiente pueden afectar negativamente a la salud física y mental del ser humano. Las sustancias químicas presentes en el ambiente pueden incluir, por ejemplo, los compuestos en partículas y orgánicos volátiles ("VOC") generados en los hospitales, las sustancias químicas que emanan del deterioro de los alimentos, los VOC exhalados en la respiración, los escapes industriales y de automóviles, y los primeros indicios de procesos tales como enfermedades, descomposición de los alimentos y combustión. La publicación del documento que no es patente "A comparative study of density models for gas identification using microelectronic gas sensor" de S. Brahim-Belhouari *et al.*, Proceedings of the 3rd IEEE International Symposium on Signal Processing and Information Technology, ISSPIT 2003, divulga la comparación de la precisión de una serie de modelos de densidad avanzados para la identificación de gases a partir de señales de una matriz de sensores. La estimación de la densidad se aplica en la construcción de clasificadores a través del uso de la regla de Bayes. Los modelos comparados son modelos de mezcla gaussiana, cartografiado topográfico generativo, mezcla probabilística de PCA y K vecinos más próximos.

25

SUMARIO

La presente invención se define en las reivindicaciones independientes adjuntas. Otras realizaciones preferidas se definen en las reivindicaciones dependientes.

30

Aspectos de la presente solicitud se refieren a un sistema de detección de sustancias químicas en miniatura, instantáneo, de bajo coste y bajo consumo, que puede detectar simultáneamente múltiples sustancias químicas. El sistema incluye un componente, que puede ser un chip sensor, que contiene una matriz de sensores de material nanocompuesto. Estos sensores están configurados para producir un identificador único para cualquier sustancia química o combinación de sustancias químicas. Cada material nanocompuesto es, en general, sensible a una sustancia química particular (por ejemplo, amoníaco), pero también tiene sensibilidad cruzada a otras sustancias químicas (por ejemplo, acetona, dióxido de carbono). Aunque los sensores individuales pueden carecer de alta selectividad, una matriz de sensores formada a partir de la combinación de polímeros de sensibilidad cruzada puede generar un patrón de respuesta específico para una combinación química particular. Esta estrategia permite abordar una amplia gama de analitos químicos para su identificación y cuantificación. Además, esta estrategia permite crear grandes bases de datos de referencia centralizadas de identificadores químicos, que luego pueden usarse para entrenar modelos de aprendizaje automático que pueden desconvertir el identificador de una mezcla compleja de sustancias químicas.

45

La presente invención se define únicamente por las reivindicaciones adjuntas.

BREVE DESCRIPCIÓN DE LOS DIBUJOS

No se pretende que los dibujos adjuntos estén dibujados a escala. En los dibujos, cada componente idéntico o casi idéntico que se ilustra en diversas figuras está representado por un número semejante. Por motivos de claridad, es posible que no todos los componentes estén marcados en todos los dibujos. En los dibujos:

50

Las figuras 1A y 1B representan vistas de un componente ejemplar de un sistema de detección de sustancias químicas.

La figura 2A representa una secuencia de cartografiados ejemplares desde las señales emitidas por los sensores hasta una representación de salida que tiene bases correspondientes a los analitos relevantes.

55

La figura 2B representa una secuencia de representaciones ejemplares correspondientes a los cartografiados de la figura 2A.

60

Las figuras 3A a 3G representan un ejemplo de transferencia de dominio entre dos instancias de un sistema de detección de sustancias químicas.

La figura 4 representa un proceso ejemplar para aprender cartografiados desde las señales emitidas por los sensores hasta una representación latente de dichas señales de salida.

65

La figura 5 representa un proceso ejemplar para usar cartografiados aprendidos para identificar y cuantificar las sustancias químicas dentro del entorno del sensor.

La figura 6 representa un proceso ejemplar para determinar una concentración de al menos un analito en una muestra.

La figura 7 representa un proceso ejemplar para configurar un sistema de detección de sustancias químicas para detectar concentraciones de al menos un analito.

Las figuras 8A a 8F representan los resultados de ensayos empíricos para tres analitos cartografiados en diversas representaciones usando modelos entrenados de acuerdo con algunas realizaciones.

DESCRIPCIÓN DETALLADA

Algunos sistemas convencionales de detección de sustancias químicas se basan en sensores de bloqueo sensible solo a una sustancia química o se basan en técnicas de cromatografía de gases-espectrometría de masas que requieren equipos voluminosos y prohibitivos para muchas aplicaciones y no pueden detectar sustancias químicas en el ambiente casi instantáneamente. Los autores de la invención han reconocido y apreciado que los sistemas convencionales de detección de sustancias químicas pueden mejorarse proporcionando un sistema que mitigue, al menos en parte, al menos algunas de las limitaciones descritas anteriormente.

Los sensores químicos son dispositivos físicos que presentan una respuesta medible a la presencia de una o más especies químicas. En una matriz de sensores químicos, múltiples sensores químicos se hacen funcionar en el contexto de la misma aplicación de detección. En la descripción que sigue, los sensores químicos se denominan sensores y las matrices de sensores químicos se denominan matrices de sensores.

Un sensor puede hacerse funcionar en un entorno que incluya una o más especies químicas. Al menos una de las especies químicas del entorno puede estar presente en fase líquida y/o en fase gaseosa. La concentración de la especie química en el entorno se cuantifica como un valor escalar junto con una unidad de medición elegida. Por ejemplo, la concentración de metano gaseoso en el aire puede cuantificarse en términos de concentración molar.

Un sensor está configurado para detectar una concentración de una o más especies químicas relevantes (denominadas en este documento analitos) en el ambiente. La concentración de analitos en el ambiente se denomina en este documento composición del ambiente. Por ejemplo, un detector de monóxido de carbono puede estar configurado para detectar una concentración de monóxido de carbono presente en un entorno que también incluya otras especies químicas (por ejemplo, oxígeno y nitrógeno). Cuando una matriz de sensores está configurada para detectar M analitos, una unidad de medición define un espacio vectorial V de M dimensiones isomorfo a R^M . Cada uno de los elementos V E V describe de forma única una composición del entorno. La composición del entorno v medida por un sensor puede depender de la ubicación del sensor y puede variar con el tiempo.

Las figuras 1A y 1B representan vistas de un sistema de detección de sustancias químicas 100 ejemplar. El sistema de detección de sustancias químicas 100 incluye una matriz de sensores 120. Las salidas individuales del sensor de una pluralidad de sensores en la matriz pueden presentar información incompleta sobre las especies químicas del entorno en que se encuentra el sistema de detección de sustancias químicas. Por ejemplo, la salida de cada sensor puede presentar una dependencia de múltiples variables externas que varían con el tiempo (por ejemplo, temperatura, humedad, etc.) y que no están bien especificadas en función de la salida de ese sensor en solitario. Al incluir múltiples sensores en una matriz, el sistema de detección de sustancias químicas puede configurarse para estimar la composición química de un entorno usando múltiples señales de salida generadas por los múltiples sensores de la matriz. Como se describe con más detalle a continuación, algunas realizaciones procesan la salida de múltiples sensores en una matriz usando un modelo inferencial para generar una estimación de una concentración de una o más especies químicas en el entorno.

El sistema de detección de sustancias químicas 100 incluye una base 110 configurada para sustentar una matriz de sensores 120. La base 110 puede implementarse usando cualquier sustrato adecuado incluyendo, aunque sin limitación, una placa de circuitos. La matriz de sensores 120 incluye una pluralidad de sensores (por ejemplo, el sensor 121). Los sensores pueden estar dispuestos en filas y columnas, como se muestra, o los sensores pueden estar dispuestos en otra disposición (por ejemplo, círculos concéntricos, filas escalonadas, etc.). La ubicación y orientación descritas de los sensores en el sistema de detección de sustancias químicas 100 no pretenden ser limitantes.

El sistema de detección de sustancias químicas 100 incluye un controlador 130. En algunas realizaciones, el controlador 130 está configurado para suministrar energía a la pluralidad de sensores. En la presente invención, el controlador 130 está configurado para adquirir señales de la pluralidad de sensores. Por ejemplo, cada uno de los sensores puede incluir, o formar parte de, un puente de Wheatstone u otro circuito configurado para medir cambios en la resistencia. El controlador 130 puede estar configurado para suministrar energía a los sensores y/o adquirir señales de los sensores correspondientes a cambios en la resistencia medida por los sensores. En algunas realizaciones, el controlador 130 está configurado además para proporcionar uno o más de acondicionamiento de señales, procesamiento de señales y comunicación de señales. Por ejemplo, el controlador 130 puede estar configurado para filtrar y amplificar las señales recibidas de los sensores. En algunas realizaciones, el controlador 130 está configurado

además para realizar al menos algunas de las operaciones de cartografiado descritas con más detalle a continuación. Por ejemplo, el controlador 130 puede estar configurado para implementar uno o más modelos que relacionen las señales emitidas por los sensores con una representación latente, o con una representación de salida que tenga uno o más ejes correspondientes a analitos relevantes. En algunas realizaciones, el controlador 130 incluye al menos un dispositivo de almacenamiento (por ejemplo, una memoria) configurado para almacenar parámetros que definen una o más de las operaciones de cartografiado, descritas con más detalle a continuación.

El sistema de detección de sustancias químicas 100 incluye un componente de comunicaciones 140, que puede incluir componentes físicos y/o programas informáticos configurados para posibilitar que el sistema de detección de sustancias químicas 100 se comuniquen con el sistema de detección de sustancias químicas (u otros dispositivos). Por ejemplo, el componente de comunicaciones 140 puede incluir un controlador de red configurado para proporcionar conectividad de red de área local, un controlador de puerto configurado para proporcionar conectividad de puerto paralelo y/o puerto en serie, y/o un controlador inalámbrico configurado para proporcionar conectividad WIFI, BLUETOOTH, ZIGBEE o similar.

De acuerdo con algunas realizaciones, un sensor (por ejemplo, el sensor 121) incluye un sustrato 122 y uno o más electrodos (por ejemplo, los electrodos 123a y 123b) dispuestos sobre el sustrato 122. En una implementación del sensor 121, una película delgada conductora 124 está dispuesta sobre y entre los electrodos 123a y los electrodos 123b, como se muestra. Por ejemplo, la película delgada 124 puede incluir nanopartículas conductoras. En algunas realizaciones, la película delgada 124 es químicamente sensible. Por ejemplo, la película delgada 124 puede experimentar un cambio físico (es decir, hincharse, contraerse y/o un cambio de composición o estado) tras la exposición a un analito. El cambio físico de la película delgada 124 puede provocar un cambio en la resistencia entre el electrodo 123a y el electrodo 123b. El controlador 130 puede estar configurado para supervisar la resistencia entre el electrodo 123a y el electrodo 123b, lo que produce una señal de salida del sensor que es detectable por el controlador 130. La señal de salida puede incluir información semántica relativa a uno o más analitos introducidos en el sensor.

De acuerdo con esta invención, uno o más de los sensores de la matriz de sensores 120 están configurados con sensibilidades diferentes a analitos diferentes. Por ejemplo, las películas delgadas de los distintos sensores de la matriz pueden estar configuradas para proporcionar distintos grados de cambio físico en respuesta a la exposición al mismo analito. Como ejemplo adicional, una película delgada para un sensor puede configurarse para proporcionar diferentes grados de cambio físico en respuesta a la exposición a diferentes analitos. Por consiguiente, en algunas realizaciones, las señales de salida de diferentes sensores de la matriz pueden diferir en presencia del mismo analito y/o la señal de salida del mismo sensor puede diferir en presencia de diferentes analitos en el entorno. Estas diferencias pueden incluir, aunque sin limitación, diferencias en la amplitud y/o en las características temporales de la señal de salida.

La figura 2A representa un proceso ejemplar 200 de cartografiado de señales emitidas por sensores (por ejemplo, los sensores del sistema de detección de sustancias químicas 100) a una representación de salida que tiene bases correspondientes a analitos relevantes (por ejemplo, el espacio vectorial V , descrito anteriormente). La figura 2B representa una secuencia de representaciones ejemplares (también denominadas en este documento modelos o submodelos) correspondientes a los cartografiados de la figura 2A. El proceso 200 puede funcionar sobre datos de entrada (por ejemplo, conjuntos de datos, datos de flujo, archivos o similares) divididos en particiones semánticamente separadas correspondientes a diferentes contextos ambientales y operativos. Por ejemplo, los datos de entrada pueden dividirse en múltiples conjuntos de datos, datos de flujo, archivos, etc. correspondientes a diferentes sensores, momentos, contextos, entornos o similares. Dichas particiones pueden contener múltiples entradas de datos de entrada, una entrada de datos de entrada o ninguna entrada de datos de entrada. En este tipo de partición, los conjuntos y flujos de datos pueden considerarse compuestos de las particiones semánticas individuales, y los análisis aplicados a los conjuntos de datos y flujos de datos pueden aplicarse de forma equivalente a las particiones semánticas y viceversa.

Los datos de entrada pueden incluir señales de salida obtenidas de los sensores (por ejemplo, datos sin procesar emitidos desde los sensores) y/o datos derivados de las señales emitidas desde los sensores (por ejemplo, una o más características extraídas de las señales de salida). En algunos aspectos, las señales de salida obtenidas de los sensores pueden filtrarse para reducir el ruido en las señales de salida. Puede usarse cualquier técnica de filtrado adecuada dependiendo de la naturaleza de la respuesta del sensor y del ruido presente en las señales de salida. A menos que se especifique lo contrario, las señales de salida descritas en este documento pueden ser señales de salida filtradas o señales de salida no filtradas. En algunas realizaciones, los datos de entrada incluyen valores de tiempo. Por ejemplo, los datos de entrada pueden incluir marcas de tiempo correspondientes a los valores de señal de salida. En algunas realizaciones, los valores de tiempo pueden determinarse implícitamente a partir de los datos. Por ejemplo, los datos de entrada pueden incluir una marca de tiempo inicial y una frecuencia de muestreo, de modo que los valores de tiempo de los datos de entrada después de la marca de tiempo inicial pueden determinarse en función de la marca de tiempo inicial y la frecuencia de muestreo.

En algunas realizaciones, los datos de entrada incluyen información sobre la concentración correspondiente a las señales de salida. Cuando los datos de entrada carecen de información sobre la concentración de todos los analitos relevantes, los datos de entrada se denominan en este documento "datos no marcados". Cuando los datos de entrada

carecen de información sobre la concentración de algunos de los analitos relevantes, los datos de entrada se denominan en este documento "datos parcialmente marcados". Cuando los datos de entrada incluyen información sobre la concentración de todos los analitos relevantes, los datos de entrada se denominan en este documento "datos marcados". En algunas realizaciones, los datos de entrada incluyen información contextual. La información contextual puede incluir, por ejemplo, información sobre el entorno del dispositivo, tal como la temperatura del entorno, la aplicación en que se emplea el sistema, información explícita sobre la presencia o ausencia de analitos irrelevantes u otra información contextual relacionada con el funcionamiento de la matriz de sensores.

En la presente invención, el proceso 200 se implementa aplicando secuencialmente dos modelos a los datos. El uno o más modelos pueden incluir parámetros e hiperparámetros almacenados en un componente de memoria del sistema de detección de sustancias químicas. En algunas realizaciones, los parámetros se aprenden usando técnicas de aprendizaje automático, cuyos ejemplos se describen con más detalle a continuación. Un sistema de detección de sustancias químicas configurado para aplicar la secuencia de dos modelos de acuerdo con los parámetros e hiperparámetros aprendidos a las señales de salida puede deducir una composición química de un entorno a partir de las señales de salida.

Se genera una secuencia de modelos que cartografían colectivamente los datos de entrada a la representación de salida (por ejemplo, el espacio vectorial V , descrito anteriormente) en lugar de un solo modelo que realice la misma función. Usar una secuencia de modelos puede mejorar la flexibilidad del sistema de detección de sustancias químicas. Además, el efecto de cada modelo individual puede revisarse y/o interpretarse más fácilmente cuando se usa una secuencia de modelos que cartografían colectivamente los datos de entrada a la representación de salida, lo que permite ajustar o depurar cómodamente los modelos individuales.

De acuerdo con la invención, la secuencia de modelos incluye un primer modelo que relaciona las señales de salida con una representación intermedia (por ejemplo, una representación de características, una representación latente o una representación ortogonal rectificada, como se describe en este documento) y un segundo modelo que relaciona la representación intermedia con la representación de salida. Diferentes versiones del primer modelo pueden ser específicas para diferentes implementaciones o instancias del sistema de detección de sustancias químicas. Asimismo, diferentes versiones del segundo modelo pueden relacionar la representación intermedia con diferentes representaciones de salida. Dependiendo del sistema de detección de sustancias químicas y de la representación de salida deseada, puede usarse una versión apropiada del primer modelo junto con la versión adecuada del segundo modelo. Los dos modelos pueden generarse por separado (por ejemplo, en diferentes momentos o ubicaciones, o mediante dispositivos distintos), o aplicarse por separado. Como ejemplo, un primer sistema de detección de sustancias químicas puede aplicar el primer modelo a las señales de salida para generar la representación intermedia. Posteriormente, un segundo sistema de detección de sustancias químicas puede aplicar el segundo modelo a la representación intermedia para generar la representación de salida. En algunas realizaciones, el primer modelo puede ser específico del primer dispositivo. Por tanto, puede entrenarse un primer modelo específico de dispositivo para cartografiar los datos de entrada adquiridos por el primer dispositivo a la representación intermedia. El primer modelo específico de dispositivo puede usarse posteriormente para especificar los parámetros iniciales para el entrenamiento de modelos adicionales específicos de dispositivo. Por ejemplo, al entrenar un segundo modelo específico para un segundo dispositivo, al menos algunos de los parámetros del segundo modelo específico de dispositivo pueden inicializarse con al menos algunos de los parámetros del primer modelo específico de dispositivo. En algunas realizaciones, el segundo modelo puede entrenarse independientemente de cualquier dispositivo particular. Por ejemplo, cuando el segundo modelo se implementa como un modelo independiente de dispositivo, puede entrenarse para cartografiar los datos de entrada de las representaciones intermedias generadas por uno o más modelos específicos de dispositivo a la representación de salida.

En algunas realizaciones, uno o ambos del primer y segundo modelos incluyen al menos dos submodelos, de los cada uno divide el cartografiado para un modelo en múltiples subcartografiados que pueden someterse a un proceso de aprendizaje separado. De acuerdo con la invención, el segundo modelo se divide en un primer submodelo que relaciona la representación de características de salida del primer modelo con una representación latente, un segundo submodelo que relaciona una representación latente con una representación ortogonal rectificada, pudiendo comprender también el segundo modelo un tercer submodelo que relaciona una representación ortogonal rectificada con la representación de salida.

La composición y el entrenamiento de los modelos y/o submodelos usados de acuerdo con algunas realizaciones, se describen con más detalle a continuación. En algunas realizaciones, uno o más de los modelos o submodelos se entrenan usando técnicas paramétricas, tales como máquinas de vectores de soporte, bosques aleatorios o redes neuronales profundas. En otras realizaciones, uno o más de los modelos o submodelos se entrenan usando técnicas no paramétricas, tales como incrustación estocástica de vecinos t distribuidos (t-SNE) o las técnicas de k vecinos más próximos (k-NN).

Por comodidad, las figuras 2A y 2B se describen con respecto a tuplas de la forma $\{D(t_i) = (t_i, C(t_i), x(t_i), a(t_i))\}$, donde t_i es una marca de tiempo única, $x(t) = \langle x_1(t), \dots, x_N(t) \rangle$ es la respuesta de una matriz de sensores que incluye N sensores a tiempo t_i , y $a(t)$ puede ser el correspondiente vector de concentraciones de analitos relevantes. Como se describe anteriormente, $x(t)$ puede representar una versión filtrada de las señales de salida de los sensores para reducir el ruido en las señales de salida. Cuando no está disponible información sobre la concentración de un analito relevante, los

elementos correspondientes de $a(t_i)$ pueden incluir un elemento (un "elemento nulo") que indique la no disponibilidad de dicha información (por ejemplo, un valor por defecto, un NaN o similar). Por ejemplo, cuando no está disponible información sobre la concentración de analitos relevantes, $a(t_i)$ puede ser un vector de elementos nulos. Como se usa en este documento, una entrada de datos $D(t_i)$ se denomina "no marcada" cuando todos los elementos de $a(t_i)$ son elementos nulos, parcialmente marcada cuando algunos, pero no todos los elementos de $a(t_i)$ son elementos nulos, y $D(t_i)$ se denomina "marcada" cuando ninguno de los elementos de $a(t_i)$ son elementos nulos. $C(t_i)$ puede incluir un vector de información contextual, tal como la información contextual descrita anteriormente. Sin embargo, las realizaciones divulgadas no se limitan a tuplas de la forma $\{D(t_i) = (t_i, C(t_i), x(t_i), a(t_i))\}$.

En la operación 210, los sensores (por ejemplo, los sensores de la matriz de sensores 120) de un dispositivo de detección (por ejemplo, sistema de detección de sustancias químicas 100) pueden transducir una señal química v dependiente de la composición del entorno en señales eléctricas de salida $x(t)$ (por ejemplo, del sistema de detección de sustancias químicas 100 a señales de salida 211, como se representa en la figura 2B). En algunas realizaciones, los valores de las señales de salida 211 pueden reflejar cambios en la composición del entorno a lo largo del tiempo. En algunas realizaciones, estas señales de salida pueden incluir cambios transitorios de valor en respuesta a un cambio en la composición del entorno. Por ejemplo, un valor de referencia anterior al cambio en la composición del entorno puede ser aproximadamente igual a un valor de estado estacionario alcanzado tras el cambio en la composición del entorno. En diversas realizaciones, estas señales de salida pueden alcanzar un nuevo valor de estado estacionario dependiente de la composición cambiada del entorno.

En la operación 220, las señales de salida se aplican a un modelo que relaciona las señales de salida con una representación de características (por ejemplo, un cartografiado desde las señales de salida 211 a la representación de características 221, como se representa en la figura 2B) para generar vectores de características correspondientes a las señales de salida. De esta manera, el modelo puede desconvertir la información relevante de las señales de salida. La relación establecida por el modelo puede expresarse, para una señal de salida $x(t)$, como un mapa para una representación de características, $\zeta_i: \mathbb{R}^{T_i} \rightarrow \mathbb{R}^{K_i}$, donde T_i indica algún número (posiblemente infinitamente grande) de muestras que abarcan algún intervalo de tiempo $[t_1, t_{\pi}]$, y K_i indica un número de características extraídas de la señal de salida. Dicho mapa produce un vector de características, $z_i = \zeta_i(x_i([t_1, t_{\pi}]))$, donde $z_i \in \mathbb{R}^{K_i}$. Como se analiza en este documento, ζ_i puede expresarse como una función paramétrica de algún conjunto de parámetros θ_i : $z_i = \zeta_i(x_i([t_1, t_{\pi}]); \theta_i)$. Los valores para estos parámetros pueden estimarse usando, por ejemplo, técnicas de aprendizaje automático tales como redes neuronales prealimentadas y procesos gaussianos.

En algunas realizaciones, el número de mapas ζ_i puede no ser igual al número de señales de salida $x_i(t)$. Por ejemplo, pueden no extraerse características de algunas señales de salida (produciendo menos mapas), o pueden extraerse características de combinaciones de señales de salida además de señales de salida individuales (produciendo mapas adicionales). En general, cuando el número de señales de salida es N , el número de mapas ζ_i será igual a N . El resultado de aplicar $\zeta = \{\zeta_1, \dots, \zeta_N\}$ a $x(t)$ puede expresarse como un vector de características compuesto $z = \{z_1, \dots, z_N\}$, donde $\vec{z} \in \mathbb{R}^K$, y $K = \sum_i K_i$ es la colección de características extraídas de todos los mapas que comprende ζ . Como se usa en este documento, dicho vector de características compuesto se denomina vector de características. Para z como se define anteriormente, permite que la extensión de todos los posibles vectores de características z se indique como el espacio de características Z , donde $Z \subseteq \mathbb{R}^K$.

En algunas realizaciones, N puede ser un número grande, y K puede ser mayor que N . Por tanto, los métodos numéricos aplicados en Z pueden sufrir la maldición de la dimensionalidad. Además, un cambio en la concentración Δv puede producir un cambio no lineal Δz en el vector de características, lo que puede, en algunos casos, impedir el uso de técnicas lineales de reducción de la dimensionalidad.

En algunas realizaciones, las propiedades del espacio de características Z pueden usarse para asociar vectores de características con analitos, sin depender de vectores de concentraciones de analitos relevantes (por ejemplo, sin depender de $a(t_i)$). Estas asociaciones pueden usarse para entrenar modelos que implementen cartografiados que impongan condiciones de rectificado y ortogonalidad a los datos. Por ejemplo, puede crearse una asociación entre vectores de características correspondientes a concentraciones variables del mismo analito. Se puede generar un modelo, usando esta asociación, que implemente un cartografiado a una representación en que los puntos correspondientes a los vectores de características estén alineados a lo largo de un solo vector. Como ejemplo adicional, puede crearse una primera asociación entre primeros vectores de características correspondientes a concentraciones variables de un primer analito y puede crearse una segunda asociación entre segundos vectores de características correspondientes a concentraciones variables de un segundo analito. Se puede generar un modelo, usando la primera y segunda asociaciones, que implemente un cartografiado a una representación en que los primeros puntos correspondientes a los primeros vectores de características estén alineados a lo largo de un primer vector, los segundos puntos correspondientes a los segundos vectores de características estén alineados a lo largo de un segundo vector, y el primer vector y el segundo vector sean ortogonales.

En algunas realizaciones, se usa un proceso iterativo para identificar vectores de características correspondientes a concentraciones variables de un solo analito. Este proceso puede llevarse a cabo de forma automática (por ejemplo, sin indicaciones o entrada del usuario). Esta estrategia asume que los vectores de características correspondientes a

concentraciones variables de un solo analito se encuentran en el exterior, o cubierta, del colector Z' . Los puntos en Z' correspondientes a combinaciones de dos o más analitos pueden encontrarse entre estos puntos exteriores, en la cubierta del colector Z' o en el interior del colector Z' . Una secuencia de muestras que incluye una concentración fija de un primer analito y concentraciones decrecientes de un segundo analito se aproxima a una ubicación en Z' correspondiente a la concentración fija de un primer analito a lo largo de una primera trayectoria. Una secuencia de muestras que incluye la concentración fija del primer analito y concentraciones decrecientes de un tercer analito se aproxima a la ubicación en Z' correspondiente a la concentración fija del primer analito a lo largo de una segunda trayectoria, distinta de la primera trayectoria. Por tanto, los puntos correspondientes a concentraciones variables de un solo analito pueden identificarse como puntos de la cubierta del colector Z' donde cambian las trayectorias definidas por los puntos vecinos (por ejemplo, ubicaciones con cambios de gradiente locales). El siguiente proceso iterativo puede usarse para identificar dichos puntos.

Como primera etapa, se inicializa un espacio D igual al espacio Z e incluye todos los puntos del espacio Z . Se selecciona un punto z_1 en D . Se selecciona otro punto z_2 en las cercanías de z_1 y se crea un vector z_1z_2 . A continuación, se identifica una secuencia de puntos, satisfaciendo cada punto de la secuencia en las cercanías del punto precedente de la secuencia un criterio de direccionalidad con respecto a z_1z_2 . La satisfacción de este criterio de direccionalidad puede indicar que un punto está suficientemente alineado con el vector z_1z_2 . En algunas realizaciones, el criterio de direccionalidad puede depender de un vector entre el punto precedente de la secuencia y el punto actual de la secuencia. Por ejemplo, el criterio de direccionalidad puede depender de un valor del coseno del ángulo entre z_1z_2 y el vector. Cuando el valor del coseno es inferior a un umbral, es posible que no se cumpla el criterio de direccionalidad. Por ejemplo, un primer punto z_3 de la secuencia puede estar en una proximidad de z_2 y puede satisfacer el criterio de direccionalidad cuando un valor del coseno del ángulo entre z_1z_2 y z_1z_3 es mayor a un umbral. En diversas realizaciones, el criterio de direccionalidad puede depender de una distancia del siguiente punto de la secuencia a una proyección del vector z_1z_2 . La secuencia puede terminar cuando no pueda identificarse ningún otro punto a lo largo de esta dirección. Se pueden generar secuencias adicionales de esta manera para todos los puntos z_1 en Z y z_2 en la proximidad de z_1 . El conjunto de puntos finales E para todas las secuencias puede definir entonces un espacio límite en D . El espacio D puede actualizarse para incluir solo los puntos límite E . El proceso de identificación de los puntos límite puede repetirse entonces para generar un nuevo conjunto de puntos finales E .

Este proceso puede repetirse hasta que E comprenda un conjunto de colectores unidimensionales que atraviesen un origen correspondiente a una ausencia de respuesta del sensor. Cada uno de estos colectores unidimensionales comprende vectores de características correspondientes a sustancias químicas puras o analitos de base. Aplicando este proceso, los vectores de características pueden asociarse con colectores unidimensionales correspondientes a los analitos de base. Esta asociación puede usarse entonces para realizar un aprendizaje no supervisado en las operaciones 241 y 251, sin depender de marcadores para las muestras. En las técnicas semisupervisadas, la disponibilidad parcial de marcadores que indiquen concentraciones asociadas con vectores de características puede ayudar a validar la formación de cada mapa y espacio comparando un marcador para una muestra con una posición correspondiente a la muestra en cada espacio. Los marcadores parciales también pueden usarse para marcar un eje correspondiente a los analitos de base. Por ejemplo, cuando una muestra se encuentra sobre o cerca de un eje y un marcador de la muestra indica concentraciones de analitos, el eje puede marcarse como correspondiente al analito que tiene la mayor concentración.

En algunas realizaciones, $x(t)$ puede ser continuo con respecto a cambios en $v(t)$. El cartografiado ζ puede seleccionarse para se conserve la continuidad de $\Delta z(t)$ con respecto a $\Delta v(t)$. Cuando la señal de salida $x(t)$ es única para cada composición química del entorno $v(t)$, y ζ se selecciona para conservar la singularidad de z con respecto a v , entonces existe un cartografiado uno a uno H^{-1} entre la representación de salida ejemplar V y Z' donde la imagen V define un colector continuo $Z' \subseteq Z$ como se representa en la figura 2B.

Cuando la representación de salida ejemplar V y Z' son conjuntos abiertos, el cartografiado uno a uno H^{-1} es un homeomorfismo. Por definición, existe entonces un homeomorfismo H entre Z' y V . En dichos casos, Z' comprende un colector de dimensión M incrustado en Z (como se representa en el espacio de características 221 de la figura 2B). Además, cada dimensión de V cartografía a un colector unidimensional, potencialmente no lineal, incrustado en Z' . El cartografiado Ω de Z' y V puede descomponerse, por tanto, en subcartografiados. Como se describe anteriormente, los submodelos pueden implementar estos subcartografiados. Dichos submodelos pueden ser más fáciles de generar que un modelo que implemente H , y pueden proporcionar flexibilidad adicional al sistema de detección de sustancias químicas.

En la operación 230, los vectores de características generados en la operación 220 pueden aplicarse a un primer submodelo que relaciona la representación de características Z con una representación latente Φ (por ejemplo, de la representación de características 221 a la representación latente 231, como se representa en la figura 2B) para generar vectores de valores latentes correspondientes a los vectores de características. En algunas realizaciones, la representación latente Φ puede ser un espacio de producto interior. La representación latente Φ puede ser de la misma dimensión que el colector Z' . Como ejemplo no limitante, cuando Z' es un plano incrustado en Z , entonces la representación latente Φ puede ser un espacio bidimensional (por ejemplo, la representación latente 231, como se representa en la figura 2B). El primer submodelo puede implementar un cartografiado $\phi: Z \rightarrow \Phi$. Dicho mapa puede producir un vector de valores latentes $p = \phi(z)$, donde $\vec{p} \in \mathbb{R}^{\dim(Z')}$. En algunas realizaciones, cuando Z' no está

incrustado en Z , ϕ puede reducirse a la función de identidad. Como se analiza en este documento, ϕ puede expresarse como una función paramétrica de algún conjunto de parámetros Λ : $p = \phi(z; \Lambda)$. Los valores del conjunto de parámetros Λ pueden estimarse usando técnicas de aprendizaje automático tales como redes neuronales prealimentadas y procesos gaussianos. En algunas realizaciones, el cartografiado $\phi: Z \rightarrow \Phi$ cumple las siguientes condiciones: ϕ es un cartografiado continuo entre Z' y Φ , ϕ es biyectivo de Z' a Φ , ϕ^{-1} es un cartografiado continuo entre Φ y Z' , y ϕ^{-1} es biyectiva de Φ y Z' . Las condiciones anteriores pueden derivarse del homeomorfismo entre Z' y Φ .

En las operaciones 240 y 250, los vectores de valores latentes generados en la operación 230 pueden aplicarse a un segundo submodelo que relaciona la representación latente Φ con una representación rectificadora ortogonalizada Ω . En algunas realizaciones, este segundo submodelo incluye dos modelos de componentes. Como se describe anteriormente, los modelos de múltiples componentes pueden proporcionar más flexibilidad y ser más fáciles de interpretar que un solo modelo que proporcione la misma funcionalidad.

En la operación 240, los vectores de valores latentes generados en la operación 230 pueden aplicarse al primer modelo de componentes para generar vectores alineados correspondientes a los vectores de valores latentes (por ejemplo, de la representación latente 231 a la representación alineada 241, como se representa en la figura 2B). El primer modelo de componentes puede relacionar la representación latente Φ con la representación rectificadora Ψ . En la representación latente Φ , las muestras que incluyen concentraciones variables de un solo analito pueden describirse mediante un colector unidimensional no lineal. El primer modelo de componentes puede implementar un cartografiado $\phi: \Phi \rightarrow \Psi$ que cartografía cada uno de dicho colector a un colector unidimensional no lineal rectificado en Ψ . Por ejemplo, dos concentraciones diferentes del mismo analito (por ejemplo, $\vec{v}_2 = c\vec{v}_1$, $\vec{v}_1, \vec{v}_2 \in V$, $c \in \mathbb{R}$) pueden cartografiarse a dos vectores de valores latentes (por ejemplo, $p_1, p_2 \in \Phi$). El cartografiado ψ puede cartografiar p_1 y p_2 a $s_1, s_2 \in \Psi$ de modo que se minimice un ángulo entre s_1 y s_2 . Por ejemplo, ψ puede determinarse de modo que se maximice la distancia del coseno $d(s_1, s_2)$. Cuando los colectores en Φ ya son rectas, ψ puede reducirse a la función de identidad. Como se analiza este documento, ψ puede expresarse como una función paramétrica de algún conjunto de parámetros Σ : $s = \psi(p; \Sigma)$. Los valores del conjunto de parámetros Σ pueden estimarse usando técnicas de aprendizaje automático, tales como redes neuronales prealimentadas y procesos gaussianos. En algunas realizaciones, el cartografiado $\psi: \Phi \rightarrow \Psi$ cumple las siguientes condiciones: ψ es un cartografiado continuo entre Φ y Ψ , ψ es biyectivo de Φ a Ψ , ψ^{-1} es un cartografiado continuo entre Ψ y Φ , y ψ^{-1} es biyectivo de Ψ a Φ . Las condiciones anteriores pueden derivarse del homeomorfismo entre Ψ y Φ . Además, la función ψ puede reducir el impacto de los datos ruidosos, ya que ψ puede alinear vectores de valores latentes en Φ correspondientes a mediciones ruidosas del mismo analito a lo largo de la misma dirección en Ψ .

En la operación 250, los vectores de valores latentes generados en la operación 230 pueden aplicarse al segundo modelo de componentes para generar vectores independientes correspondientes a los vectores alineados (por ejemplo, de la representación rectificadora 241 a la representación rectificadora ortogonal 251, como se representa en la figura 2B). El segundo modelo de componentes puede relacionar la representación rectificadora Ψ con la representación rectificadora ortogonal Ω . En la representación rectificadora Ψ , las concentraciones variables del mismo analito pueden cartografiarse en un colector rectificado, no lineal unidimensional (por ejemplo, la representación rectificadora 241, como se representa en la figura 2B). El segundo modelo de componentes puede implementar un cartografiado $\omega: \Psi \rightarrow \Omega$ que cartografía dichos colectores en colectores ortogonales, rectificados no lineales, unidimensionales en Ψ . Por ejemplo, dos muestras de dos analitos diferentes (por ejemplo, $v_2 \perp v_1$, $v_1, v_2 \in V$) pueden cartografiarse en dos vectores independientes (por ejemplo, $s_1, s_2 \in \Psi$). El cartografiado ω puede cartografiar s_1 y s_2 a $q_1, q_2 \in \Omega$ de modo que se maximice un ángulo entre q_1 y q_2 . Por ejemplo, Ω puede determinarse de modo que se minimice la distancia de coseno $d(q_1, q_2)$. Cuando los colectores correspondientes a los diferentes analitos en Ψ son ya ortogonales, ω puede reducirse a la función de identidad. Como analiza en este documento, ω puede expresarse como una función paramétrica de algún conjunto de parámetros Y : $q = \omega(s; Y)$. Los valores del conjunto de parámetros Y pueden estimarse usando técnicas de aprendizaje automático, tales como redes neuronales prealimentadas y procesos gaussianos. En algunas realizaciones, el cartografiado $\omega: \Psi \rightarrow \Omega$ cumple las siguientes condiciones: ω es un cartografiado continuo entre Ψ y Ω , ω es biyectivo de Ψ a Ω , ω^{-1} es un cartografiado continuo entre Ω y Ψ , y ω^{-1} es biyectivo de Ω a Ψ . Las condiciones anteriores pueden derivarse del homeomorfismo entre Ω y Ψ . Además, la función ω puede reducir el impacto de los datos ruidosos, ya que ω puede cartografiar vectores alineados en Ω correspondientes a mediciones ruidosas de diferentes analitos a lo largo de direcciones ortogonales en Ψ .

En las operaciones 260 y 270, los vectores independientes y alineados generados en la operación 250 pueden aplicarse a un tercer submodelo que relaciona la representación ortogonal rectificadora Ω con la representación de salida V . En algunas realizaciones, este tercer submodelo puede incluir dos modelos de componentes. Como se describe anteriormente, los modelos de múltiples componentes pueden proporcionar más flexibilidad y ser más fáciles de entrenar que un solo modelo que proporcione la misma funcionalidad.

En la operación 260, el primer modelo de componentes puede configurarse para alinear los colectores ortogonales rectificados correspondientes a concentraciones variables de analitos diferentes con los vectores de base convencionales de $\mathbb{R}^M$ (por ejemplo, de la representación ortogonal rectificadora 251 a la representación de base convencional 261, como se representa en la figura 2B). Por ejemplo, el primer modelo de componentes puede configurarse para implementar un cartografiado $\tau: \Omega \rightarrow U$ que cartografía los colectores correspondientes a concentraciones variables de un solo analito de base a los vectores de base convencionales e_i de $\mathbb{R}^M$. Por ejemplo, cuando el sistema de detección de sustancias químicas está configurado para detectar dos analitos, las muestras que

incluyen concentraciones variables de un primer analito pueden situarse en un primer colector unidimensional rectificado en Ω . Las muestras que incluyen concentraciones variables del segundo analito pueden situarse en un segundo colector unidimensional rectificado en Ω , ortogonal al primer colector unidimensional rectificado. En este ejemplo bidimensional, el primer modelo de componentes puede cartografiar el primer colector unidimensional rectificado al vector de base convencional $e_1 = [1 \ 0]$ y cartografiar el segundo colector unidimensional rectificado al vector de base convencional $e_2 = [0 \ 1]$. Cuando el sistema químico está configurado para detectar analitos relevantes adicionales, la representación Ω contendrá más colectores correspondientes a estos analitos relevantes adicionales, que se cartografiarán en vectores de base convencionales adicionales e_i de $\mathbb{R}^M$. Como analiza en este documento, τ puede expresarse como una función paramétrica de algún conjunto de parámetros Π : $u = \tau(q; \Pi)$. Los valores del conjunto de parámetros Π pueden estimarse usando técnicas de aprendizaje automático, tales como redes neuronales prealimentadas y procesos gaussianos. En algunas realizaciones, τ puede comprender una o más matrices de rotación. Los parámetros que comprende el conjunto de parámetros Π pueden ser valores de una o varias matrices de rotación.

En la operación 270, el segundo modelo de componentes puede configurarse para cartografiar desde los colectores correspondientes a analitos individuales en U hasta colectores linealizados correspondientes a analitos individuales en V (por ejemplo, desde la representación de base convencional 261 hasta la representación de salida 271, como se representa en la figura 2B). En algunas realizaciones, por ejemplo, la duplicación de una concentración de un analito en el entorno puede no provocar una duplicación de un valor correspondiente en U . Por consiguiente, el primer modelo de componentes puede configurarse para implementar un cartografiado $\eta: U \rightarrow V$ que cartografía la representación de base convencional U en la representación de salida V . La relación entre las concentraciones de analitos en el entorno y los valores de la representación de salida V puede ser lineal. Por ejemplo, la duplicación de una concentración de un analito en el entorno puede provocar una duplicación de un valor correspondiente en V . Como se analiza en este documento, η puede expresarse como una función paramétrica de algún conjunto de parámetros Γ : $v = \eta(u; \Gamma)$. Los valores del conjunto de parámetros Γ pueden estimarse usando métodos de aprendizaje automático, tales como redes neuronales prealimentadas y procesos gaussianos.

El proceso 200 descrito anteriormente pretende ser ejemplar y no limitante. En algunas realizaciones, puede omitirse uno o más actos del proceso 200. Por ejemplo, el acto 230 puede omitirse cuando Z' no está incrustado en Z . Como ejemplo adicional, los actos 240 y 250 pueden omitirse cuando los colectores unidimensionales correspondientes a las concentraciones variables de analitos individuales no requieren rectificado u ortogonalización. Además, la asociación de colectores unidimensionales en Ω con analitos y la generación de la representación de salida V pueden combinarse en un solo acto. En este acto único, cada elemento de V puede describirse mediante un vector direccional único $\hat{s}_k$ en Ψ . La colección de M vectores $\hat{s}_k$ puede definir una base para Ψ . Esta base puede ortogonalizarse y transformada a la base convencional de $\mathbb{R}^M$ usando técnicas convencionales de álgebra lineal, y se describe por la transformación lineal $u = Gs$. Esta transformación lineal puede indicarse más generalmente como una función paramétrica de G : $u = \rho(s, G)$. En el caso donde los vectores $\hat{s}_k$ ya formen una base ortogonal, G se reduce a la función de identidad. En la transformación lineal G , el vector $\hat{u}_k = G\hat{s}_k$ se convierte en un múltiplo escalar de un vector de base convencional $\hat{e}_k$, y v puede recuperarse mediante un cartografiado $\eta_2: U \rightarrow V$ que cartografía a la representación de salida V . Como se analiza en este documento, η_2 puede expresarse como una función paramétrica de algún conjunto de parámetros Γ : $v = \eta_2(u; \Gamma)$. Los valores del conjunto de parámetros Γ pueden estimarse usando técnicas de aprendizaje automático, tales como redes neuronales prealimentadas y procesos gaussianos. En este ejemplo, a diferencia del ejemplo proporcionado anteriormente con respecto a los actos 240 y 250, pueden ser necesarios marcadores que identifiquen las muestras en u correspondientes a los ejes en V para generar G y η_2 .

Las figuras 3A a 3G representan un ejemplo de transferencia de dominio entre dos instancias de un sistema de detección de sustancias químicas de acuerdo con algunas realizaciones. Por ejemplo, la primera instancia del sistema de detección de sustancias químicas (representada en la figura 3A) puede reunir datos de entrada usando una primera instancia del sistema de detección de sustancias químicas 100 y la segunda instancia del sistema de detección de sustancias químicas (representada en la figura 3B) puede reunir datos de entrada usando una segunda instancia del sistema de detección de sustancias químicas 100. Estas dos instancias del sistema de detección de sustancias químicas 100 pueden diferir debido a las variaciones normales de fabricación, o pueden incluir distintos tipos de sensor químico o distintos modelos o versiones del mismo tipo de sensor químico.

Debido a estas diferencias, los datos de entrada reunidos por la primera instancia del sistema de detección de sustancias químicas (representada en la figura 3C) pueden diferir de los datos de entrada reunidos por la segunda instancia del sistema de detección de sustancias químicas (representada en la figura 3D) cuando se exponen al mismo estímulo en las mismas condiciones. Para generar una representación Ω a partir de las señales de salida obtenidas en cada instancia, puede usarse el aprendizaje no supervisado, por ejemplo, usando las técnicas descritas en este documento para identificar los colectores correspondientes a concentraciones variables de un solo analito. A continuación, pueden aplicarse técnicas de aprendizaje supervisado para la adaptación de dominios para cartografiar la representación Ω para cada instancia (por ejemplo, como se representa en la figura 3E y la figura 3F) a una representación de salida común V (por ejemplo, como se representa en la figura 3G), en lugar de intentar aplicar dichas técnicas en la etapa de extracción de características.

En algunas realizaciones, la estrategia divulgada con respecto a las figuras 3A a 3G puede posibilitar que un modelo entrenado con datos adquiridos usando un primer sistema de detección de sustancias químicas se aplique a datos

adquiridos usando otro sistema de detección de sustancias químicas en que no se haya entrenado el modelo. Como se describe anteriormente, estos dos sistemas de detección de sustancias químicas pueden diferir debido a las variaciones normales de fabricación, o pueden incluir distintos tipos de sensor químico o distintos modelos o versiones del mismo tipo de sensor químico. En algunas realizaciones, la información codificada de los dos sistemas de detección de sustancias químicas puede procesarse a través de instancias separadas del mismo proceso de aprendizaje, determinando la representación Ω para cada sistema de detección de sustancias químicas mediante técnicas de aprendizaje no supervisadas o semisupervisadas antes de cartografiar estas representaciones de salida no linealizadas a la representación de salida común V .

La figura 4 representa un proceso ejemplar 400 para aprender cartografiados desde las señales emitidas por los sensores hasta una representación latente de dichas señales de salida. El proceso 400 puede realizarse en un sistema de detección de sustancias químicas que incluya un repositorio de datos 401, que puede ser una base de datos alojada en un primer dispositivo informático o cualquier otra estructura de datos adecuada almacenada en un dispositivo de almacenamiento. La base de datos puede estar configurada para almacenar las señales de salida recibidas de los sensores. La base de datos también puede estar configurada para almacenar valores intermedios generados por la aplicación de uno o más cartografiados a las señales de salida. El sistema de detección de sustancias químicas puede incluir un repositorio de modelos 406, que puede ser una base de datos alojada en el primer dispositivo informático o en otro dispositivo informático. Los modelos almacenados pueden incluir al menos algunos de los modelos descritos anteriormente, con respecto a las figuras 2A y 2B. Por ejemplo, el repositorio de modelos 406 puede estar configurado para almacenar un modelo que implemente el cartografiado ζ a partir de señales de salida a vectores de características y un modelo que implemente el cartografiado ϕ a partir de vectores de características a vectores latentes.

El sistema de detección de sustancias químicas puede estar configurado para adquirir datos (por ejemplo, señales de salida) usando un sistema de detección de sustancias químicas, tal como el sistema de detección de sustancias químicas 100, descrito anteriormente con respecto a la figura 1. En algunas realizaciones, el sistema de detección de sustancias químicas está configurado para adquirir los datos por lotes en el acto 402. Tras adquirir un lote de datos, el sistema de detección de sustancias químicas puede estar configurado para determinar si se satisface un criterio de actualización. La satisfacción de este criterio de actualización puede indicar que los datos del nuevo lote introducen información nueva. El sistema de detección de sustancias químicas, por lo tanto, puede estar configurado para actualizar uno o más de los cartografiados ζ y ϕ para reflejar esta nueva información. En algunas realizaciones, la satisfacción del criterio de actualización depende de un valor de la información mutua entre el nuevo lote de datos y el lote de datos recibido previamente. En algunas realizaciones, cuando se satisface el criterio de actualización, el sistema de detección de sustancias químicas está configurado para actualizar el mapa de extracción de características ζ en el acto 403. Como se describe anteriormente, el cartografiado ζ puede parametrizarse. El sistema de detección de sustancias químicas puede estar configurado para actualizar el cartografiado ζ actualizando los parámetros del cartografiado ζ usando una técnica de aprendizaje automático en el acto 403. Los parámetros actualizados entonces pueden almacenarse en el repositorio de modelos 406.

El sistema de detección de sustancias químicas puede estar configurado para procesar las señales de salida recibidas usando el cartografiado de actualización ζ para actualizar la representación Z con vectores de características actualizados en el acto 404. En algunas realizaciones, el sistema de detección de sustancias químicas puede actualizar el cartografiado ϕ usando vectores de características en la representación actualizada Z . Como se describe anteriormente, el cartografiado ϕ puede parametrizarse. El sistema de detección de sustancias químicas puede estar configurado para actualizar el cartografiado ϕ actualizando los parámetros del cartografiado ϕ usando una técnica de aprendizaje automático en el acto 405. Los parámetros actualizados entonces pueden almacenarse en el repositorio de modelos 406. El mapa actualizado ϕ puede introducir un nuevo subespacio, el colector Φ (representación latente actualizada 407), que es una representación del contenido de información del conjunto de datos para la aplicación de los mapas aprendidos.

La figura 5 representa un proceso ejemplar 500 para usar cartografiados aprendidos para identificar y cuantificar las sustancias químicas dentro del entorno del sensor. En el acto 510, un sistema de detección de sustancias químicas puede adquirir señales de salida. El sistema de detección de sustancias químicas puede determinar si las señales adquiridas satisfacen un criterio de almacenamiento. La satisfacción de este criterio de almacenamiento puede indicar que la señal de salida introduce información nueva. El sistema de detección de sustancias químicas puede estar configurado para almacenar la señal de salida, junto con cualquier información contextual, en el repositorio de datos 410. En algunas realizaciones, la satisfacción del criterio de almacenamiento depende de un valor de la información mutua entre las señales de salida adquiridas y las señales de salida ya almacenadas en el repositorio de datos 410. Las señales de salida almacenadas en el repositorio de datos 410 pueden usarse para actualizar los cartografiados, como se describe anteriormente con respecto a la figura 4. A continuación, el sistema de detección de sustancias químicas puede calcular un punto en la representación Z , z , a partir de las señales de salida usando un modelo almacenado en el repositorio de modelos 406 que implemente el mapa ζ en el acto 520. A continuación, el sistema de detección de sustancias químicas puede calcular un punto en el espacio Φ , p , a partir del punto z usando un modelo almacenado en el repositorio de modelos 406 que implemente el mapa ϕ en el acto 530.

El sistema de detección de sustancias químicas puede estar configurado para deducir una composición del entorno correspondiente al valor p en el espacio Φ en el acto 540. Esta deducción puede depender de la semántica asociada a los puntos del colector Φ (representado como colector 550 en la figura 5) en la proximidad de p . Por ejemplo, el

sistema de detección de sustancias químicas puede estar configurado para identificar puntos marcados dentro de una distancia predeterminada de p . Dichos puntos marcados pueden asociarse con concentraciones conocidas de analitos. Aunque la relación global entre las concentraciones de analito y las ubicaciones en el espacio Φ puede ser compleja y no lineal, para una región suficientemente pequeña alrededor de p , la relación puede ser aproximadamente lineal. Por consiguiente, el sistema de detección de sustancias químicas puede estar configurado para estimar las concentraciones de analitos correspondientes a p en función de las concentraciones de analitos asociadas a los puntos marcados dentro de la distancia predeterminada de p . En algunas realizaciones, el sistema de detección de sustancias químicas puede estar configurado para interpolar las concentraciones para p en función de estas concentraciones conocidas.

La figura 6 representa un proceso ejemplar 600 para determinar una concentración de al menos un analito en una muestra. El proceso 600 puede implementarse usando al menos algunos de los cartografiados descritos anteriormente con respecto a las figuras 2A y 2B. El proceso 600 puede implementarse usando un sistema de detección de sustancias químicas. El sistema de detección de sustancias químicas incluye una matriz de sensores (por ejemplo, la matriz de sensores 120). La matriz de sensores incluye una pluralidad de sensores dispuestos sobre un sustrato. Un primer sensor y un segundo sensor de la pluralidad de sensores tienen diferentes sensibilidades para detectar diferentes analitos en una muestra. Cada uno de la pluralidad de sensores está configurado para emitir una señal en respuesta a la detección de un analito. En algunas realizaciones, el sistema de detección de sustancias químicas puede incluir un dispositivo informático. El dispositivo informático puede incluir un procesador y una memoria configurada para almacenar datos e instrucciones para realizar uno o varios de los procesos descritos en este documento. El sistema de detección de sustancias químicas está configurado para determinar una concentración de analitos en la muestra en función, al menos en parte, de las señales de salida generadas por los sensores y en un modelo que relaciona las señales de salida o la información derivada de las señales de salida con la representación de salida V . La representación de salida V puede tener bases correspondientes a los diferentes analitos de la muestra.

En el acto 610, el sistema de detección de sustancias químicas recibe las señales emitidas por la pluralidad de sensores. Cada señal puede incluir una serie temporal de mediciones, como se describe anteriormente con respecto a las figuras 2A y 2B. En algunas realizaciones, las señales se reciben a medida que se generan (por ejemplo, como un flujo de datos). En algunas realizaciones, la señal se almacena y se proporciona posteriormente al sistema de detección de sustancias químicas. En algunas realizaciones, las señales se reciben de los sensores a través de una red. Por ejemplo, el sistema de detección de sustancias químicas que contiene los sensores puede estar situado a distancia del dispositivo informático que procesa la señal. En algunas realizaciones, el sistema de detección de sustancias químicas que contiene los sensores puede estar integrado en el dispositivo informático.

En el acto 620, se usa un primer modelo para cartografiar las señales emitidas por la pluralidad de sensores a una representación de características Z . En algunas realizaciones, este cartografiado no es lineal. Por ejemplo, un cambio en la concentración de un analito en la muestra provoca un cambio no lineal en la ubicación de un punto en la representación de características. El sistema de detección de sustancias químicas está configurado para realizar este cartografiado usando un primer modelo que relaciona las señales emitidas por la pluralidad de sensores con una representación de características. El cartografiado puede incluir un acto de cartografiado de las señales de salida a valores de respuesta. En algunas realizaciones, se cartografía una característica de amplitud y/o una característica temporal de una señal de salida a cada valor de respuesta correspondiente (por ejemplo, un valor de respuesta puede ser de valor vectorial, con uno o más componentes correspondientes a las características de amplitud y uno o más componentes correspondientes a las características temporales). La característica de amplitud puede ser, por ejemplo, un cambio normalizado en una amplitud de la señal correspondiente. La característica temporal puede ser, por ejemplo, un tiempo de subida o un tiempo de bajada de una amplitud de la señal correspondiente. A continuación, estos valores de respuesta pueden ponderarse y combinarse para formar vectores de características en la representación de características. En algunas realizaciones, los pesos pueden ser los pesos de una red neuronal que relaciona los valores de respuesta con la representación de características. La red neuronal puede ser una red neuronal recurrente (o incluir capas de red neuronal recurrente), una red neuronal convolucional (o incluir capas de red neuronal convolucional) u otro tipo de red neuronal. De esta manera, una ponderación puede relacionar los valores de respuesta con la representación de características.

En el acto 630, se usa un segundo modelo para cartografiar los vectores de características correspondientes a las señales de salida desde la representación de características Z a una representación de salida V . El segundo modelo incluye múltiples submodelos que implementan subcartografiados, como se describe anteriormente. En algunas realizaciones, un primer submodelo relaciona una representación de características Z con una representación latente Φ . En algunas realizaciones, la representación latente Φ tiene una dimensionalidad menor que la representación de características. Por ejemplo, como se describe anteriormente, el número de dimensiones de la representación de características Z puede depender del número de sensores de la matriz de sensores y del número de características extraídas de cada sensor. El número de dimensiones en la representación latente Φ puede depender del número de analitos de base relevantes. Por ejemplo, cuando la matriz de sensores incluye 32 sensores y se extrae una sola característica de cada señal de salida, la representación de características Z puede ser un espacio de 32 dimensiones. Cuando el sistema de detección de sustancias químicas está configurado para detectar cuatro analitos de base relevantes, la representación latente Φ puede ser un espacio de cuatro dimensiones.

Un segundo submodelo relaciona la representación latente Φ con una representación ortogonal rectificada Ω . En la representación ortogonal rectificada Ω , se define que los colectores unidimensionales correspondientes a concentraciones variables del mismo analito tienen un ángulo cero entre ellos y que los colectores unidimensionales correspondientes a analitos diferentes son ortogonales.

Un tercer submodelo puede relacionar la representación ortogonal rectificada Ω con la representación de salida V . La ubicación de los puntos en la representación de salida V puede ser una función lineal de la concentración de analitos en las muestras correspondientes. El tercer submodelo puede relacionar la representación ortogonal rectificada con una representación de salida no linealizada U que tenga bases convencionales asociadas con los analitos de base. El tercer submodelo puede implementar esta relación de acuerdo con un cartografiado τ , como se describe en este documento. El tercer submodelo también puede relacionar la representación de salida no linealizada U con la representación de salida V . El tercer submodelo puede implementar esta relación de acuerdo con un cartografiado η , como se describe en este documento.

En el acto 640, se determina una concentración de al menos un analito en la muestra usando la representación de salida. En algunas realizaciones, el sistema de detección de sustancias químicas puede determinar la concentración de cada analito relevante en función de la ubicación del punto correspondiente a la muestra en la representación de salida. Por ejemplo, cuando la representación de salida incluye ejes correspondientes a cuatro analitos de base relevantes, la ubicación de un punto en la representación de salida puede ser $[c_1 \ c_2 \ c_3 \ c_4]$. En este ejemplo, c_1 es la concentración del primer analito de base, c_2 es la concentración del segundo analito de base, c_3 es la concentración del tercer analito de base y c_4 es la concentración del cuarto analito de base. En algunas realizaciones, el sistema de detección de sustancias químicas puede estar configurado para almacenar, presentar o proporcionar la posición en la representación de salida correspondiente a la muestra.

La figura 7 representa un proceso ejemplar para configurar un sistema de detección de sustancias químicas para detectar concentraciones de al menos un analito. En algunas realizaciones, un dispositivo de entrenamiento incluye un procesador y una memoria configurada para almacenar datos e instrucciones para llevar a cabo las realizaciones divulgadas. El dispositivo de entrenamiento está configurado para entrenar un modelo de evaluación que relacione las señales de salida generadas por los sensores de una matriz de sensores (o la información derivada de dichas señales) con una representación de salida V que tenga bases correspondientes a los analitos de base. Entonces, el sistema de detección de sustancias químicas está configurado para detectar concentraciones de los analitos usando el modelo de evaluación entrenado. Por ejemplo, el sistema de detección de sustancias químicas puede estar configurado para usar el modelo de evaluación entrenado para relacionar las señales de salida (o la información derivada de las señales de salida) con la representación de salida, como se describe anteriormente con respecto a la figura 6.

En algunas realizaciones, el modelo de evaluación puede incluir un conjunto de modelos. En dichas realizaciones, el entrenamiento usando el conjunto de datos de entrenamiento puede realizarse sobre todos los modelos simultáneamente. Por ejemplo, el conjunto de modelos puede usar los datos de entrenamiento para generar concentraciones estimadas, que pueden compararse con concentraciones conocidas usando marcadores en los datos de entrenamiento para generar una señal de error, que puede usarse para actualizar todos los modelos. En diversas realizaciones, un subconjunto del conjunto de modelos puede entrenarse simultáneamente. Por ejemplo, cada modelo del conjunto de modelos puede entrenarse individualmente usando el conjunto de datos de entrenamiento. Por ejemplo, los dos primeros modelos del conjunto de modelos pueden estar al menos parcialmente entrenados. A continuación, estos modelos pueden generar resultados usando las señales del conjunto de datos de entrenamiento. Este resultado puede usarse para entrenar el siguiente modelo del conjunto de modelos. En algunas realizaciones, el conjunto de modelos puede someterse a entrenamiento iterativo. En cada iteración, cada uno de los modelos puede entrenarse usando al menos una parte del conjunto de datos de entrenamiento. El entrenamiento de modelos individuales, de subconjuntos del conjunto de modelos o del modelo de evaluación global puede continuar hasta que se satisfagan los criterios de tiempo de entrenamiento y/o de precisión.

En el acto 710, el dispositivo de entrenamiento recibe un conjunto de datos de entrenamiento generado por una pluralidad de sensores. Los sensores tienen diferentes sensibilidades para detectar diferentes analitos en un entorno. Los sensores están configurados para emitir una señal en respuesta a la detección de los diferentes analitos. En algunas realizaciones, el conjunto de datos de entrenamiento puede incluir $x(t)$ como se describe anteriormente con respecto a las figuras 2A y 2B. Por ejemplo, el conjunto de datos de entrenamiento puede incluir uno o más componentes de la tupla $\{D(t_i) = (t_i, C(t_i), x(t_i), a(t_i))\}$ además de las señales de salida $x(t)$. En algunas realizaciones, el dispositivo de entrenamiento está configurado para recibir el conjunto de datos de entrenamiento a medida que se genera por los sensores (por ejemplo, como un flujo de datos). En algunas realizaciones, el dispositivo de entrenamiento está configurado para recibir el conjunto de datos de entrenamiento después de generarse por los sensores (por ejemplo, el conjunto de datos de entrenamiento se almacena y se proporciona posteriormente al dispositivo de entrenamiento). El conjunto de datos de entrenamiento puede recibirse directamente desde una o más instancias del sistema de detección de sustancias químicas, o indirectamente desde una base de datos configurada para almacenar el conjunto de datos de entrenamiento. El conjunto de datos de entrenamiento puede recibirse a través de una red, o de una instancia del sistema de detección de sustancias químicas conectada al dispositivo de entrenamiento. En algunas realizaciones, una instancia del sistema de detección de sustancias químicas puede incluir el dispositivo de entrenamiento, y el entrenamiento puede realizarse por el sistema de detección de sustancias químicas.

En el acto 720, el dispositivo de entrenamiento entrena un modelo de asignación que relaciona las señales emitidas por los sensores (o la información derivada de las señales de salida) con la representación de salida V . En algunas realizaciones, el entrenamiento del modelo de evaluación incluye generar un primer modelo que relacione las señales emitidas por la pluralidad de sensores con la representación de características Z . En algunas realizaciones, el primer modelo se implementa, al menos en parte, mediante una o más redes neuronales (por ejemplo, una red neuronal recurrente, una red neuronal convolucional o una red neuronal que incluya capas recurrentes y/o convolucionales). El entrenamiento del primer modelo puede incluir el entrenamiento de los pesos de la red neuronal usando el conjunto de datos de entrenamiento. En algunas realizaciones, el primer modelo se entrena usando una técnica de aprendizaje no supervisado (por ejemplo, sin depender de datos de entrenamiento marcados).

En algunas realizaciones, el entrenamiento del modelo de evaluación incluye generar un segundo modelo que relacione la representación de características Z con la representación de salida V . El segundo modelo incluye múltiples submodelos, que pueden entrenarse por separado. El cartografiado de la representación de características Z a la representación de salida V incluye la asociación de bases en la representación ortogonal rectificada con los analitos.

Un primer submodelo relaciona la representación de características Z con una representación latente Φ . En algunas realizaciones, un colector continuo incrustado en la representación de características Z contiene las señales emitidas por la pluralidad de sensores. El colector continuo puede tener una dimensionalidad igual a la dimensionalidad de la representación latente Φ . Por consiguiente, la representación latente Φ puede tener una dimensionalidad inferior a la dimensionalidad de la representación de características Z . En algunas realizaciones, el primer submodelo incluye un modelo de aprendizaje automático adecuado para la reducción de la dimensionalidad, tal como el codificador de un autocodificador, el generador de una red generativa adversativa o un modelo similar. El dispositivo de entrenamiento puede estar configurado para entrenar el primer submodelo usando el conjunto de datos de entrenamiento. En algunas realizaciones, el entrenamiento se lleva a cabo usando una técnica de aprendizaje no supervisado (por ejemplo, sin depender de datos de entrenamiento marcados). En algunas realizaciones, el primer submodelo implementa una técnica no paramétrica de reducción de la dimensionalidad (por ejemplo, incrustación estocástica de vecinos t distribuidos (t-SNE)).

En algunas realizaciones, como se describe anteriormente con respecto a las figuras 2A y 2B, el entrenamiento del modelo de evaluación incluye identificar colectores correspondientes a muestras de concentraciones variables de un mismo analito. Este entrenamiento puede proceder iterativamente para identificar colectores unidimensionales asociados a analitos de base de concentraciones variables en la representación de características Z usando cambios de gradiente locales. La identificación de estos colectores como asociados a los analitos de base puede servir posteriormente para generar modelos de rectificado y ortogonalización de la representación latente Φ .

Un segundo submodelo relaciona la representación latente Φ con una representación ortogonal rectificada Ω . El segundo submodelo puede incluir una red neuronal de rectificado. En algunas realizaciones, la red neuronal de rectificado se implementa como una red neuronal prealimentada que relaciona la representación latente con una representación rectificada. El dispositivo de entrenamiento puede estar configurado para entrenar la red neuronal de rectificado usando el conjunto de datos de entrenamiento y una función de pérdida configurada para penalizar la generación de ángulos distintos de cero entre los vectores emitidos por la al menos una red neuronal que corresponden a muestras de concentraciones variables de un mismo analito. El segundo submodelo también puede incluir una red neuronal de ortogonalización. En algunas realizaciones, la red neuronal de ortogonalización se implementa como una red neuronal prealimentada que relaciona la representación rectificada con una representación rectificada y ortogonal. El dispositivo de entrenamiento puede estar configurado para entrenar la red neuronal de ortogonalización usando el conjunto de datos de entrenamiento y una función de pérdida configurada para penalizar la generación de vectores no ortogonales emitidos por la red neuronal de ortogonalización que correspondan a muestras de analitos diferentes. El entrenamiento del segundo submodelo puede incluir entrenar al menos una de la red neuronal de rectificado o la red neuronal de ortogonalización usando una técnica de aprendizaje no supervisado (por ejemplo, sin depender de marcadores asociados a los datos de entrenamiento). En algunas realizaciones, este entrenamiento se basa en asociaciones determinadas usando cambios de gradiente locales.

Un tercer submodelo puede relacionar la representación ortogonal rectificada Ω con la representación de salida V . En algunas realizaciones, el dispositivo de entrenamiento está configurado para usar marcadores en los datos de entrenamiento para asociar bases en la representación ortogonal rectificada con los analitos de base. Por ejemplo, el dispositivo de entrenamiento puede identificar un analito asociado con una base usando marcadores asociadas con uno o varios puntos situados sobre o cerca de la base. A continuación, el dispositivo de entrenamiento puede generar un modelo de introducción que introduzca las bases asociadas en las bases convencionales de una representación de salida no linealizada U . En algunas realizaciones, el dispositivo de entrenamiento genera un modelo de linealización que linealiza la representación de salida no linealizada U usando concentraciones indicadas en marcadores asociados con los datos de entrenamiento. En algunas realizaciones, el modelo de linealización que linealiza la representación de salida no linealizada U incluye una red neuronal. En algunas realizaciones, esta red neuronal se implementa como una red neuronal prealimentada. El dispositivo de entrenamiento puede estar configurado para entrenar la red neuronal para linealizar la representación de salida no linealizada U usando los datos de entrenamiento y los valores de concentración correspondientes a los datos de entrenamiento.

En algunas realizaciones, uno o más de los modelos descritos anteriormente pueden entrenarse por un dispositivo distinto del de entrenamiento. Por ejemplo, el dispositivo de entrenamiento puede estar configurado para generar el primer modelo y el primer y segundo submodelos. Estos modelos pueden relacionar colectivamente las señales de salida con una representación ortogonal rectificada Ω . A continuación, el dispositivo de entrenamiento puede recibir el tercer submodelo que relaciona la representación ortogonal rectificada Ω con la representación de salida V . De esta manera, los modelos pueden reutilizarse o generarse únicamente cuando sea necesario. Como ejemplo adicional, como se indica anteriormente con respecto a las figuras 3A a 3G, uno o más dispositivos de entrenamiento pueden estar configurados para generar modelos que relacionen las señales de salida generadas por diferentes instancias de un sistema de detección de sustancias químicas con una representación común (por ejemplo, la representación de salida no linealizada U). Otro modelo que se puede usar con cada una de las diferentes instancias del sistema de detección de sustancias químicas puede entonces relacionar la representación de salida no linealizada U con la representación de salida V .

En el acto 730, el sistema de detección de sustancias químicas puede estar configurado para detectar concentraciones de los analitos usando el modelo de evaluación. Por ejemplo, el dispositivo de entrenamiento, u otro dispositivo, puede hacer que el modelo de evaluación se almacene en una memoria del sistema de detección de sustancias químicas. Entonces, el sistema de detección de sustancias químicas puede estar configurado para usar el modelo de evaluación para cartografiar las señales de salida recibidas de los sensores a la representación de salida V .

Las figuras 8A a 8E representan los datos de ensayos empíricos de tres analitos (acetona, etanol y tolueno) cartografiados a diversas representaciones usando modelos entrenados de acuerdo con las realizaciones divulgadas. El conjunto de datos incluye la señal de salida recibida de los elementos sensores del sistema de detección de sustancias químicas para 1200 muestras químicas. Las muestras químicas incluyen muestras de acetona pura, etanol o tolueno a diversas concentraciones como analitos de base. Las muestras químicas también incluían mezclas de acetona, etanol y/o tolueno en diversas proporciones y diversas concentraciones totales. Cada señal de salida incluía 32 secuencias de datos de series temporales, correspondiendo cada secuencia a uno de los 32 elementos sensores.

Las muestras se introdujeron en una cámara de 1,5 l en que estaba montado el sistema de detección de sustancias químicas. Se recogieron 10 muestras de acetona, etanol y tolueno cada una en concentraciones que variaban de 2,5 ul a 25 ul. Se introdujeron en la cámara mezclas de (acetona, etanol), (acetona, tolueno), (tolueno, etanol) y (acetona, tolueno, etanol) en que la proporción de cada sustancia química variaba de un 0 % a un 100 % (0 %, 17 %, 25 %, 33 %, 50 %, 66 %, 75 % y 100 %) con una concentración total que variaba de 2,5 ul a 25 ul. Por cada mezcla y a diversas concentraciones, se recogieron 10 muestras en el conjunto de datos para representar la semántica con la distribución local para cada composición química.

La figura 8A representa una respuesta transitoria ejemplar de un elemento sensor a una de las composiciones químicas ensayadas. El valor extremo de la respuesta transitoria se indica como 803 y el valor de referencia de la respuesta transitoria se indica como 801. En este ejemplo, el cartografiado ζ incluye solo un descriptor f que es el valor "1" restado del valor extremo en la respuesta transitoria, α , dividido por el vector de referencia, β , que se calcula para cada ciclo.

$$f = \frac{\alpha - \beta}{\beta} \quad \text{donde} \quad f = \frac{\alpha}{\beta} - 1$$

Como el sistema de detección de sustancias químicas incluye 32 elementos sensores, el vector de características correspondiente a cada entorno incluye 32 valores. La representación de características Z era un espacio de 32 dimensiones. Dispuestos en este espacio de 32 dimensiones había 1200 valores correspondientes a las 1200 muestras.

En las figuras 8B a 8F, los valores de los puntos en cada representación se presentan mediante círculos pequeños. Cada una de las tres líneas indica puntos correspondientes a concentraciones variables de uno de los tres analitos de base (acetona, etanol, tolueno). La figura 8B representa una representación latente Φ ejemplar generada a partir de la representación de características Z de acuerdo con un cartografiado ϕ . El cartografiado ϕ se generó usando la incrustación estocástica de vecinos t distribuidos (t-SNE) para aprender un espacio tridimensional reducido Φ . Como t-SNE conserva la localidad de los conceptos cercanos en el espacio original tras reducir la dimensión, cuando dos puntos están cerca (o lejos) entre sí en la representación de características original de treinta y dos dimensiones Z , los dos puntos correspondientes seguirán estando cerca (o lejos) entre sí en la representación latente de tres dimensiones Φ . En el conjunto de datos, para cada proporción y concentración únicas de analitos hay múltiples señales de salida. Estas señales de salida se cartografían en puntos correlacionados (ceranos, pero no en la misma ubicación exacta) en el espacio de treinta y dos dimensiones, Z , y en el espacio tridimensional equivalente, Φ . En la figura 8B, el colector 815 conecta la mediana de los valores de muestras de acetona pura de concentraciones variables, el colector 813 conecta las medianas de los valores de muestras de etanol puro de concentraciones variables, y el

colector 811 conecta las medianas de los valores de muestras de tolueno puro de concentraciones variables. Las líneas discontinuas son curvas ajustadas en los puntos relacionados con cada uno de los analitos de base.

La figura 8C representa una representación rectificada ejemplar Ψ generada a partir de la representación latente Φ de acuerdo con un cartografiado ψ . En este ejemplo, los ejes se identificaron para cada analito de base (por ejemplo, el eje 821 para tolueno, el eje 825 para etanol y el eje 823 para acetona). Esta identificación puede realizarse usando el proceso iterativo de identificación de puntos exteriores en el colector descrito en este documento. Como hay tres analitos de base en el conjunto de datos, se pueden identificar tres ejes. Para rectificar los ejes, se calcula una ecuación lineal para cada eje. Estas ecuaciones lineales pueden restringirse de modo que no se encuentren todas dentro de un plano y que el origen de todas las ecuaciones lineales se encuentre en o cerca de un punto correspondiente a la ausencia de analitos en la muestra. A continuación, cada punto asociado con un analito de base se cartografía a un punto de la línea correspondiente para ese analito. Este cartografiado ψ puede generarse usando una red neuronal entrenada para rectificar los ejes y desplegar el colector. Una vez realizado el entrenamiento, el cartografiado ψ se aplica a los puntos de la representación latente Φ para generar los puntos correspondientes en el espacio transformado Ψ .

La figura 8D representa una representación ejemplar rectificada y ortogonal Ω generada a partir de la representación rectificada Ψ de acuerdo con un cartografiado ω . En este ejemplo, los ejes de Ψ se han rectificado, pero no son ortogonales (al menos en este ejemplo). El sistema de detección de sustancias químicas puede estar configurado para generar ejes ortogonales de acuerdo con el siguiente proceso. En un primer acto del proceso, se selecciona un primer eje y_1 (representado como eje 831). En este ejemplo no limitante, el eje seleccionado 831 no se modifica. A continuación, se selecciona un segundo eje y_2 y se determina un cartografiado del segundo eje y_2 a un eje objetivo y_2' (eje 833), ortogonal al primer eje 831. El cartografiado de y_2 al eje 833 también puede tener el efecto de cartografiado del tercer eje y_3 a y_3' . A continuación, se selecciona el eje restante y_3' y se determina un cartografiado de y_3' a un eje objetivo 835. A lo largo de este proceso, se generan ubicaciones objetivo para los puntos situados en los ejes y_2 y y_3 . A continuación, puede entrenarse una red neuronal para implementar el cartografiado ω , que puede cartografiar los puntos situados en los ejes y_2 y y_3 a las ubicaciones objetivo. A continuación, esta red neuronal puede usarse para calcular las ubicaciones en la representación rectificada ortogonal Ω que corresponden a los puntos de la representación rectificada Ψ .

La figura 8E representa una representación ejemplar de base convencional U generada a partir de una representación rectificada ortogonal Ω de acuerdo con un cartografiado τ . En este ejemplo, los ejes de Ω son ortogonales, pero no están alineados (al menos en este ejemplo) con las bases convencionales de $\mathbb{R}^M$ (por ejemplo, el eje 841, el eje 843 y el eje 845). Usando los marcadores asociados a los datos, el sistema puede determinar una proyección de Ω a U que alinee cada eje de Ω con una base convencional correspondiente en U . Por ejemplo, si el eje x en U corresponde al etanol, el cartografiado τ puede proyectar el eje en Ω correspondiente al etanol al eje x en U (por ejemplo, el eje 843).

La figura 8F representa una representación de salida ejemplar V generada a partir de la representación de base convencional U de acuerdo con un cartografiado η . Usando las concentraciones y proporciones incluidas en los marcadores asociados con los datos, se determinan los puntos objetivo en la representación de salida V para cada punto de la representación de base convencional U . Puede entrenarse una red neuronal para implementar el cartografiado η que transforma los puntos de la representación de base convencional U en los puntos objetivo de la representación de salida V .

Una vez determinados los cartografiados τ , η , ω , ψ , ϕ y ζ , el sistema de detección de sustancias químicas puede configurarse con estos cartografiados. Por ejemplo, los modelos y parámetros que implementan estos cartografiados pueden guardarse en una memoria del sistema de detección de sustancias químicas. El sistema de detección de sustancias químicas puede estar configurado para aplicar los modelos almacenados de acuerdo con los parámetros almacenados para implementar estos cartografiados, que cartografía la muestra de salida recibida de la matriz de sensores a un punto de la representación de salida con una semántica claramente definida.

La descripción anterior de implementaciones proporciona ilustración y descripción, pero no pretende ser exhaustiva ni limitar las implementaciones a la forma precisa divulgada. Son posibles modificaciones y variaciones en vista de los contenidos anteriores o pueden adquirirse a partir de la práctica de las implementaciones. En otras implementaciones, los métodos representados en estas figuras pueden incluir menos operaciones, operaciones diferentes, operaciones ordenadas de forma distinta y/u operaciones adicionales. Además, los bloques no dependientes pueden realizarse en paralelo. El sistema de detección de sustancias químicas representado en la figura 1 asimismo pretende ser ejemplar.

Será evidente que los aspectos de ejemplo, como se describen anteriormente, pueden implementarse en muchas formas diferentes de programa informático, soporte lógico inalterable y componente físico en las implementaciones ilustradas en las figuras. Además, determinadas partes de las implementaciones pueden implementarse como un "módulo" que realiza una o más funciones. Este módulo puede incluir componentes físicos, tales como un procesador, un circuito integrado específico de aplicación (ASIC) o una matriz de puerto programable por campo (FPGA), o una combinación de componentes físicos y programas informáticos.

Ningún elemento, acto o instrucción usada en la presente solicitud debe interpretarse como crucial o esencial a menos que se describa explícitamente como tal. Además, como se usa en este documento, el artículo "un/o" pretende incluir uno o más artículos. Cuando solo se pretende un artículo, se usa el término "uno" o un vocabulario similar. Además, la expresión "en función de" significa "en función, al menos en parte, de", a menos que se indique explícitamente lo contrario. Aproximadamente, como se usa en este documento, significa dentro del 10 % de un valor nominal, coherente con lo que entiende un experto en la materia y a menos que se especifique lo contrario.

5

10

15

20

25

30

35

40

45

50

55

60

65

REIVINDICACIONES

1. Un sistema de detección de sustancias químicas (100), que comprende:

- 5 una pluralidad de sensores (121) dispuestos sobre al menos un sustrato (122), en donde un primer sensor y un segundo sensor de la pluralidad de sensores (121) tienen diferentes sensibilidades para detectar al menos un analito en una muestra, estando cada uno de la pluralidad de sensores (121) configurado para emitir una señal en respuesta a la detección del al menos un analito; y
- 10 un procesador informático (130) programado para:
 recibir las señales emitidas por la pluralidad de sensores (121); y
 determinar una concentración del al menos un analito en la muestra en función, al menos en parte, de las señales recibidas y en un modelo entrenado para relacionar las señales o la información derivada de las señales con una representación de salida que tiene bases correspondientes a analitos, incluyendo los analitos el al menos un analito, en donde la concentración es un valor escalar junto con una unidad de medición particular,
- 15 en donde:
 el modelo comprende:
 un primer modelo que relaciona las señales emitidas por la pluralidad de sensores (121) con una representación de características (221); y
 un segundo modelo que relaciona la representación de características (221) con la representación de salida; y
- 20 en donde:
 el segundo modelo que relaciona la representación de características (221) con la representación de salida comprende:
 un primer submodelo que relaciona la representación de características (221) con una representación latente (231) **caracterizada por que** el segundo modelo comprende además un segundo submodelo que relaciona dicha representación latente (231) con una representación ortogonal rectificada (241), en donde:
- 25 los colectores unidimensionales en la representación ortogonal rectificada (241) correspondientes a concentraciones variables de un mismo analito tienen un ángulo cero entre ellos; y
 los colectores unidimensionales en la representación ortogonal rectificada (241) correspondientes a diferentes analitos son ortogonales.

2. El sistema de detección de sustancias químicas (100) de la reivindicación 1, en donde:

- el primer modelo comprende:
 un cartografiado de las señales a valores de respuesta; y
- 35 una ponderación que relaciona los valores de respuesta con la representación de características (221).

3. El sistema de detección de sustancias químicas (100) de la reivindicación 2, en donde:

- la ponderación comprende:
 40 pesos de una red neuronal recurrente o de una red neuronal convolucional que relacionan los valores de respuesta con la representación de características (221).

4. El sistema de detección de sustancias químicas (100) de la reivindicación 2, en donde:

- 45 el cartografiado asigna a cada valor de respuesta una característica de amplitud y/o una característica temporal de una señal correspondiente.

5. El sistema de detección de sustancias químicas (100) de la reivindicación 4, en donde:

- 50 la característica de amplitud comprende un cambio normalizado en una amplitud de la señal correspondiente.

6. El sistema de detección de sustancias químicas (100) de la reivindicación 4, en donde:

- la característica temporal comprende un tiempo de subida o un tiempo de bajada de una amplitud de la señal correspondiente.
- 55

7. El sistema de detección de sustancias químicas (100) de la reivindicación 1, en donde:

- 60 un cambio en la ubicación de un punto de la representación de características (221) correspondiente a una concentración de analito en la muestra es una función no lineal de un cambio en la concentración de analito en la muestra.

8. El sistema de detección de sustancias químicas (100) de la reivindicación 1, en donde:

- 65 el segundo modelo que relaciona la representación de características (221) con la representación de salida comprende:

un tercer submodelo que relaciona la representación ortogonal rectificada (241) con la representación de salida, en donde el tercer submodelo:

relaciona la representación ortogonal rectificada (241) con una representación de salida no linealizada que tiene bases convencionales asociadas con los analitos; y

- 5 relaciona la representación de salida no linealizada con la representación de salida; y
 en donde un cambio en la ubicación de un punto de la representación de salida correspondiente a una concentración de analito en la muestra es una función lineal de un cambio en la concentración de analito en la muestra.

9. El sistema de detección de sustancias químicas (100) de la reivindicación 1, en donde:

- 10 cada señal comprende una serie temporal de mediciones.

10. El sistema de detección de sustancias químicas (100) de la reivindicación 1, en donde:

- 15 el primer modelo es un modelo específico de dispositivo que relaciona las señales o la información derivada de las señales con una representación intermedia; y
 el segundo modelo es un modelo independiente de dispositivo que relaciona la representación intermedia con la representación de salida.

- 20 11. Un método implementado por ordenador que comprende:

recibir (610) señales de una pluralidad de sensores (121) de un sistema de detección de sustancias químicas (100), teniendo los sensores (121) diferentes sensibilidades para detectar al menos un analito en la muestra, estando cada uno de los sensores configurado para emitir una señal en respuesta a la detección del al menos un analito;

- 25 cartografiar (620, 630) las señales o la información basada en las señales a una representación de salida que tienen bases de coordenadas correspondientes a los analitos; y
 determinar (640) una concentración del al menos un analito en la muestra a partir de la representación de salida, en donde la concentración es un valor escalar junto con una unidad de medición particular;
 en donde:

- 30 el cartografiado de las señales o de la información basada en las señales a una representación de salida comprende: usar un primer modelo para cartografiar las señales emitidas por la pluralidad de sensores (121) a una representación de características (221); y
 usar un segundo modelo para cartografiar la representación de características (221) a la representación de salida, en donde el segundo modelo comprende:

- 35 un primer submodelo que relaciona la representación de características (221) con una representación latente (231) **caracterizada por que** el segundo modelo comprende además un segundo submodelo que relaciona dicha representación latente (231) con una representación ortogonal rectificada (241), en donde:

los colectores unidimensionales en la representación ortogonal rectificada (241) correspondientes a concentraciones variables de un mismo analito tienen un ángulo cero entre ellos; y

- 40 los colectores unidimensionales en la representación ortogonal rectificada (241) correspondientes a diferentes analitos son ortogonales.

12. El método de la reivindicación 11, en donde:

- 45 el segundo modelo comprende además:
 un tercer submodelo que relaciona la representación ortogonal rectificada (241) con la representación de salida, en donde el tercer submodelo:

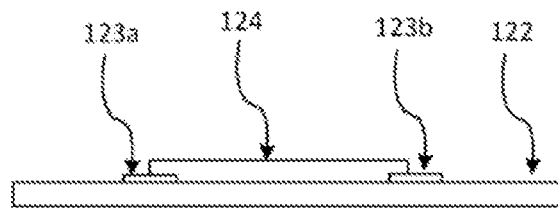
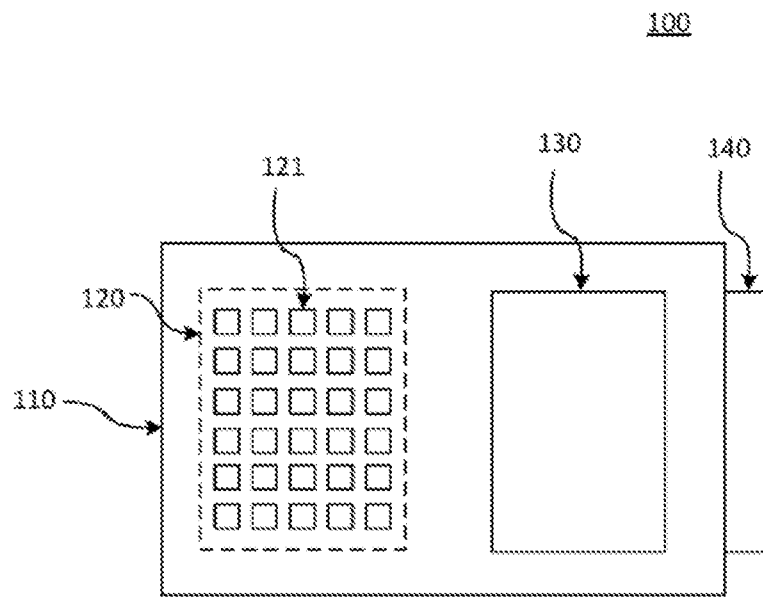
relaciona la representación ortogonal rectificada (241) con una representación de salida no linealizada que tiene bases convencionales asociadas con los analitos; y

- 50 relaciona la representación de salida no linealizada con la representación de salida; y
 en donde un cambio en la ubicación de un punto de la representación de salida correspondiente a una concentración de analito en la muestra es una función lineal de un cambio en la concentración de analito en la muestra.

55

60

65



200

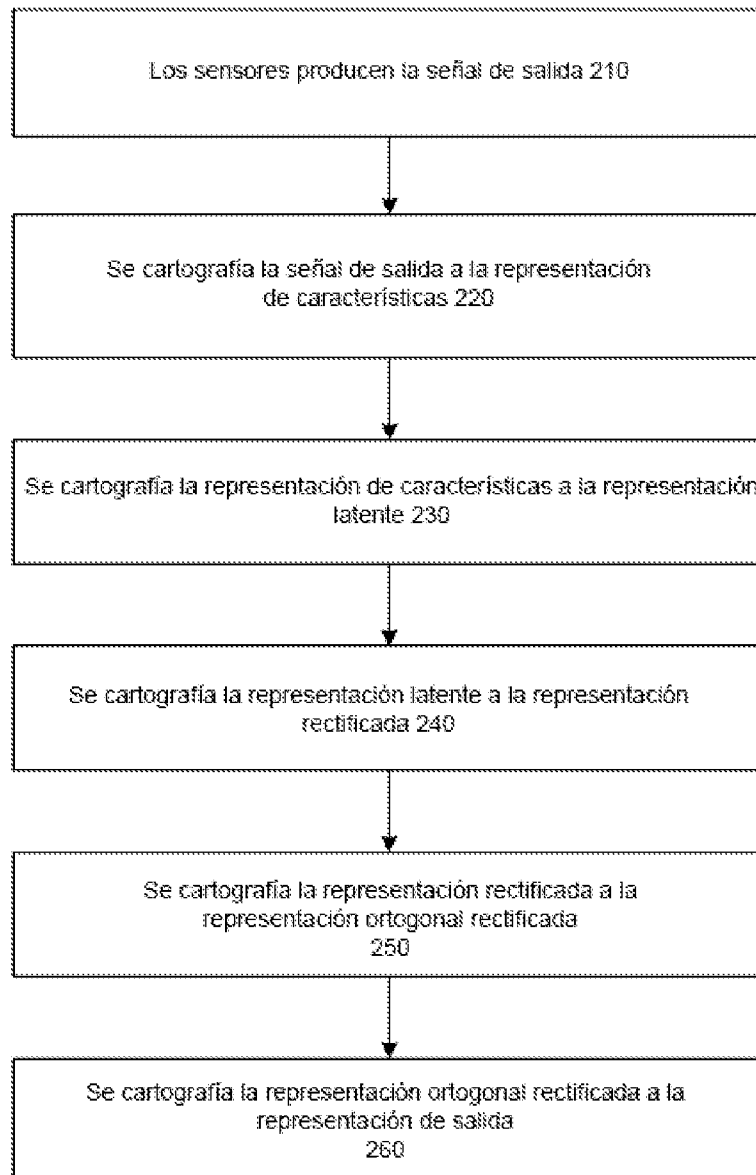


FIG. 2A

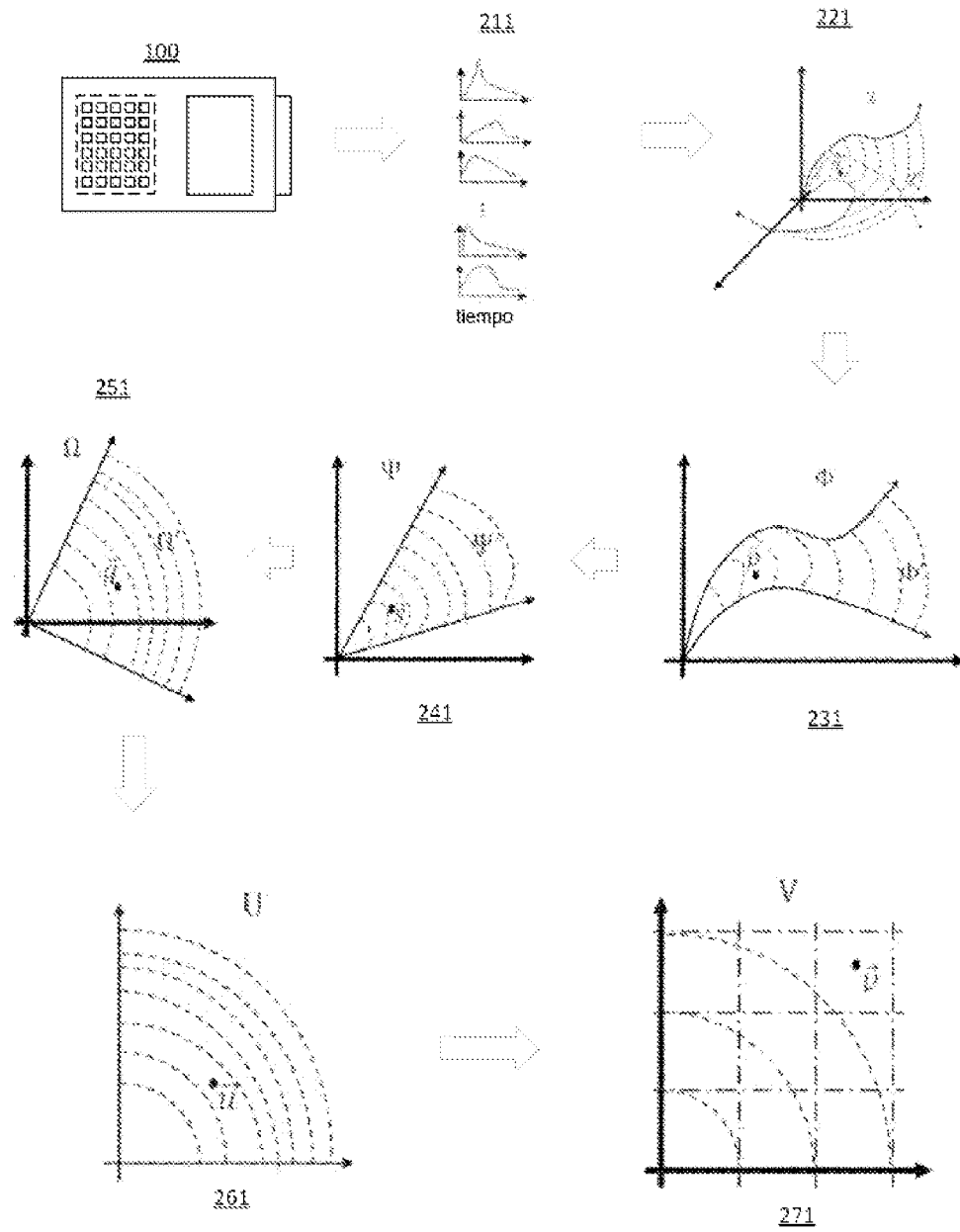
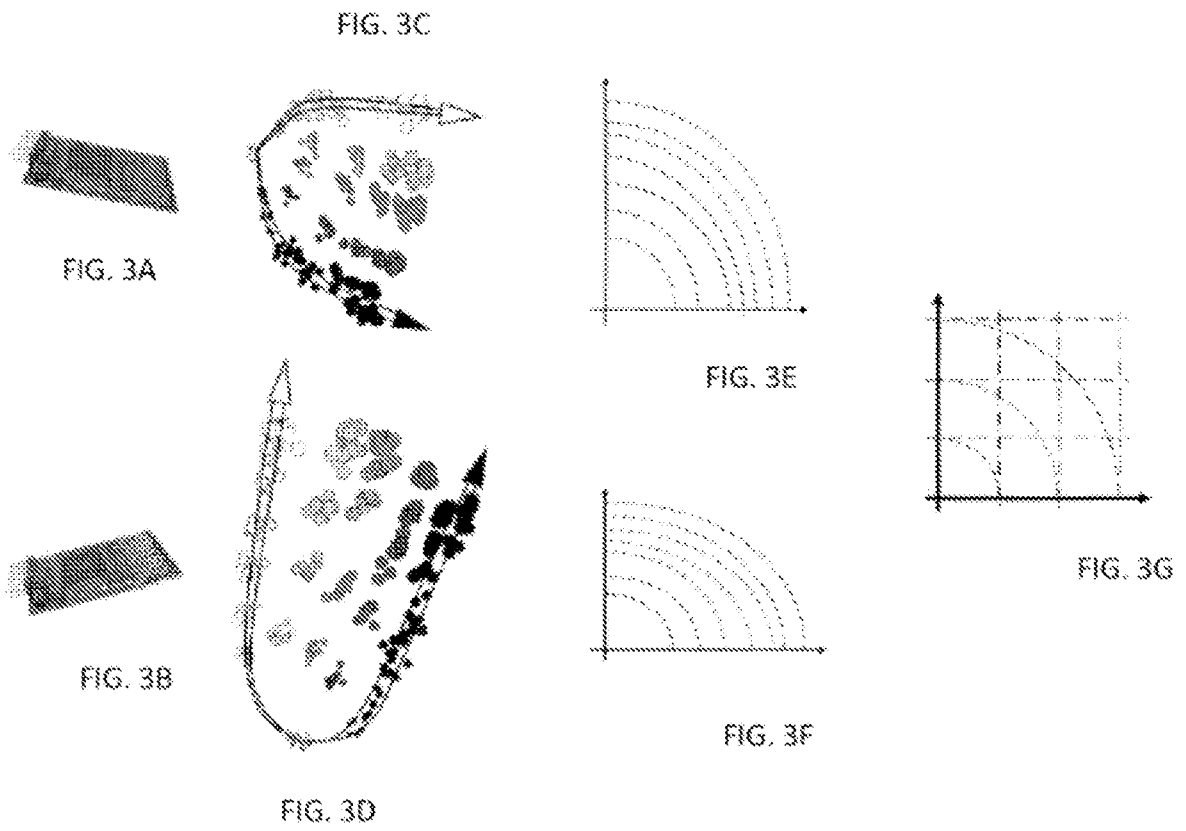
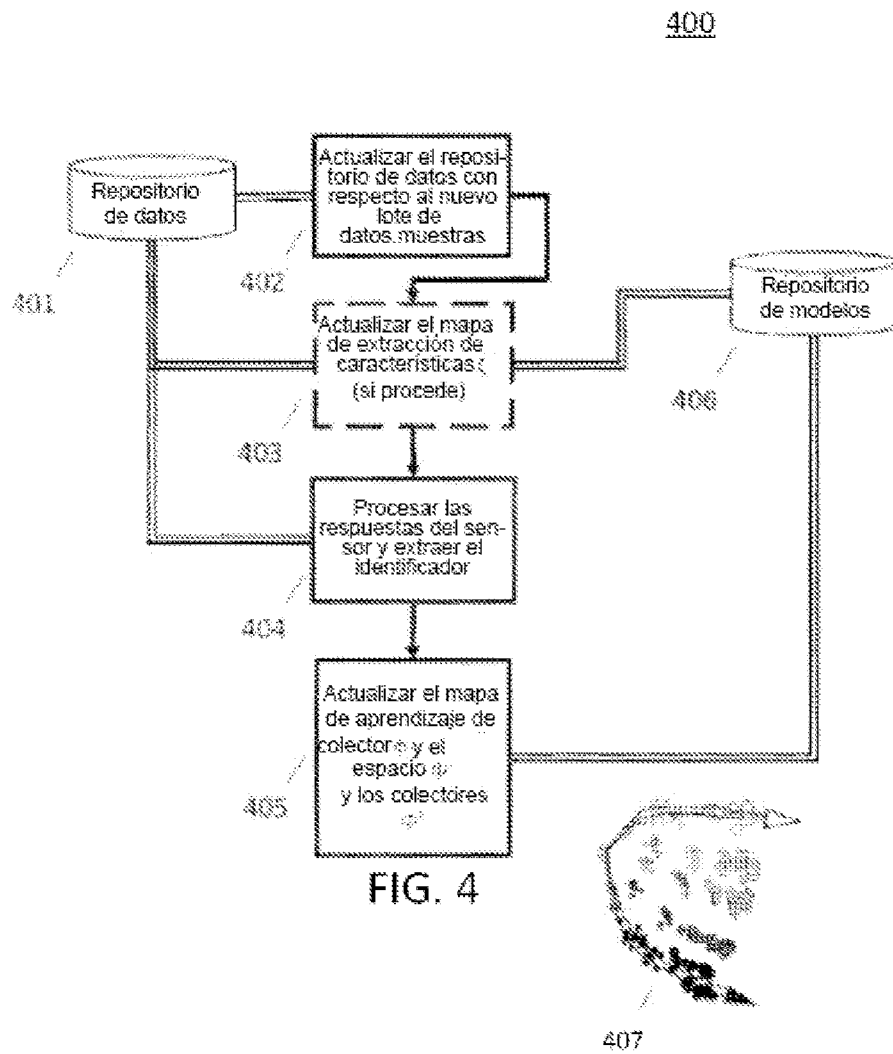


FIG. 2B





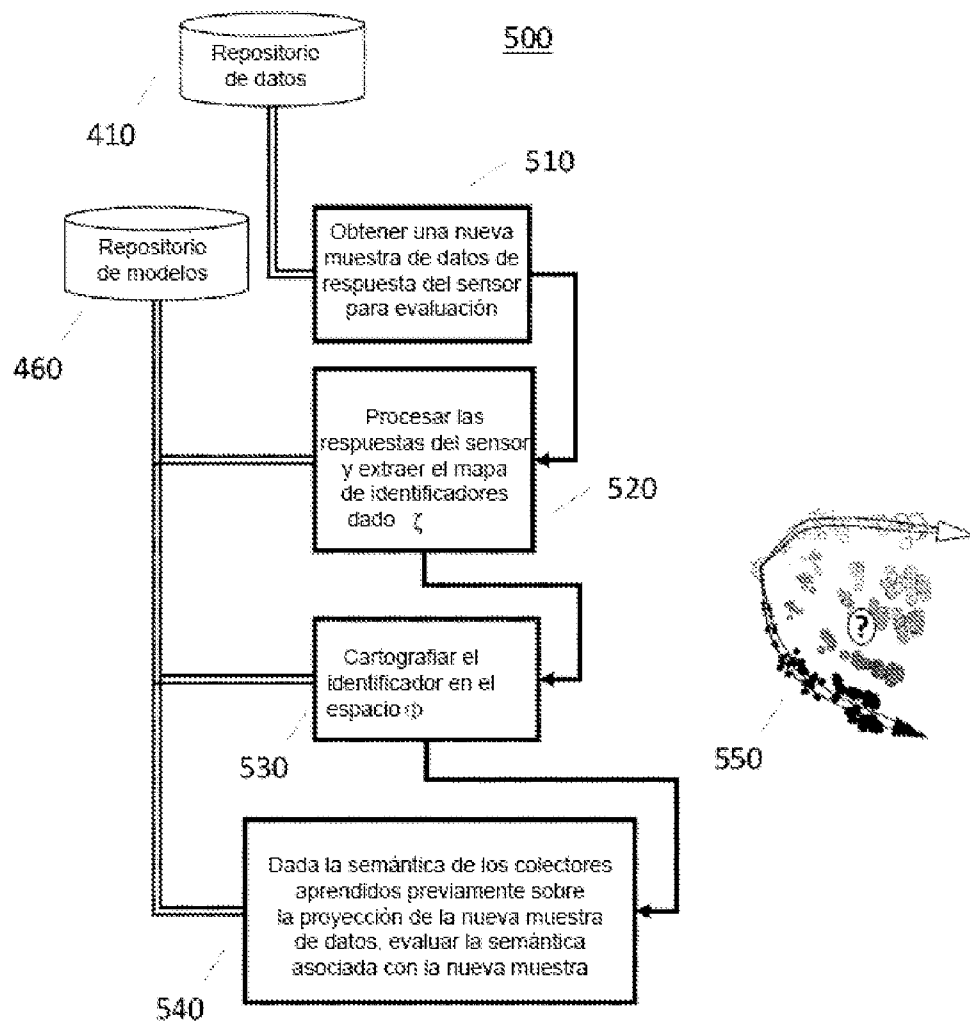


Fig. 5

600

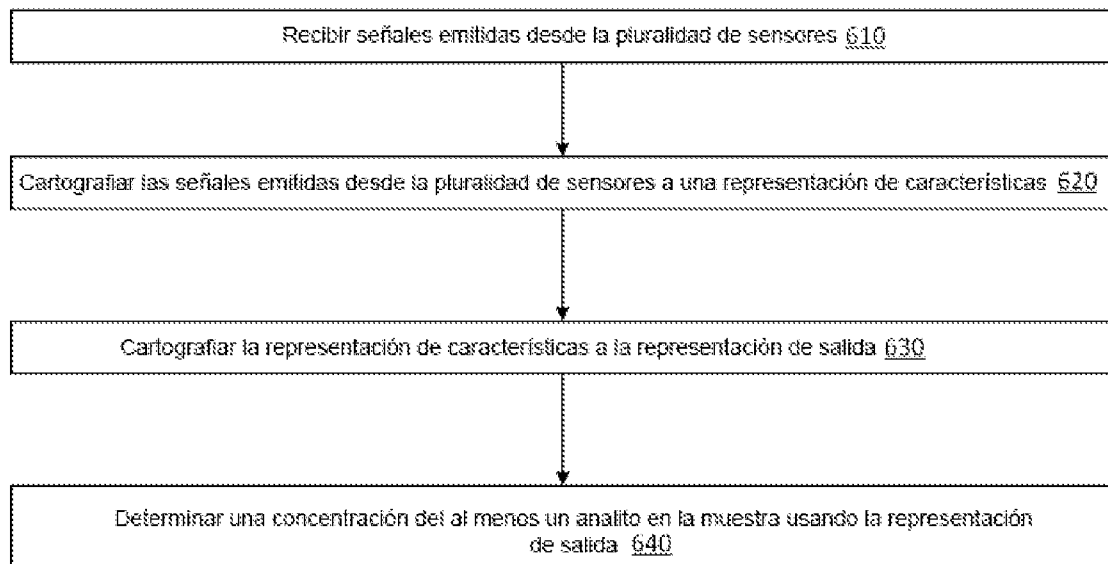


FIG. 6

700

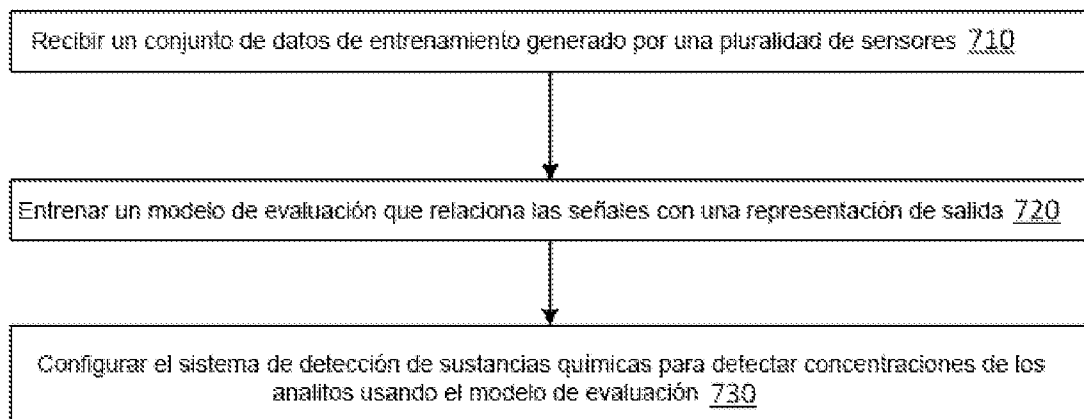


FIG. 7

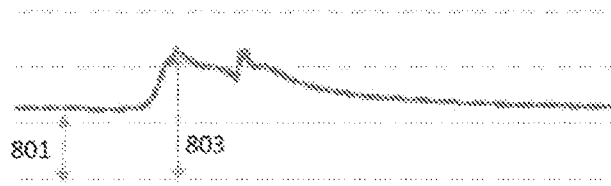


FIG. 8A

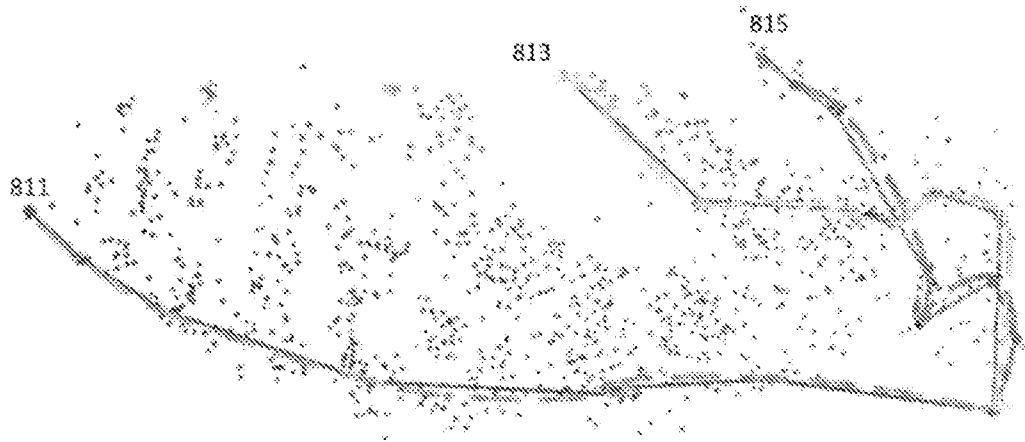


FIG. 8B

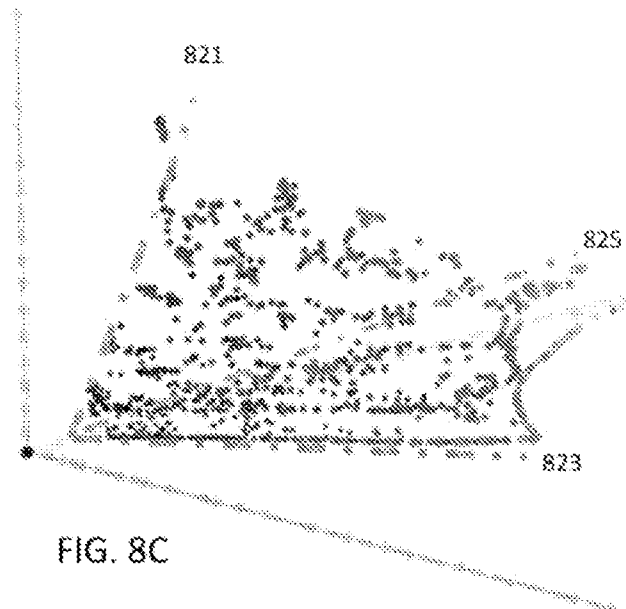


FIG. 8C

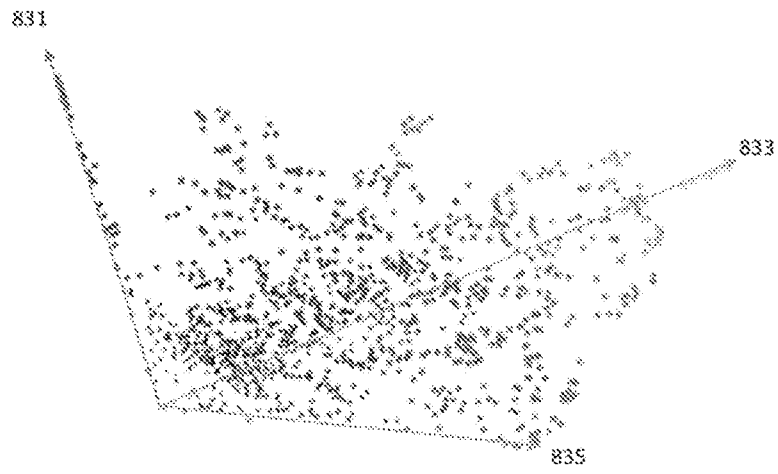


FIG. 8D

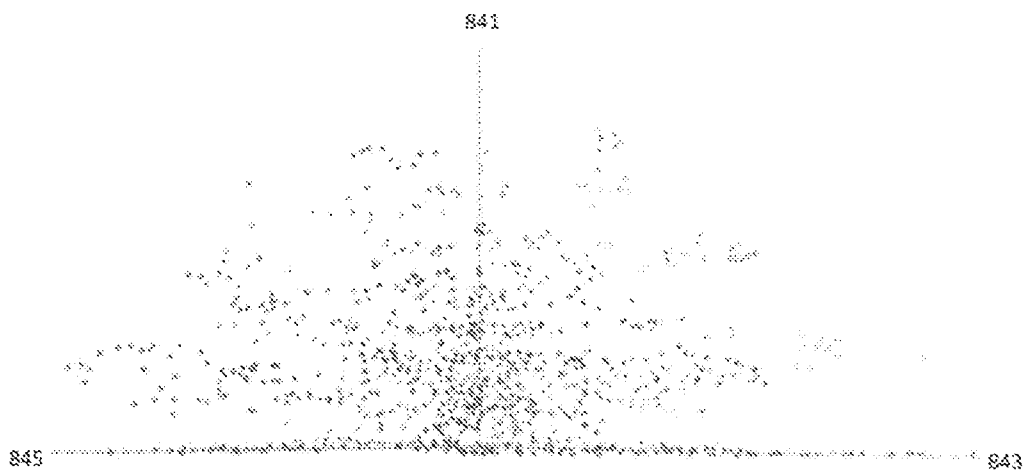


FIG. 8E

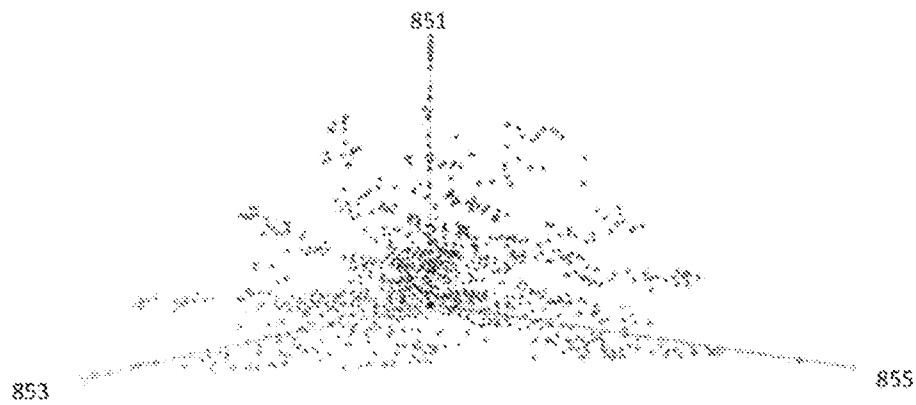


FIG. 8F