

NARIZ ELECTRÓNICA PERSONAL PARA LA DETECCIÓN DE CONTAMINANTES EN EL AIRE

Patricia Arroyo, José Ignacio Suárez, Jesús Lozano, José Luis Herrero, Pablo Carmona
Escuela de Ingenierías Industriales, Universidad de Extremadura, Av. Elvas s/n, Badajoz
email: jesuslozano@unex.es

Resumen

En este trabajo se presenta una nariz electrónica novedosa y de bajo coste para la detección de contaminantes en el aire. Este sistema puede conectarse con cualquier dispositivo inteligente mediante una conexión Bluetooth para su control y para la recepción de los datos obtenidos. La nariz electrónica tiene como núcleo un microcontrolador de alto rendimiento y contiene cuatro sensores de gas, un sensor de temperatura y un sensor de humedad. Para poner a prueba su capacidad de discriminación, se han realizado pruebas con 7 compuestos orgánicos volátiles habitualmente presentes en procesos industriales. Para realizar el procesamiento de los datos obtenidos en el dispositivo inteligente, se ha hecho uso de técnicas de inteligencia artificial. Concretamente, las técnicas utilizadas han sido el análisis de componentes principales (PCA) para la reducción de dimensión de los datos, y redes neuronales de función de base radial para las tareas de clasificación.

Palabras clave: Bluetooth, nariz electrónica, sensores de gases, calidad del aire

1 INTRODUCCIÓN

Las emisiones naturales junto a las emisiones antropogénicas (tráfico e industria) son las mayores fuentes de contaminación atmosférica. Entre los principales contaminantes destacan los óxidos de sulfuro, óxidos de nitrógeno, óxidos de carbón, ozono y compuestos orgánicos volátiles (COVs). Los COVs son compuestos químicos orgánicos con una alta presión de vapor en condiciones normales, de manera que se vaporizan en la atmósfera con facilidad. Además, se tratan de peligrosos contaminantes del aire cuya importancia reside en su capacidad de ser precursores del ozono troposférico y en su papel como destructores del ozono estratosférico. Los efectos que tienen los COV sobre la salud pueden ser muy variados ya que dependen del compuesto y del tiempo que se ha estado expuesto [7].

Por lo tanto, la monitorización de contaminantes y COVs resulta extremadamente importante. Los datos adquiridos por las estaciones con instrumentos tradicionales de medición pueden utilizarse para construir mapas y modelos de contaminación que proporcionen información de la situación ambiental y de predicción. Sin embargo, las limitaciones en la resolución espacio-temporal son frecuentes en estos sistemas. Estas limitaciones resultan en problemas de monitorización de la contaminación del aire, tales como la no escalabilidad del sistema o la limitación en la disponibilidad de datos referentes a la exposición personal.

Por ello, como alternativa a estos instrumentos, los sensores de gas de bajo coste, bajo consumo y tamaño reducido combinados con métodos de reconocimiento de patrones podría derivar en sistemas inteligentes y portátiles. De esta manera se podrían llevar a cabo mediciones masivas, distribuidas y ubicuas de los contaminantes atmosféricos con una alta resolución espacial y temporal. Esta nueva generación de sistemas de detección inteligentes (basados en el uso de teléfonos y otros dispositivos inteligentes) permitirá a los ciudadanos controlar la calidad de la atmósfera circundante pudiendo así, tomar medidas para proteger su salud y bienestar.

Este tipo de dispositivo permitirá a las administraciones públicas elaborar planes eficientes para la gestión, el control, y la mejora de la calidad del aire, en los que la participación ciudadana es un factor importante. Esto es debido a que la recopilación de datos de numerosos sistemas personales facilita la creación de mapas de calidad del aire altamente detallados a escala local, regional, nacional e incluso continental. Es por ello, que en el desarrollo de estos sistemas personales, se requiere que sus principales componentes tengan características mejoradas. Entre ellos destacan el uso de sensores de bajo tamaño y consumo para la integración en sistemas de medición miniaturizados y portátiles, y el uso de sistemas de instrumentación y control con alta precisión, repetitividad, bajo consumo, tamaño reducido, y con capacidades de comunicación. Por último, pero no por ello menos importante, podría emplearse un sistema de aprendizaje automático para el procesamiento de señal y datos de sensores y con el fin de ahorrar en el

consumo de recursos de los dispositivos inteligentes utilizados para control y monitoreo.

Por otro lado, la tecnología Bluetooth se ha convertido en una parte integral de nuestras vidas (auriculares inalámbricos, smartbands, etc.), de manera que la cantidad de dispositivos que utilizan esta tecnología crece cada vez más. Siguiendo este enfoque, se han desarrollado narices electrónicas que hacen uso de este tipo de enlace. Por ejemplo, un sistema portátil (pero no compacto) con sensores de gas permite detectar y cuantificar la contaminación relacionada con el tráfico [3]. Los datos medidos se almacenan en una tarjeta SD y luego se transmiten a través de una conexión Bluetooth, a un ordenador personal o un teléfono inteligente. En otro trabajo, también es utilizada la comunicación Bluetooth entre un asistente digital personal (PDA) y una nariz electrónica compacta [9]. En definitiva, el Bluetooth surge como el reemplazo natural de la conexión cableada clásica RS232 como se muestra en un trabajo de la universidad de Delhi [12], donde se utiliza un “dongle” para comunicar el multímetro digital de una nariz electrónica con un teléfono inteligente.

Con respecto a los sensores, la mayoría de los sensores comerciales disponibles de tamaño reducido pertenecen a cuatro tecnologías diferentes: sensores resistivos, sensores electroquímicos, sensores de absorción de radiación infrarroja dispersiva (NDIR) y sensores de fotoionización (PID) [1]. Sin embargo, los sensores de gas resistivos de óxidos metálicos (óxido de estaño) son los más utilizados debido a su bajo precio, tamaño y consumo. Además, estos sensores reaccionan con una gran cantidad de gases y tienen fuertes cambios en su resistencia. Su funcionamiento se basa en el cambio de conductividad como consecuencia de la reacción producida entre el semiconductor y los gases presentes en la atmósfera.

Sin embargo, por lo general es necesario utilizar técnicas de procesamiento de datos en el uso de dispositivos con sensores de gas de óxidos metálicos. Las principales técnicas de reconocimiento de patrones utilizadas en el campo de la detección de gases se han resumido en numerosos artículos en los últimos años [8,10, 2].

La nariz electrónica miniaturizada presentada en este trabajo, que utiliza un enlace Bluetooth para transmitir datos instantáneamente a un teléfono o dispositivo inteligente, incorpora varios sensores microelectromecánicos para la monitorización de la calidad del aire, y un sensor integrado de temperatura y humedad, que generalmente no está incluido en muchas narices electrónicas. Además, casi todos los teléfonos inteligentes modernos incluyen un sistema de GPS, que podría ser utilizado como un sensor adicional de nariz electrónica [13].

Este trabajo se estructura de la siguiente forma: en el capítulo 2, se realiza una descripción del dispositivo desarrollado mostrando sus principales características constructivas y de funcionamiento, y desarrollando el método de clasificación empleado. A continuación, en la sección 3, se muestran las medidas realizadas y los resultados obtenidos y, por último, en el capítulo 4 se detallan las conclusiones obtenidas del trabajo.

2 DESCRIPCIÓN DEL DISPOSITIVO

2.1 DIAGRAMA DE BLOQUES

El dispositivo olfativo desarrollado incluye seis sensores: uno para la medición de humedad, otro para la medición de la temperatura ambiente, y cuatro para la detección de gases. Concretamente, el circuito integrado SHT21 de Sensirion se ha utilizado para medir la humedad y la temperatura, y los sensores MOX MiCS-4514, MiCS-5526 y MiCS-5914 de SGX Sensortech (destinados a la detección de contaminantes de los escapes de automóviles) se han utilizado para la detección de gases. El modelo MiCS-4514 incorpora dos elementos sensores (uno reductor y otro oxidante). El sensor de humedad y temperatura se incorpora con el fin de compensar el efecto en la respuesta de los sensores de gas.

El diagrama de bloques del sistema se muestra en la Figura 1. El núcleo del mismo es un microcontrolador de alto rendimiento PIC18F46K80 de 8 bits de Microchip. Incluye hasta 11 canales de entrada analógicos a digitales (A/D) de 12 bits, aunque solamente son utilizados cuatro con el fin de medir las resistencias de los sensores de gas. Por otro lado, las resistencias calefactoras necesarias para el correcto funcionamiento de los sensores son controladas a través de señales PWM generadas por el microcontrolador. También son incluidos circuitos de acondicionamiento y filtros pasivos de paso bajo para mejorar las señales analógicas. El módulo serial de entrada/salida (MSSP) se utiliza para establecer una comunicación I2C, actuando el microcontrolador como maestro y el sensor SHT21 como esclavo. La información de las lecturas de los sensores y otros datos de interés se envían a través del USART a un módulo Bluetooth encargado de la comunicación con el dispositivo inteligente. La velocidad de funcionamiento del microcontrolador puede alcanzar los 64 MHz, sin embargo, se han utilizado 32 MHz con el fin de reducir el consumo.

El sistema es alimentado con una batería recargable de polímero de litio de 3,7 V. A partir de dicha tensión se obtienen 3,3 V y 5 V a través de dos convertidores DC/DC de alta eficiencia. Por último, un controlador de gestión de la carga de la batería también ha sido incluido en el diseño.

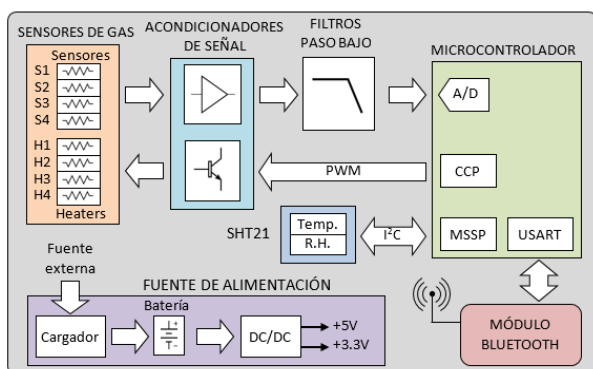


Figura 1: Diagrama de bloques de la nariz electrónica

En la Figura 2 se muestra una imagen del prototipo real diseñado y desarrollado.



Figura 2: Prototipo de la nariz electrónica

2.2 PROTOCOLO DE COMUNICACIÓN

La comunicación es establecida mediante el envío de comandos específicos al módulo sensor para recibir información (lecturas de sensores individuales o globales), o para establecer ciertas acciones (controlar las calefacciones de los sensores, detener el envío de datos o activar algunas pruebas internas). En respuesta, la nariz electrónica envía una trama al dispositivo inteligente. Esta trama está compuesta por campos de datos separados por un carácter ASCII ("tabulación horizontal") y terminados con dos caracteres ASCII ("retorno de carro" y "nueva línea"). La información del ciclo de trabajo de la señal PWM utilizada para controlar los elementos calefactores, las lecturas del sensor de gas (con resolución de 12 bits),

la temperatura y la humedad se encapsulan en los campos de datos.

2.3 PROCESAMIENTO DE DATOS

Los datos recibidos por el dispositivo inteligente se almacenan en una base de datos para su posterior procesamiento. Por lo general, este procesamiento de datos se divide en cuatro etapas (Figura 3) [6]: preprocesamiento de la señal, reducción del número de variables, predicción y toma de decisiones (o validación). Con este objetivo, se ha diseñado un programa en entorno Matlab, que permite realizar cada una de estas etapas y mostrar, a su vez, los resultados obtenidos.

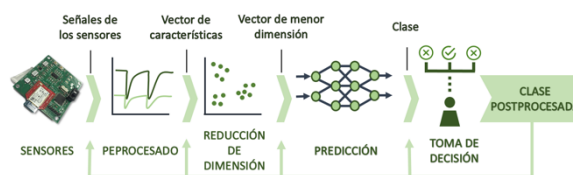


Figura 3: Etapas del procesamiento de la señal obtenida

En la fase de preprocesamiento, se extrae la información principal de la totalidad de datos recogidos en cada una de las mediciones para llevar a cabo un procesamiento posterior. Para ello se ha utilizado el algoritmo de resistencia relativa [5], donde el valor de la resistencia relativa se expresa como la relación entre el valor durante la exposición al gas de referencia (aire seco) y el valor de resistencia durante la exposición al gas objetivo (compuesto orgánico volátil).

A continuación se lleva a cabo la fase de reducción de variables, cuyo objetivo es la disminución del costo computacional del proceso y de la redundancia de datos. En este caso, se ha utilizado la técnica tradicional de análisis de componentes principales (PCA) [4].

La siguiente etapa tiene como objetivo realizar la predicción haciendo uso del vector de baja dimensión resultante de la etapa anterior. Las tareas que se deben desarrollar son agrupamiento (clustering), regresión o clasificación. En este caso se han realizado tareas de clasificación, que buscan la identificación de una muestra desconocida como una clase dentro de un conjunto de contaminantes aprendidos anteriormente. Para ello, se han utilizado clasificadores con redes neuronales artificiales (ANN), específicamente basados en redes probabilísticas o redes neuronales de función de base radial (RBF). Estas son un tipo de red neuronal predictiva, cuya estructura original [11] es una red neuronal directa con la implementación de la estimación de densidad de probabilidad de Parzen y la regla de clasificación de Bayes. En este caso, la estructura de la red está formada por cuatro capas (entrada, patrón, suma y salida). La capa de entrada se

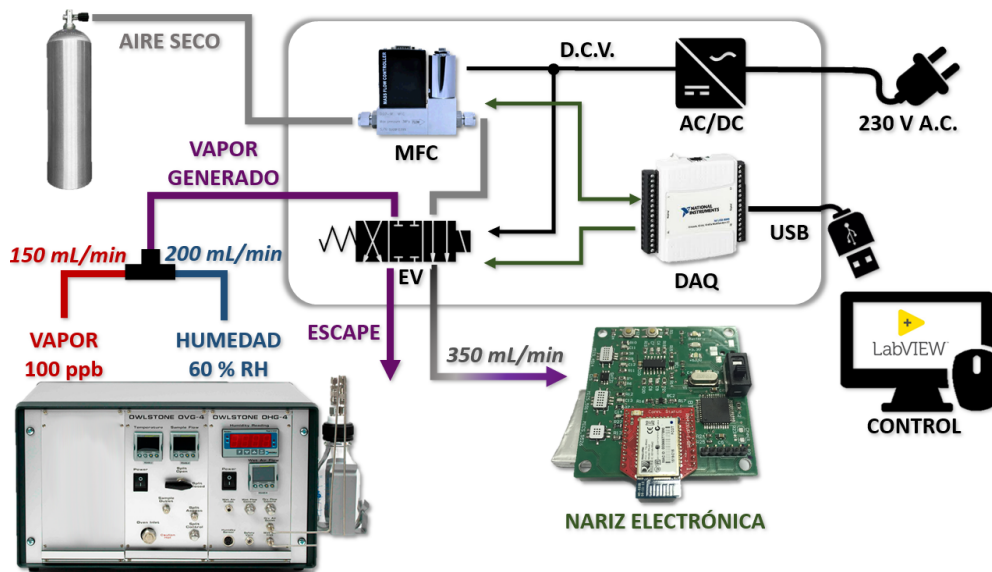


Figura 4: Diagrama de bloques del sistema de medición utilizado

corresponde con los componentes del PCA utilizados. En segundo lugar, la capa de patrón es la responsable de evaluar la distancia entre cada elemento del conjunto de entrenamiento y el vector de la capa de entrada. Para este fin, se emplea una función radial. A continuación, la capa de suma contiene una neurona para cada clase. Esta capa añade las salidas de las neuronas patrón pertenecientes a la misma clase. Finalmente, la capa de salida se establece en 1 cuando corresponde al valor más alto de la capa de suma y se establece en 0 para todas las demás salidas.

La última etapa es la validación, la cual permite evaluar la estimación de los errores del sistema de predicción diseñado y entrenado. Específicamente, debido al bajo número de mediciones realizadas debido al alto costo de implementación, la validación cruzada de orden 1 o "Leave-One-Out" (LOO) es un método apropiado.

3 RESULTADOS

3.1 CONFIGURACIÓN DE LAS MEDIDAS

Con el fin de estimar el rendimiento del sistema desarrollado se han realizado mediciones controladas en una instalación de laboratorio. Para ello se han realizado análisis con 7 compuestos orgánicos volátiles distintos, todos ellos implicados en mayor o menor medida en procesos industriales: acetona, ácido acético, etilacetato, etilbenceno, xileno, tolueno, y dimetilacetamida. Para ello, se ha hecho uso de un generador de vapor y humedad comercial (Owlstone) a través de tubos de permeación. Cada tubo fabricado y posteriormente calibrado contiene 1 ml del COV correspondiente. La temperatura del horno de permeación ha sido determinada para conseguir concentraciones de 100 ppb en todos los casos. Al

flujo de salida, también es añadido un flujo de humedad controlado, generado a partir de la unidad generadora de humedad.

Para realizar mediciones con el generador de vapor de gas, se ha diseñado un sistema conmutador que permite alternar la salida entre el gas de referencia y el vapor generado. Dicho sistema cuenta con un controlador de flujo másico para regular el caudal del gas de referencia (aire seco), y una electroválvula que permite alternar entre ambas entradas posibles. El flujo de vapor continuo generado se expulsa al exterior cuando el gas de referencia pasa a través la nariz electrónica. Con respecto a la parte eléctrica y de control, está compuesta por una fuente de alimentación y una tarjeta de adquisición que permite controlar el funcionamiento del sistema a través de un software desarrollado en LabVIEW®.

Se han llevado a cabo veinte ciclos de mediciones con cada uno de los compuestos utilizados. Cada uno de estos ciclos tiene una duración de 8 minutos, de los cuales 420 segundos corresponden a la circulación del gas de referencia, y los 60 segundos restantes a la circulación del vapor generado. Los valores de caudal de la humedad (200 ml / min) y del vapor generado (150 ml / min) se han mantenido fijos, consiguiendo así que flujo que llega a los sensores sea siempre constante (350 ml / min).

3.2 RESULTADOS

Una vez realizadas todas las medidas, se ha llevado a cabo la extracción de características haciendo uso de la técnica de resistencia relativa como se ha indicado anteriormente. Los datos obtenidos muestran que la discriminación de los compuestos podría ser exitosa

ya que los valores obtenidos de cada sensor para los diferentes compuestos medidos son diferentes. Además, se observa que en los primeros dos ciclos de medición para cada compuesto, la señal de los sensores aún no está completamente estabilizada. Es por ello que estos dos ciclos no se han incluido en el procesamiento de datos posterior.

A continuación, se aplica un análisis de PCA para ver la distribución de las mediciones en una parcela. En la Figura 5 se representan las dos primeras componentes principales, donde se puede detectar la existencia de una deriva a corto plazo en las mediciones. Sin embargo, aunque las zonas correspondientes al tolueno y la dimetilacetamida presentan una superposición parcial, en general los distintos clusters están claramente separados.

Para estudiar la capacidad real de discriminación de los 7 compuestos orgánicos volátiles, se ha entrenado una red neuronal probabilística con funciones de base radial. Por último, para estimar el rendimiento de dicha red neuronal se ha utilizado la técnica de validación cruzada de orden 1. La matriz de confusión obtenida se presenta en la Figura 6, donde cada columna representa las instancias de una clase predicha, mientras que cada fila representa las instancias de una clase real (valores reales). La tasa de éxito (porcentaje de casos correctamente clasificados en la validación frente al número total de casos) obtenida es del 97,61%. En concreto, puede observarse que un total de 3 clasificaciones han sido erróneas.

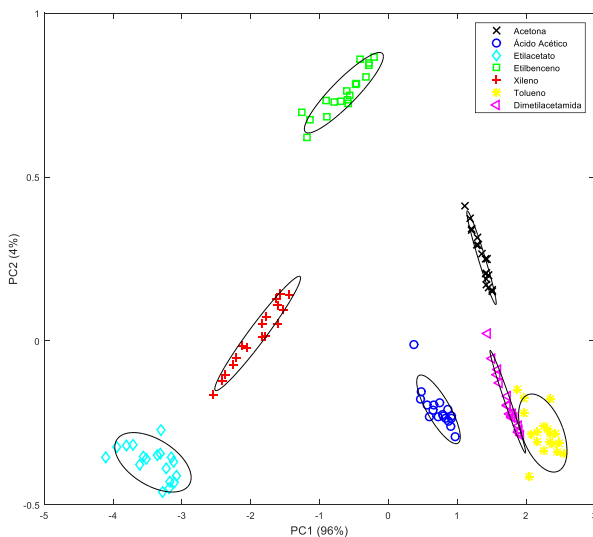


Figura 5: PCA de las medidas realizadas

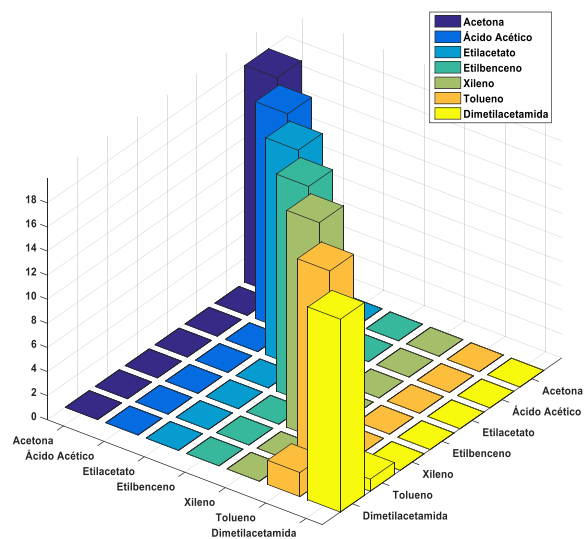


Figura 6: Matriz de confusión obtenida utilizando la red neuronal RBF

4 CONCLUSIONES

Se ha presentado un nuevo prototipo miniaturizado de nariz electrónica que sirve como detector personal de la calidad del aire. Éste incluye sensores de gas miniaturizados para el reconocimiento de compuestos orgánicos volátiles, y un sensor de temperatura y humedad para la compensación de sus efectos sobre la respuesta de los sensores. El uso de un enlace Bluetooth permite la comunicación instantánea de la nariz electrónica con cualquier dispositivo inteligente donde los datos se almacenan para su posterior procesamiento. La capacidad del dispositivo para discriminar algunos compuestos orgánicos volátiles se ha estudiado llevando a cabo algunos experimentos de laboratorio. La técnica principal de análisis de componentes se ha utilizado para reducir la dimensionalidad de los conjuntos de datos y se ha entrenado una red neuronal probabilística para estudiar la capacidad real de discriminación. Se han obtenido tasas de discriminación cercanas al 100%. Los desarrollos futuros incluyen una miniaturización importante del dispositivo e incluso una integración del módulo de detección en un teléfono inteligente.

Agradecimientos

Los autores desean agradecer a la Junta de Extremadura por financiar el proyecto IB16048 y a la Unión Europea a través del proyecto NanoSen-AQM (SOE2 / P1 / E0569)

English summary

WIRELESS PERSONAL ELECTRONIC NOSE FOR THE DETECTION OF AIR POLLUTANTS

Abstract

In this paper, a novel and low cost electronic nose for the detection of pollutants in the air is presented. This system can be connected to any smart device using a Bluetooth connection for control and for receiving the data. The electronic nose based on a high performance microcontroller, contains four gas sensors, a temperature sensor and a humidity sensor. In order to check its discrimination capacity, tests have been carried out with 7 volatile organic compounds usually present in industrial processes. The processing of the data obtained in the smart device used has been carried out through artificial intelligence techniques. Specifically, principal components analysis (PCA) have been used for the reduction of data dimension, and radial base function neural networks for classification tasks.

Keywords: Bluetooth, electronic nose, gas sensors, air quality monitoring

Referencias

- [1] Aleixandre, M., Gerboles, M., (2012) Review of small commercial sensors for indicative monitoring of ambient gas. *Chemical Engineering Transactions* 30, pp. 169–174.
- [2] Brereton, R. G., (2015) Pattern recognition in chemometrics. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, 149, pp. 90–96.
- [3] Elen, B., Theunis, J., Ingarra, S., Molino, A., Van den Bossche, J., Reggente, M., Loreto, V., (2012) The EveryAware SensorBox: a tool for community-based air quality monitoring. *Sensing a Changing World*, pp. 1–7.
- [4] Esbensen, K., Geladi, P., (2009) *Principal Component Analysis: Concept, Geometrical Interpretation, Mathematical Background, Algorithms, History, Practice*, Comprehensive Chemometrics.
- [5] Gardner, J.W., (1991) Detection of Vapours and Odours from a Multisensor Array Using Pattern Recognition Part 1. Principal Component and Cluster Analysis. *Sensors and Actuators B: Chemical* 4, pp. 109–115.
- [6] Gutierrez-Osuna, R., (2002) Pattern analysis for Machine olfaction: A review. *IEEE Sensors Journal* 2, pp. 189–202.
- [7] Hsu, C.-Y., Chiang, H.-C., Shie, R.-H., Ku, C.-H., Lin, T.-Y., Chen, M.-J., Chen, N.-T., Chen, Y.-C., (2018) Ambient VOCs in residential areas near a large-scale petrochemical complex: Spatiotemporal variation, source apportionment and health risk. *Environmental Pollution* 240, pp. 95-104
- [8] Marco, S.; Gutiérrez-Gálvez, A, (2012) Signal and Data Processing for Machine Olfaction and Chemical Sensing: A Review. *IEEE Sensors Journal* 12, pp. 3189–3214.
- [9] Moon, S.E., Choi, N.J., Lee, H.K., Lee, J., Yang, W.S., (2013) Semiconductor-type MEMS gas sensor for real-time environmental monitoring applications. *ETRI Journal* 35, pp. 617–624.
- [10] Scott, S. M.; James, D.; Ali, Z, (2007) Data analysis for electronic nose systems. *Microchimica Acta* 2007, 156, pp. 183–207.
- [11] Specht, D.F., 1990. Probabilistic neural networks. *Neural Networks* 3, pp. 109–118.
- [12] Tiwari, P., Pokhriyal, A., Rawat, P., Gupta, C.K., Narang, S., Chowdhuri, A., (2014) Using Mobile Phones with android OS for Measuring Hazardous Gas Concentrations Detected using Electronic Nose (E-Nose). *Advanced Research in Electrical and Electronic Engineering* 1, pp. 25–27.
- [13] Zhang, R., Ravi, D., Yang, G.-Z., Lo, B., (2017) A personalized air quality sensing system - a preliminary study on assessing the air quality of London underground stations. 2017 IEEE 14th International Conference on Wearable and Implantable Body Sensor Networks (BSN) pp. 111–114.



© 2018 by the authors.
Submitted for possible open access publication under the terms and conditions of the Creative Commons Attribution CC-BY-NC 3.0 license (<https://creativecommons.org/licenses/by-nc/3.0>).