

КОМП'ЮТЕРНІ ЗАСОБИ, МЕРЕЖІ ТА СИСТЕМИ

Состав выдыхаемого воздуха как результат биохимических процессов в организме человека несет много важной информации. Современное состояние разработок интеллектуальных устройств типа «электронный нос» позволяет использовать их для диагностики некоторых заболеваний человека, сопровождающихся наличием специфических запахов. Разработка методики диагностики и портативных приборов индивидуального пользования на базе полупроводниковых мультисенсоров с микропроцессором и соответствующим программным обеспечением дает возможность сделать доступными для пациентов индивидуальные приборы оперативного контроля состояния их здоровья.

© С.И. Лукаш, В.Ю. Перетяцько,
2004

УДК 621.37:681.5

С.И. ЛУКАШ, В.Ю. ПЕРЕТЯТЬКО

КОМПЬЮТЕРНАЯ СИСТЕМА ОПРЕДЕЛЕНИЯ АЦЕТОНА В ВОЗДУХЕ ДЫХАНИЯ

Введение. На Украине насчитывается до 800 тысяч больных сахарным диабетом. Постоянный контроль уровня глюкозы в крови – жизненная потребность этой категории больных. Для повышения качества жизни больных, особенно детей, необходимы устройства для неинвазивного определения глюкозы.

До настоящего времени устройства для неинвазивного определения глюкозы в крови с удовлетворяющими требованиям характеристиками практически не созданы. В большинстве случаев причинами неудач является выбор методов, на основе которых пытаются создать устройства для прямого определения глюкозы в крови.

Для решения проблемы можно использовать метод на основе анализа неинвазивно измеренного параметра, хорошо коррелирующего с концентрацией глюкозы в крови.

Одним из таких параметров для построения корреляционных зависимостей и неинвазивного определения глюкозы может быть концентрация ацетона в составе выдыхаемого человеком воздуха [1].

В работе представлены результаты измерений запаха ацетона в выдыхаемом пациентом воздухе, выполненные на серийно изготовленных полупроводниковых газовых мультисенсорах и компьютерном комплексе со встроенным микропроцессором для управления и программной обработки первичного информационного сигнала.

Методика. Ацетон как продукт метаболических процессов в организме постоянно присутствует в составе выдыхаемого воздуха на уровне 1-3 мг/м³. В норме у здоровых

людей измеренная концентрация глюкозы в крови составляет 4-8 ммоль/л и коррелирующее значение концентрации ацетона в этом случае не превышает $3-5 \text{ мг/м}^3$. У людей, болеющих сахарным диабетом с компенсированной кетонемией, концентрация ацетона может достигать $8-10 \text{ мг/м}^3$.

Для проведения эксперимента была собрана установка, блок-схема газовой системы которой и ее общий вид представлены на рис. 1, а, б. Подобная газовая система и принцип работы газового полупроводникового мультисенсора описаны в предыдущих работах авторов [2]. Объем измерительного оборудования составил $1,5 \pm 0,1 \text{ л}$.

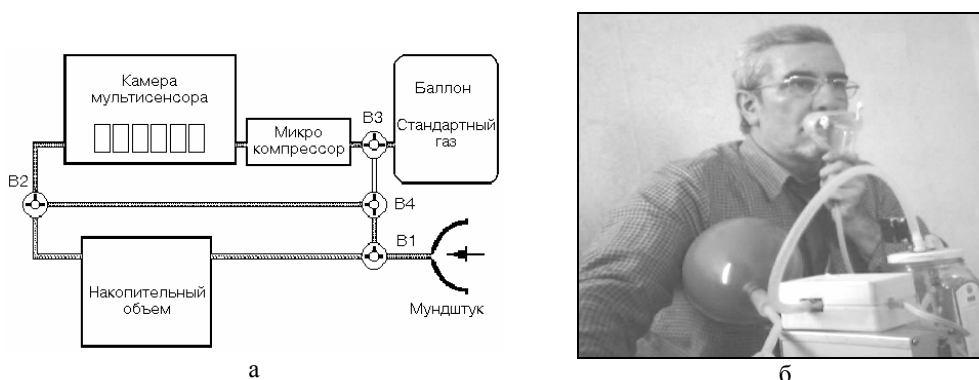


РИС. 1

В состав оборудования входят: мундштук для дыхания, накопительный объем, мультисенсор в измерительной камере, микрокомпрессор для создания циркуляции воздуха в системе, баллон со стандартным газом для промывки системы и ее предварительной калибровки, вентили В. Блоки предварительной обработки сигналов и компьютер с программным обеспечением также входят в состав оборудования (на блок-схеме не показаны). Был использован мультисенсор с тремя чувствительными слоями 1000/3000/7000 по номенклатуре фирмы-изготовителя, обозначаемыми в дальнейшем S_1, S_2, S_3 [3]. В таком мультисенсоре конструктивно в одном корпусе на общей подложке расположены три разных полупроводниковых чувствительных слоя и нагреватель. Рабочий режим создается программированным нагревом слоев от 50 до $400 \text{ }^\circ\text{C}$ с последующим охлаждением до начальной температуры за время одного цикла.

Перед измерениями систему промывали стандартным газом и выполняли калибровку сенсоров. В процессе калибровки было проведено обезгаживание и уточнены параметры рабочего режима. Условия в помещении при измерениях были постоянными: температура – $22 \pm 2 \text{ }^\circ\text{C}$, влажность – 65% , давление – 740 мм. рт. ст.

Результаты и обсуждение. Для проверки условий стабилизации режима работы устройства и сенсоров на протяжении нескольких дней непрерывно в тече-

ние часа после включения записывали информационный сигнал от всех чувствительных слоев. Соответственно представлению, что $S_{T=T_{\Phi}} = f(t)$ и 1 цикл = 3 мин, были проведены последовательные записи состояния воздуха для трех слоев: S_1 , S_2 , S_3 сенсора на фиксированных температурах T_{Φ} , равных 100, 150, 200, 250, 300, 350 и 400 °С. На рис. 2 показана зависимость для слоя S_2 (для других слоев S_1 и S_3 зависимость имеет подобную тенденцию).

Оценка стабилизации режима работы устройства определялась по δ_{cm} - уровню относительного изменения двух последовательных измерений первичного информационного сигнала сенсора:

$$\delta_{cm} = \left| \frac{S_{k+1} - S_k}{S_k} \right| \cdot 100\% \quad (1)$$

Здесь k – номер цикла, в котором был измерен сигнал сенсора в течение времени эксперимента. Критерием достижения стабилизации для данного оборудования является уровень в 3–5 %.

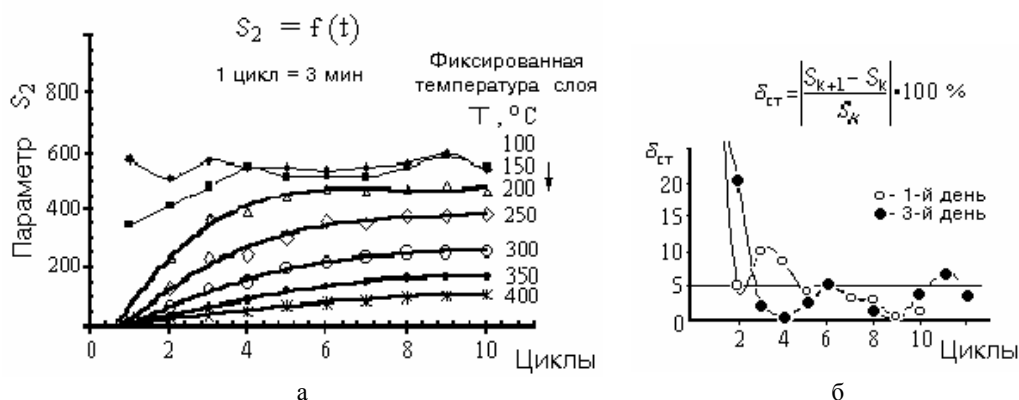


РИС. 2

На рис. 2, а маркерами показаны зависимости сигнала от времени работы устройства. Для температур нагревателя 100 и 150 °С экспериментальные точки соединены сплайном, для остальных температур подобрана аппроксимирующая функция. Уровень стабилизации режима работы устройства оценивался по временной зависимости параметра S_2 при фиксированной температуре нагревателя $T_{\Phi}=200$ °С. Анализ показывает (рис. 2, б), что приемлемый уровень сигнала для температур разогрева чувствительного слоя выше 200 °С устанавливается спустя 4 – 6 циклов работы устройства. Для более низких температур значение сигнала нестабильно.

Экспериментальные зависимости $S_i(t)$ в интервале температур 200...400 °С с высокой достоверностью ($R^2 > 0,98$ – показатель определенности, который от-

ражает близость значений линии тренда к фактическим данным) могут быть аппроксимированы по методу Гаусса кубическим полиномом вида

$$y = a_0 + a_1x + a_2x^2 + a_3x^3. \quad (2)$$

Значения коэффициентов полинома представлены в табл. 1.

ТАБЛИЦА 1

T, °C	a ₀	a ₁	a ₂	a ₃	R ²
200	- 158.9	256.23	- 33.975	1.4764	0.9854
250	- 126.43	157.16	- 17.046	0.6436	0.9873
300	- 72.587	82.182	- 6.6989	0.1758	0.9971
350	- 24.231	31.562	- 0.1222	-0.1096	0.9969
400	- 6.2458	15.119	+ 0.3005	-0.0661	0.9962

При обработке и интерпретации результатов измерений использовали следующую математическую модель. Определение изменений состава газовой среды осуществляется путем сравнения сигналов сенсора в анализируемом газе S_{ia} и в референтном эталонном газе S_{ie} . Индекс $i=1,2,3$ соответствует одному из трех чувствительных слоев в конструкции мультисенсора. В данной задаче для максимального приближения к реальным условиям эталонной газовой смесью был воздух помещения.

Первичный информационный сигнал сенсора S_i зависит: 1) от температуры T_i нагрева чувствительного слоя i ; 2) температуры T_v , влажности H_v и давления P_v среды в измерительном объеме; 3) наличия в объеме газа концентрации C_g , к которому чувствителен слой i сенсора.

Полагая, что действия факторов независимы, в общем виде это можно представить следующим образом:

$$S_i = f(T_s, T_v, H_v, P_v, C_g) = S_i(T_s) + S_i(T_v) + S_i(H_v) + S_i(P_v) + S_i(C_g), \quad (3)$$

или

$$S_i = S_{io} + S_i(C_g), \quad (4)$$

где $S_{io} = S_i(T_s) + S_i(T_v) + S_i(H_v) + S_i(P_v)$ - те составляющие сигнала сенсора, на которые определяемый газ не влияет.

Тогда в случае записи сигнала сенсора в воздухе $C_g = C_{air}$ или в воздухе с добавкой ацетона $C_g = C_{air} + C_{ac}$ для обнаружения изменений достаточно определить разницу в сигналах:

$$\Delta S_i = S_i(C_{air} + C_{ac}) - S_i(C_{air}). \quad (5)$$

Если погрешности оборудования и методики известны, то этого результата достаточно для экспертного вывода.

Если погрешности а priori принимаются примерно равными 10 %, что типично и приемлемо для газовых измерений [4], то надежнее подсчитать относительное изменение L_i :

$$L_i = \frac{\Delta S_i}{S_i} = \frac{S_i(C_{air} + C_{ac})}{S_i(C_{air})} - 1 . \quad (6)$$

Здесь индекс i соответствует номеру выбранного чувствительного слоя, а индексы air и ac показывают принадлежность к воздуху или ацетону соответственно. Эта формула позволяет оценить достоверность результата при установленном 95-процентном уровне надежности.

Сигнал сенсора L^A в зависимости от концентрации определяемого газа C^A можно представить выражением

$$L^A = b_0 + b_1 C^A + b_2 (C^A)^2 + \dots , \quad (7)$$

где b_0, b_1, b_2 - коэффициенты.

В первом приближении отношение регистрируемых сигналов прямо пропорционально отношению концентраций определяемого газа в газовой смеси:

$$\frac{L_{обр1}^A}{L_{обр2}^A} = \frac{C_{обр1}^A}{C_{обр2}^A} , \quad (8)$$

где $L_{обр1}^A, L_{обр2}^A, C_{обр1}^A, C_{обр2}^A$ - сигналы сенсора при концентрациях 1 и 2 определяемого газа А.

На рис. 3, а показан ход зависимости сигнала L^A двух слоев мультисенсора для концентраций ацетона: $C_1=0,05$ и $C_2=0,1$ об.%. Экспериментально полученные значения также были аппроксимированы полиномом 3-й степени.

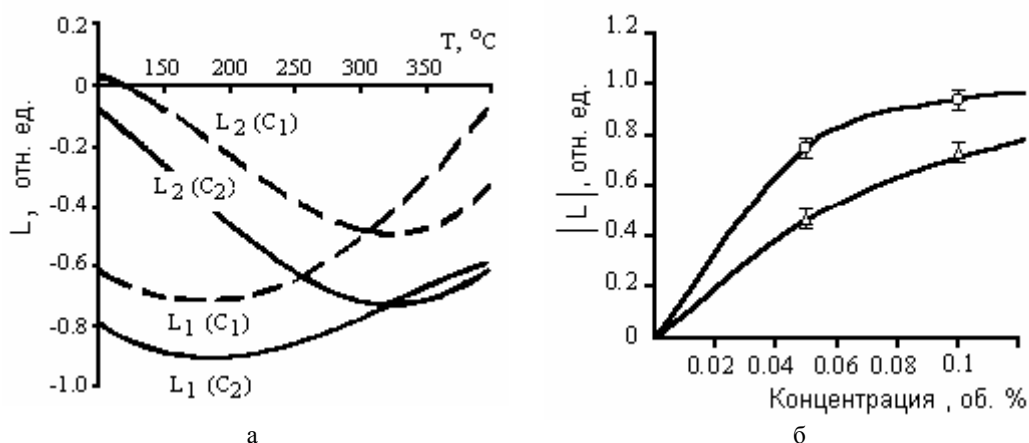


РИС. 3

В табл. 2 представлены коэффициенты аппроксимирующих функций параметров $L(T)$ для кривых на рис.3, а при разных концентрациях аналитического газа.

ТАБЛИЦА 2

Сен-сор	Концентра-ция об.%	a_0	a_1	a_2	a_3	R^2
1	0.05	- 0.1596	- 0.0065	2.06×10^{-5}	-9.75×10^{-9}	>0.99
	0.1	- 0.2291	- 0.0084	3.15×10^{-5}	-3.2×10^{-8}	>0.99
2	0.05	- 0.0254	0.0035	-3.5×10^{-5}	6.1×10^{-8}	>0.99
	0.1	0.1605	- 0.0008	-2.1×10^{-5}	4.6×10^{-8}	>0.99

Изменение электронного состояния полупроводникового чувствительного слоя связано с процессом адсорбции молекул аналитического газа на его разогретой поверхности [5–7] и имеет ограничение. Это должно проявиться в нелинейном характере концентрационной зависимости сигнала L^A . На рис. 3, б по математической модели выполнена аппроксимация зависимости параметров L_1 (маркер – о) и L_2 (маркер – Δ) от концентрации ацетона, точки маркеров – усредненные экспериментальные значения с выбранной погрешностью в 5%. Аппроксимирующие функции имеют вид

$$L_{\max}^A = A(1 - \exp(-cC_{ac})) . \quad (9)$$

Здесь $A=1$, $c = 28$ и 12.5 для слоев сенсора S_1 и S_2 соответственно.

Для формирования набора признаков, позволяющих выделить и распознать требуемый газ, согласно [8] были созданы класс А, соответствующий аналитическому газу ацетон, и подкласс типа сенсора. В качестве концентрационнoзависимых признаков, которые позволяют идентифицировать аналитический газ, можно выбрать величину и координату положения абсолютного максимума зависимости $L(T)$, значения коэффициентов аппроксимирующих функций. Путем компьютерной обработки данных определена температура нагревателя, соответствующая максимальному значению параметра L_i^A .

Такие признаки как знак параметра и тип создаваемых в полупроводнике состояний (донорных или акцепторных), условно названных здесь термином реакция, являются характеристиками взаимодействия молекул газа с полупроводником и могут служить для распознавания данного газа в качестве идентификаторов. В табл. 3 представлены перечисленные признаки.

Для заданной погрешности методики и оборудования с учетом чувствительности слоев на графике рис. 3, б можно установить минимальный порог определяемой концентрации ацетона – 0,01-0,02 об.%.

Все выполненные в работе расчеты проводились по разработанным авторами алгоритмам и компьютерным программам [9].

ТАБЛИЦА 3

Класс	Подкласс	Сенсор	Концентрация об. %	Признаки		
				$T_{\text{макс}}$, °C	$L_{1\text{макс}}$ отн. ед.	Реакция, (+, -)
А	I	1	0.05	170	0.75	-
		1	0.1	170	0.94	-
	II	2	0.05	325	0.47	-
		2	0.1	325	0.74	-

Выводы. Выполненные эксперименты и анализ результатов показывают, что при использовании чувствительных полупроводниковых газовых сенсоров и соответствующей компьютерной системы регистрации и обработки данных возможно определение запаха ацетона в выдыхаемом пациентом воздухе даже при его низких концентрациях. Развитие разработанного подхода для более полного анализа состава воздуха позволит провести раннюю диагностику тех заболеваний человека, которые сопровождаются выделением специфического запаха.

1. *Мазовецкий А.Г., Великов В.К.* Сахарный диабет. – М.: Медицина, 1987. – 288 с.
2. *Лукаш С.И., Алрс Х., Райш Р.* Исследование изменения параметров сенсоров в устройстве газового анализатора в процессе измерений // УСиМ. – 2001. – № 3. – С. 279–285.
3. *Прспект* фирмы UST UMWELTSENSORTECHNIK GmbH, DBR, 1999. – 14 p.
4. *Методы и приборы газового анализа:* Сб. науч. тр.; – Киев: ВНИИАП, 1990. – 153 с.
5. *Волькенштейн Ф.Ф.* Электронные процессы на поверхности полупроводников при хемосорбции. – М.: Наука, 1987. – 432 с.
6. *Таланчук П.М., Мороз О.С.* Теорія напівпровідникових сенсорів. Ч. 1.– К., 1997. – 56 с.
7. *Пека Г.П., Стріха В.І.* Поверхневі та контактні явища у напівпровідниках.– К.: Либідь, 1992.– 240 с.
8. *Алерс Х., Гладун В., Лукаш Л., Лукаш С.* Принципы формирования пространства признаков для задачи распознавания газов в атмосфере при помощи программного обеспечения "CONFOR" // Искусственный интеллект. – Донецк, 1999. – № 2. – С. 386–391.
9. *Лукаш С.І. Перетяцько В.Ю.* Комп'ютерна програма попередньої обробки даних. Свід. ПА № 4461 від 03.07.2001.

Получено 26.02.2004