

## Выполнили

Магеррамов Ешгин  
Миев Дмитрий  
Таланов Андрей

## Цель работы

Разработка узла для предварительного нагрева пробы и программного обеспечения для анализа хромато-спектрометрии ионной подвижности

## Задачи

1. Разработать 3D-модели с использованием пакета Autodesk Inventor и комплект конструкторской документации, а также изготовить детали испарительной камеры и смесителя газовых потоков;
2. Провести экспериментальную апробацию системы предварительного нагрева;
3. Рассмотреть способы обработки данных:

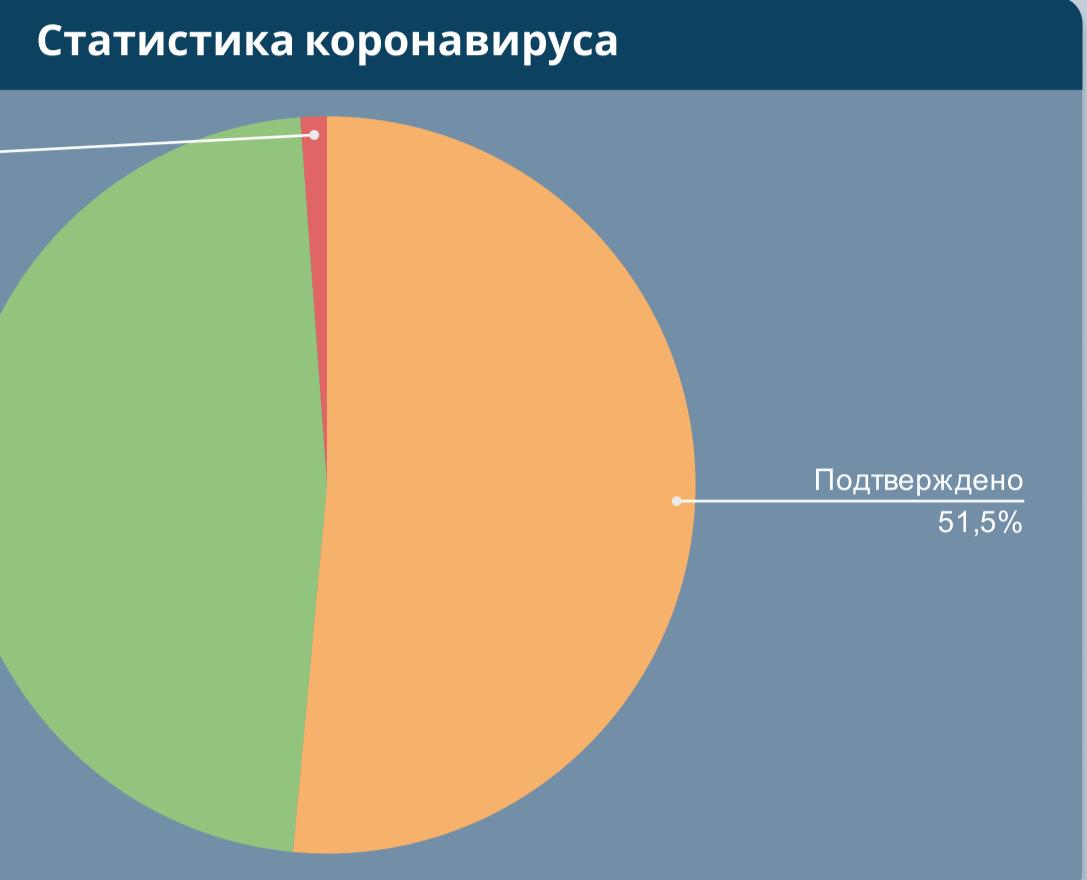
  - Без программной обработки
  - С программной обработкой
  - С предварительным нагревом и программной обработкой

## Аннотация

В работе разработаны узлы пробоотборного устройства для хромато-спектрометра ионной подвижности, предложен метод динамического нагрева колонки, а также разработано программное обеспечение для визуализации и обработки данных, и проведено тестирование разработанных узлов и алгоритмов при анализе состава выдыхаемого воздуха.

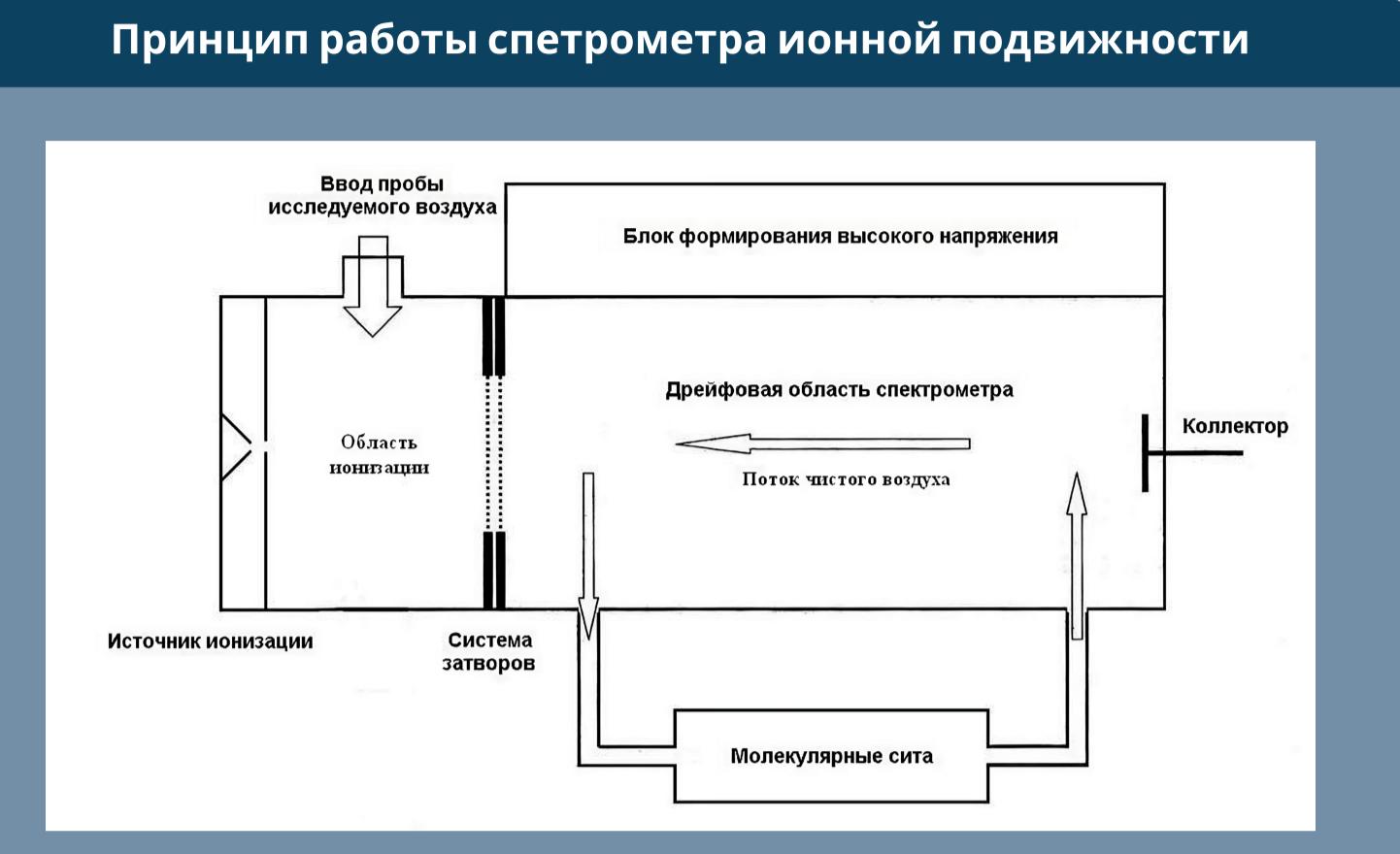
## Научный руководитель

Шалтаева Юлия Ренатовна,  
ст. преп. ИНТЭЛ НИУ ВШЭ-МИФИ

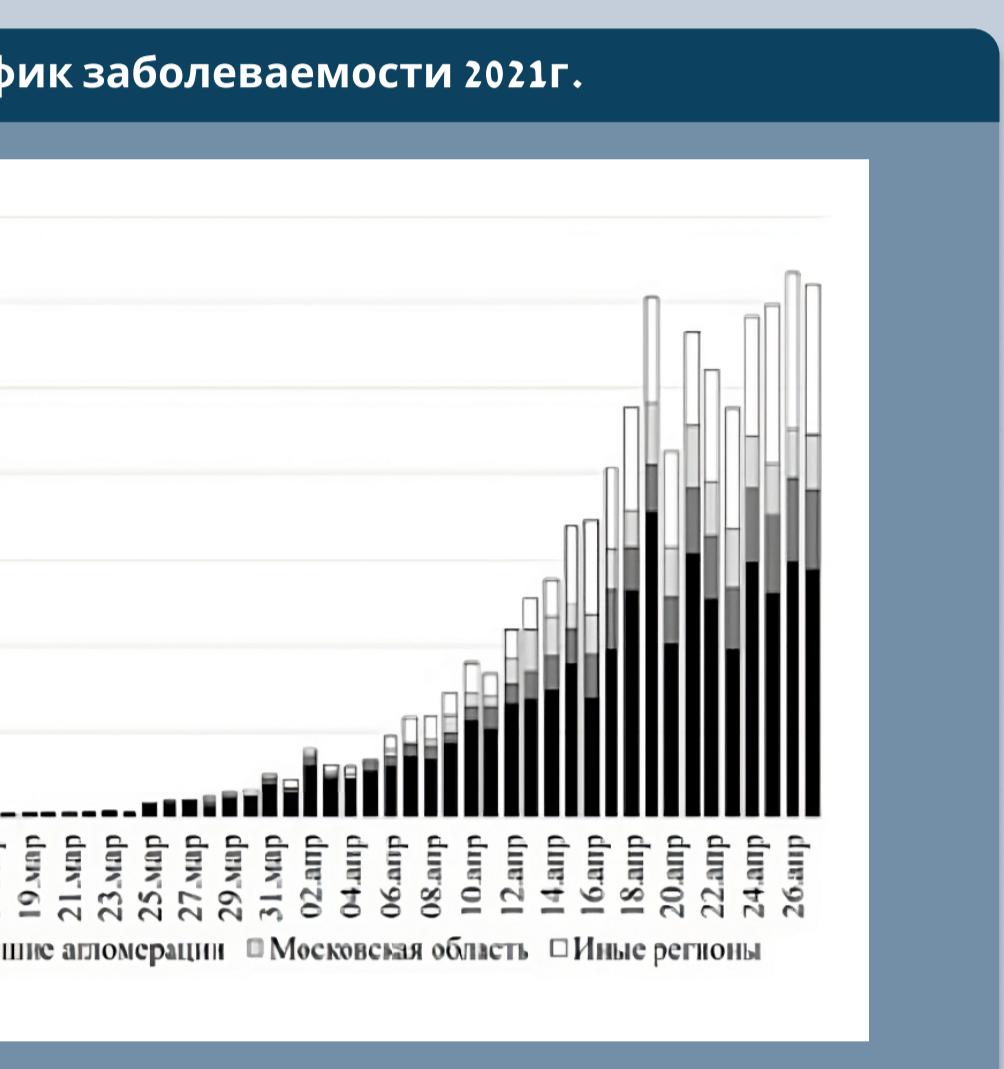


## Актуальность

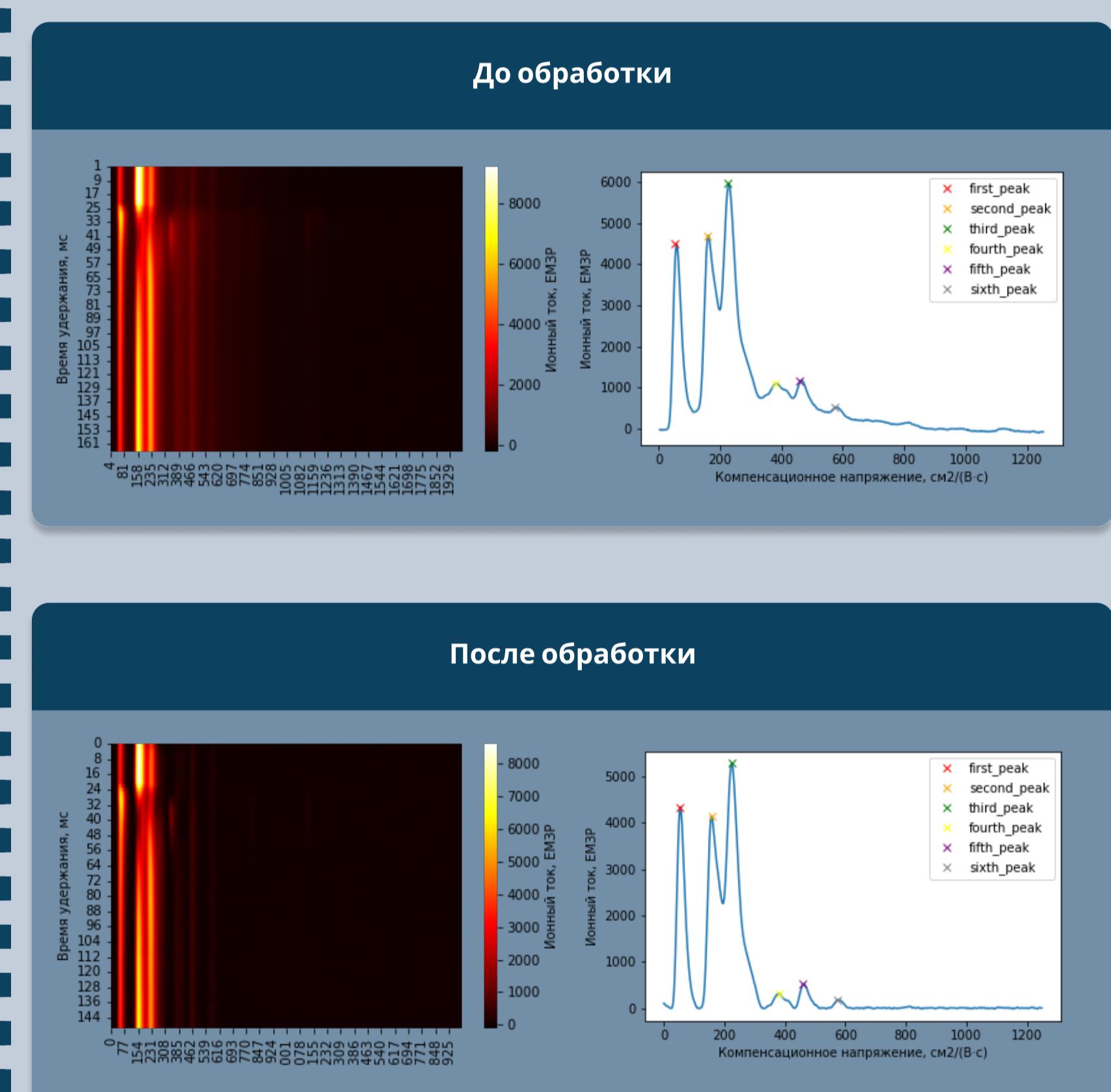
В 2021 году человечество пострадало от пандемии коронавируса COVID-19, которая охватила более 200 стран. Новая волна инфекции быстро распространяется по всему миру, заражая миллионы людей(1). Без правильной и рациональных мер по профилактике пандемии, количество заболевших может значительно возрасти. Своевременное диагностирование COVID-19 может иметь значительное влияние на борьбу с этой инфекцией. Благодаря моментальному и точному диагнозу можно раннее и достоверно установить, кто имеет инфекцию. Это позволяет применить срочные меры по предотвращению распространения инфекции. Доступные инструменты предварительной диагностики, такие как скрининги и осмотры представляют собой важные средства предотвращения заболеваний. Они могут помочь человеку узнать, не имеет ли он риска на заболевание, или же даже до того, как появятся симптомы, они могут помочь распознать ранние признаки его развития. Но данные мероприятия не являются быстрыми, что уменьшает эффективность первичных исследований.



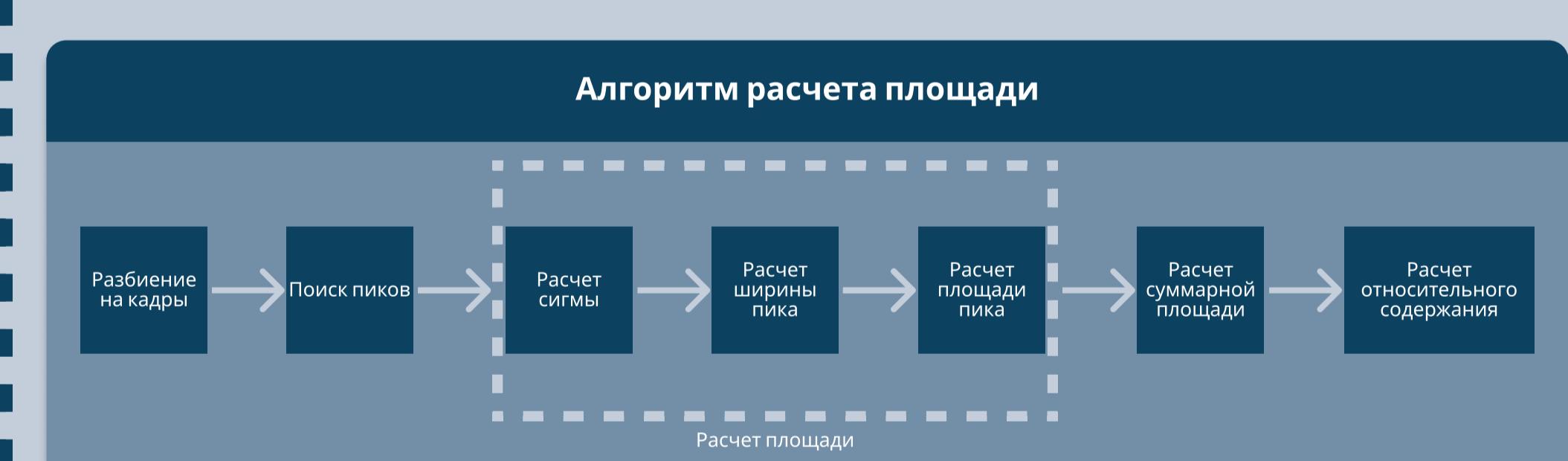
На данный момент спектрометрия ионной подвижности широко используется в сфере обеспечения безопасности. С его помощью сотрудники правоохранительных органов определяют взрывчатые и наркотические вещества в воздухе. Спектрометр также можно использовать для анализа состава летучих органических веществ в выдыхаемом воздухе человека. Например, в публикации (2, 3) учеными было установлено, что благодаря методу ионной спектрометрии есть статистически значимое отличие в составе газовой смеси и в концентрации компонентов выдыхаемого воздуха пациентов с коронавирусной инфекцией (COVID-19) от других респираторных вирусов.



## Программная часть



Для визуализации графиков и их обработки был выбран язык Python. С его помощью построены тепловые карты и графики для каждого интервала времени, объединенные в GIF изображения. Также был использован алгоритм arPLS, сглаживающий шумы для лучшего определения пиков(5).



## Функция нормального распределения

$$f(x) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{1}{2} \left(\frac{x-\mu}{\sigma}\right)^2}$$

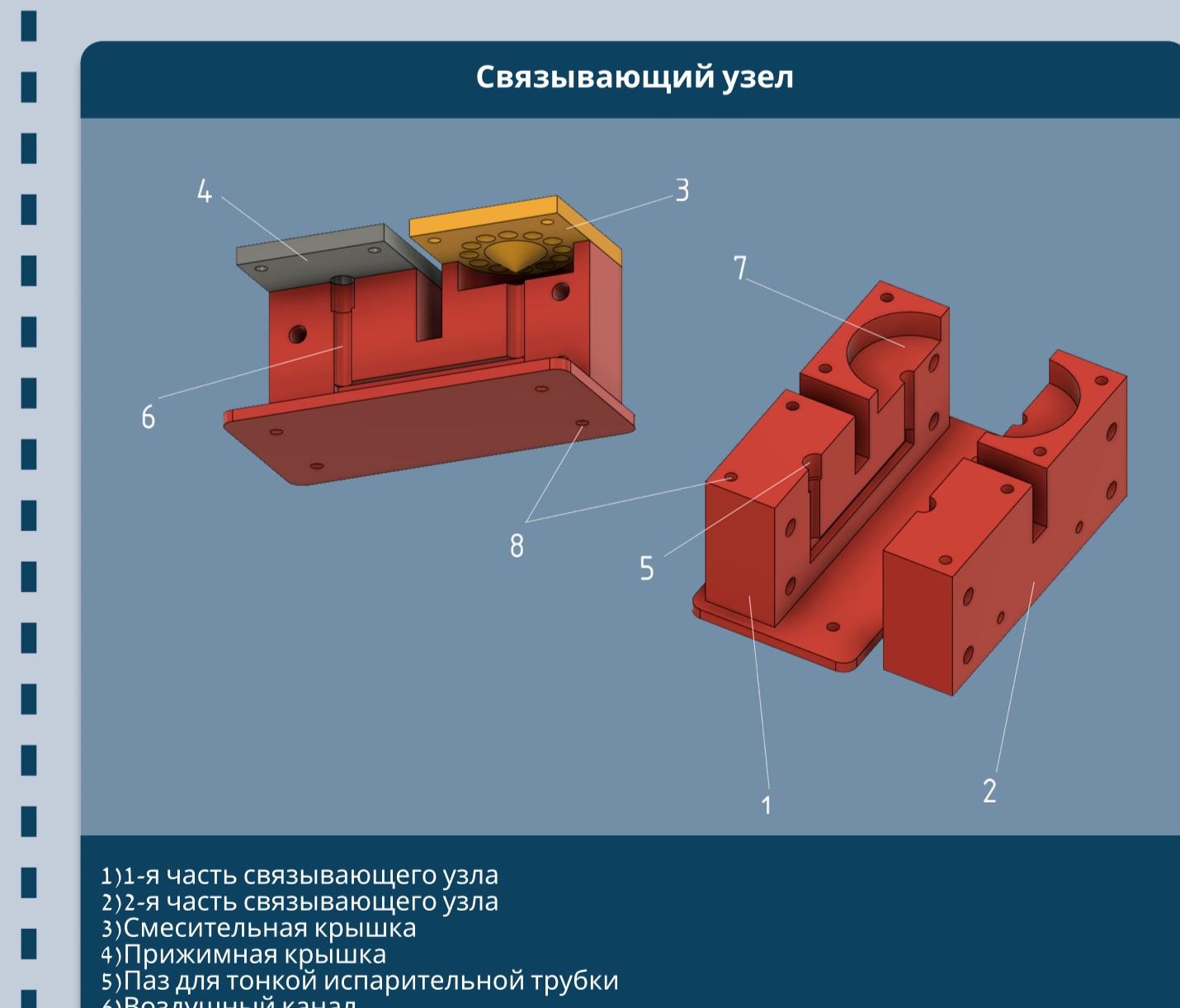
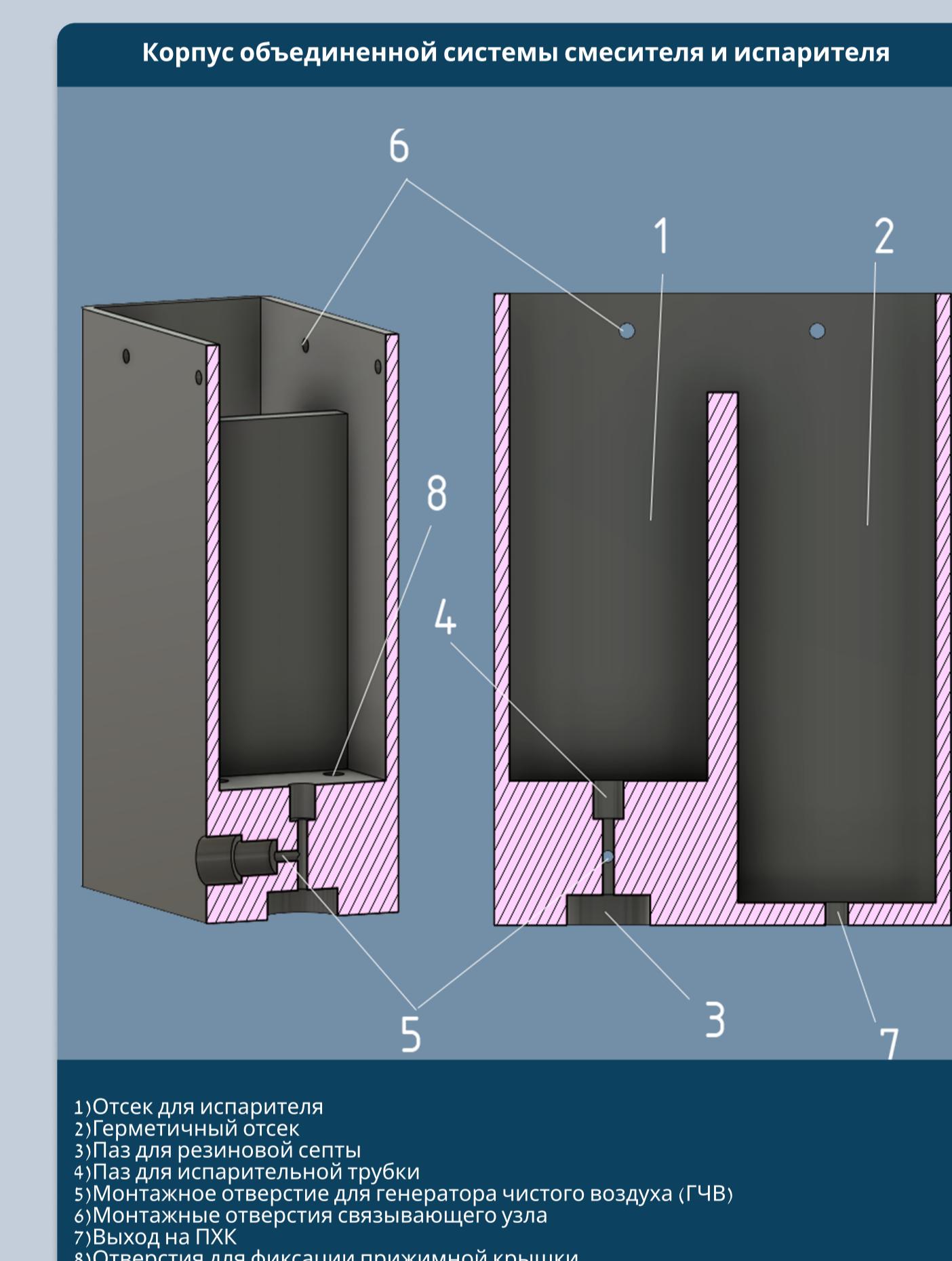
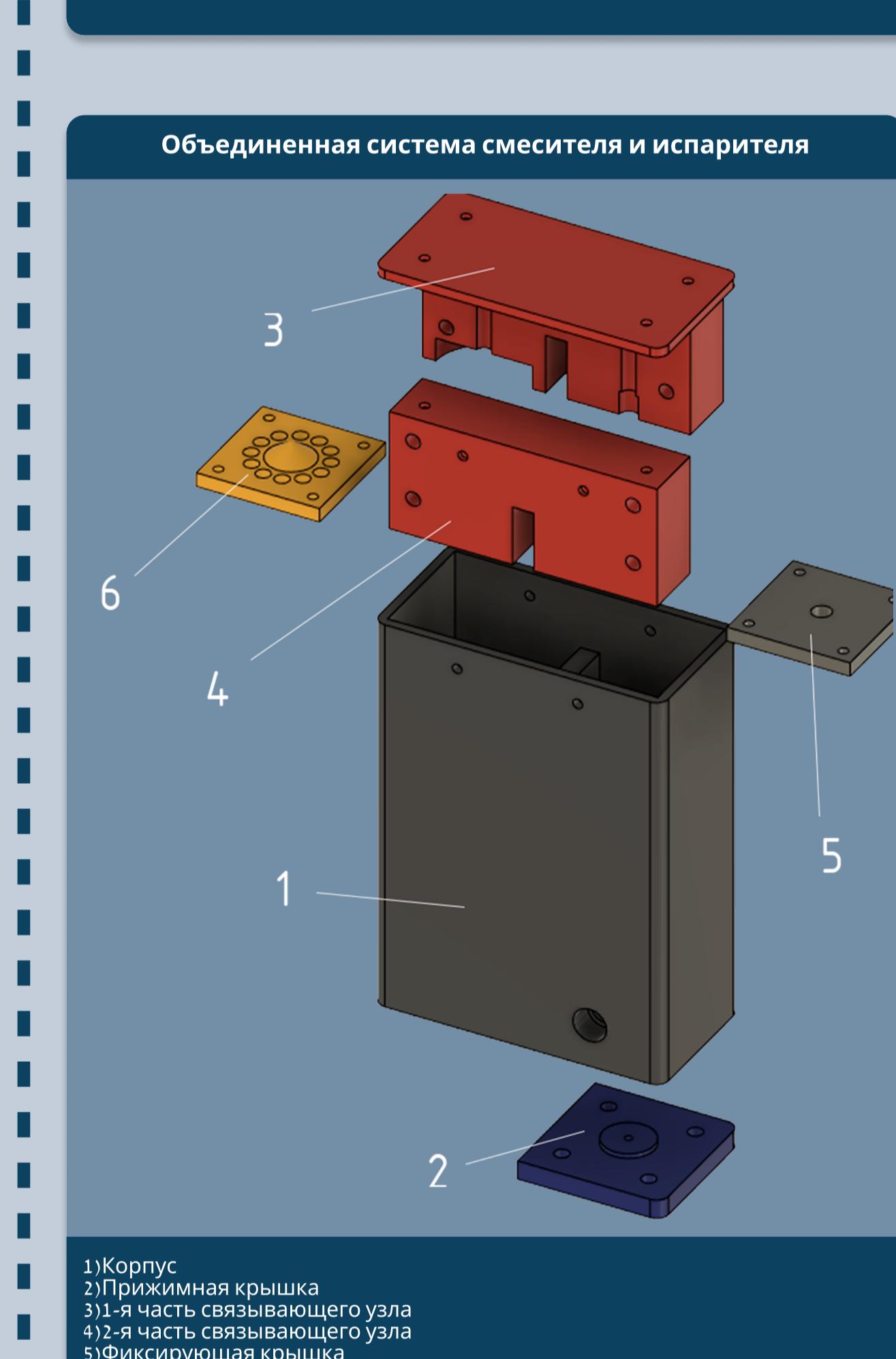
Для определения относительного содержания вещества в выдохе человека необходимо подсчитать площадь под графиком хроматограммы. Использовалось приближение пиков к функции нормального распределения(4). Площадь графика нормального распределения высчитывалась как площадь треугольника, имеющего высоту равную высоте пика пика и основание равное ширине пика.

## Результаты

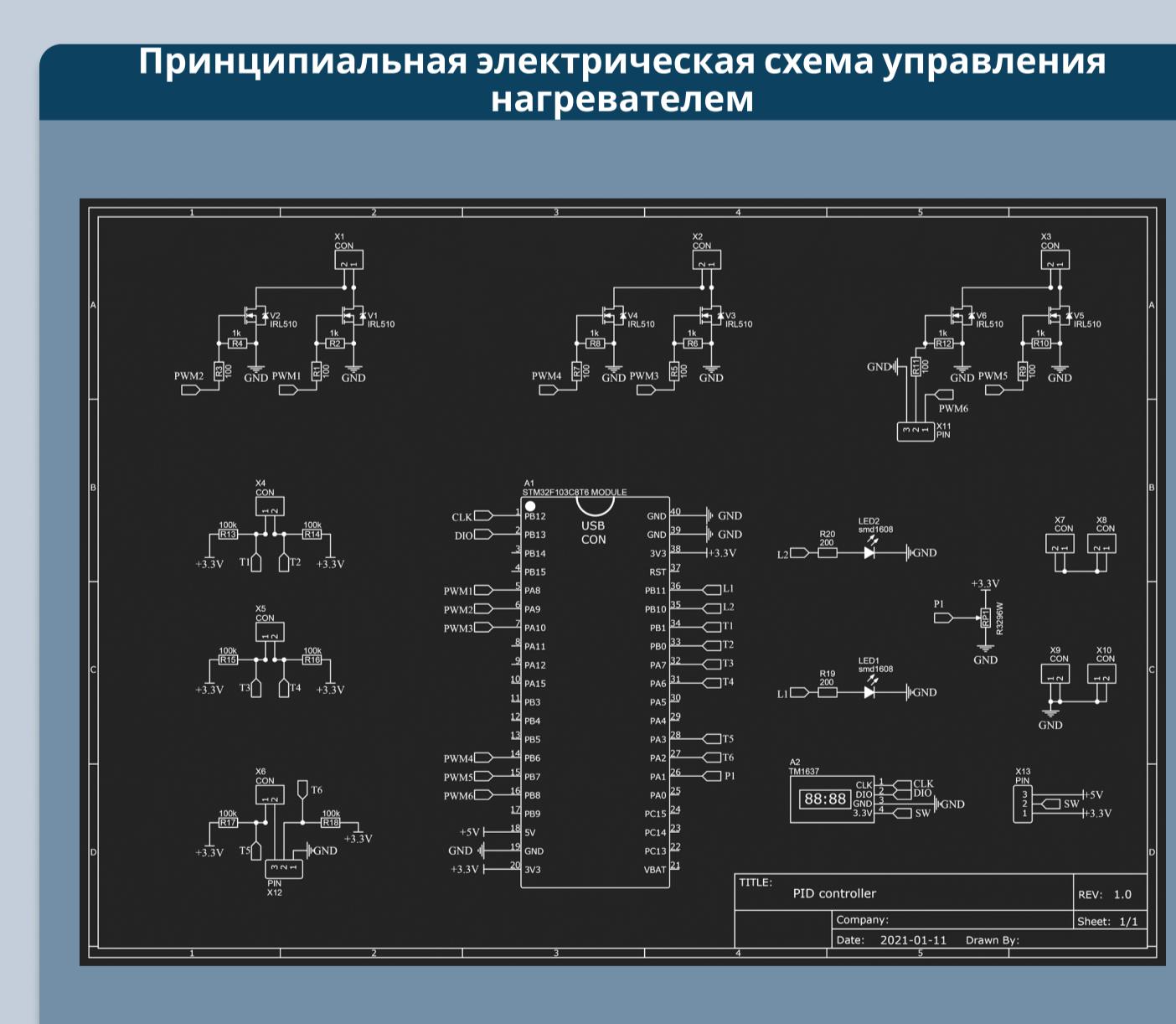
В рамках проекта был выполнен ряд работ по созданию системы предварительного нагрева пробы и программного обеспечения для анализа хромато-спектрометрии ионной подвижности:

- 1)Разработаны 3D-модели с использованием пакета Autodesk Inventor, комплект конструкторской документации, а также изготовлены детали испарительной камеры и смесителя газовых потоков;
- 2)Осуществлена экспериментальная апробацию системы предварительного нагрева пробы;
- 3)Выполнена обработка тепловых карт хроматограмм.

Результаты данного проекта представляют интерес с точки зрения усовершенствования методов диагностики социально значимых заболеваний.



1.1-я часть связывающего узла  
1.2-я часть связывающего узла  
3-смесительная крышка  
4-прижимная крышка  
5-отверстие для тонкой испарительной трубки  
6-воздушный канал  
7-инжекторная полость  
8-монтажные отверстия



## Принцип работы установки

Выдох смешивается с газом носителем в смесителе, затем он поступает по пластиковым трубкам в нагревательный элемент. В результате моментального нагрева температура повышается в короткий срок и поступает в хроматограф. Нагревательный элемент управляет платой под управлением STM32. Температура нагрева прошивается на устройство заранее, подается максимальная мощность на ТЭНЫ через мощный источник питания. Значение температуры выводится на дисплей

## Список литературы

1. Хроника распространения COVID-19 в России [Электронный ресурс]: Хронология и статистика заболеваемости COVID-19 в России, 02:23 05.03.2021. Электрон. журн. РИА Новости — Режим доступа: <https://ria.ru/20210305/koronavirus-1599707836.html>
2. Feuerherd, Martin & Tippel, A.-K. Erber, Johanna & Baumback, Jörg Ingo & Schmid, R. & Proter, Ulrike & Volt, Florian & Spinner, Christoph. (2021). A proof of concept study for the differentiation of SARS-CoV-2, hCoV-NL63, and hAV-H1N1 in vitro cultures using ion mobility spectrometry. *Scientific Reports*. 11. 20143. 10.1038/s41598-021-99742-7
3. Mansour, Elias & Vishniki, Rotem & Rihet, Stéphanie & Saliba, Wala & Fish, Falk & Sarfaty, Patrice & Haick, Hossam. (2019). Measurement of temperature and relative humidity in exhaled breath. *Sensors and Actuators B Chemical*. 127371. DOI 10.1016/j.snb.2019.127371
4. Винарский В.А. Хроматография [Электронный ресурс]. Курс лекций в двух частях. Часть 1. Газовая хроматография. — Электрон. текст. дан. 4.1 Мб. — Мн.: Научно-методический центр "Электронная книга БГУ", 2003. — Режим доступа: <http://anubis.bsu.by/publications/elresources/Chemistry/vinarski.pdf>. — Электрон. версия публикации, 2002. — PDF формат, версия 1.4.
5. Baek S. J. et al. Baseline correction using asymmetrically reweighted penalized least squares smoothing // Analyst. — 2015. — T. 140. — №. 1. — С. 250-257. Baseline correction using asymmetrically reweighted penalized least squares smoothing