

基于电诱导驱动的中红外光谱增强气体辨识

朱建雄¹, 季善玲¹, 王林²

(1.东南大学机械工程学院, 江苏 南京 210089; 2.中国科学院上海技术物理研究所, 上海 200433)

摘要: 随着新冠肺炎疫情的爆发, 异丙醇分子作为抗病毒诊断的生物标志物发挥着重要作用。然而, 传统的气体分子检测表现出显著的缺点, 如离子迁移率方法的严格工作条件和中红外光谱的弱光物质相互作用, 导致靶分子的响应有限。我们提出了一种人工智能增强离子迁移率和中红外光谱的协同方法, 利用不同维度传感信号的互补特征, 达到IPA识别的卓越精度。我们从摩擦发电机中引入“冷”等离子体放电, 这通过良好的回归预测改善了IPA的中红外光谱响应。此外, 即使有三种以上不同碳基气体的干扰, 这种协同方法对精确的气体浓度预测也能达到~99.08%的准确率。人工智能增强IMMS的协同方法为医疗的精确气体混合物和回归预测气体传感方法。

关键词: 分子检测; 红外光谱; 机器学习; 离子放电

Electrical-induced ion mobility for mid-infrared gas spectroscopy

Zhu Jianxiong¹, Ji Shanling¹, Wang Lin²

(1. Mechanical Engineering, Southeast University, Nanjing 210089, China; 2. Shanghai Institute of Technical Physics, Chinese Academy of Sciences, Shanghai 200433, China)

Abstract: During the outbreak of the Covid-19 pandemic, isopropyl alcohol (IPA) molecules play a significant role as a biomarker for anti-virus diagnosis. However, conventional gas molecule detection exhibits dramatic drawbacks, like the strict working conditions of ion mobility methodology and weak light-matter interaction of mid-infrared spectroscopy, yielding a limited response of targeted molecules. We propose a synergistic methodology of artificial intelligence (AI)-enhanced ion mobility and mid-infrared spectroscopy (IMMS), leveraging the complementary features from the sensing signal in different dimensions to reach superior accuracy for IPA identification. Moreover, even with interferences of more than three different carbon-based gases, this synergistic methodology achieves ~99.08% accuracy for a precise gas concentration prediction. The synergistic methodology of AI-enhanced IMMS creates a mechanism of gas sensing for accurate gas mixture and regression prediction in healthcare.

Keywords: Molecules detection; mid-infrared spectroscopy; machine learning; plasma discharge

1 研究背景

中红外光谱是一种用于识别气体分子振动模式的非破坏性方法，在环境监测、制药、化学分析、生物传感、以及制药行业。关于中红外光谱的灵敏度增强，发现瞬时强静电场可以进一步适应分子振动以及光学反射响应，增强红外光谱的吸收效果。传统的离子迁移率传感受到严格测量环境要求的限制，而传统的中红外光谱在低浓度识别过程中受到较差响应的限制。在这一点上，这两种方法在 IPA 传感方面都有缺点。为了实现具有良好选择性、快速响应和高灵敏度的 IPA 检测，我们提出了一种基于 IMMS 的人工智能（AI）增强化学检测，该化学检测由多开关摩擦电纳米发电机辅助。它为离子迁移率和等离子体增强提供了额外的高压电源，用于中红外传感。在 IPA 传感中，血浆增强的中红外响应表现出良好的浓度预测，DNN 回归的 R2 得分为~0.87，在 DNN 回归之前，使用 SMOTE 可以将 R2 得分提高到~0.98。此外，还证明了数据预处理方法可以在特征分类中以良好的精度去除背景校准。在 IMMS 之间的传感融合方面，浓度预测的回归性能可以提高到 $a \sim 0.99R^2$ 。此外，即使在不同气体干扰的情况下，在 AI 增强方法和高压摩擦电冷离子迁移率的帮助下，IMMS 的这种协同方法在我们的研究中也达到了~99.08%的准确率。

2 研究内容

IPA 分子在中红外光谱区的等离子体增强振动光谱。等离子体极大地增强了分子的性能，产生了明显更高的灵敏度。数据处理包括标准校准、SMOTE 增强方法和 t-SNE 分类。深度学习算法用于 IPA 分子识别的可行性。用于计算的 SMOTE+DNN 回归预测方法在几乎每个 IPA 浓度下都显示出良好的预测（图 1）。

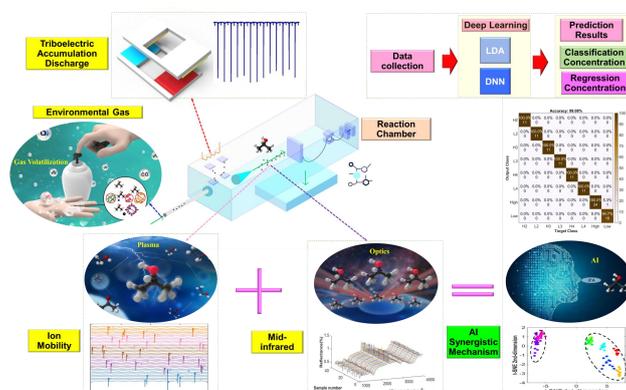


图 1 电诱导驱动的中红外气体光谱系统

LDA 对气体特征进行分类，以区分不同的 IPA 浓度或不同种类的气体。针对 IPA 浓度实现了 AI 增强的传感器融合机制。LDA 的目的是最大化类间方差，最小化类内方差。LDA 模型使用来自等离子体增强中红外光谱区或离子迁移率分析仪的标记数据进行训练。线性判别分析、支持向量机和决策树的比较结果表明，基于 LDA 的人工智能方法以最小的时间成本和最高的精度获得了最佳的性能。为了评估所提出的人工智能增强方法在 IPA 识别中的有效性。

IPA 气体混合物中较高的 IPA 浓度在 $\sim 1800\text{cm}^{-1}$ 的波数处引起强烈的峰值响应，这清楚地表明可以很好地识别不同气体种类的峰值响应。气体种类由分子在特定波数下的独特模式的响应决定，而它们的浓度由响应值表示。通过主成分分析和 LDA 得出的最佳模型的准确率为 $\sim 100\%$ 。因此，人工智能增强方法证明了 IPA 特征的识别。通过辅助传感融合技术和 DNN，浓度估计达到了 ~ 0.99 R2 的分数，与单次测量相比有所提高，产生的准确率为 $\sim 99.08\%$ （图 2）。

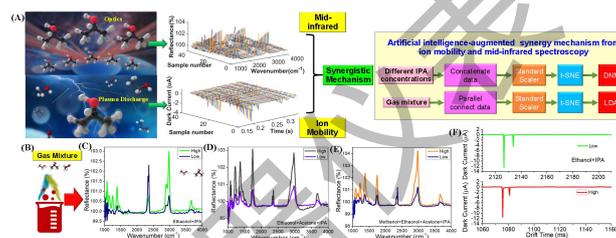


图 2 电诱导驱动的中红外气体光谱测试效果

3 结论

提出了协同机制的 AI 增强的化学传感，以实现快速响应和准确检测。基于高压等离子体的摩擦电纳米发生器，以克服环境压力对离子迁移率的限制以及气体分子的弱响应和反射检测，限制中红外光谱的使用。通过自动提取特定特征，在人工智能增强的帮助下，所报道的自供电离子迁移率达到了比传统方法高出近两倍的精度。来自摩擦发电机的冷等离子体通过深度学习以良好的线性预测增强了 IPA 传感的中红外响应。数据处理可以消除基于我们的观察的背景校准。由于 IPA 检测方面的挑战，通过数据中提取特征，AI 增强方法以 $\sim 99.08\%$ 的准确率成功地得到了证明。

参考文献

[1] Wang, H., Zhu, J., He, T., Zhang, Z., Lee, C. Programmed-triboelectric nanogenerators—a multi-switch regulation methodology for energy manipulation. *Nano Energy*. 78, 105241

(2020).

- [2] Zhu, J., Ren, Z., Lee, C. Toward healthcare diagnoses by machine-learning-enabled volatile organic compound identification. *ACS Nano*. 26, 15(1): 894-903 (2021).
- [3] Zhu, J., Wang, H., Zhang, Z., Ren, Z., Shi, Q., Liu, W., Lee, C. Continuous direct current by charge transportation for next-generation IoT and real-time virtual reality applications. *Nano Energy*. 73, 104760 (2020).
- [4] Zhu, J., Sun, Z., Xu, J., Walczak, R., Dziuban, J., Lee, C. Volatile organic compounds sensing based on benet doubler-inspired triboelectric nanogenerator and machine learning-assisted ion mobility analysis. *Science Bulletin*. 66, 1176-1185 (2021).
- [5] Yang, F., Lin, D., Pan, L., Zhu, J., Shen, J., Yang, L., Jiang, C. Portable smartphone platform based on a single dual-emissive ratiometric fluorescent probe for visual detection of isopropanol in exhaled breath. *Anal. Chem*. 93, 43, 14506–14513 (2021).

中国仪器仪表杂志