

Etude d'un modèle linéaire quadratique appliqué à la mesure optique infrarouge du gaz carbonique sanguin émis par la peau

PIERRE GRANGEAT¹, SADOK GHARBI¹, MARC ACCENSI¹, HENRI GRATEAU¹

¹ Univ. Grenoble Alpes, CEA, LETI, Minatec Campus, F-38054 Grenoble Cedex, France.

¹ pierre.grangeat@cea.fr, sadok.gharbi@cea.fr, marc.accensi@cea.fr, henri.grateau@cea.fr

Résumé – Nous étudions un nouveau dispositif portable autonome de mesure du gaz carbonique sanguin émis par la peau par un chauffage local. La concentration du gaz carbonique est estimée à partir d'une mesure d'atténuation optique NDIR (Non Dispersive Infra-Red) différentielle à deux longueurs d'onde. L'utilisation d'un guide d'onde et la largeur spectrale des filtres créent des non-linéarités sur le modèle direct reliant la concentration du gaz carbonique à l'atténuation du rayonnement. La loi linéaire de Beer Lambert n'est plus valide. Nous proposons d'introduire un modèle linéaire quadratique dépendant d'une puissance non-entière de la concentration. Nous étendons ce modèle pour prendre en compte l'influence de l'humidité engendrée par la sueur. Nous montrons comment ce modèle peut être inversé et calibré. Nous présentons des premiers résultats expérimentaux sur des mélanges synthétiques acquis sur banc gaz et sur une personne volontaire lors d'un test d'exercice cardiopulmonaire.

Abstract -.We are studying a new autonomous wearable wristband to measure the carbon dioxide gas emitted through the skin thanks to a local heating. The concentration of carbon dioxide gas is estimated from optical NDIR (Non Dispersive Infra-Red) differential attenuation measurement at two wavelengths. The use of a waveguide and the spectrum width of the filters induce non-linearities on the direct problem linking the concentration of the carbon dioxide gas to the infrared light attenuation. The linear law of Beer Lambert is no more valid. We propose to introduce a linear quadratic model applied on a non-integer power of the gas concentration. We extend this model to take into account the humidity induced by the sweat. We explain how to invert and to calibrate this model. We present first experimental results on synthetic mixtures acquired on a gas bench and on a healthy volunteer during a cardiopulmonary exercise test (CPET).

1 Introduction

Les maladies respiratoires affectent les échanges gazeux entre le sang et l'air expiré, et donc la concentration des biomarqueurs dans le sang. La mesure des gaz transpirés permet de suivre en continue la concentration de certains composés volatils du sang, notamment le dioxyde de carbone. Les applications cliniques sont les insuffisances respiratoires chroniques, le suivi non-invasif des systèmes de ventilation mécanique, le dépistage de l'hypoventilation alvéolaire ou de l'hypercapnie, le suivi en réanimation cardiopulmonaire [1]. Le laboratoire LS2P (Systèmes Portés par la Personne) développe le bracelet CAPNO portable autonome, reposant sur une mesure optique infrarouge de la pression du gaz carbonique transcutané ($P_{tc}CO_2$). Dans cette communication, nous présentons dans la partie 2, le principe du dispositif et de la mesure optique différentielle infrarouge, puis dans la partie 3, un modèle linéaire quadratique pour décrire le problème direct, et dans la partie 4, la résolution du problème inverse et la calibration du modèle, et enfin, dans la partie 5, nos premiers résultats expérimentaux.

2 Principe de la mesure

2.1 Présentation du dispositif

Le dispositif CAPNO est constitué de trois étages : une cellule de collecte du gaz carbonique au contact de la peau qui assure d'une part l'extraction du gaz

carbonique par chauffage à environ 42°C et diffusion à travers la peau, d'autre part le mélange du gaz carbonique avec l'air ambiant, et enfin le transport du gaz carbonique par convection, une cellule de mesure optique différentielle NDIR (Non Dispersive Infra-Red) dans le proche infrarouge, une cellule d'évacuation des gaz. Une quatrième cellule séparée mesure les paramètres de l'air ambiant notamment la concentration du CO_2 ambiant par un principe de mesure optique NDIR identique à celui de la cellule de mesure.



Figure 1 : Le dispositif portable autonome CAPNO pour la mesure sur le bras du gaz carbonique sanguin émis par la peau. Le dispositif comprend également dans chaque cellule des capteurs de température, de pression et d'humidité utilisés pour le calcul de la pression transcutanée $P_{tc}CO_2$.

Le modèle numérique du dispositif associe un modèle optique d'interaction de la lumière avec le mélange gazeux et un modèle fluide décrivant le transport des

gaz entre les différents compartiments constitués par le sang, la cellule de collecte, la cellule de mesure, et la cellule d'évacuation. Dans cette communication, nous étudierons principalement le modèle optique. Le modèle fluide est décrit dans une autre communication [2].

2.2 Principe de la mesure optique différentielle NDIR

Le principe de la cellule de mesure est décrit sur la Figure 2. Un corps noir sert de source émettrice de lumière infrarouge et un tube métallique de guide d'onde entre la source et les détecteurs. Le rayonnement se propage en réalisant des réflexions multiples sur la paroi du guide d'onde. Les détecteurs sont constitués de deux thermopiles sensibles à l'énergie lumineuse incidente associés à deux filtres optiques autour des longueurs d'onde nominales recherchées à savoir 4.26 μm pour la mesure correspondant à la raie d'absorption du gaz carbonique, et 3.91 μm pour l'onde de référence pour laquelle le gaz carbonique est faiblement atténué. La mesure différentielle NDIR réalise la mesure de la concentration du gaz carbonique en calculant le logarithme du rapport des intensités à ces 2 longueurs d'onde correspondant à la différence des atténuations. Ceci permet de réduire la contribution des autres gaz comme l'air ambiant et la vapeur d'eau.

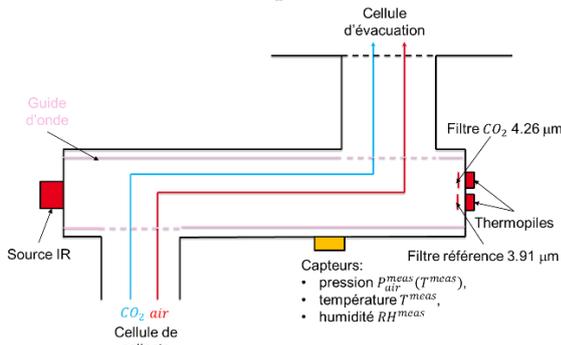


Figure 2: Principe de la mesure optique différentielle NDIR dans la cellule de mesure

3 Modélisation de la mesure optique différentielle

3.1 Le modèle de Beer Lambert

Dans le modèle de mélange associé à la loi de Beer Lambert, l'atténuation dépend linéairement des concentrations molaires des constituants :

$$-\ln \left[\frac{U(\lambda_1)/U(\lambda_2)}{U_0(\lambda_1)/U_0(\lambda_2)} \right] = [k_{CO_2}(\lambda_1) - k_{CO_2}(\lambda_2)] \cdot C_{CO_2} + [k_{H_2O}(\lambda_1) - k_{H_2O}(\lambda_2)] \cdot C_{H_2O} + [A_{air}(\lambda_1) - A_{air}(\lambda_2)] \quad (1)$$

Où C_{CO_2} et C_{H_2O} sont les concentrations molaires, $k_{CO_2}(\lambda_1)$, $k_{CO_2}(\lambda_2)$, $k_{H_2O}(\lambda_1)$, $k_{H_2O}(\lambda_2)$ les coefficients d'atténuation du gaz carbonique et de la vapeur d'eau, $A_{air}(\lambda_1)$, $A_{air}(\lambda_2)$ les atténuations de l'air aux longueurs d'onde λ_1 , λ_2 .

Les longueurs d'onde λ_1 et λ_2 ont été choisies de façon à vérifier les hypothèses suivantes :

$$k_{CO_2}(\lambda_1) \gg k_{CO_2}(\lambda_2) \text{ et } k_{H_2O}(\lambda_1) \approx k_{H_2O}(\lambda_2) \text{ et } A_{air}(\lambda_1) \approx A_{air}(\lambda_2) \quad (2)$$

Dans ces conditions, ce modèle simplifié montre comment la mesure d'atténuation s'exprime linéairement en fonction de la concentration molaire du gaz carbonique C_{CO_2} , indépendamment de la concentration de la vapeur d'eau C_{H_2O} .

$$-\ln \left[\frac{U(\lambda_1)/U(\lambda_2)}{U_0(\lambda_1)/U_0(\lambda_2)} \right] \approx k_{CO_2}(\lambda_1) \cdot C_{CO_2} \quad (3)$$

3.2 Le modèle linéaire quadratique appliqué à une puissance non-entière de la concentration

Cependant, comme la concentration de la vapeur d'eau est très supérieure à celle du gaz carbonique, il s'avère expérimentalement que l'on constate une influence sur la mesure. Par ailleurs, du fait des réflexions multiples sur le guide d'onde et de la diffusion engendrée par la vapeur d'eau, les longueurs parcourues par la lumière entre la source et le détecteur vont être multiples, ce qui va créer des non-linéarités. Aussi, le filtre placé devant les thermopiles n'est pas parfaitement monochromatique. Du fait de la variabilité des coefficients d'atténuation en fonction de la longueur d'onde, ceci va aussi générer des non-linéarités.

Pour tenir compte de tous ces phénomènes non-linéaires, nous proposons d'utiliser un modèle linéaire quadratique dépendant d'une puissance non-entière de la concentration des gaz. Pour un seul constituant, le modèle linéaire correspondrait à un modèle graphique linéaire en échelle log-log. Nous avons étudié ce type de modèles pour décrire les mesures par des capteurs à oxyde métallique sur des mélanges de gaz [3], comme l'acétone et l'éthanol pour l'analyse de l'air expiré [4]. Nous avons aussi montré que ces modèles non-linéaires permettaient de développer des techniques de séparation de source supervisées [5] et non-supervisées [6].

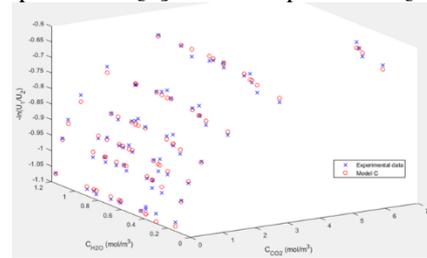


Figure 3: Adéquation du modèle linéaire quadratique (modèle C, ronds rouges) aux mesures expérimentales (croix bleues) sur des mélanges de gaz carbonique et de vapeur d'eau dilués dans l'air

Nous proposons ici d'étendre l'utilisation de ces modèles aux mesures optiques NDIR différentielles. Le modèle des mesures prend alors la forme suivante :

$$-\ln \left[\frac{U(\lambda_1)/U(\lambda_2)}{U_0(\lambda_1)/U_0(\lambda_2)} \right] \approx m_1 \cdot C_{CO_2}^{u_1} + n_1 \cdot C_{CO_2}^{2u_1} + m_2 \cdot C_{H_2O}^{u_2} + n_2 \cdot C_{H_2O}^{2u_2} + q \cdot C_{CO_2}^{u_1} \cdot C_{H_2O}^{u_2} \quad (4)$$

Où C_{CO_2} et C_{H_2O} sont les concentrations molaires du gaz carbonique et de la vapeur d'eau, m_1 , n_1 , m_2 , n_2 , q u_1 , u_2 les coefficients du modèle, u_1 , u_2 définissant les puissances non-entières des concentrations.

Nous montrons sur la **Erreur ! Source du renvoi introuvable**. l'adéquation du modèle complet (modèle C), en rouge, aux mesures expérimentales, en bleu, pour l'ensemble des échantillons de calibration décrit au paragraphe 5.1.

4 Inversion et calibration du modèle linéaire quadratique

4.1 Inversion du modèle

Une propriété intéressante du modèle linéaire quadratique est qu'il est possible de l'inverser analytiquement. Nous supposons que la concentration en vapeur d'eau a été calculée à partir du capteur d'humidité présent dans la cellule de mesure.

Nous définissons le changement de variable :

$$m_2 \cdot C_{H_2O}^{u_2} + n_2 \cdot C_{H_2O}^{2u_2} + \ln \left[\frac{U(\lambda_1)/U(\lambda_2)}{U_0(\lambda_1)/U_0(\lambda_2)} \right] = \gamma \quad (5)$$

$$q \cdot C_{H_2O}^{u_2} + m_1 = \beta \quad (6)$$

$$C_{CO_2}^{u_1} = x \quad (7)$$

La variable x est solution de l'équation du second degré:

$$n_1 \cdot x^2 + \beta \cdot x + \gamma = 0 \quad (8)$$

Nous obtenons l'expression suivante des 2 solutions :

$$x = \frac{-\beta \pm \sqrt{\beta^2 - 4 \cdot n_1 \cdot \gamma}}{2 \cdot n_1} \quad (9)$$

$$C_{CO_2} = \sqrt[u_1]{x} \quad (10)$$

Nous choisissons la solution qui se trouve dans la plage de variation de la concentration du gaz carbonique.

A l'aide de la loi des gaz parfaits, nous en déduisons la pression partielle du gaz carbonique $P_{CO_2}^{meas}(T^{meas})$ dans la cellule de mesure à la température T^{meas} :

$$P_{CO_2}^{meas}(T^{meas}) = C_{CO_2} \cdot R \cdot T^{meas} \quad (11)$$

Où C_{CO_2} est exprimée en (mol/m³), R est la constante des gaz parfaits (0.0623637 m³.mmHg.K⁻¹.mol⁻¹), T^{meas} en K et $P_{CO_2}^{meas}$ en mmHg.

Nous calculons ensuite la pression partielle $P_{CO_2}^{col}(T^{col})$ dans la cellule de collecte, à la température T^{col} :

$$P_{CO_2}^{col}(T^{col}) = \frac{P_{total}^{col}(T^{col})}{P_{total}^{meas}(T^{meas})} P_{CO_2}^{meas}(T^{meas}) \quad (12)$$

Les pressions $P_{total}^{meas}(T^{meas})$ et $P_{total}^{col}(T^{col})$ sont les valeurs de la pression totale de l'air véhiculant le mélange dans la cellule de collecte et dans la cellule de mesure.

En première approximation, nous considérons que la pression transcutanée $P_{CO_2}^{tc}(T^{tc})$ est proportionnelle à la pression partielle $P_{CO_2}^{col}(T^{col})$ dans la cellule de collecte avec un facteur de correction $g_{CO_2}^{TC/col}$ qui doit être estimée par apprentissage :

$$P_{CO_2}^{TC}(T^{tc}) = g_{CO_2}^{TC/col} \cdot P_{CO_2}^{col}(T^{col}) \quad (13)$$

Où T^{tc} et T^{col} sont respectivement les températures au niveau de la peau et de la cellule de collecte.

La valeur de la pression artérielle dans le sang $P_{CO_2}^{sang}$ à 37°C est calculée par la formule empirique utilisée par Severinghaus [7] où T^{tc} est exprimée en °C et $P_{CO_2}^{sang}$ et $P_{CO_2}^{tc}$ en mmHg:

$$P_{CO_2}^{sang}(37^\circ C) = \frac{P_{CO_2}^{tc}(T^{tc}) - 4}{\exp(0.046[T^{tc} - 37])} \quad (14)$$

4.2 Calibration du modèle

Nous nous plaçons dans le cadre d'une calibration supervisée où nous disposons de N_{cal} échantillons de calibration de composition connue.

Nous estimons les paramètres du modèle en minimisant la fonctionnelle J suivante:

$$J = \sum_{i=1}^{N_{cal}} \left[-\ln \left[\frac{[U(\lambda_1)](i)/[U(\lambda_2)](i)}{U_0(\lambda_1)/U_0(\lambda_2)} \right] - A(i) \right]^2 \quad (15)$$

Où :

$$A(i) = m_1 \cdot [C_{CO_2}(i)]^{u_1} + n_1 \cdot [C_{CO_2}(i)]^{2u_1} + m_2 \cdot [C_{H_2O}(i)]^{u_2} + n_2 \cdot [C_{H_2O}(i)]^{2u_2} + q \cdot [C_{CO_2}(i)]^{u_1} \cdot [C_{H_2O}(i)]^{u_2} \quad (16)$$

Comme il s'agit d'un modèle non-linéaire du fait des termes en exposant, nous utilisons un algorithme de Levenberg Marquardt pour trouver les paramètres m_1 , n_1 , m_2 , n_2 , q , u_1 , u_2 qui minimisent cette fonctionnelle.

5 Premiers résultats expérimentaux

5.1 Evaluation du modèle sur banc gaz

Pour évaluer le modèle, 12 expériences de calibration correspondant à différentes valeurs pour la concentration en vapeur d'eau C_{H_2O} , la température T^{col} dans la cellule de collecte et la température T^{meas} dans la cellule de mesure comme décrit sur la Table 1 ont été réalisées. Pour chaque expérience, 6 concentrations C_{CO_2} de gaz carbonique ont été mesurées: 0, 0.2, 0.4, 0.8, 1.6, 3.2 (mol/m³).

Table 1: Paramètres des 12 expériences de calibration

Expérience	C_{H_2O} (mol/m ³)	T^{col} (°C)	T^{meas} (°C)
1	0.126	30.1	30.3
2	0.301	39.7	32.0
3	0.365	37.0	32.4
4	0.364	39.7	31.8
5	0.691	40.1	32.2
6	0.428	30.2	30.2
7	0.623	37.1	32.0
8	0.898	40.1	31.5
9	0.863	37.2	31.6
10	0.609	30.3	30.3
11	0.753	30.1	30.2
12	1.160	37.1	32.3

Les paramètres du modèle ont été estimés en suivant la méthode de calibration décrite précédemment. Pour évaluer les performances du modèle, nous avons étudié successivement un modèle linéaire quadratique dépendant uniquement du gaz carbonique (modèle A), un modèle linéaire quadratique sans terme bilinéaire

dépendant du gaz carbonique et de la vapeur d'eau (modèle B), et un modèle linéaire quadratique avec tous les termes (modèle C). Nous présentons sur la Table 2 les valeurs estimées pour les paramètres du modèle.

Table 2 – Paramètres estimés pour les modèles linéaire (modèle A), linéaire quadratique sans terme bilinéaire (modèle B), linéaire quadratique complet (modèle C)

Paramètres	Modèle A	Modèle B	Modèle C
$\ln(U_0(\lambda_1)/U_0(\lambda_2))$	1.08	0.99	1.07
m_1	0.29	0.29	0.29
u_1	0.61	0.59	0.57
n_1	0.051	0.048	0.044
m_2		0.0040	0.0015
u_2		0.12	2.45
n_2		0.065	0.00001
q			0.00028

Pour comparer les performances des modèles, nous avons calculé la racine carrée de l'écart quadratique moyen (RMSE) et le coefficient de détermination ρ^2 . Ces résultats sont présentés sur la Table 3.

Table 3: Comparaison des performances pour les 3 modèles

Modèle	RMSE	ρ^2
A	0.0180	0.982
B	0.0140	0.989
C	0.0133	0.990

Ces résultats montrent que le modèle linéaire quadratique correspond bien aux données comme le coefficient de détermination est proche de 1. Par ailleurs, la valeur du coefficient u_1 proche de 0.6 montre que le modèle linéaire n'est pas adapté. Ils montrent aussi que la correction de l'influence de la vapeur d'eau par la mesure différentielle est efficace. Mais pour une évaluation quantitative, le modèle C intégrant la vapeur d'eau et le terme bilinéaire est le plus précis.

5.2 Evaluation comparative sur un test d'exercice cardiopulmonaire

Nous présentons sur la Figure 4 l'enregistrement de la pression partielle du gaz carbonique sur une personne volontaire en bonne santé lors d'un test d'exercice cardiopulmonaire réalisé suivant le protocole décrit par Stege et al. [7]. La personne est placée sur un vélo et module son effort en fonction de la vitesse de pédalage. Après une période au repos d'une durée de 9 mn, elle réalise 4 paliers de 5 minutes en augmentant progressivement sa vitesse de pédalage. Elle effectue ensuite deux paliers de récupération de 5 mn, un avec une vitesse lente et un au repos. Nous présentons sur la Figure 4 l'enregistrement du rythme cardiaque, en orange, et le signal de pression dans la cellule de collecte $P_{CO_2}^{col}(T^{col})$ calculé en appliquant en première approximation le modèle linéaire quadratique A aux mesures optiques différentielles, en bleu. Le niveau de bruit étant important devant la dynamique du signal, nous introduisons un lissage des données, soit à l'aide d'une fenêtre glissante de largeur 100 s, en vert, soit par lissage par un polynôme d'ordre 3, en rouge. Sur ces

signaux filtrés ou lissés, nous visualisons clairement l'évolution de la pression du gaz carbonique et nous retrouvons l'allure des courbes observées par Stege et al. [7] comprenant une phase montante correspondant au fonctionnement aérobique et une phase descendante correspondant au fonctionnement anaérobique des muscles impliqués.

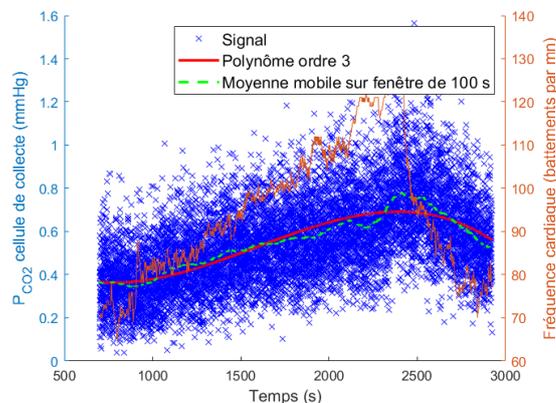


Figure 4: Pression partielle du gaz carbonique dans la cellule de collecte et fréquence cardiaque lors d'un test d'exercice cardiopulmonaire. Signal original (bleu), signal filtré par un filtre à moyenne mobile de 100s (vert) et signal lissé par un polynôme d'ordre 3 (rouge)

6 Perspectives et conclusion

Ces premiers résultats qualitatifs doivent être poursuivis par des évaluations plus quantitatives et des comparaisons avec des dispositifs de mesures de référence. D'autres tests physiologiques cliniques sont aussi envisagés. Néanmoins, nous avons pu montrer que le modèle linéaire quadratique appliqué à des puissances non-entières de la concentration des gaz permettait de bien décrire les phénomènes non-linéaires observés sur les courbes de calibration et de prendre en compte l'effet des gaz interférant comme la vapeur d'eau.

7 Remerciements

Nous remercions la société L3Médical et l'IRT Nanoelec pour le cofinancement de cette étude.

8 Références

- [1] S. E. Huttman, W. Windisch, and J. H. Storre, "Techniques for the Measurement and Monitoring of Carbon Dioxide in the Blood", *Ann. Am. Thorac. Soc.*, vol. 11, no. 4, pp. 645–652, May 2014.
- [2] P. Grangeat, S. Gharbi, M. Accensi, H. Grateau, "First Evaluation of a Transcutaneous Carbon Dioxide Monitoring Wristband Device during a Cardiopulmonary Exercise Test", in *41st Intern. Conf. IEEE Engineering in Medicine and Biology Society (EMBC)*, 2019.
- [3] S. Madrolle, P. Grangeat, and C. Jutten, "A Linear-Quadratic Model for the Quantification of a Mixture of Two Diluted Gases with a Single Metal Oxide Sensor," *Sensors*, vol. 18, no. 6, p. 1785, Jun. 2018.
- [4] S. Madrolle, "Méthodes de traitement du signal pour l'analyse quantitative de gaz respiratoires à partir d'un unique capteur MOX.", Thèse de doctorat, Communauté Université Grenoble Alpes, 2018.
- [5] S. Madrolle, L. T. Duarte, P. Grangeat, and C. Jutten, "Supervised Bayesian source separation of nonlinear mixtures for quantitative analysis of gas mixtures," in *40th Intern. Conf. IEEE Engineering in Medicine and Biology Society (EMBC)*, 2018, pp. 1230–1233.
- [6] S. Madrolle, L. T. Duarte, P. Grangeat, and C. Jutten, "A Bayesian Blind Source Separation Method for a Linear-quadratic Model," in *26th Eur. Signal Processing Conf. (EUSIPCO)*, 2018, pp. 1242–1246.
- [7] J. W. Severinghaus, "The current status of transcutaneous blood gas analysis and monitoring," *Blood Gas News*, vol. 7, no. 2, pp. 4–9, 1998.
- [8] G. Stege et al., "Accuracy of Transcutaneous Carbon Dioxide Tension Measurements during Cardiopulmonary Exercise Testing," *Respiration*, vol. 78, no. 2, pp. 147–153, 2009.