

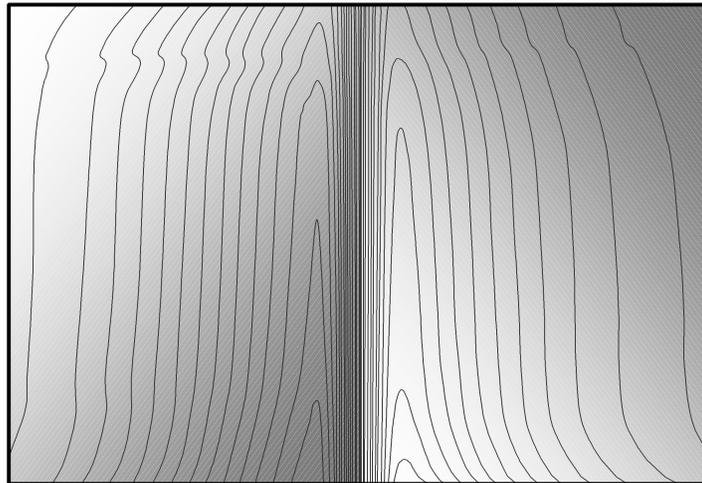


Universidad Autónoma Metropolitana
División de Ciencias Básicas e Ingeniería

Doctorado en Ciencias
Especialización en Ingeniería Biomédica

Sistema de procesamiento para
identificación y cuantificación
de agentes anestésicos

M. en C. Andro Antonio Solis Marcheff



Asesor:

Dr. Emilio Sacristán Rock

Sinodales:

Dr. Angel Kuri Morales

Dr. Antonio Muñoz Flores

Dr. Boris Escalante Ramírez

Dr. Emilio Sacristán Rock

Dra. Sonia Charleston Villalobos

La mesa de operaciones se sentía tan dura como la barata mesa de Formica que tenía en su cocina. Pero el Phernargan y el Demerol que le habían sido administrados empezaban a surtir efecto en algún lugar de su cerebro. Nancy estaba más despierta de lo que hubiera querido, pero al mismo tiempo comenzaba a sentir un alejamiento y un disociamiento de lo que la rodeaba. La atropina que le habían suministrado también comenzó a tener un efecto, causando que su garganta y su boca se sintieran deshidratadas y su lengua pegajosa.

El Dr. Robert Billing estaba absorto con su máquina. Era una maraña de acero inoxidable, manómetros verticales, y algunos coloridos cilindros de gas comprimido. Una botella ámbar de halotano estaba colocada encima de la máquina. En la etiqueta estaba escrito: "2-bromo-2-cloro-1,1,1-tri-fluoroetano (C₂HBrClF₃)". Un agente anestésico casi perfecto. "Casi" debido a que de cuando en vez parecía destruir el hígado del paciente. Pero eso era un raro suceso, y las demás características del halotano le hacían sombra completamente al potencial daño hepático. El Dr. Billing amaba esta substancia. En algún lugar de su imaginación se veía a sí mismo inventando el halotano, dándosele a conocer a la comunidad médica en el artículo principal del *New England Journal of Medicine*, y más tarde yendo a recoger su premio Nobel vestido con el mismo smoking que había utilizado para su boda.

El Dr. Billing era un anestesiólogo residente condenadamente bueno, y lo sabía. De hecho, pensaba que casi todo el mundo lo sabía. Estaba convencido de que conocía tanto del tema como cualquier anestesiólogo regular, más que algunos. Y era cuidadoso, muy cuidadoso. No había tenido complicaciones serias como residente, y eso era en verdad poco común.

Como un piloto de 747, habiendo elaborado una lista, religiosamente se adhería a la política de ir palomeando cada paso del procedimiento de inducción. Esto significaba haber hecho miles de copias facsímiles y traer consigo una de ellas, junto con su equipo de anestesia, al comienzo de cada operación. Para las 7:15, el anestesiólogo llegaba puntualmente al paso 12: ese significaba conectar la tubería de la máquina. Un extremo iba a la bolsa de ventilación, cuya capacidad de cuatro a cinco litros le permitía inflar con fuerza los pulmones del paciente si éste lo requería en cualquier momento del procedimiento. El otro extremo iba al contenedor de cal sodada, en donde se absorbería el bióxido de carbono expirado por el paciente. El paso 13 de su lista consistía en asegurarse de que las válvulas unidireccionales del circuito respiratorio estuvieran alineadas en la dirección correcta. El paso 14 incluía la conexión de la máquina de anestesia a las salidas de gas comprimido, óxido nitroso y oxígeno en la pared del quirófano. La máquina de anestesia tenía además cilindros de oxígeno de emergencia colgados a un lado, y el Dr. Billing comprobó la presión en ambos tanques. Estaban completamente cargados.

...

"Todo está bien", dijo el Dr. Billing, acercando su máquina de anestesia a la cabeza de Nancy. Con bien practicada habilidad, insertó su jeringa con Pentotal en la válvula de la línea intravenosa. "Ahora quiero que cuentes hasta el cincuenta, Nancy". Esperaba que Nancy no pasara del quince. De hecho, le causaba cierta satisfacción al Dr. Billing observar al paciente quedarse dormido. Representaba para él una prueba repetida de la validez del método científico. Además, lo hacía sentirse poderoso; era como si tuviera el mando del cerebro del paciente. Nancy era, sin embargo, una paciente de fuerte carácter, y aunque quería dormirse, de forma involuntaria su cerebro peleaba contra el químico. Seguía contando de forma audible cuando el Dr. Billing le administró una dosis adicional de Pentotal. Llegó hasta el veintisiete antes de que los dos gramos del fármaco tuvieran éxito en inducir el letargo. Nancy Greenly se quedó dormida a las 7:24 del 14 de febrero de 1976, por última vez.

El Dr. Billing no tenía idea de que esta joven de buena salud se convertiría en su primera complicación. Confiaba en que todo estaba bajo su control. Ya casi terminaba con su lista. Le dio a respirar a Nancy una mezcla de halotano, óxido nitroso y oxígeno a través de una mascarilla. Luego inyectó 2 cc de una solución al 0.2 por ciento de cloruro de succinilcolina en su línea intravenosa para causar la parálisis de todos sus músculos esqueléticos. Esto permitiría colocarle el tubo endotraqueal con mayor facilidad.

...

La lengua de Nancy se paralizó y cayó hacia atrás, bloqueando sus vías aéreas. Pero no había ningún problema... [El Dr. Billing] tenía el control total del estado respiratorio de la paciente. Ajustó sus flujómetros y estableció la mezcla de halotano, óxido nitroso y oxígeno que deseaba.

...

Eran las 7:56. Con su mano derecha levantó los párpados de Nancy. No opusieron ninguna resistencia, y sus pupilas estaban máximamente dilatadas. El pánico le vino de golpe al Dr. Billing. Algo estaba mal... algo estaba muy mal.

RESUMEN

La eliminación del dolor no es la única función de la anestesiología. En el quirófano es necesario mantener las funciones vitales del paciente ante los efectos desequilibrantes de la cirugía, la enfermedad y las intervenciones farmacológicas - incluyendo la anestesia - a través de frecuentes mediciones y ajustes. El monitoreo rápido y continuo de la anestesia puede mejorar de manera importante la eficacia del procedimiento y mantener la seguridad del paciente, por lo que organizaciones médicas y gubernamentales en muchos países han promovido fuertes recomendaciones a favor del monitoreo de gases. El problema principal es que las tecnologías existentes son demasiado caras y requieren mucho espacio y mantenimiento sofisticado, por lo que un gran número de salas quirúrgicas aún carecen de algún equipo de monitoreo adecuado. Este problema es aún más grave en hospitales con pocos recursos y en países subdesarrollados y de mediano desarrollo. Existe una clara necesidad para una nueva tecnología de medición de menor costo y pequeño tamaño que pueda incorporarse directamente al equipo de anestesia.

El objetivo de esta investigación es el desarrollo de un sistema alternativo de reducido tamaño y costo, rápido y eficiente para monitorear gases anestésicos, basado en un *condensador de aspiración diferencial de primer orden con barrido de campo*, cuyo desarrollo se fundamenta en principios de espectroscopía de movilidad iónica y métodos de aspiración. La celda de medición de este instrumento es del tamaño de una caja de cerillos pequeña, sin partes móviles, ópticas o consumibles y se utilizan para su fabricación procesos de fabricación de tarjetas impresas, lo que implica un costo reducido y un diseño robusto. No requiere de altos voltajes ni grandes campos magnéticos, y las mediciones se realizan a presión barométrica.

La celda de medición del sensor se ha descrito mediante un modelo matemático sencillo pero funcional que ha sido el fundamento para diseñar el instrumento y relacionar dos dominios importantes en los que pueden presentarse los resultados analizados: *densidad de corriente* y *densidad de movilidad iónica*.

Se ha diseñado un sistema experimental que incluye a) una *máquina dosificadora de anestesia* que permite obtener distintas mezclas clínicas de agentes y gases, y b) un *sistema de monitoreo y análisis* basado en el condensador de aspiración y controlado por una computadora personal, la cual además tiene implementado en software un sistema de redes neuronales de retropropagación para el reconocimiento y clasificación de los datos entregados por el sensor. El sistema de reconocimiento procesa de manera preliminar los datos aplicándoles una reducción dimensional mediante PCA (análisis de componentes principales), método que resulta, al ser comparado con algunos otros, ser el más adecuado para expresar las características sobresalientes de los datos de forma compacta (solo 18 componentes se requieren para el reconocimiento). El resultado es que las redes neuronales asociadas, son relativamente sencillas, pequeñas y eficientes.

El resultado de la investigación demuestra que los resultados son repetibles y diferentes para cada mezcla, aunque no todos los gases se identifican con igual facilidad, lo cual nos descubre la sensibilidad del instrumento para cada gas. En orden descendiente de porcentaje de reconocimiento se tiene: porcentaje de nitrógeno (94.98%), tipo de agente anestésico (91.04%), porcentaje de oxígeno (90.39%), porcentaje de óxido nitroso (88.96%), porcentaje de bióxido de carbono (86.60%) y porcentaje de agente anestésico (74.12%). El porcentaje de agente anestésico en la mezcla es el que el sistema encuentra más difícil de reconocer, y sin embargo el resultado indica que el sistema es sensible a ésta y a todas las demás características, y en el futuro deben encontrarse métodos para aumentar los niveles del reconocimiento, incluyendo mejoras en el diseño y construcción del sensor y su modelo matemático.

AGRADECIMIENTOS

Quiero agradecer de primera instancia a los distinguidos miembros del comité de evaluación para este proyecto, Dr. Angel Kuri Morales, Dr. Antonio Muñoz Flores, Dr. Boris Escalante, Dr. Emilio Sacristán Rock, y Dra. Sonia Charleston Villalobos, por su guía y ayuda, y de forma muy particular al Dr. Emilio Sacristán Rock, mi asesor y amigo, quien contribuyó en cada aspecto de la investigación.

Extiendo también mi apreciación a la M. en C. Iseo Gonzalez Christen por su ayuda durante todo el proceso de trámites relativos al posgrado.

Agradezco a CONACyT el apoyo económico brindado durante el período de estudios.

Un saludo a A.B.M. y mi más profundo aprecio por su apoyo durante estos últimos cinco difíciles y largos años en Finisterra.

Finalmente, extiendo mi gratitud a mi familia por su paciencia y el apoyo que me brindaron.

AASM

INDICE

Resumen	i
Agradecimientos	ii
Índice	iii
Relación de Tablas y Figuras	vi
I Introducción y Objetivos	1
II Antecedentes e Importancia de la Investigación	4
2.1 Administración de la anestesia	4
2.1.1 Administración automática de anestesia	4
2.1.1.1 Vaporizadores de agentes anestésicos	5
2.2 Monitoreo en el quirófano	6
2.2.1 Monitoreo de la ventilación y gases	7
2.2.1.1 Monitoreo de oxígeno	7
2.2.1.2 Monitoreo de dióxido de carbono	7
2.2.1.2.1 El capnograma	8
2.2.1.3 Monitoreo de óxido nitroso	9
2.2.1.4 Monitoreo de nitrógeno	9
2.2.1.5 Monitoreo de agentes anestésicos volátiles	9
2.2.2 Requerimientos clínicos de un monitor de gases de anestesia	10
2.3 Tecnologías de medición	10
2.3.1 Cromatografía de gases	10
2.3.2 Espectrometría de masa	11
2.3.3 Espectrometría por Radiación Infrarroja	13
2.3.4 Espectrometría por difracción de Raman	14
2.3.5 Análisis piezoeléctrico	16
2.3.6 Espectrometría por movilidad iónica (IMS)	16
2.4 Método de aspiración	21
2.4.1 Antecedentes	21
2.4.1.1 El contador o condensador de aspiración	21
2.4.1.2 El condensador de aspiración plano	22
2.4.2 El condensador diferencial de primer orden con barrido de campo	22
2.4.2.1 Descripción general	22
2.4.2.2 Funcionamiento teórico	23
2.4.2.3 Descripción matemática	24
2.4.2.3.1 La transformada discreta de Tammet	29
2.4.2.4 Relación experimental con el espectrógrafo IMS	30
2.5 Química de los gases y agentes anestésicos	31
2.5.1 Gases de la mezcla portadora	31
2.5.1.1 Oxígeno	31
2.5.1.2 Nitrógeno	31
2.5.1.3 Óxido Nitroso	32
2.5.1.4 Bióxido de Carbono	32

2.5.2	<i>Agentes anestésicos</i>	32
2.5.2.1	<i>Agentes anestésicos halogenados inhalables volátiles (VHAs)</i>	33
2.5.2.2	<i>Parámetros importantes de los anestésicos</i>	37
2.5.2.2.1	<i>Punto de ebullición</i>	37
2.5.2.2.2	<i>Presión de vapor saturado (SVP)</i>	37
2.5.2.2.3	<i>Concentración de vapor</i>	38
2.5.2.2.4	<i>Concentración mínima alveolar (MAC)</i>	38
2.5.2.2.5	<i>PMAC1</i>	38
2.5.2.2.6	<i>Gravedad específica</i>	38
2.5.2.2.7	<i>Coefficiente de partición</i>	38
2.5.2.3	<i>Características del agente anestésico inhalado ideal</i>	39
2.6	Espectrometría de movilidad iónica y agentes halogenados	39
2.7	Técnicas de Inteligencia Artificial	44
2.7.1	<i>Redes Neuronales Artificiales</i>	44
2.7.1.1	<i>Redes Neuronales y la clasificación de patrones</i>	48
2.7.2	<i>Lógica Difusa</i>	50
2.7.2.1	<i>Sistemas de control difuso</i>	50
2.7.2.2	<i>Agrupamiento Fuzzy c-means</i>	54
2.8	Minería de datos y extracción de características	56
2.8.1	<i>Reducción dimensional</i>	57
2.8.1.1	<i>Análisis de Componentes Principales (PCA)</i>	58
2.8.1.1.1	<i>Descomposición en Valores Singulares (SVD) y sus aplicaciones</i>	59
2.8.1.1.1.1	<i>La Pseudoinversa</i>	60
2.8.1.1.1.2	<i>Regularización por el método de Tikhonov</i>	61
2.8.1.1.1.3	<i>Regularización por truncamiento de la SVD (TSVD)</i>	62
2.8.1.2	<i>Análisis de Componentes Independientes (ICA)</i>	63
2.8.1.3	<i>Persecución Exploratoria de Proyecciones (EPP)</i>	65
2.8.1.4	<i>Análisis de Discriminantes Lineales (LDA)</i>	65
2.8.1.5	<i>Escalado Multidimensional (MDS)</i>	66
2.8.1.6	<i>Mapeado de Sammon</i>	68
2.8.1.7	<i>ISOMAP</i>	68
2.8.1.8	<i>Empotramiento localmente lineal (LLE)</i>	69
III	Metodología Experimental	70
3.1	Sistema experimental	70
3.1.1	<i>Sistema proveedor de mezclas gaseosas</i>	70
3.1.1.1	<i>Sistema automático mezclador de gases anestésicos</i>	70
3.1.1.2	<i>Monitor de anestesia de referencia</i>	76
3.1.2	<i>Sistema de monitoreo y análisis</i>	77
3.1.2.1	<i>Diseño del condensador de aspiración</i>	78
3.1.2.1.1	<i>Consideraciones teóricas sobre la celda de medición</i>	78
3.1.2.1.2	<i>Diseño de una nueva celda de medición</i>	80
3.1.2.1.3	<i>Software CAD para el diseño de la celda de medición</i>	84
3.1.2.1.4	<i>Construcción de la celda de medición</i>	84
3.1.2.1.5	<i>Diseño del cuerpo del condensador de aspiración</i>	86
3.1.2.2	<i>Diseño del control de temperatura</i>	87
3.1.2.3	<i>Diseño del subsistema de muestreo</i>	92
3.1.2.4	<i>Software para el control del condensador de aspiración</i>	93

3.2 Diseño de los experimentos	94
3.2.1 <i>Características de la base de datos experimental</i>	94
3.2.2 <i>Diseño del sistema de identificación y cuantificación</i>	97
IV Resultados	100
4.1 Sistema experimental	100
4.1.1 <i>Sistema proveedor de mezclas gaseosas</i>	100
4.1.1.1 <i>Respuesta del control de presión</i>	100
4.1.1.2 <i>Caracterización de las mezclas</i>	102
4.1.2 <i>Sistema de monitoreo y análisis</i>	108
4.1.2.1 <i>Respuesta del control de la temperatura del condensador</i>	108
4.1.2.2 <i>Características de la base de datos</i>	110
4.1.2.2.1 <i>Distribución de las curvas de corriente iónica</i>	110
4.1.2.2.2 <i>Distribución de las inversas</i>	110
4.1.2.2.3 <i>Sensibilidad de las curvas de corriente iónica</i>	111
4.1.2.2.4 <i>Sensibilidad de las inversas</i>	116
4.1.2.3 <i>Aplicación de la reducción dimensional a la base de datos</i>	125
4.1.2.4 <i>Redes neuronales para la identificación y cuantificación</i>	135
V Discusión de los Resultados	140
5.1 Sistema experimental	140
5.1.1 <i>Sistema proveedor de mezclas gaseosas</i>	140
5.1.1.1 <i>Control de presión</i>	140
5.1.1.2 <i>Caracterización de las mezclas</i>	141
5.1.2 <i>Sistema de monitoreo y análisis</i>	141
5.1.2.1 <i>Respuesta del control de la temperatura del condensador</i>	141
5.1.2.2 <i>Características de la base de datos</i>	142
5.1.2.2.1 <i>Distribución de las curvas de corriente iónica</i>	142
5.1.2.2.2 <i>Distribución de las inversas</i>	143
5.1.2.2.3 <i>Sensibilidad de las curvas de corriente iónica</i>	145
5.1.2.2.4 <i>Sensibilidad de las inversas</i>	146
5.1.2.3 <i>Aplicación de la reducción dimensional a la base de datos</i>	146
5.1.2.4 <i>Redes neuronales para la identificación y cuantificación</i>	150
VI Conclusiones y Recomendaciones	154
VII Apéndice	157
A.1 <i>Sensibilidad del condensador de aspiración al flujo del gas diluyente</i>	157
A.2 <i>Redes neuronales desarrolladas en NeuralWorks Professional II Plus</i>	159
A.3 <i>Distribución de las curvas de movilidad iónica</i>	164
A.4 <i>Distribución de las inversas</i>	171
Referencias Bibliográficas	187

RELACIÓN DE TABLAS Y FIGURAS

Tablas

2.1.	<i>Algunas funciones monitoreadas e instrumentos utilizados durante la anestesia</i>	5
2.2.a	<i>Características físicas y químicas del desflorano y el enflorano</i>	34
2.2.b.	<i>Características físicas y químicas del halotano y el isoflurano</i>	35
2.2.c.	<i>Características físicas y químicas del sevoflurano y el óxido nitroso</i>	36
2.3.	<i>Distribución de iones producto de halotano</i>	39
2.4.	<i>Ejemplo de una base de reglas difusa</i>	53
3.1.	<i>Descripción de los reguladores digitales de flujo</i>	72
3.2.	<i>Conjunto de reglas difusas del control de presión</i>	74
3.3.	<i>Características de monitoreo del Capnomac Ultima™ de Datex-Ohmeda™</i>	77
3.4.	<i>Posibles valores de x_b [cm] para diferentes ganancias de la función G</i>	82
3.5.	<i>Parámetros establecidos mediante la metodología de diseño</i>	83
3.6.	<i>Conjunto de reglas difusas para el control de temperatura</i>	88
3.7.	<i>Combinaciones de porcentajes de gases anestésicos para la base de datos</i>	95
4.1.	<i>Características de la respuesta transitoria del control de presión</i>	101
4.2.	<i>Matriz de confusión para la identificación del porcentaje de N_2</i>	135
4.3.	<i>Matriz de confusión para la identificación del tipo de agente anestésico</i>	136
4.4.	<i>Matriz de confusión para la identificación del porcentaje de N_2O</i>	136
4.5.	<i>Matriz de confusión para la identificación del porcentaje de O_2</i>	136
4.6.	<i>Matriz de confusión para la identificación del porcentaje de CO_2</i>	137
4.7.	<i>Matriz de confusión para la identificación del porcentaje de agente anestésico</i>	137
4.8.	<i>Desempeño del sistema sin contar con información adicional de los porcentajes de O_2 y CO_2</i>	137
4.9.	<i>Matriz de confusión para la identificación del porcentaje de N_2 conociendo O_2 y CO_2</i>	138
4.10.	<i>Matriz de confusión para la identificación del porcentaje de N_2O conociendo O_2 y CO_2</i>	138
4.11.	<i>Matriz de confusión para la identificación del tipo de AA conociendo O_2 y CO_2</i>	139
4.12.	<i>Matriz de confusión para la identificación del porcentaje de AA conociendo O_2 y CO_2</i>	139
4.13.	<i>Desempeño del sistema contando con información adicional de los porcentajes de O_2 y CO_2</i>	139
5.1.	<i>Correlación de las características de las mezclas con los componentes principales (PCA)</i>	148

Figuras

2.1.	<i>Funcionamiento de los vaporizadores de bypass variable y de flujo medido</i>	5
2.2.	<i>Forma de onda normal para CO_2</i>	8
2.3.	<i>Esquema de un cromatógrafo de gases</i>	11
2.4.	<i>Elementos básicos de un espectrómetro de masa</i>	11
2.5.	<i>Filtro de cuadripolo de un espectrómetro de masa</i>	12
2.6.	<i>Espectrómetro de masa compartido</i>	13
2.7.	<i>Esquema de un analizador de infrarrojo</i>	14
2.8.	<i>Sistema óptico para la observación de un espectro de Raman</i>	15
2.9.	<i>Diagrama de un analizador por efecto Raman</i>	15
2.10.	<i>Esquema de un analizador piezoeléctrico</i>	16
2.11.	<i>Diagrama de un espectrómetro de movilidad iónica completo</i>	16
2.12.	<i>Esquema de un tubo de arrastre típico</i>	17
2.13.	<i>Respuesta del IMS en función de la concentración</i>	19
2.14.	<i>Diferentes tipos de contadores de aspiración</i>	21
2.15.	<i>El condensador de aspiración plano</i>	22
2.16.	<i>El condensador de aspiración diferencial de primer orden</i>	23
2.17.	<i>Respuesta de un condensador de aspiración a la movilidad iónica</i>	24
2.18.	<i>Diagrama de una celda de medición diferencial de primer orden</i>	25
2.19.	<i>Cálculo gráfico de la función G para el electrodo colector</i>	27
2.20.	<i>Representación de las tres áreas definidas por hipérbolas en una función G</i>	27
2.21.	<i>Superficie de la función G</i>	28
2.22.	<i>La función G vista como dos familias simétricas de triángulos</i>	28
2.23.	<i>Espectro y Análisis Gaussiano para iones negativos de halotano en un IMS sin saturación</i>	40

2.24.	<i>Espectro y Análisis Gaussiano para iones negativos de halotano en un IMS en saturación</i>	41
2.25.	<i>Espectro y Análisis Gaussiano para iones positivos de halotano en un IMS en saturación</i>	43
2.26.	<i>Espectro de corriente iónica para halotano a diversas concentraciones</i>	44
2.27.	<i>Estructura básica de una neurona biológica</i>	45
2.28.	<i>Estructura básica de una neurona artificial</i>	46
2.29.	<i>Estructura de una red neuronal artificial simple</i>	46
2.30.	<i>Esquema general de un controlador de lógica difusa</i>	51
2.31.	<i>Posible asignación de conjuntos difusos</i>	52
2.32.	<i>Fuzzificación de variables de entrada</i>	52
3.1.	<i>Diagrama a bloques del sistema experimental propuesto</i>	70
3.2.	<i>Diagrama a bloques del sistema proveedor de mezclas gaseosas</i>	70
3.3.	<i>Diagrama a bloques del sistema automático mezclador de anestesia</i>	71
3.4.	<i>Funciones de membresía difusa para el control de presión</i>	73
3.5.	<i>Superficie difusa del control de presión</i>	74
3.6.	<i>Pseudo-algoritmo del programa de control de la máquina automática de anestesia</i>	75
3.7.	<i>Pantalla de interfase con el usuario del sistema mezclador de gases</i>	76
3.8.	<i>Monitor de gases y agentes anestésicos Capnomac Ultima™ de Datex-Ohmeda™</i>	77
3.9.	<i>Diagrama del sistema de monitoreo y análisis</i>	78
3.10.	<i>Programa interactivo de CAD para la visualización del diseño de una celda de medición</i>	83
3.11.	<i>Convertidor de corriente iónica a voltaje y amplificador de salida del sensor</i>	84
3.12.	<i>Placas de circuito impreso para la construcción de la celda de medición</i>	85
3.13.	<i>Diagrama técnico de las medidas del cuerpo del condensador</i>	86
3.14.	<i>Diagrama del espaciador de Teflón™ para la construcción de la celda de medición</i>	87
3.15.	<i>Diagrama a bloques del control de temperatura difuso</i>	87
3.16.	<i>Diagrama del circuito amplificador de la señal de temperatura</i>	88
3.17.	<i>Respuesta teórica del subsistema de medición de temperatura</i>	88
3.18.	<i>Funciones de membresía difusa para el control de temperatura</i>	89
3.19.	<i>Superficie difusa para el control de la temperatura del condensador</i>	90
3.20.	<i>Circuito calentador propuesto como actuador del control de temperatura</i>	91
3.21.	<i>Relación entre el voltaje de salida del control difuso y la corriente en el actuador</i>	91
3.22.	<i>Diagrama del funcionamiento del sistema de muestreo</i>	92
3.23.	<i>Pseudo-código del software de control del condensador de aspiración</i>	93
3.24.	<i>Instrumento virtual para el control del condensador de aspiración</i>	94
3.25.	<i>Estructura de la red neuronal clasificadora propuesta</i>	99
3.26.	<i>Diagrama del sistema de identificación y cuantificación</i>	99
4.1.	<i>Superficie de control difuso de la presión aprendida por una red neuronal de base radial</i>	100
4.2.	<i>Punto de estabilización de la presión para cada mezcla de la tabla 3.7</i>	101
4.3.	<i>Respuesta transitoria del control de presión para los gases portadores a 1 lpm</i>	101
4.4.	<i>Caracterización mediante el monitor de referencia de diversas mezclas gaseosas</i>	102
4.5.	<i>Caracterización de una mezcla de 25% O₂ y 75% N₂O con desflurano</i>	103
4.6.	<i>Caracterización de una mezcla de 25% O₂ y 75% N₂O con enflurano</i>	104
4.7.	<i>Caracterización de una mezcla de 25% O₂ y 75% N₂O con halotano</i>	105
4.8.	<i>Caracterización de una mezcla de 25% O₂ y 75% N₂O con isoflurano</i>	106
4.9.	<i>Caracterización de una mezcla de 25% O₂ y 75% N₂O con sevoflurano</i>	107
4.10.	<i>Respuesta del sistema de medición de temperatura</i>	108
4.11.	<i>Respuesta del sistema actuador del control de temperatura</i>	108
4.12.	<i>Respuesta del control difuso de temperatura en un condensador sin flujo de aire</i>	109
4.13.	<i>Respuesta del control difuso de temperatura en un condensador con 2 lpm de aire</i>	109
4.14.	<i>Respuesta de un control on/off de temperatura en un condensador con 2 lpm de aire</i>	110
4.15.	<i>Repetibilidad de las 1395 diferentes curvas de la base de datos: error ordenado</i>	111
4.16.	<i>Curvas que presentan la mayor repetibilidad</i>	112
4.17.	<i>Curvas que presentan la menor repetibilidad</i>	112
4.18.	<i>Separación por porcentaje de agente anestésico</i>	113
4.19.	<i>Grupo de curvas que presentan la mínima separación por porcentaje de anestésico</i>	113
4.20.	<i>Grupo de curvas que presentan la máxima separación por porcentaje de anestésico</i>	114
4.21.	<i>Separación por agente anestésico</i>	114
4.22.	<i>Grupo de curvas que presentan la mínima separación por agente anestésico</i>	115
4.23.	<i>Grupo de curvas que presentan la máxima separación por agente anestésico</i>	115
4.24.	<i>Repetibilidad de las inversas para iones negativos: error ordenado</i>	116
4.25.	<i>Curva de densidad de movilidad iónica más repetible para iones negativos</i>	116

4.26.	<i>Curva de densidad de movilidad iónica menos repetible para iones negativos</i>	117
4.27.	<i>Repetibilidad de las inversas para iones positivos: error ordenado</i>	117
4.28.	<i>Curva de densidad de movilidad iónica más repetible para iones positivos</i>	118
4.29.	<i>Curva de densidad de movilidad iónica menos repetible para iones positivos</i>	118
4.30.	<i>Separación de grupos de inversas correspondientes a iones negativos por tipo de AA</i>	119
4.31.	<i>Conjunto de inversas para iones negativos con menor sensibilidad al tipo de AA</i>	119
4.32.	<i>Conjunto de inversas para iones negativos con mayor sensibilidad al tipo de AA</i>	120
4.33.	<i>Separación de grupos de inversas correspondientes a iones positivos por tipo de AA</i>	120
4.34.	<i>Conjunto de inversas para iones positivos con menor sensibilidad al tipo de AA</i>	121
4.35.	<i>Conjunto de inversas para iones positivos con mayor sensibilidad al tipo de AA</i>	121
4.36.	<i>Separación de grupos de inversas correspondientes a iones negativos por % de AA</i>	122
4.37.	<i>Conjunto de inversas para iones negativos con menor sensibilidad al % de AA</i>	122
4.38.	<i>Conjunto de inversas para iones negativos con mayor sensibilidad al % de AA</i>	123
4.39.	<i>Separación de grupos de inversas correspondientes a iones positivos por % de AA</i>	123
4.40.	<i>Conjunto de inversas para iones positivos con menor sensibilidad al % de AA</i>	124
4.41.	<i>Conjunto de inversas para iones positivos con mayor sensibilidad al % de AA</i>	124
4.42.	<i>Componentes principales calculados mediante PCA y agrupados por N₂</i>	125
4.43.	<i>Componentes principales calculados mediante PCA y agrupados por tipo de AA</i>	126
4.44.	<i>Componentes principales calculados mediante PCA y agrupados por N₂O</i>	127
4.45.	<i>Componentes principales calculados mediante PCA y agrupados por O₂</i>	128
4.46.	<i>Componentes principales calculados mediante PCA y agrupados por CO₂</i>	129
4.47.	<i>Componentes principales calculados mediante PCA y agrupados por porcentaje AA</i>	130
4.48.	<i>Resultado del análisis de componentes independientes (ICA) agrupado por porcentaje de N₂</i>	131
4.49.	<i>Resultado del análisis de discriminante lineal (LDA) agrupado por porcentaje de N₂</i>	132
4.50.	<i>Resultado del análisis mediante el algoritmo ISOMAP agrupado por porcentaje de N₂</i>	133
4.51.	<i>Análisis mediante el algoritmo de empotramiento localmente lineal (LLE) agrupado por N₂</i>	134
5.1.	<i>Porcentaje retenido de varianza de la base de datos para cada componente principal (PCA)</i>	148
A.1.	<i>Estudio de sensibilidad al flujo del gas diluyente</i>	157
A.2.	<i>Componentes principales para el estudio de sensibilidad al flujo del gas diluyente</i>	158
A.3.	<i>Estructura de la red neuronal clasificadora propuesta</i>	159
A.4.	<i>Orden de procesamiento de las redes neuronales sin información externa</i>	162
A.5.	<i>Orden de procesamiento de las redes neuronales con información externa de O₂ y CO₂</i>	163
A.6.	<i>Distribución de las curvas de la base de datos de acuerdo a su contenido de O₂</i>	164
A.7.	<i>Distribución de las curvas de la base de datos de acuerdo a su contenido de N₂O</i>	165
A.8.	<i>Distribución de las curvas de la base de datos de acuerdo a su contenido de CO₂</i>	166
A.9.	<i>Distribución de las curvas de la base de datos de acuerdo a su contenido de N₂</i>	166
A.10.	<i>Distribución de las curvas de la base de datos de acuerdo al agente anestésico</i>	168
A.11.	<i>Distribución de las curvas de la base de datos de acuerdo al porcentaje de anestésico</i>	169
A.12.	<i>Distribución de las inversas para iones negativos de acuerdo a su contenido de O₂</i>	171
A.13.	<i>Distribución de las inversas para iones positivos de acuerdo a su contenido de O₂</i>	172
A.14.	<i>Distribución de las inversas para iones negativos de acuerdo a su contenido de CO₂</i>	173
A.15.	<i>Distribución de las inversas para iones positivos de acuerdo a su contenido de CO₂</i>	174
A.16.	<i>Distribución de las inversas para iones negativos de acuerdo a su contenido de N₂O</i>	175
A.17.	<i>Distribución de las inversas para iones positivos de acuerdo a su contenido de N₂O</i>	176
A.18.	<i>Distribución de las inversas para iones negativos de acuerdo a su contenido de N₂</i>	177
A.19.	<i>Distribución de las inversas para iones positivos de acuerdo a su contenido de N₂</i>	179
A.20.	<i>Distribución de las inversas para iones negativos de acuerdo al tipo de agente</i>	181
A.21.	<i>Distribución de las inversas para iones positivos de acuerdo al tipo de agente</i>	182
A.22.	<i>Distribución de las inversas para iones negativos de acuerdo al porcentaje de AA</i>	183
A.23.	<i>Distribución de las inversas para iones positivos de acuerdo al porcentaje de AA</i>	185

I INTRODUCCIÓN Y OBJETIVOS

1.1 Introducción

La eliminación del dolor, aunque de obvia importancia, no es la función principal de la anestesiología moderna. El anestesiólogo se ocupa principalmente de mantener el equilibrio de las funciones vitales del paciente ante los efectos desequilibrantes de la cirugía, la enfermedad, y las intervenciones farmacológicas (incluyendo la anestesia). Este balance se logra a través de frecuentes mediciones y ajustes. El monitoreo rápido y continuo durante la intervención puede mejorar de manera importante la eficacia del procedimiento y satisfacer los requerimientos de la cirugía moderna [10], la cual requiere que los gases anestésicos inspirados y expirados sean constantemente monitoreados.

La razón más importante tras la necesidad de un monitoreo continuo en anestesia es la seguridad del paciente. El alto número de accidentes anestesiológicos ocurridos en tiempos anteriores y sus graves consecuencias se han reducido gracias a las nuevas tecnologías de monitoreo clínico. Por ello varias organizaciones médicas y gubernamentales en muchos países han promovido fuertes recomendaciones a favor del monitoreo continuo de gases para cada caso de administración de anestesia.

El problema principal es que las tecnologías existentes son demasiado caras y requieren mucho espacio y mantenimiento sofisticado, por lo que un gran número de salas quirúrgicas aún carecen de algún equipo de monitoreo adecuado. Este problema es aún más grave en hospitales con pocos recursos y en países subdesarrollados y de mediano desarrollo. Existe una clara necesidad de una nueva tecnología de medición de menor costo y pequeño tamaño que pueda incorporarse directamente al equipo de anestesia [23].

Con todas estas necesidades en mente, el objetivo de esta investigación es desarrollar un sistema alternativo de tamaño reducido, bajo costo, rápido y eficiente para monitorear (detectar y cuantificar) gases anestésicos pues, como se ha mencionado, el monitoreo de agentes anestésicos aumenta la seguridad de un paciente quirúrgico y estándares mínimos para este fin han demostrado una reducción en la tasa de mortalidad, accidentes y complicaciones relacionadas con anestesia [129].

Sacristán [102,103] ha desarrollado una *nueva tecnología* de medición para el análisis de gases. El instrumento - un *condensador de aspiración diferencial de primer orden con barrido de campo* - se basa en principios de espectroscopía de movilidad iónica [26] y métodos de aspiración [114], y es una variante del condensador de aspiración desarrollado en Finlandia por Puumalainen y Paakanen [65,85,91] creada específicamente para la medición de agentes anestésicos. El diseño compacto y robusto de este sensor permite su construcción utilizando procesos de fabricación de tarjetas impresas, lo cual representa una reducción importante de costos (a aproximadamente 1/10 del costo de los analizadores convencionales). La celda de medición es del tamaño de una caja de cerillos pequeña, sin partes móviles, ópticas o consumibles. No requiere de altos voltajes ni grandes campos magnéticos (se utilizan voltajes de unos cuantos volts) y las mediciones se realizan a presión barométrica (no se requiere un vacío).

Un modelo matemático sencillo pero funcional de la celda de medición del sensor ha sido presentado en forma discreta [111,112], el cual aclara las condiciones bajo las cuales deben realizarse las mediciones por medio de una computadora o microcontrolador para hacer posible la presentación y manipulación de resultados en dos diferentes dominios importantes: *densidad de corriente* y *densidad de movilidad iónica*. El modelo define así el diseño de condensadores de aspiración, tomando en cuenta las características del espacio de movilidad bajo estudio.

Rosenblatt y Sacristán han llevado a cabo experimentos preliminares [96-99] en los que se ha utilizado el condensador de aspiración para realizar mediciones que caracterizan diferentes mezclas de gases anestésicos en un gas portador de concentración variable, pero de manera reducida e incompleta, de mediana reproducibilidad, y sin tomar en cuenta las características

físicas y de muestreo que se requieren para un desempeño adecuado. A pesar de ello, se pudo demostrar que el sistema es sensible a los agentes anestésicos y gases auxiliares que se desean monitorear. Se pudo también observar que las señales o espectros obtenidos tienen una naturaleza compleja, por lo que se justifica un sistema automático de identificación y cuantificación basado en técnicas de inteligencia artificial. Además pudo demostrarse que los clasificadores basados en redes neuronales de retropropagación son capaces de identificar el agente anestésico en una mezcla. Este resultado se ha extendido y mejorado mediante técnicas de reducción dimensional para poder ser aplicado a nuestro sistema.

Para realizar el trabajo se construyó primero una máquina automática para la administración dosificada de gases y agentes anestésicos que nos permite crear cualquier mezcla para ser analizada después. A lo largo del proyecto se diseñó un nuevo dispositivo de mejorada repetibilidad en base al modelo y se desarrolló un sistema de control de temperatura y adquisición para el sensor, además de un sistema de procesamiento mejorado capaz de identificar y cuantificar los cinco agentes anestésicos inhalados de uso común (halotano, isoflurano, enflurano, sevoflurano y desflurano) así como el anestésico auxiliar N₂O. Para ello se obtuvieron muestras de diversas mezclas anestésicas de uso clínico (primero unas cuantas muestras para evaluar y retroalimentar el desempeño, y posteriormente una base de datos definitiva) a partir de las cuales se desarrolló el sistema de identificación, utilizando primero técnicas de reducción dimensional y posteriormente de inteligencia artificial (i.e. redes neuronales) que permitieron el aprendizaje y reconocimiento de patrones de manera automatizada en un ordenador personal.

En conjunto, este sistema representa el prototipo para un analizador de gases anestésicos de bajo costo y alta eficiencia basado en una PC de eventual uso clínico en la sala de operaciones.

1.2 Objetivos

En la investigación de la cual este trabajo forma parte, se ha tenido como objetivo global el desarrollo de un método clínico alternativo de bajo costo, rápido y eficiente para monitorear (detectar y cuantificar) gases anestésicos, basado en un nuevo sensor y método de medición por espectrometría de movilidad iónica. Nuestro objetivo en esta tesis ha sido diseñar, evaluar y calibrar un nuevo prototipo de este sensor, con todos los sistemas de soporte a su alrededor.

La hipótesis principal que en este proyecto se pretende verificar es la siguiente: "*Los espectros de movilidad iónica que son proporcionados por el sensor son reproducibles, característicos y particulares para diferentes mezclas de gases anestésico/portador*", con la siguiente sub-hipótesis: "*Es posible diseñar un sistema de reconocimiento de patrones que permita distinguir y cuantificar diferentes mezclas de gases anestésico/portador*".

Para lograr nuestro objetivo y comprobar las hipótesis propuestas es necesario cumplir los siguientes objetivos particulares:

- Diseñar y construir un sistema automatizado de mezcla de gases y agentes anestésicos.
- Diseñar un prototipo basado en el condensador de aspiración de primer orden con barrido de campo que presente características idóneas para su aplicación clínica (éstas incluyen características físicas, esquemas de control y estrategia de muestreo).
- Diseñar y construir un sistema automatizado de control de temperatura y campo eléctrico del condensador que además permita la captura y almacenamiento de los datos.
- Obtención mediante el sensor de todos los espectros posibles correspondientes a diferentes mezclas de agente anestésico/gas portador para uso clínico.
- Demostrar que cada espectro es reproducible, único y característico para cada mezcla gaseosa en particular.
- Diseñar un sistema de identificación certera de los componentes de la mezcla gaseosa y sus correspondientes concentraciones relativas.

A continuación se detallan las actividades que se plantean para cubrir cada objetivo:

1. Instalar y evaluar un sistema automático capaz de generar cualquier mezcla de O_2 , CO_2 , N_2O , N_2 y vapores de agente anestésico (halotano, isoflurano, enflurano, sevoflurano y desflurano) bajo el control de un ordenador. El sistema prevee el uso de un monitor de agentes anestésicos y gases respiratorios calibrado que proporcione un análisis preciso de referencia para cada muestra generada.
2. Diseñar y construir un condensador de aspiración prototipo basado en el modelo matemático descrito por Solis [111,112].
3. Diseñar y construir un prototipo de evaluación basado en una PC para la posterior evaluación y refinación del sensor de movilidad iónica, tomando en cuenta el modelo matemático.
4. Utilizar el sistema experimental y el prototipo de evaluación para obtener muestras de espectros de movilidad iónica que permitan evaluar y obtener retroalimentación acerca del diseño del sistema.
5. Utilizar el sistema experimental y el prototipo de evaluación para obtener una base de datos definitiva, cubriendo de forma discreta el espacio muestral de trabajo clínico en el que se espera se desempeñe este sensor.
6. Definir un procedimiento alternativo para encontrar las inversas de las curvas almacenadas en la base de datos mediante la inversión de la ecuación principal del modelo, la ecuación de Tammet, identificada como perteneciente a la familia de ecuaciones integrales de Fredholm del primer tipo [89], las cuales presentan una naturaleza mal condicionada y requieren por ello de algún tipo de regularización para su adecuada resolución.
7. Diseñar y evaluar un sistema de reconocimiento basado en software alrededor de un núcleo de redes neuronales que permita identificar y cuantificar cada espectro de la base de datos. Esto incluye el análisis previo que debe realizarse con los datos para encontrar esquemas adecuados de pre-procesamiento que faciliten su identificación.
8. Evaluar y caracterizar el desempeño del sistema completo desarrollado en los puntos anteriores.

II ANTECEDENTES E IMPORTANCIA DE LA INVESTIGACIÓN

2.1 Administración de la anestesia

El sistema de administración de anestesia consiste generalmente en una máquina de anestesia, un circuito de respiración para el paciente, un ventilador y un equipo de vías aéreas. La máquina consiste a su vez de una unidad de suministro de gases (oxígeno / óxido nitroso) y al menos un vaporizador de agente anestésico primario. El circuito de respiración consta de un lazo cerrado de tubería, que a su vez contiene dos válvulas de respiración unidireccional y una válvula limitadora de presión ajustable (APL), un absorbedor de CO₂, una válvula para permitir la salida de gases en exceso, un humidificador (opcional) y un ventilador manual o automático. El equipo para el manejo de vías aéreas incluye una máscara o un tubo endotraqueal, los cuales son la interfase del paciente al circuito.

Aunque este sistema es simple y confiable, siempre puede haber problemas que afecten el desempeño y la seguridad. En la actualidad estos riesgos se reducen mediante el monitoreo clínico, y la tendencia hacia el futuro indica que el sistema se automatizará e integrará con el monitoreo, simplificando lo más posible su diseño y operación, reduciendo así tamaño y costo.

El trabajo del anesestesiólogo, por otro lado, involucra el mantenimiento del equilibrio de las funciones vitales del organismo ante los efectos traumáticos de la operación quirúrgica, infecciones e intervención farmacológica (los agentes anestésicos incluidos). En vista de ello, y tomando en cuenta la discusión presentada, es evidente la necesidad de un monitoreo constante de los agentes anestésicos por seguridad del paciente, y no solo de éste, sino también del personal clínico que de alguna u otra manera está expuesto a pequeñas pero acumulativas dosis de anestésicos halogenados que pueden llegar a causar daños hepáticos por exposición crónica. Además de aumentar la seguridad, el monitoreo permite también la mejor regulación de la anestesia.

Debido al alto costo del monitoreo y de otros gastos en general, este servicio no se presta para todos los pacientes. Este problema es alarmantemente mayor en los países subdesarrollados, en donde no existen estándares de monitoreo y los hospitales tienen un presupuesto mucho menor que en otros países. Existe una gran necesidad de tecnología y equipo para la medición de gases que sea pequeño, eficiente, preciso y constante, para permitir el monitoreo de toda actividad anesthesiológica.

2.1.1 Administración automática de anestesia

La máquina de anestesia es un sistema manual, manejado por un anesestesiólogo, que permite realizar una mezcla de gases (generalmente oxígeno y óxido nitroso) en una proporción deseada, a la cual se le añade una pequeña concentración variable de un vapor anestésico. La mezcla resultante es entregada por la máquina a través de un circuito respiratorio y un equipo de vías aéreas al paciente.

El diseño de estos equipos ha mantenido su forma básica a través del tiempo y se ha adaptado a la nueva tecnología, lo que ha permitido una cierta estandarización. Sin embargo, existen numerosas aplicaciones que requieren composiciones conocidas y precisas de gases mezcladas en forma automática principalmente para propósitos de investigación.

La complejidad del proceso de mezcla de gases con una cierta composición ha resultado en la aparición de diversas soluciones al problema de la generación automática de ésta, aunque no todas se aplican en el campo de anestesia. La primera, el método más utilizado, es la *preparación por presiones parciales*. Este es el método más impreciso y sencillo, aunque requiere algunos cálculos matemáticos, y toma en cuenta las propiedades moleculares de cada gas. Otro

método existente se conoce como *Certificación Primaria Estándard* o simplemente *método de medición de masas*, y es muy preciso.

Existe también un método basado en la *proporción de volúmenes*, y se reporta como el más preciso y lineal de todos, pero no es continuo, puede ocupar un gran espacio y resultar caro. Por otro lado, existe un método de mezcla por *proporción de flujos* que se basa en el principio de combinación de flujos fijos de diversos gases. La constancia de dichos flujos depende de la regulación de la presión de cada fuente. Debido a las limitaciones de precisión inherentes a los reguladores, este método puede ser menos exacto que el anteriormente descrito, pero puede implementarse en forma compacta y, mediante un control digital retroalimentado, puede mejorarse su precisión.

2.1.1.1 Vaporizadores de agentes anestésicos

Los vaporizadores de agentes anestésicos halogenados son aparatos de precisión que permiten regular la mezcla del agente en un gas portador. Ya sea para un equipo manual o automático, una máquina de anestesia debe contar con uno de estos vaporizadores.

Existen básicamente dos tipos de sistemas en los vaporizadores: *de bypass variable* y *de flujo medido*. En el primer sistema se puede seleccionar la concentración de anestésico mediante una perilla graduada, la cual debe estar calibrada a la temperatura y presión atmosférica de trabajo. Existen vaporizadores específicos para cada tipo de agente halogenado, ya que la potencia y otras características de cada uno son diferentes. El gas que entra al vaporizador se divide en una proporción determinada por la perilla de concentración. Uno de los flujos se mantiene puro mientras el otro se satura de agente anestésico, el cual se encuentra en su estado de vapor justamente sobre la superficie del agente en estado líquido. Posteriormente los dos flujos se vuelven a reunir, formando el flujo de gas portador con un porcentaje dado de agente anestésico. Las variaciones en el flujo del gas portador no afectan considerablemente la concentración del anestésico a la salida del vaporizador ya que afectan por igual a ambos flujos. No sucede así al cambiar el tipo de gas portador. Al variar el gas puede cambiar considerablemente la concentración de agente a la salida. Lo mismo sucede si existen variaciones en la presión atmosférica o la temperatura (excepto en el caso de vaporizadores que mantienen la presión y temperatura internas a un valor fijo mediante un controlador integrado). En la figura 2.1.a se muestra el esquema de un vaporizador de *bypass variable*.

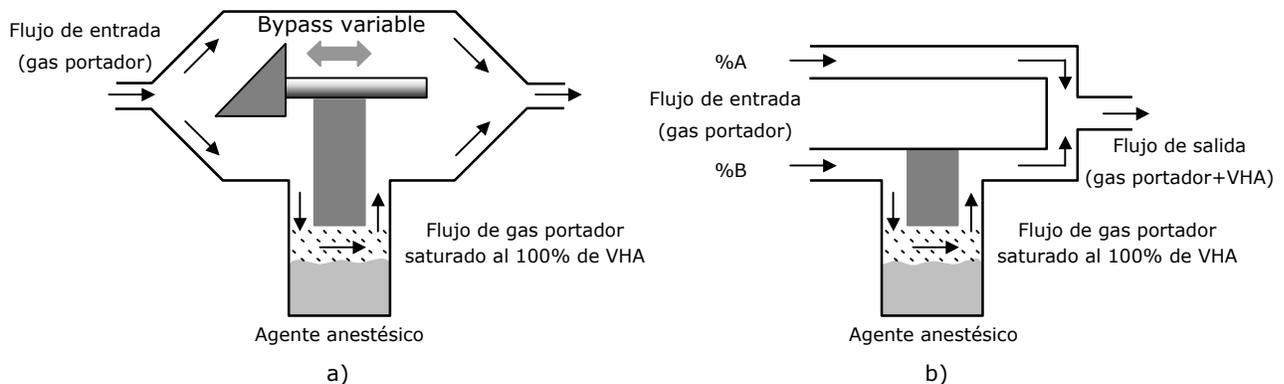


Figura 2.1. Funcionamiento de los vaporizadores a) de *bypass variable* y b) de *flujo medido*.

El vaporizador de flujo medido mostrado en la figura 2.1.b. funciona de forma similar al de *bypass variable*, pero no existe una perilla de concentración calibrada. El usuario mismo tiene que suministrar por algún otro medio un flujo diluyente (%A) y otro que se sature con agente anestésico (%B) en las proporciones correctas para que, una vez juntos, formen el gas con la concentración de anestésico deseada. Esta configuración se puede calibrar de acuerdo a las condiciones particulares de presión y temperatura.

2.2 Monitoreo en el quirófano

Cuando se introdujo la anestesia poco después de 1840, pronto surgió el reconocimiento de que los agentes anestésicos interfieren con la estabilidad cardiovascular y respiratoria, además de producir insensibilidad o letargo. Para proteger al paciente de complicaciones producidas por el proceso de inducción y cualquier efecto secundario producido por la anestesia y el proceso operatorio, el anestesista observaba el color del paciente, le tomaba el pulso y seguía de cerca su respiración [10]. Tardó aproximadamente medio siglo el poder monitorear la presión sanguínea de un paciente bajo anestesia, y solo después de la segunda guerra mundial el electrocardiograma hizo su aparición en los quirófanos.

Desde entonces han sido introducidos nuevos instrumentos al arsenal del anestesista, logrando con ellos hacer posibles muchos procedimientos quirúrgicos que sin instrumentos se consideraban imposibles en los días anteriores a la anestesiología moderna. En la tabla 2.1 se muestran algunos sistemas monitoreados y los instrumentos utilizados.

Función monitoreada	Instrumento o monitor	Variable de interés
Mezcla apropiada en el sistema respiratorio	Analizador de oxígeno Analizador transcutáneo de O ₂ Oxímetro de pulso	Oxígeno inspirado Oxígeno en la sangre Oxígeno en la sangre
Integridad del sistema respiratorio	Espirómetro Medidor de presión Capnógrafo	Volumen Presión CO ₂
Ventilación pulmonar adecuada	Capnógrafo Analizador de gases sanguíneos Analizador de CO ₂ transcutáneo Espirómetro Estetoscopio	CO ₂ alveolar CO ₂ sanguíneo CO ₂ sanguíneo Volumen de respiración Volumen de respiración
Circulación adecuada	Electrocardiograma Presión arterial Presión venosa Estetoscopio Ecocardiograma Gasto cardíaco	Bombeo y sistema circulatorio Bombeo y sistema circulatorio Bombeo y sistema circulatorio Bombeo Bombeo y sistema circulatorio Bombeo y sistema circulatorio
Función cerebral adecuada	Electroencefalograma Potenciales evocados Evaluación clínica	Función eléctrica Función eléctrica Función fisiológica
Función renal adecuada	Evacuación de orina Análisis de electrolitos	Volumen Función fisiológica

Tabla 2.1. Algunas funciones monitoreadas e instrumentos utilizados durante la anestesia.

En general, el mayor interés del monitoreo se centra en aquellos sistemas que pueden sufrir mayor daño por insuficiencia de circulación y oxigenación, y menos en la profundidad de la anestesia. Esto refleja la idea de que el paciente puede morir o sufrir daño cerebral o del corazón no porque la anestesia profunda sea peligrosa en sí, sino porque los efectos secundarios de la anestesia pueden afectar la ventilación y la circulación y, consecuentemente, la oxigenación del cerebro, corazón y riñones, los órganos más vulnerables cuando ocurre una calamidad anestesiológica. Sin embargo, en años recientes se ha demostrado que el monitoreo de agentes anestésicos aumenta la seguridad para un paciente quirúrgico y estándares mínimos para este fin han generado una reducción en la tasa de mortalidad relacionada con la anestesia y las complicaciones operatorias relacionadas con su utilización [129].

2.2.1 Monitoreo de la ventilación y gases

Durante la anestesia general la mayoría de los pacientes son paralizados con medicamentos disruptores de la función neuromuscular, y por tanto no pueden respirar por sí mismos, dependiendo así de una ventilación mecánica. Es entonces importante monitorear esta ventilación ya que pueden presentarse situaciones en las que los sistemas mecánicos dejan de funcionar, se obstruyen o desconectan, o simplemente no satisfacen las necesidades respiratorias del paciente, sobre o subventilándolo. Esto se refleja directamente en el sistema respiratorio cuando se presentan fluctuaciones atípicas de presión, volúmenes inapropiados de gas exhalado, o ausencia de CO₂ en éste. Entonces, para monitorear la ventilación, los gases de los flujos inspiratorio y exhalatorio deben ser medidos. Los más importantes de éstos son el oxígeno, el dióxido de carbono, los gases y vapores anestésicos, y el nitrógeno. Casi todos los pacientes que requieren anestesia general reciben dosis cuidadosamente administradas de anestésicos gaseosos incluyendo óxido nitroso, desflurano, enflurano, halotano, isoflurano o sevoflurano.

2.2.1.1 Monitoreo de oxígeno

La importancia de una suficiencia de oxígeno es obvia. La primera línea de defensa contra la hipoxemia (deficiencia en la oxigenación sanguínea) es la oxigenación de la mezcla de gases. Por otro lado, una hiperoxigenación puede provocar problemas como sensación (conciencia), daño pulmonar y ocular, y fuego en los conductos de ventilación si se está operando con láser. Además, el conocimiento del nivel de oxígeno exhalado permite estimar la tasa metabólica del paciente, su consumo de oxígeno, su gasto cardíaco, y puede ayudar en el diagnóstico de la hipertermia maligna. Una diferencia positiva alta entre el oxígeno inspirado y el existente al final de la respiración es un indicador sensible de hipoventilación. El uso del análisis de oxígeno puede utilizarse para detectar desconexiones en el sistema de respiración, pero no debe dependerse únicamente de él para este propósito. La concentración de óxido nitroso, por otro lado, puede estimarse en ocasiones (dependiendo de la mezcla gaseosa suministrada) a partir de la concentración de oxígeno.

Los niveles de oxígeno pueden determinarse mediante espectrometría de masa (sección 2.3.2), difracción Raman (sección 2.3.4), análisis electroquímico o análisis paramagnético. El análisis electroquímico puede medir las concentraciones promedio en los flujos inspiratorio y exhalatorio. Los otros tres métodos tienen una respuesta lo suficientemente rápida para poder medir los niveles inspirados y del final de la respiración. Los análisis electroquímicos y paramagnéticos miden únicamente oxígeno mientras que la espectrometría de masa y la espectrometría Raman pueden medir además otros gases.

2.2.1.2 Monitoreo de dióxido de carbono

El análisis de CO₂ representa una forma adecuada de comprobar la ventilación y puede detectar muchos problemas relacionados con el equipo o con el mismo paciente que otros monitores pueden no detectar o hacerlo con insuficiente rapidez, poniendo en peligro la integridad del paciente.

La capnometría se refiere a la medición y visualización del nivel de dióxido de carbono durante el ciclo respiratorio. El capnógrafo es el aparato que realiza esta medición. El nivel de CO₂ puede reportarse ya sea en porcentaje o en presión parcial. Se puede desplegar de forma continua o en valor pico (generalmente al final de cada respiración). Puede, además, mostrar el nivel mínimo inspiratorio.

El ciclo respiratorio (es decir, inspiración/exhalación) se define en términos de la medición de CO₂ de manera que los valores al final de la respiración de otros gases depende de ésta. El dióxido de carbono se forma en las células corporales como un producto del metabolismo, es transportado por la sangre, y eliminado a través de los pulmones por ventilación de los alveolos, y por ello el monitoreo de este gas proporciona información sobre la tasa, frecuencia y profundidad

de la respiración, y es un indicador de la tasa metabólica del organismo y la profundidad de la anestesia.

Las causas de un incremento del CO_2 incluyen: aumento de la temperatura corporal, escalofríos, convulsiones, producción excesiva de quetocolaminas, administración de sangre o bicarbonato, desprendimiento de una pinza arterial o torniquete, presencia de glucosa en el fluido intravenoso, hiperalimentación parenteral (alimentación por una vía no alimentaria), dióxido de carbono utilizado para distender la cavidad peritoneal durante una laparoscopia o una articulación durante una artroscopia, hipoventilación y obstrucción de las vías aéreas superiores, bloqueo en las tuberías del ventilador, falla en las válvulas, y un absorbedor de CO_2 inexistente o saturado. Por otro lado, el CO_2 disminuye con bajas en la temperatura, aumento en la relajación muscular, una mayor profundidad de la anestesia, decremento del gasto cardíaco, circulación periférica dañada, una obstrucción pulmonar, hiperventilación, apnea (falta de respiración temporal), desconexión o mal funcionamiento del ventilador, así como fugas en las tuberías.

De gran importancia es la detección temprana mediante el monitoreo del síndrome de hipertermia maligna, que se refleja por un incremento masivo del dióxido de carbono tiempo antes del aumento de la temperatura. Otro problema que permite detectar el capnograma es la acidosis respiratoria, o retención de dióxido de carbono en el cuerpo.

El CO_2 exhalado es un mejor indicador de la presencia de la circulación que el ECG, el pulso o la presión sanguínea. La eficacia de procedimientos de resucitación puede decidirse mediante la capnometría.

2.2.1.2.1 El capnograma

La habilidad de observar e interpretar las formas de onda del nivel de CO_2 exhalado proporcionadas por un capnógrafo permite, además de diagnosticar problemas, determinar los ciclos de la respiración, importante para aquel monitoreo que deba realizarse respiración a respiración, lo cual significa un monitoreo mas preciso para la inducción controlada en tiempo real. La onda debe examinarse sistemáticamente identificando en ella la amplitud, frecuencia, ritmo, línea de base y forma. La amplitud depende del nivel de dióxido de carbono al final de la respiración. La frecuencia depende de la tasa respiratoria. El ritmo depende del estado del ventilador. La línea de base debe ser cero (a menos de que se agregue CO_2 de manera intencional a la mezcla de gases respiratorios).

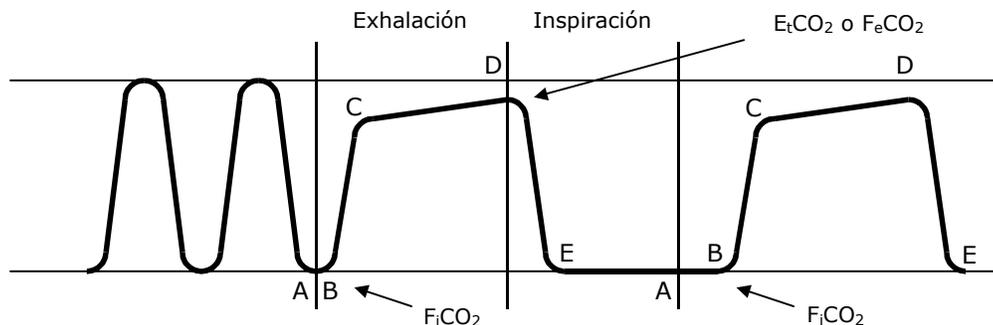


Figura 2.2. Forma de onda normal para CO_2 . A la izquierda se muestra una grabación lenta. Las curvas son delgadas y largas y se encuentran juntas. Todos los picos tienen la misma amplitud. A la derecha se muestran dos formas de onda individuales, cada una un único ciclo exhalación / inhalación. AB es la exhalación de gas libre de CO_2 del espacio muerto al principio de la exhalación. BC representa el vaciado de las vías aéreas y el comienzo del vaciado de los alveolos. CD muestra la meseta exhalatoria o alveolar. El punto D muestra la mejor aproximación al nivel de CO_2 alveolar. DE representa la caída abrupta de dióxido de carbono que ocurre cuando el paciente inspira gas libre de CO_2 . EA muestra el final del ciclo durante el cual el nivel de CO_2 se mantiene en cero.

La forma de onda normal se ilustra en la figura 2.2. Únicamente una forma de onda se considera como normal. La primera fase de la respiración comienza en el punto A (fracción inspirada de CO_2 , $F_i\text{CO}_2$). Durante esta fase el nivel de CO_2 al final de la respiración es cero. El gas exhalado es gas de espacio muerto del tubo traqueal, bronquios y bronquiolos, y tiene el mismo nivel de CO_2 que la porción de la inhalación anterior.

La segunda fase comienza en el punto B y continúa hasta el punto C. Conforme el gas alveolar comienza a ser exhalado el nivel de dióxido de carbono aumenta rápidamente (BC). El gas exhalado durante esta fase es una combinación de gas alveolar y de gas de espacio muerto.

La tercera fase de la exhalación comienza en el punto C y continúa hasta justo antes del punto D. Conforme se exhala el dióxido de carbono de los alveolos, se alcanza un nivel (CD) que nunca es absolutamente plano. La última porción del gas exhalado, identificado por el punto D (fracción expirada de CO_2 , $F_e\text{CO}_2$, o *end tidal* CO_2 , $E_t\text{CO}_2$), se denomina *punto final de la respiración*. El nivel de CO_2 se encuentra al máximo en este punto. En individuos normales este punto se encuentra de 5% a 5.5%, o 35 a 40 torr. Es en esta fase donde se encuentra la mayor indicación de si existe daño aéreo. Una pendiente exagerada indica una obstrucción del flujo. El nivel de gas en el punto final de la respiración es el más indicativo del nivel de gas en los alveolos. Conforme el paciente inhala, el nivel de dióxido de carbono disminuye abruptamente a cero (DE) y ahí permanece hasta la próxima exhalación.

2.2.1.3 Monitoreo de óxido nitroso

El óxido nitroso es un anestésico secundario empleado para disminuir la cantidad de anestésico primario utilizado, generalmente más potente y caro, y su monitoreo puede mostrar si los flujómetros funcionan de forma apropiada. Al final de una operación la eliminación del N_2O previene la hipoxia por difusión en la cual el óxido nitroso ocupa el lugar del oxígeno. Se puede disminuir el nivel de óxido nitroso simplemente al permitir la respiración de aire limpio. El óxido nitroso puede medirse utilizando espectrometría de infrarrojo, de masa o de Raman.

2.2.1.4 Monitoreo de nitrógeno

Un aspecto importante del monitoreo de nitrógeno es el asegurar una desnitrogenación adecuada previa a la inducción anestésica para que ésta sea más rápida. Esto es de importancia especial en pacientes pediátricos y en pacientes con problemas pulmonares. Es de ayuda también en la detección de embolismos (si hay sangre expuesta ésta puede producir coágulos y causar una embolia). Por otro lado, no siempre es deseable la ausencia del nitrógeno y en algunos casos se utiliza como gas de relleno. El N_2 puede detectarse mediante espectrometría de masa o Raman, o puede determinarse por exclusión si éste se utiliza como gas de relleno. Es decir, una vez determinada la cantidad de otros gases presentes, lo que resta debe ser nitrógeno (con concentraciones mínimas de otros gases que afectan de manera despreciable este resultado).

2.2.1.5 Monitoreo de agentes anestésicos volátiles

La medición de estos gases se está convirtiendo en práctica común. Una ventaja de hacerlo reside en la capacidad resultante de comprobar la precisión de los vaporizadores. Además, se puede detectar un agente incorrecto, el uso de más de un agente a la vez (lo cual potencia su efecto, algo indeseable y peligroso), permite determinar flujos fuera del rango para el cual se calibra el vaporizador, indica cuando existe una falla en el suministro, o cuando el vaporizador se encuentra vacío. El aspecto más importante radica en la medición de fracciones inspiradas y expiradas de agente anestésico para estimar la proporción de éste que se encuentra presente en el cuerpo. La fracción expirada de agente anestésico representa la mejor aproximación a la concentración de éste que se encuentra presente en la circulación alveolar, y con ella puede controlarse con mayor precisión la dosis y profundidad de la anestesia.

2.2.2 Requerimientos clínicos de un monitor de gases de anestesia [10]

Los gases a ser analizados son tomados directamente del aliento del paciente en un sistema semi-cerrado, por lo cual el volumen de la muestra debe ser lo más pequeño posible. En pacientes adultos se acepta clínicamente un flujo de muestreo de 200 ml/min. Para pacientes pediátricos el flujo de muestreo debe ser menor a 80 cc/min. Además, si el monitoreo ha de ser continuo, o al menos de respiración a respiración para permitir un control más fino del proceso de anestesia, el tiempo entre muestras debe ser menor a 200 ms. La muestra es tomada bajo distintas condiciones de temperatura, presión y concentraciones de gases y vapor de agua, por lo que todos estos efectos deben ser tomados en cuenta, controlados y/o compensados para no afectar la precisión del sistema. El exceso de vapor de agua, por ejemplo, debe ser eliminado para evitar su condensación.

El analizador / monitor de anestesia debe, idealmente, ser capaz de reconocer y medir la concentración de los cinco agentes halogenados (halotano, isofluorano, enflurano, desflurano y sevofluorano) en muestras de gas exhalado e inspirado. La precisión que se requiere es de $\pm 0.2\% \text{Vol}$, sobre un rango de $0.1\% \text{Vol}$ a $5.0\% \text{Vol}$ de concentración, excepto en el caso del enflurano que puede llegar hasta $7\% \text{Vol}$, y el desflurano que puede llegar hasta $18\% \text{Vol}$.

Otros gases que se pueden medir y que, aunque no es indispensable, sería útil poder reconocer y cuantificar son: O_2 , que mantiene el metabolismo, CO_2 , que es un producto del metabolismo y N_2O , un anestésico auxiliar.

2.3 Tecnologías de medición

2.3.1 Cromatografía de gases

El término de *cromatografía de gases* se usa para describir el proceso por el cual mezclas complejas son separadas por partición selectiva entre un gas en estado móvil y un gas, líquido o sólido en estado estacionario [131]. En algunas ocasiones, como en el caso que nos ocupa, los compuestos que se separan son gases, pero también pueden ser vapores obtenidos de muestras sólidas o líquidas.

El equipo que se utiliza generalmente para realizar la cromatografía de gases consiste de una cabeza de inyección a alta temperatura, una columna (o varias de ellas, ya sea en serie o paralelo), y un elemento que mide las concentraciones de los componentes separados del gas. La temperatura de la columna debe ser controlada por un termostato y puede mantenerse constante durante el análisis, o programada de forma que se permita la separación de mezclas con puntos de ebullición más altos.

La muestra entra por un diafragma a la cabeza de inyección (ver figura 2.3) y es llevada hasta una columna en donde los componentes de la mezcla se separan por partición selectiva o adsorción e, idealmente, se detectan por separado cuando salen. La salida del detector se recoge ya sea en forma analógica o digital, y se obtiene una gráfica contra el tiempo. En ella se aprecian varios picos, cada uno correspondiente a un componente (o componentes no separados) de la mezcla, el área bajo cada uno siendo proporcional a la concentración de cada elemento presente, por lo que el análisis sirve para una identificación cuantitativa además de poder separar los distintos constituyentes. El tiempo que transcurre desde que la muestra entra al sistema hasta que se obtiene un pico máximo en la gráfica se conoce como tiempo de retención. Este tiempo varía con la temperatura, el flujo del gas y otras variables. En la gráfica o cromatograma, los picos o áreas bajo ellos proporcionan información cuantitativa, mientras que los tiempos de retención nos hablan de información cualitativa.

El tipo de detector utilizado en el sistema varía de acuerdo a la aplicación, pero en el caso de análisis de componentes y para la mayoría de los trabajos en bioquímica se utilizan *ionizadores de flama*, *detectores de argón* o *detectores de captura de electrones*. El detector de ionización de flama responde a concentraciones tan pequeñas como 10^{-11} moles de cada compuesto de la mezcla, es bastante sensible a compuestos orgánicos y tiene un amplio rango dinámico. Es

insensible al agua y a otros compuestos inorgánicos. El detector de captura de electrones es utilizado para detectar hidrocarburos clorados y otros compuestos con un alto grado de selectividad.

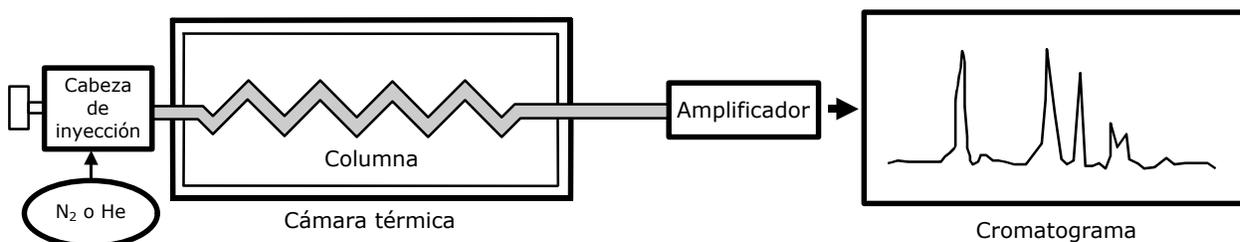


Figura 2.3. Esquema de un cromatógrafo de gases.

Como hemos dicho, tiene la ventaja de ser un sistema de alta sensibilidad, pero su velocidad de respuesta no es suficiente debido al tiempo que tarda el gas recorriendo las columnas, lo cual lo hace un sistema no apto para el monitoreo clínico, el cual requiere velocidad y continuidad. Además, un aparato de este tipo puede ser bastante complejo y de alto costo.

2.3.2 Espectrometría de masa

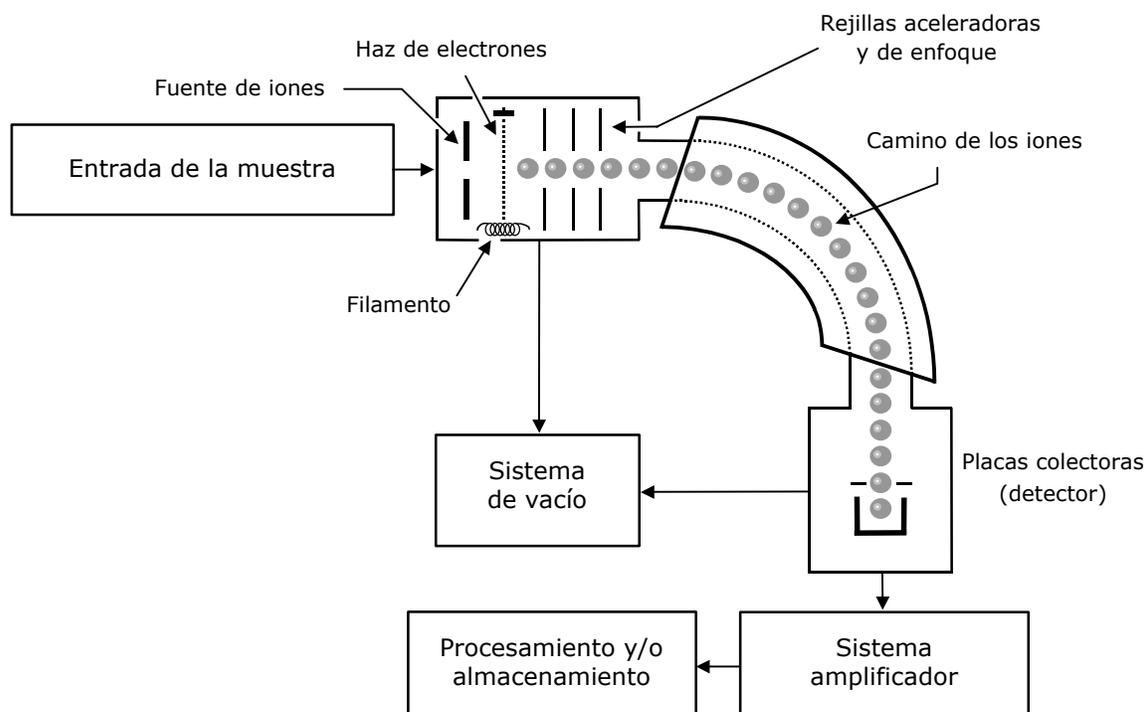


Figura 2.4. Elementos básicos de un espectrómetro de masa.

El espectrómetro de masa, en sus diversas configuraciones, es un analizador cuantitativo y cualitativo para la mayoría de los componentes en todo tipo de muestras, ya sean gases líquidos o sólidos, con algunas limitaciones de volatilidad [125]. Un análisis completo puede obtenerse en un rango que puede ser tan pequeño como algunos milisegundos o tan largo como algunos minutos, con una precisión de $\pm 1.0\%$. El rango que puede medir va desde algunas partes por millón

de un compuesto, hasta concentraciones del 100%. Gracias a éstas y otras características, la espectrometría de masa se convirtió en la primera tecnología clínica que proporcionó un análisis completo y preciso de todos los gases y agentes utilizados en la anestesia, y se convirtió en el estándar contra el cual todos los demás métodos de monitoreo son comparados.

El esquema general de un espectrómetro de masa se muestra en la figura 2.4. El gas a ser analizado se introduce a una cámara de vacío, en la cual se ionizan las moléculas por medio de un bombardeo electrónico a partir de un filamento caliente (existen otros métodos también, como por ejemplo la aplicación de un fuerte campo electrostático, la reacción con otro gas ionizado, el láser, la fotoionización, etc.). La ionización generalmente viene acompañada de una fragmentación parcial de las moléculas. El patrón de fragmentación es constante para una molécula específica bajo las mismas condiciones. La fragmentación complica los cálculos posteriores pero permite distinguir entre isómeros para obtener información sobre la estructura molecular [125].

Los iones así obtenidos son entonces enfocados y acelerados por unas rejillas. Posteriormente se separan de acuerdo a su masa a través de un campo eléctrico que induce a los iones a seguir una trayectoria curva de radios proporcionales a sus masas y a sus cargas. Existen varias geometrías para esta etapa, pero la que se muestra es bastante común e ilustrativa. Otros métodos que existen para la separación incluyen la combinación de campos electrostáticos, campos eléctricos alternantes o rotatorios (filtro de cuadrupolo, figura 2.5), radio-frecuencia, etc.

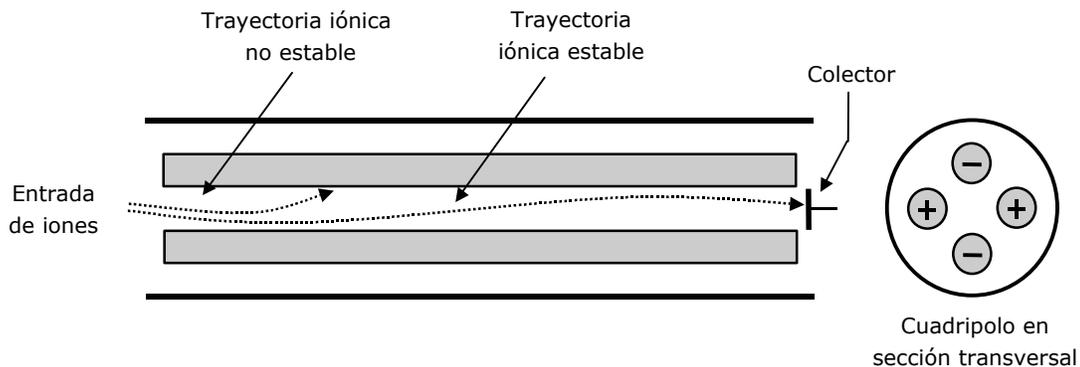


Figura 2.5. Filtro de cuadrupolo. Su uso es muy común en sistemas de monitoreo anestésico. Su nombre deriva de las cuatro barras conductoras dispuestas simétricamente. Todos los iones, excepto aquellos de una relación masa-carga seleccionada, se salen de trayectoria y se estrellan contra las barras, descargándose. El número de iones que alcanzan el colector al otro extremo es proporcional al porcentaje del gas seleccionado existente en la muestra.

Los iones separados se detectan en las placas colectoras, en un arreglo geométricamente favorable para la captura de iones de una cierta relación masa-carga. El enorme volumen de información que arrojan muchos de los espectrómetros de masa fabricados hoy en día hacen necesario un posterior procesamiento de datos, para aprovechar a fondo la capacidad del aparato.

El costo de un espectrómetro de masa de uso específico para monitoreo de gases clínicos, aunque no tanto como el de aquellos que se utilizan en otro tipo de análisis, es bastante alto debido a sus componentes, principalmente sus cámaras de vacío y los altos campos eléctricos y magnéticos que debe generar. Esto, aunado al gran espacio que ocupa (en años recientes y conforme avanza la tecnología su tamaño se ha reducido), hacen que en ocasiones este aparato se utilice en forma compartida o multiplexada, para aprovecharlo mejor (figura 2.6).

Una desventaja de la espectrometría de masa multiplexada recae en el relativamente largo tiempo de respuesta debido al tiempo de flujo por la tubería del aparato, y debido a ello, la falta de continuidad en el monitoreo durante el muestreo [95]. Sin embargo, y como hemos mencionado, la principal desventaja para cualquier espectrómetro de masa es el costo. No todos

los centros médicos pueden tener uno de estos aparatos, ni darles mantenimiento adecuado. Por ejemplo, los espectrómetros de masa compartidos requieren un buen mantenimiento de la plomería y el alambrado de la estación multiplexora central, ya que una falla afectará a todas las salas o pacientes monitoreados.

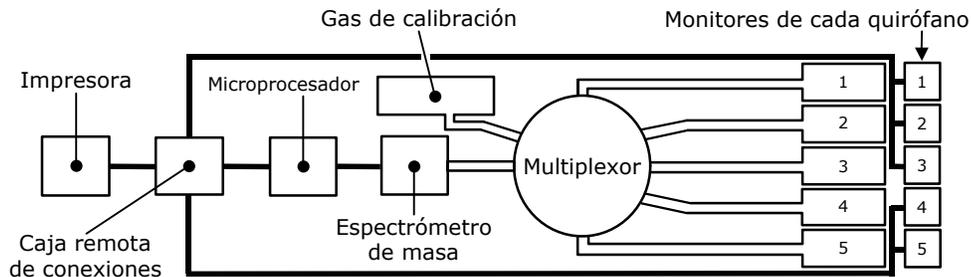


Figura 2.6. Espectrómetro de masa compartido. Continuamente se toman muestras de cada paciente mediante un multiplexor y se conducen al espectrómetro. Los resultados se procesan por separado y se muestran para cada paciente. La impresora en este sistema es opcional.

Debido a esto, se han desarrollado otros sistemas de monitoreo de anestesia bastante útiles y de menor costo, utilizando tecnologías alternativas. Entre ellas se encuentran la espectrometría por efecto Raman, el análisis por infrarrojo, la adsorción piezoeléctrica, la espectroscopía de movilidad de iones y, recientemente, los condensadores de aspiración.

2.3.3 Espectrometría por Radiación Infrarroja

La región del espectro electromagnético comprendida entre 0.7 y 1000 micrómetros de longitud de onda se denomina como el *infrarrojo*. La radiación por debajo de estas longitudes de onda se denomina *región visible*, y por encima, *microondas* (aunque los límites son un poco arbitrarios). La región infrarroja se divide generalmente en tres sub-regiones: la *región infrarroja cercana* (0.7 a 1.5 micrómetros), la *región infrarroja intermedia* (1.5 a 20 micrómetros), y la *región infrarroja lejana* (20 a 1000 micrómetros).

La radiación infrarroja se produce principalmente por la emisión de materiales sólidos y líquidos excitados térmicamente, y por emisión molecular en los gases. La emisión gaseosa de radiación infrarroja difiere de la emisión en sólidos o líquidos puesto que la primera produce un espectro discreto compuesto de bandas, mientras que la segunda produce un espectro con una distribución energética continua.

La propagación de la radiación infrarroja en un gas, así como en los demás materiales, depende en general de la absorción, la cual varía con la longitud de onda. Las vibraciones y rotaciones moleculares en los gases, relacionadas con la emisión de radiación, también son responsables de la absorción por resonancia. Los gases menores en la atmósfera presentan una pronunciada absorción sobre el espectro infrarrojo. Sin embargo, el nitrógeno y el oxígeno, fundamentales en anestesia, no absorben bien la radiación en esta región.

En la figura 2.7 se muestra un analizador infrarrojo [93]. La detección de la presencia de esta radiación, su distribución y/o cantidad, requiere de técnicas en parte únicas para esta región del espectro. La frecuencia es tal que se pueden utilizar métodos ópticos para captarla, dirigirla y filtrarla. Los elementos ópticos de transmisión, ventanas y lentes, se fabrican de elementos que pueden no ser transparentes para el espectro visible. Por otro lado, la parte más importante de este tipo de aparatos es el detector, el cual puede ser de diferentes tipos, dependiendo de la región a analizar. Para esto se utilizan dispositivos foto-emisores, foto-celdas, foto-conductores, etc. También pueden utilizarse elementos térmicos (termocoplas, bolómetros o celdas neumáticas) diseñados específicamente, pero no son tan sensibles y no responden tan rápido como los foto-conductores.

El analizador infrarrojo se basa en el hecho de que gases compuestos, con dos o más átomos desiguales en una molécula (como el N_2O , el CO_2 y los agentes anestésicos halogenados), presentan una absorción del infrarrojo que es única [23]. En la figura 2.7, el gas entra a una cámara conocida como celda de muestra, mientras una luz infrarroja intermitente (la cual pasa primero por una rueda que gira varios miles de veces por minuto y que tiene filtros especialmente escogidos para el gas a medir) lo ilumina. La luz atraviesa al mismo tiempo un gas sin características de absorción en otra cámara, la celda de referencia. Finalmente, la radiación llega al detector, en este caso un fotosensor. La cantidad de luz absorbida por el gas muestreado es proporcional a la presión parcial de los gases cuyos patrones de absorción corresponden a las longitudes de onda seleccionadas mediante los filtros en la rueda giratoria. Entre más luz sea detectada, menor es la cantidad de gas presente y viceversa. Los niveles de luz cambiantes son detectados en el fotosensor, y se transforman en señales eléctricas que son amplificadas y procesadas para obtener la verdadera señal al compararla con la señal obtenida con el gas de referencia. Esta señal puede entonces ser almacenada, procesada y/o desplegada.

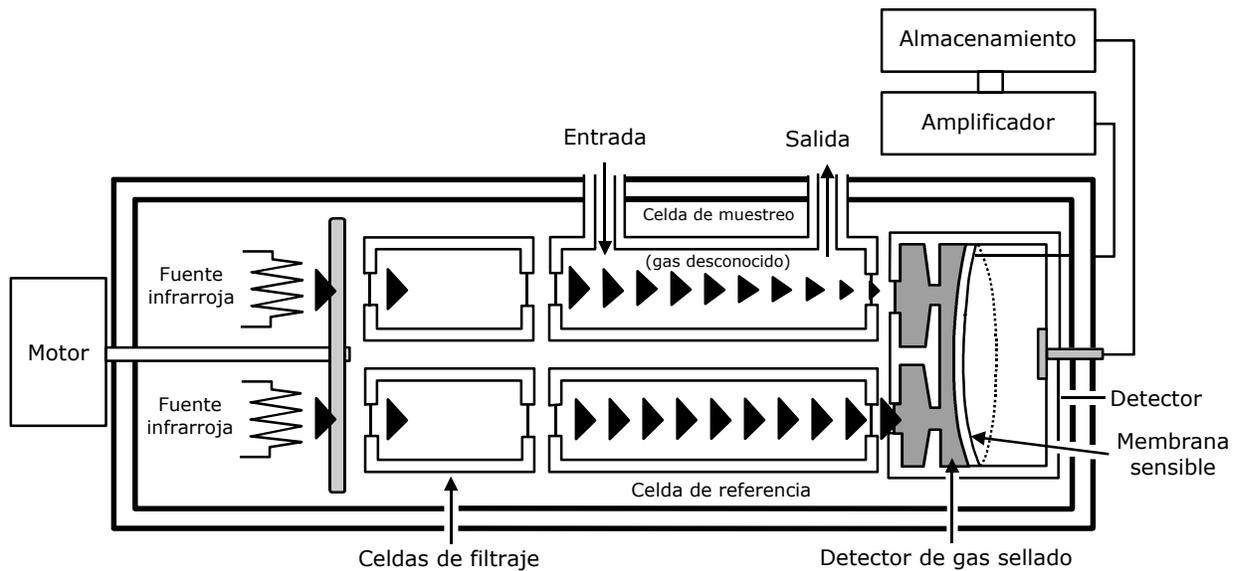


Figura 2.7. Esquema de un analizador de infrarrojo.

Además de la desventaja que tiene este método al no poder medir oxígeno y nitrógeno, se añade la desventaja del costo cuando se trata de medir los agentes anestésicos, ya que en este caso se requieren filtros sumamente selectivos, además de detectores mucho más sensibles, ya que las bandas del espectro de los agentes anestésicos halogenados son relativamente pequeñas y hay sobreposición entre ellas.

2.3.4 Espectrometría por difracción de Raman

Esta forma de espectrometría está basada en el efecto Raman, el cual describe el fenómeno por el cual una luz incidente monocromática (generalmente ultravioleta) se difracta con una longitud de onda diferente (además se observa la luz original refractada, lo que se conoce como difracción Rayleigh, figura 2.8) debido a que al entrar en contacto con un gas, líquido o sólido, las moléculas de éstos absorben la energía, convirtiéndola en modos vibratorios y rotatorios, y remiten una pequeña porción [16]. La nueva longitud de onda y el número de nuevos haces puede utilizarse para determinar los componentes de un gas. Descubierta por el físico hindú C.V. Raman en 1928, a este fenómeno también se le conoce con el nombre de efecto Smekal-Raman, siendo el primero un investigador que hizo algunas predicciones sobre el fenómeno un tiempo antes.

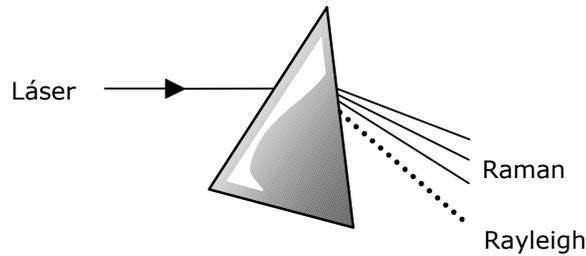


Figura 2.8. Sistema óptico para la observación de un espectro de Raman. La difracción Rayleigh se observa a la misma longitud de onda que el rayo láser monocromático incidente. La difracción Raman tiene una longitud de onda diferente dependiendo del material sobre el cual incide el rayo láser.

El efecto Raman permite entonces determinar los modos de movimiento molecular, especialmente las vibraciones, y su utilidad para el análisis radica en que las vibraciones son específicas para cada gas en particular, tal como sucede con la espectrometría por infrarrojo. Ambos, el efecto Raman y la absorción de rayos infrarrojos, nos proporcionan una descripción parcial del movimiento vibratorio interno de una molécula. Ninguno de los dos métodos nos da información completa, y por análisis, entre los dos se puede inferir nueva y útil información.

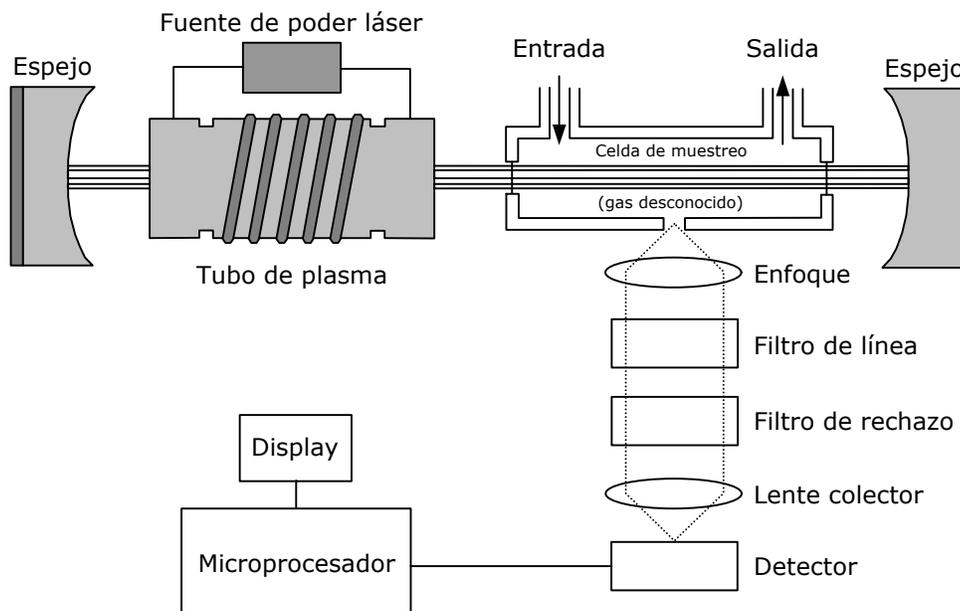


Figura 2.9. Diagrama de un analizador por efecto Raman.

En la figura 2.9 se muestra un espectrómetro de efecto Raman [23]. El gas a ser analizado entra en la celda de muestreo, en donde es iluminado con un rayo láser, generalmente de Argón, que se dispersa por el efecto Raman. Una serie de lentes montados en forma paralela a una ventana por donde sale la radiación Raman la juntan y guían a través de un número de filtros que seleccionan las longitudes de onda de los gases a analizar. La luz así tratada es entonces recogida por un detector que determina el número de fotones incidentes. El análisis de la frecuencia permite la identificación de los gases presentes en la muestra.

Los espectrómetros Raman, aunque cercanos al nivel de un espectrómetro de masa en cuanto a desempeño, son más pequeños que éste y más baratos. Aún así, la reducción en precio y tamaño no es la suficiente, ya que siguen ocupando suficiente espacio y el sistema óptico y los

detectores son algo caros. Además, la fuente del láser debe ser cambiada anualmente, y el consumo de potencia de éste es grande.

2.3.5 Análisis piezoeléctrico

Los gases anestésicos tienen la propiedad de ser altamente solubles en lípidos, y se depositan sobre su superficie por un proceso de adsorción [23]. Un analizador piezoeléctrico (figura 2.10) consiste en dos cristales, generalmente de cuarzo, uno de ellos cubierto con una capa de lípido o lípido-polímero. Mediante un sistema de dos osciladores, uno conectado al cristal recubierto (detector) y otro al no recubierto (referencia), se determina la diferencia entre las frecuencias generadas, la cual es proporcional a la cantidad del anestésico en el gas, el cual hace que la masa del lípido cambie, modificando la frecuencia de resonancia del cristal.

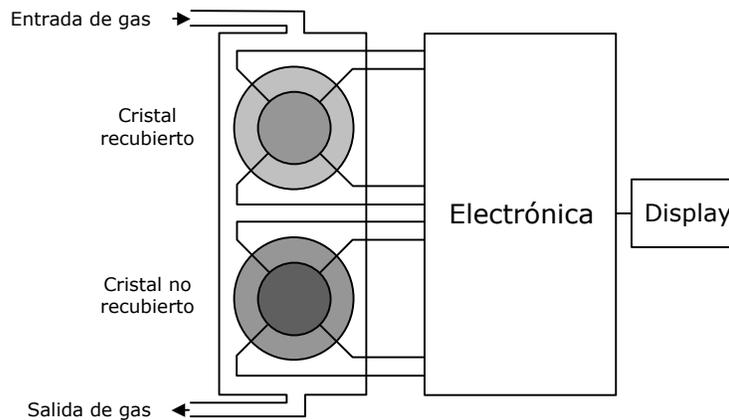


Figura 2.10. Esquema de un analizador piezoeléctrico.

El analizador resultante es pequeño y barato, pero con la desventaja de que el sensor tiene variaciones de acuerdo a la humedad y, aunque detecta la presencia de anestésicos, no puede distinguir entre ellos.

2.3.6 Espectrometría por movilidad iónica (IMS)

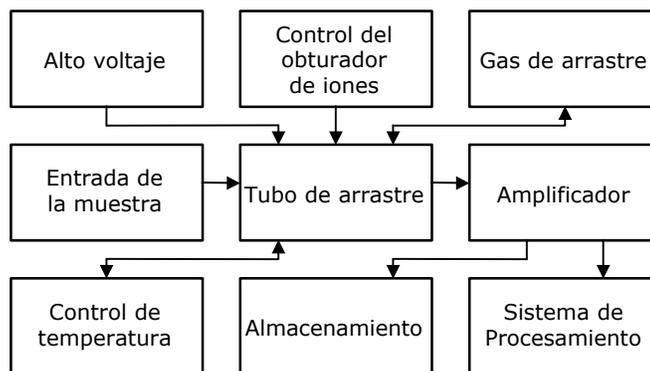


Figura 2.11. Diagrama de un espectrómetro de movilidad iónica completo.

Esta tecnología nació a finales de los sesenta con el nombre de cromatografía de plasma, el cual no la describía con exactitud, y se introdujo como un método para la detección de concentraciones pequeñas de compuestos orgánicos en el aire y otros gases. El término de

espectrometría de movilidad de iones se refiere a los principios, la práctica y la instrumentación para analizar y caracterizar sustancias químicas a través de la movilidad de sus iones cuando éstas se encuentran en estado gaseoso [26,52]. Es una técnica instrumental para la detección y caracterización de vapores [13,64]. Debido a estas características ha crecido el interés en su desarrollo en el campo del monitoreo de anestesia [30].

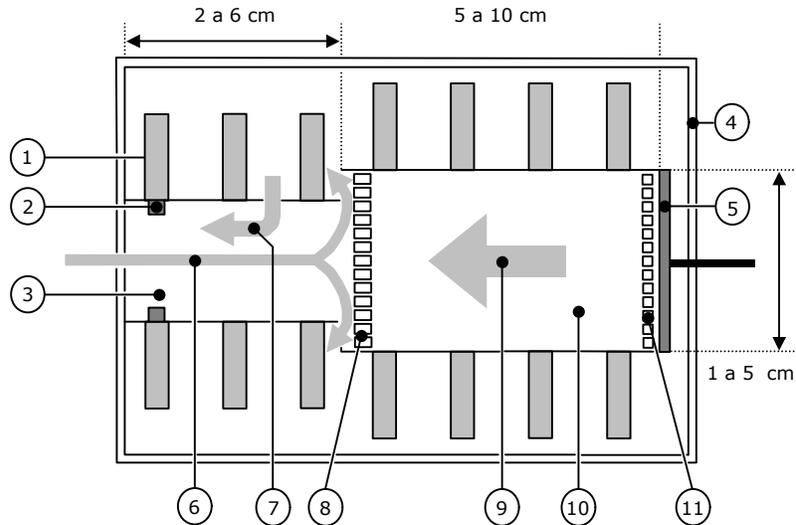


Figura 2.12. Esquema de un tubo de arrastre típico. (1) Anillos. Estos crean el campo eléctrico requerido. Están conectados a un divisor de voltaje y forman un campo eléctrico con gradiente, siendo más intenso dentro del primer anillo al principio del tubo (de alto voltaje) y menor en el de la extrema derecha, a la salida del tubo (de menor potencial). (2) Fuente radioactiva, emisora de partículas β . Generalmente está fabricada con Ni-63. (3) Región de ionización. En ella el aire o el gas de relleno es bombardeado con electrones de alta energía para formar iones reactivos, los cuales a su vez crean iones producto al tener colisiones con las moléculas del gas a ser analizado. (4) Cámara térmica. Todo el sistema se encuentra dentro de ella y se mantiene a una cierta temperatura que puede llegar hasta 350°C. Esto reduce cualquier efecto de "memoria" y otros efectos de agrupamiento que puedan degradar el espectro. (5) Detector. Consiste en un disco plano de metal que generalmente se encuentra a un potencial de referencia cero (tierra). Convierte la carga iónica en corriente, la cual puede ser posteriormente amplificada y almacenada o procesada. (6) y (7) Son dos formas diferentes en que puede introducirse el gas a analizar en el tubo. El primer caso se denomina flujo bidireccional (por el contraflujo, explicado en el punto 9). El gas se introduce por la izquierda, y se agota antes de llegar al obturador (ver punto 8). El segundo caso se denomina flujo unidireccional. El gas se introduce al final de la región de ionización y fluye hacia la entrada. Este tipo de introducción del gas tiene la ventaja de hacer al sistema bastante rápido ya que las moléculas que no se ionizan son barridas hacia afuera y de esa forma no causan colisiones. (8) Obturador. Se trata de dos rejillas con potenciales individuales. Controlan la inyección de iones de la región de ionización a la región de arrastre. Esto se logra al controlar la diferencia de potencial entre las rejillas. (9) Gas de arrastre. Es un gas limpio y en contraflujo a los iones el cual mantiene la región de arrastre limpia de impurezas, evitando reacciones indeseables. (10) Región de arrastre. Por ella viajan los iones con ayuda del campo eléctrico producido por los anillos. (11) Malla de apertura. Malla fina que aísla al detector de ruido electrónico. Lleva un campo eléctrico de 350 a 600 V/cm y les imparte energía a los iones que la cruzan para que se impacten posteriormente en el detector.

El proceso se basa en la ionización, como su nombre lo indica. Los vapores a ser analizados se ionizan en una cámara de reacción o ionización mediante una fuente de radiación de alta energía (material radioactivo, láser, spray corona, etc.) y se mide la movilidad, particular para

cada gas [79,80], de los iones resultantes inmersos en un campo eléctrico. El corazón del sistema, el cual realiza estas acciones, se denomina tubo de arrastre. La electrónica que se requiere para completar el proceso, y su relación con el tubo de arrastre se muestra en la figura 2.11.

En la figura 2.12 se muestra un tubo de arrastre típico. El gas a ser analizado se introduce en la cámara de ionización donde un núcleo radioactivo, generalmente ^{63}Ni , constantemente bombardea con partículas β (electrones de alta energía, 19 keV) el aire u otro gas de transporte que ahí se encuentre. Los iones que se producen por esta radiación (iones reactivos) a su vez tienen colisiones con el gas a ser analizado, produciendo nuevos iones (iones producto). Los iones reactivos pueden tener carga positiva (i.e. si chocan con N_2) o negativa (como ocurre cuando colisionan con O_2).

Posteriormente, el campo eléctrico barre iones de una cierta polaridad (dependiendo del campo seleccionado) hacia la región de arrastre y no permite que los iones de polaridad opuesta salgan de la región de ionización. Las rejillas del obturador se colocan a un mismo potencial en ese momento para que algunos iones puedan entrar a la región de arrastre, y posteriormente se cierra. Los iones que chocan contra el obturador cuando éste está cerrado (las rejillas a diferente potencial) se descargan, dejando de ser iones.

Los electrones que alcanzan a pasar por el obturador son llevados por el campo eléctrico en medio de un gas de arrastre en contraflujo que elimina las impurezas, y si su movilidad es diferente se separan en grupos. Cada grupo tiene una movilidad característica de esos iones en particular. Los iones reactivos generalmente son menos pesados y éstos se adelantan a los demás al tener una mayor movilidad.

Antes de llegar al final del tubo, los iones deben pasar por una malla de apertura, la cual acelera los electrones hacia el detector. Cuando chocan contra este último, los iones le transfieren su carga y se crea una corriente que se traduce en un pico en el espectro de movilidad. El espectro de movilidad es una gráfica de la corriente del detector contra el tiempo que tardan los iones en cruzar la región de arrastre desde que son creados, y contiene información cualitativa y cuantitativa. La diferencia entre picos, es decir, la diferencia de tiempo entre la llegada de cada tipo de iones, es de unos cuantos milisegundos.

La movilidad puede ser determinada a partir de un espectrograma utilizando el tiempo de arrastre y la siguiente fórmula:

$$v_d = KE = \frac{d}{t}$$

en donde K es la movilidad, la cual expresa la facilidad con que un cierto tipo de iones se muevan por el gas de arrastre, V_d es la velocidad de arrastre, y E es la intensidad del campo eléctrico. Por otro lado, podemos normalizar la temperatura y la presión bajo las cuales se efectúa la medición y así obtener una movilidad para presión estándar (760 mmHg) y temperatura estándar (273 K), conocida como movilidad reducida K_0 :

$$K_0 = K \frac{273}{T} \frac{760}{P} = \frac{d}{E \cdot t} \frac{273}{T} \frac{760}{P}$$

donde P es la presión atmosférica y T es la temperatura.

Además, la movilidad puede expresarse en función de las dimensiones del ión y el ambiente en que se encuentra:

$$K = \frac{3q}{16N\Omega} \sqrt{\frac{2p(m_i + m_g)}{k'Tm_im_g}}$$

en donde q es la carga del ión, N es la densidad del gas de arrastre, k' es la constante de Boltzman, T es la temperatura en grados Kelvin, m_i es la masa del ión, m_g es la masa del gas de arrastre y Ω es la sección transversal del ión, determinada por la dimensión molecular, su forma y

polarización. Si se mantienen constantes la temperatura y la presión, la movilidad variará únicamente en forma proporcional a la carga, e inversamente proporcional a la sección transversal. Como puede observarse, la movilidad depende de tres parámetros:

- Parámetros operacionales (temperatura, presión, campo eléctrico)
- Parámetros de instrumentación (longitud de la región de arrastre)
- Propiedades de los iones y las moléculas del gas

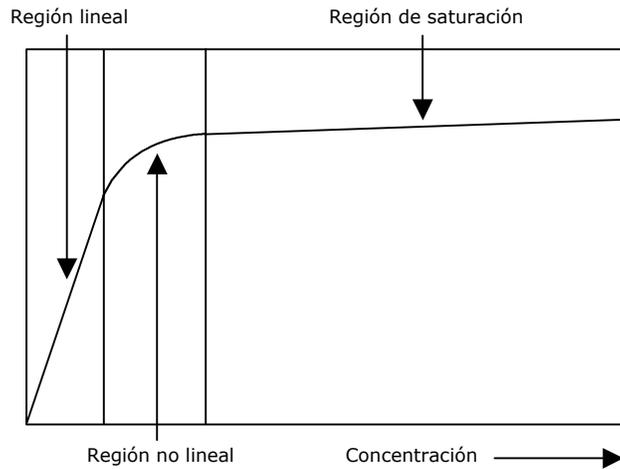


Figura 2.13 Respuesta del IMS en función de la concentración.

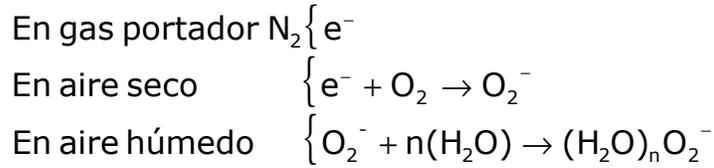
Por otro lado, la movilidad reducida normaliza los dos primeros parámetros, y en realidad solo depende del último, como se mencionó anteriormente.

Ahora veamos en que forma las partículas β (electrones con alta energía) forman estos iones:

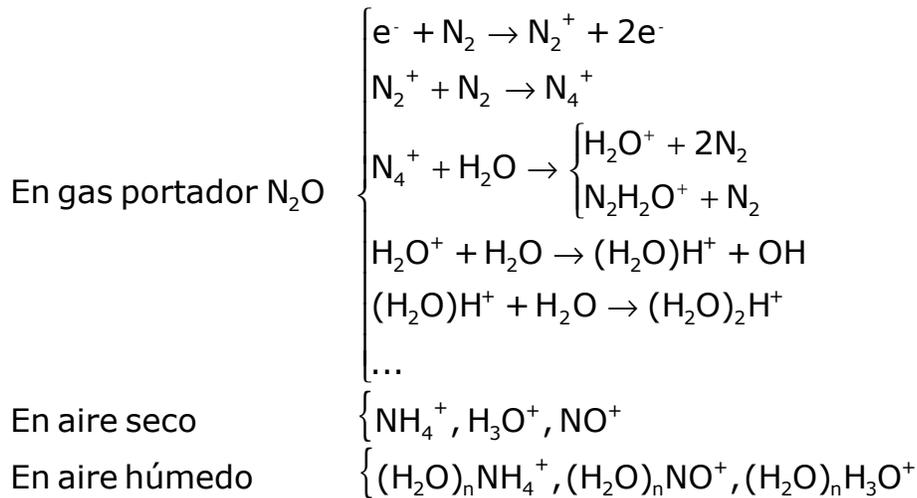
Principales procesos

- Ionización por transferencia protónica
 $(\text{H}_2\text{O})_n(\text{H}_3\text{O})^+ + \text{M} \rightarrow \text{MH}^+ + (\text{H}_2\text{O})_{n+1}$
- Ionización por transferencia de carga
 $(\text{H}_2\text{O})_n\text{NO}^+ + \text{M} \rightarrow \text{M}^+ + \text{NO} + n(\text{H}_2\text{O})$
- Ionización por agrupamiento (1)
 $(\text{H}_2\text{O})_n\text{NH}_4^+ + \text{M} \rightarrow \text{M}(\text{NH}_4^+) + (\text{H}_2\text{O})_n$
- Ionización por transferencia de carga disociativa
 $\text{RX} + \text{O}_2^- \rightarrow \text{RX}^- + \text{O}_2 \rightarrow \text{X}^- + \text{R}$
- Ionización por intercambio protónico
 $\text{O}_2^- + \text{MH} \rightarrow \text{M}^- + \text{O}_2 \cdot \text{H}$
- Ionización por agrupamiento (2)
 $\text{O}_2^- + \text{MH} \rightarrow \text{O}_2^- \cdot (\text{MH})$

Formación de iones negativos



Formación de iones positivos



Los iones más abundantes en el aire como H^+ , NO^+ y O_2^- , denominados iones reactivos, se forman a partir de las moléculas del gas. Pequeñas concentraciones del compuesto a analizar reaccionan con estos iones y liberan electrones, principalmente a través de colisiones, para formar los iones producto de la molécula a analizar, M , tales como M^+ , MH^+ , o M^- y $M^*O_2^-$. Las moléculas polares, como H_2O y N_2O , son atraídas por estos iones y se forman agrupaciones mayores de la forma $(H_2O)_n(N_2O)_m M^-$ (una interesante discusión sobre los diferentes iones que pueden formarse en una mezcla del anestésico halotano, aunque orientada a la espectrometría de masa, puede encontrarse en [77]). Para una muestra de una cierta composición que se ioniza, bajo condiciones dadas de temperatura y presión, los conjuntos iónicos formados alcanzarán un equilibrio de composición y cantidad que es característico. Estos iones pueden separarse y analizarse en un gas por medio de su movilidad iónica K , la cual es función del tamaño de su sección transversal y de su carga.

Cuando la concentración del gas rebasa un cierto límite, los iones reactivos del aire o gas de relleno se agotan y ya no pueden formar más iones producto, y el IMS ya no responde de manera normal. Bajo estas condiciones se dice que el IMS se encuentra saturado. En la figura 2.13 se muestran las distintas condiciones que puede adoptar la respuesta del espectrómetro de movilidad iónica en relación con la concentración.

Este método proporciona una buena idea de lo que sucede con la movilidad iónica en muestras de gas aunque éstas se encuentren saturadas con agente anestésico [33] u otro químico. Sin embargo, tienen varias desventajas. Una de ellas es que requieren altos voltajes para el obturador, electrodo de referencia y placa colectora, pero la más importante es que no permite un monitoreo continuo ya que debe emplearse el obturador para dejar pasar los iones desde la región de ionización a la región de arrastre. En años recientes se han hecho esfuerzos para superar estas limitaciones de los espectrómetros de movilidad iónica, así como para hacerlos más pequeños y baratos [5,25,27,28,29,32,33,53,54,82,110,116].

2.4 Método de aspiración

2.4.1 Antecedentes

2.4.1.1 Contador o condensador de aspiración

Este aparato utiliza el método de aspiración para medir la movilidad de iones en el aire. Dicho método surgió a finales del siglo XIX [39] y posteriormente fue llevado un paso adelante por investigadores de la talla de J.J. Thompson, Rutherford, Zeleny y McClelland [117].

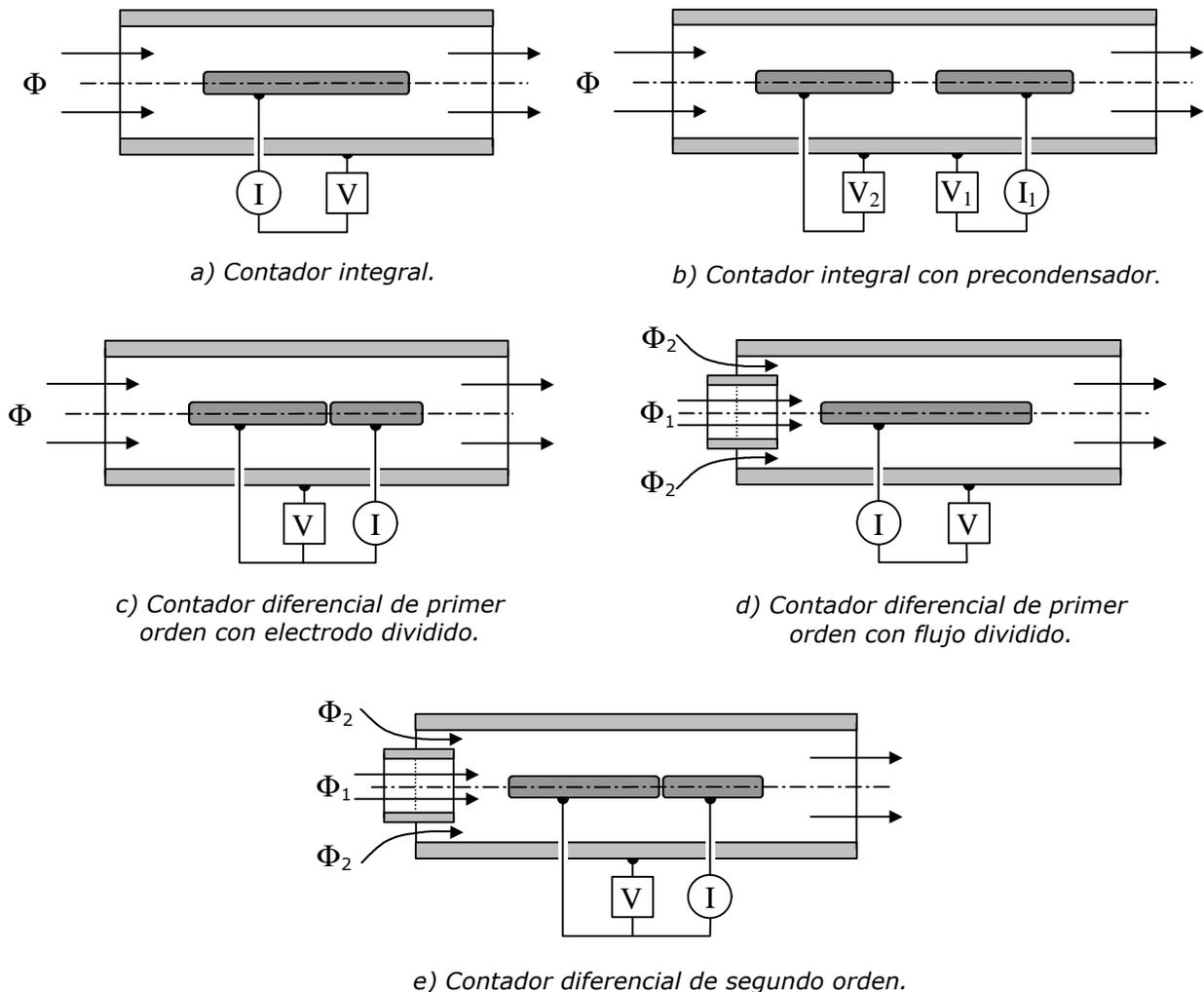


Figura 2.14. Diferentes tipos de contadores de aspiración.

Existen varias versiones de este aparato desarrolladas a lo largo de la historia [4,11,60,91,113], y algunas de las más primitivas se muestran en la figura 2.14. El principio general para todos los modelos es el mismo: se aplica un voltaje entre las placas de un condensador cilíndrico coaxial, el cual forma un campo eléctrico radial. Este campo actúa sobre los iones que fluyen a través de él con un cierto flujo Φ , y desvía su trayectoria hasta que los iones con una cierta relación carga-movilidad colisionan con el electrodo colector (generalmente el cilindro interior), creando una corriente proporcional a la carga y movilidad de los iones impactados.

2.4.1.2 Condensador de aspiración plano

Utiliza una variante del método de aspiración y fue desarrollado en Finlandia por Puumalainen y Paakanen [65,85,91] y se muestra en la figura 2.15. Es más sencillo y más barato, ya que elimina la configuración radial y la substituye por una configuración plana. En este sistema el gas muestreado entra a una cámara en donde se ioniza por medio de una fuente radioactiva y se calienta a temperatura constante. Posteriormente pasa a una cámara en la cual se crea un pequeño campo eléctrico de deflexión del orden de 2 V/cm [17] producido por una diferencia de potencial entre pares de placas de referencia y colectoras montadas de forma paralela al flujo en una configuración que asemeja un condensador o capacitor. Las partículas neutras del gas no se ven afectadas por el campo, mientras que las partículas ionizadas serán desviadas y tendrán una colisión con las placas colectoras. Esto produce una corriente proporcional a la cantidad y a la carga de los iones, la cual es transferida al electrodo cuando entran en contacto.

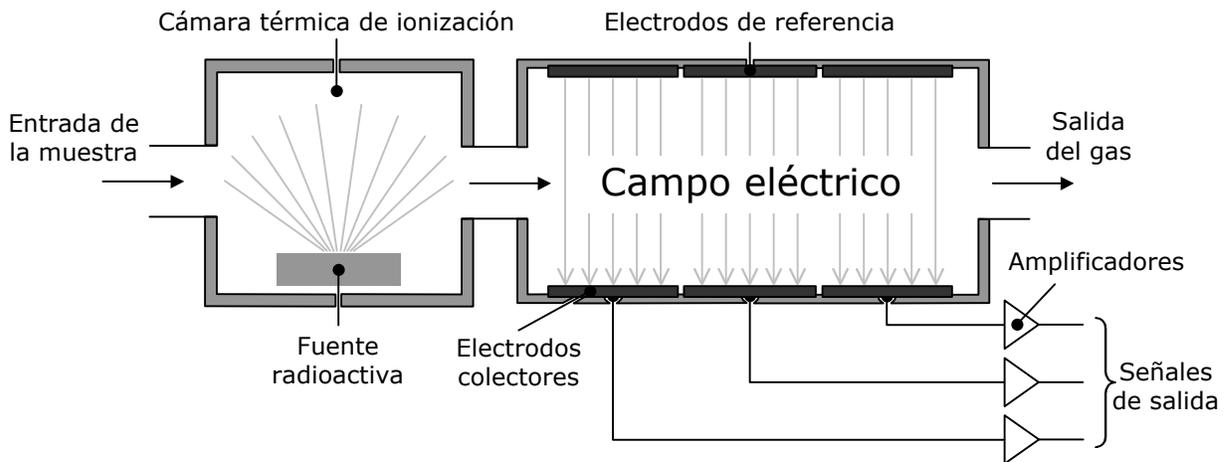


Figura 2.15. El condensador de aspiración plano.

Este sistema, que comparado con un IMS tradicional tiene la ventaja de poder medir de forma continua (debido a un tiempo de recuperación de la celda de medición muy pequeño), puede medir iones positivos y negativos al mismo tiempo y tolera altas concentraciones de gas [55,121,122]. Es producido comercialmente por Environics Oy en Finlandia y su principal aplicación es la detección de gases tóxicos para usos industriales y militares [19,67,84,85,122].

2.4.2 Condensador de aspiración diferencial de primer orden con barrido de campo

Este sistema desarrollado por Sacristán [102] es una versión simplificada del condensador de aspiración descrito en la sección anterior que utiliza un sistema de barrido de campo, un solo electrodo colector para hacer mediciones, y presenta ciertas ventajas en la detección de la movilidad promedio de los iones en muestras de gas altamente saturado, como es el caso de los agentes anestésicos halogenados para los cuales fue específicamente diseñado, debido a su eficiencia de captura de iones en función de la movilidad, la cual es bastante lineal en la relación corriente-movilidad iónica en la región de interés.

2.4.2.1 Descripción general

La configuración se muestra en la figura 2.16. En este caso tenemos un solo electrodo de referencia y dos o más electrodos independientes, el primero conocido como electrodo frontal o precolector y los demás como electrodos colectores. El gas a ser analizado entra en una cámara

con temperatura controlada, en la cual es bombardeado con una radiación de una fuente radioactiva de Americio 241 (partículas alfa). El gas así ionizado pasa a una cámara de detección a una cierta velocidad. Debido a que el campo eléctrico se encuentra de forma perpendicular al flujo, los iones son barridos hacia las placas colectoras en función de su movilidad. Para medir los iones positivos se utiliza un campo eléctrico dirigido de la placa de referencia a las colectoras. Para medir iones negativos simplemente se invierte el campo mediante los voltajes en las placas.

Utilizando un sensor de este tipo, se han efectuado estudios sobre los agentes anestésicos halogenados [97,102], obteniendo curvas de voltaje (o corriente) de colector contra voltaje de placa de referencia (variado utilizando un microprocesador y un convertidor digital-analógico). La técnica que se determinó era adecuada en ese momento consistió en variar el voltaje entre electrodos de -10 a 10 volts en 64 puntos discretos (con una pausa entre cada uno para que la corriente de colector se estabilizara), produciendo una curva como la mostrada en la figura 2.17.

El estudio permitió demostrar que con el sistema se pueden obtener curvas diferentes para cada agente anestésico en distintas concentraciones a distintas mezclas de gas portador, a pesar de la saturación, prestándose perfectamente para la identificación y cuantificación de éstos.

Los parámetros que se encontró afectan las mediciones son:

- **Concentración del VHA:** A mayor concentración, hay menor movilidad. Aunque se conserva la cantidad de iones, el tamaño de éstos aumenta. Este efecto es mas notable en los iones negativos.
- **Concentración de los elementos del gas portador:** Al aumentar el N₂O baja la movilidad. Además, un aumento de H₂O y CO₂ tiene el efecto de aumentar la resolución para iones negativos.
- **Temperatura:** A mayor temperatura, mayor movilidad. No es lineal.
- **Tasa de flujo del gas:** A mayor flujo, mayor corriente iónica.
- **Voltaje aplicado:** A voltajes pequeños se pueden detectar con mayor resolución las movilidades altas, y a voltajes grandes se detectan mejor las movilidades bajas.

Debido a lo anterior se descubrió que la corriente de los iones negativos es la más adecuada para medir la concentración del agente anestésico en uso, ya que la movilidad de estos iones es más sensible a la concentración, sobre todo para concentraciones bajas. La corriente de los iones positivos, por otro lado, es más adecuada para determinar que agente está en uso.

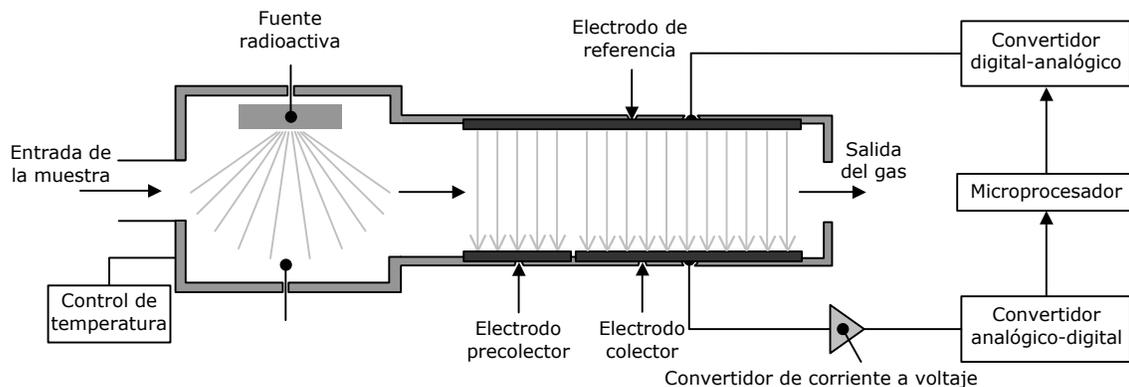


Figura 2.16. El condensador de aspiración diferencial de primer orden.

2.4.2.2 Funcionamiento teórico

El primer electrodo, electrodo frontal o precolector captura los iones de alta movilidad y limita por tanto el rango de iones que pueden caer en el segundo electrodo. Esta configuración se

denomina *condensador diferencial de primer orden*, y la corriente medida está dada por la integral ponderada de la densidad de movilidad iónica sobre un rango de movilidades definido. Esta función de ponderación se denomina como *función G* (en un principio se asoció este kernel ó núcleo de una ecuación integral de Fredholm, por su forma, con las *funciones de Green*) y es diferente para cada condensador de aspiración y depende de su geometría, el flujo del gas y el voltaje aplicado. Para una geometría y un flujo dados se puede cambiar el rango de movilidades iónicas analizado modificando únicamente el campo eléctrico aplicado. En el sistema propuesto se utiliza una computadora que con precisión y rapidez realiza un barrido del campo eléctrico del condensador, permitiendo mediciones de diferentes secciones del espectro de movilidad iónica.

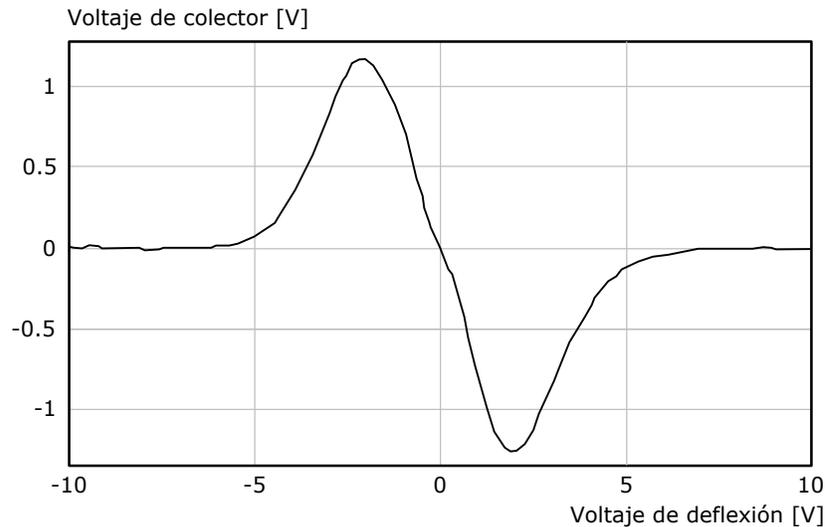


Figura 2.17. Respuesta de un condensador de aspiración a la movilidad de iones para un gas anestésico (halotano al 0.2%) en un gas portador 50% O_2 / 50% N_2O .

En el método de aspiración tradicional se tiene la desventaja de una pobre resolución puesto que, como se ha mencionado, se tiene una medición integral sobre un rango de movilidades [85]. La principal diferencia y el componente central de este método es que se realizan mediante un barrido del campo eléctrico múltiples mediciones. Esto es análogo a la metodología empleada para la tomografía axial computarizada: los rayos X no tienen ninguna resolución de profundidad, pero haciendo diversas mediciones a diferentes ángulos, la información tridimensional puede reconstruirse aplicando una transformación matemática inversa. En nuestro caso, se realizan varias mediciones integrales en una dimensión con el fin de reconstruir una curva bidimensional, pero en lugar de cambiar un ángulo se varía el campo eléctrico.

Con este barrido se obtiene una curva de corriente contra voltaje (como la que se muestra en la figura 2.17). Esta curva contiene toda la información del espectro de movilidad iónica, y aplicando una transformación inversa, puede reconstruirse ese espectro.

2.4.2.3 Descripción matemática [104,111]

La descripción matemática teórica del método de aspiración fué desarrollada por H. F. Tamm et en 1967 [114]. El condensador diferencial de primer orden básico consiste en dos electrodos diferentes, un electrodo frontal o precolector, y un electrodo colector con el cual se realizan las mediciones (figura 2.18).

Un flujo de gas previamente ionizado fluye entre los electrodos del condensador y una placa de referencia que se encuentran dispuestos en una configuración de condensador o capacitor. Los iones de una polaridad dada son desviados por el campo hacia los electrodos mediante el campo eléctrico E que se forma entre las placas, de forma perpendicular al flujo. La componente vertical de la trayectoria del ión v_d , paralela al campo, es la velocidad de arrastre del ion debida

a éste. La componente horizontal v_f , paralela al flujo, es la velocidad del ion debida al frente laminar de flujo dentro del condensador. El flujo debe mantenerse de forma laminar, puesto que de otra forma la trayectoria del ion no puede ser determinada y los iones no pueden ser separados de acuerdo a su tamaño. El frente laminar es parabólico con una velocidad de flujo máxima en el centro del canal y cercana a cero en las paredes.

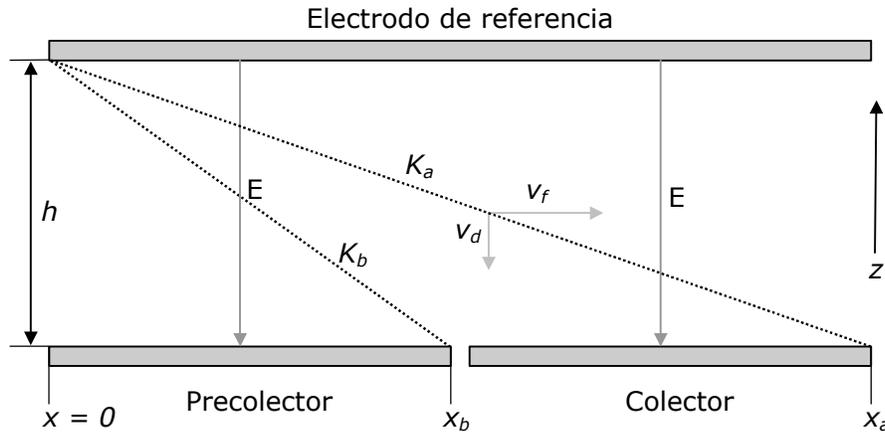


Figura 2.18. Diagrama de una celda de medición diferencial de primer orden. Las trayectorias de los iones que viajan a través del condensador son desviadas por el campo eléctrico E . El electrodo frontal (precolector) captura todo ion con movilidad $K > K_b$. El electrodo colector captura todos aquellos iones con una movilidad $K > K_a$, excepto aquellos que fueron capturados por el precolector.

Por otro lado, nos interesa en este caso solo la trayectoria media para un ion de una cierta movilidad. En el análisis se puede simplificar el modelo considerando en forma alternativa la velocidad de flujo promedio, donde f es la tasa de flujo y s es el área de la sección transversal del canal del condensador [17]:

$$\bar{v}_f = \frac{f}{s}$$

Puede verse gráficamente en la figura 2.18 que todo ión positivo con movilidad mayor o igual a K_b se desviará lo suficiente como para ser recogido por el precolector ya que aún los iones más alejados de los electrodos a la entrada del detector, a una distancia h sobre ellos, pueden desviarse de esta manera. El campo eléctrico se define como:

$$E = \frac{V}{h}$$

Si trazamos una línea desde la entrada de la cámara desde una altura h a una distancia $x=0$ hasta la orilla lejana del precolector ($x=b$), podemos darnos cuenta de ello. En este caso, los iones con movilidades mayores a cierto límite, el cual llamaremos K_b , cumplirán este requisito (entre mayor sea la movilidad es más fácil que un ión se desvíe por el campo). Podemos hacer lo mismo para la otra placa, tomando ahora $x=a$, y ahora los iones que pueden ser recogidos por la placa colector y/o el electrodo precolector serán aquellos con una movilidad mayor o igual a un límite que denominaremos K_a . Siguiendo este razonamiento se puede determinar una función para la eficiencia de captura de iones en cada electrodo, la cual se denomina como *función G*.

Para ello definiremos estas constantes que aparecen en todas las ecuaciones:

$$K_a = \frac{h v_f}{x_a E} \quad \text{y} \quad K_b = \frac{h v_f}{x_b E}$$

Al barrer el voltaje del condensador se produce una curva de corriente contra voltaje $I(V)$ en el electrodo de medición. Esta curva se produce como una transformación del espectro de movilidad iónica de la muestra de gas. La transformación descrita por Tammet [114] es:

$$I(V) = \int fG(V, K, f)D(K)dK$$

En la ecuación anterior $G(V, K, f)$ es la función G del electrodo de medición que describe su eficiencia de captura iónica, y es una función del voltaje de deflexión V aplicado al condensador, la movilidad iónica K , y la tasa de flujo del gas portador f . $D(K)$ es la distribución de movilidad iónica o función de densidad de la muestra de gas ionizado, y es igual a la densidad de carga específica de los iones con una movilidad K .

Para el precolector, que se extiende desde $x=0$ hasta $x=b$, tendremos:

$$G_b(K, V, f) = \begin{cases} \frac{K}{K_b} & \text{si } K_b \geq K \geq 0 \\ 1 & \text{si } K \geq K_b \end{cases}$$

y para el precolector y colector juntos:

$$G_a(K, V, f) = \begin{cases} \frac{K}{K_a} & \text{si } K_a \geq K \geq 0 \\ 1 & \text{si } K \geq K_a \end{cases}$$

y tomando en cuenta que $b < a$ y que $K_b > K_a$, podemos calcular la función G para el colector solo:

$$G_{ab}(K, V, f) = G_a(K, V, f) - G_b(K, V, f) = \begin{cases} \frac{K}{K_a} - \frac{K}{K_b} & \text{si } K_a \geq K \geq 0 \\ 1 - \frac{K}{K_b} & \text{si } K_b \geq K \geq 0 \\ 0 & \text{si } K \geq K_b \end{cases}$$

y por esto es que se conoce como condensador *diferencial*. En la figura 2.19 se muestra una representación gráfica de los cálculos anteriores.

Si tuviéramos otra configuración con más electrodos o diferentes campos eléctricos, solo debemos seguir el mismo procedimiento e incluir los efectos indicados.

Puede entonces observarse que la función G depende de la geometría del detector (la distancia y dimensiones de los electrodos x_a y x_b , la distancia entre placas h , y la sección transversal del canal s), la tasa de flujo del gas f (que determina la velocidad promedio \bar{v}_f) y el potencial de deflexión aplicado V (el cual causa el campo eléctrico E).

Si consideramos que las dimensiones del condensador y la tasa de flujo son constantes, podemos entonces definir las constantes A y B como:

$$A = \frac{h^2 \bar{v}_f}{x_a} \quad \text{y} \quad B = \frac{h^2 \bar{v}_f}{x_b}$$

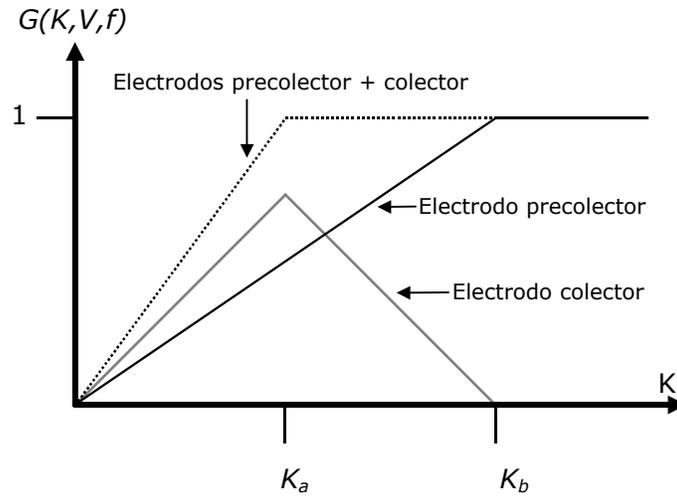


Figura 2.19. Cálculo gráfico de la función G para el electrodo colector.

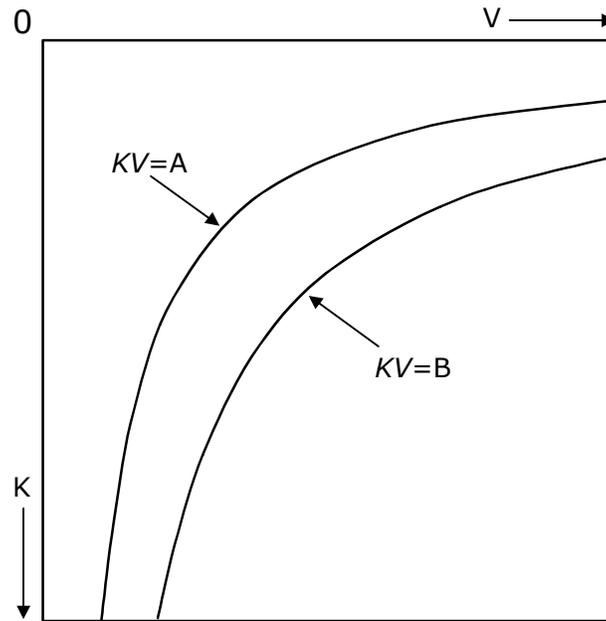


Figura 2.20. Representación de las tres áreas definidas por hipérbolas en una función G.

y entonces podemos reescribir el núcleo ó kernel de la ecuación integral de Tammet, la función G de un condensador de aspiración diferencial de primer orden, como:

$$G(K, V) = \begin{cases} \frac{KV}{A} - \frac{KV}{B} & \text{si } A \geq KV \geq 0 \\ 1 - \frac{KV}{B} & \text{si } B \geq KV \geq A \\ 0 & \text{si } KV \geq B \end{cases}$$

Esta ecuación define dos hipérbolas que limitan tres áreas distintas, como puede observarse en la figura 2.20. El área entre los ejes y la hipérbola interior, definida por $KV=A$, tiene una pendiente positiva. La segunda área, entre la primera hipérbola y la segunda, definida por $KV=B$, posee una pendiente negativa. Finalmente, la tercera área, desde la segunda hipérbola hacia afuera, es plana e igual a cero. En la figura 2.21 se muestra una representación tridimensional de la función G .

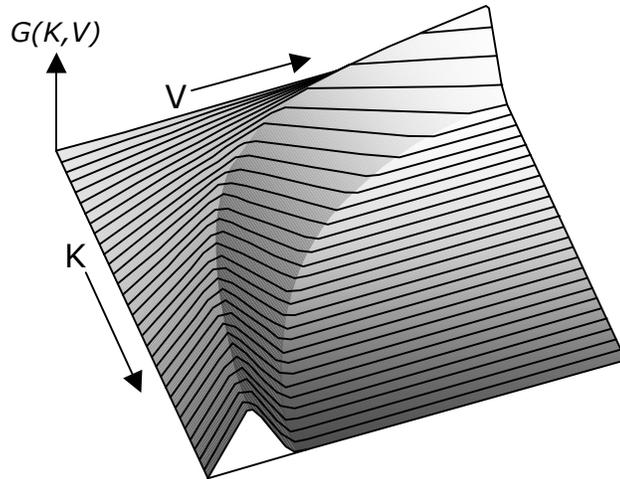


Figura 2.21. Superficie de la función G para el electrodo de medición de un condensador de aspiración, la cual indica su eficiencia de captura en función del voltaje V , la movilidad iónica K , y los parámetros dimensionales y operacionales de la celda. Hay una relación hiperbólica entre los dominios del voltaje y la movilidad.

El máximo de la función G puede encontrarse fácilmente y puede verse gráficamente en la figura 2.22. Este ocurre cuando $KV=A$. En este caso,

$$G(K, V)_{\max} = 1 - \frac{A}{B} = 1 - \frac{x_b}{x_a}$$

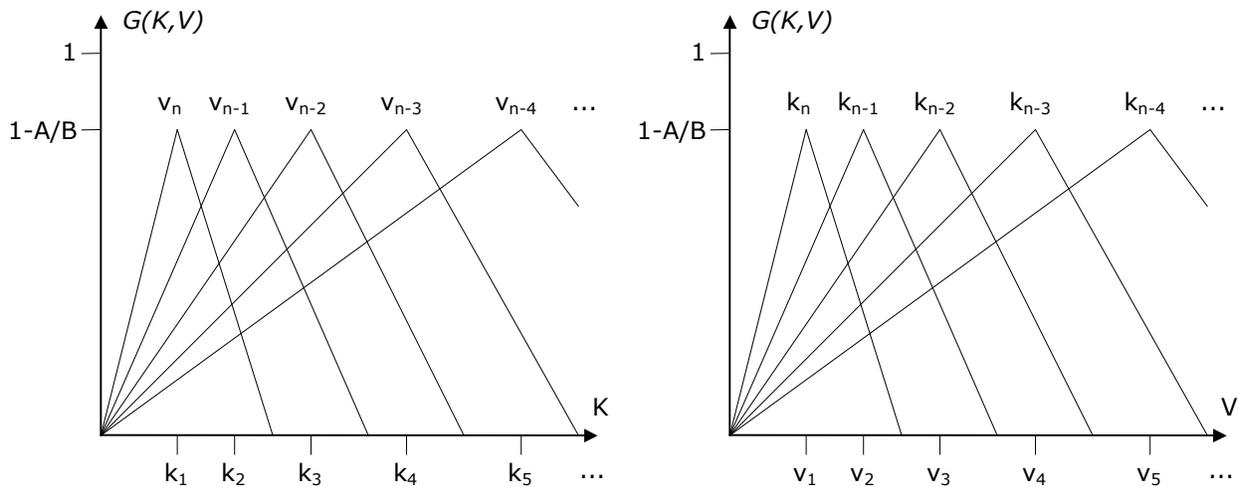


Figura 2.22. La función G vista como dos familias simétricas de triángulos con una forma que es función de la dimensión de los electrodos del condensador. Las dos variables independientes mantienen una relación hiperbólica.

Dado que $x_b < x_a$ y ambas son distancias positivas y reales, el valor máximo de la función es siempre positivo y menor a la unidad, y solo está determinado por la longitud de las placas precolectora y colectora.

Desde un punto de vista discreto, la función G puede apreciarse como dos familias de triángulos, una para cada una de las variables (V y K). Estas se encuentran integradas de forma que un espaciado uniforme en una de las variables produce un espaciado hiperbólico en los picos de los triángulos para la otra variable (figura 2.22).

2.4.2.3.1 La transformada discreta de Tammet

Es deseable utilizar al condensador de aspiración con barrido de campo como un espectrómetro de movilidad iónica. Para ello, es necesario poder reconstruir la función de densidad de movilidad iónica $D(K)$ a partir de la curva $I(V)$ obtenida con el condensador, es decir, la función inversa de la transformada propuesta por Tammet:

$$I(V) = \int fG(V, K, f)D(K)dK$$

Como puede deducirse de esta ecuación, cada punto de la curva de corriente se obtiene por integración a partir de una función G , la cual describe la información completa de la densidad de movilidad iónica en cada punto, pero vista desde una perspectiva diferente. De nuevo, utilizando la analogía con la tomografía axial computarizada, podemos considerar a la transformada de Tammet como una *proyección* y una transformada inversa puede considerarse como una *reconstrucción*.

Como es el caso para otras transformadas, la ecuación de Tammet requiere de la evaluación de las integrales asociadas, y puede ser descrita analíticamente únicamente si las expresiones involucradas son relativamente simples. Mas aún, las funciones de distribución de movilidad iónica no pueden ser descritas de manera analítica dado que son señales físicas y generalmente son obtenidas de forma discreta por un espectrómetro de movilidad iónica o algún equipo similar, y deben manipularse en forma no continua. Por otro lado, la función $I(V)$ también se obtiene de forma discreta ya que los voltajes suministrados al sistema son controlados por una computadora a través de un convertidor digital-analógico.

Esto significa que se requiere una técnica adecuada para el muestreo y una representación discreta de la ecuación de Tammet. Esta discretización permite una solución simple y eficiente desde el punto de vista computacional.

La transformada directa de Tammet en su versión discreta (DDTT) para un condensador de aspiración con una tasa de flujo de gas constante $f = f$ puede aproximarse mediante una sumatoria de Riemann [71]:

$$i(v_j) = f \sum_{i=0}^n \Delta k_i G(k_i, v_j) D(k_j)$$

donde $\Delta k_i = (k_i - k_{i-1})$. Entonces podemos escribir la ecuación para la DDTT en notación matricial:

$$\mathbf{i} = f \mathbf{G} \mathbf{d}$$

y si la matriz G es cuadrada y no singular, podemos definir la transformada inversa de Tammet discreta (DITT) como:

$$f \mathbf{d} = \mathbf{G}^{-1} \mathbf{i}$$

en donde \mathbf{i} es un vector que contiene los elementos de la curva característica $I(v_j)$,

$$\mathbf{i} = [I(v_1) \ I(v_2) \ \dots \ I(v_m)]^T$$

\mathbf{d} es un vector que contiene los elementos de la función de distribución de movilidad iónica $D(k_i)$,

$$\mathbf{d} = [D(k_1) D(k_2) \cdots D(k_n)]^T$$

y \mathbf{G} es una matriz cuadrada no singular que contiene los elementos $\Delta k_i G(k_i, v_j)$,

$$\mathbf{G} = \begin{bmatrix} (k_1 - k_0)G(k_1, v_1) & (k_2 - k_1)G(k_2, v_1) & \cdots & (k_n - k_{n-1})G(k_n, v_1) \\ (k_1 - k_0)G(k_1, v_2) & (k_2 - k_1)G(k_2, v_2) & \cdots & (k_n - k_{n-1})G(k_n, v_2) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ (k_1 - k_0)G(k_1, v_m) & (k_2 - k_1)G(k_2, v_m) & \cdots & (k_n - k_{n-1})G(k_n, v_m) \end{bmatrix}$$

donde,

$$\forall i = 0, \dots, n : k_i = \frac{A}{v_i} \quad \text{y} \quad v_i > 0$$

Esta última condición, aunque no necesaria para una transformación directa, es esencial para la transformada inversa ya que preserva la relación hiperbólica entre los dominios del voltaje y la movilidad iónica y determina el hecho de que la matriz \mathbf{G} posea un determinante diferente de cero y que por tanto exista una solución inversa única. Si lo que se desea es obtener una función de distribución de movilidad iónica $D(k_i)$ uniformemente espaciada utilizando la DITT para la curva de corriente $I(v_i)$ adquirida por un condensador de aspiración, entonces se requiere utilizar un esquema de muestreo apropiado espaciado hiperbólicamente en el dominio del voltaje. De forma más general, al aplicar la restricción descrita se puede designar la estrategia de muestreo requerida para obtener un rango y resolución deseados en cualquiera de los dominios, dadas las dimensiones del condensador y la tasa de flujo de gas empleada.

Otro detalle que cuidar para la fórmula anterior es que \mathbf{G} necesita ser cuadrada para determinar una inversa, es decir, $m=n$, pero en el caso de una transformada directa este requisito no es indispensable. Esto significa que, a pesar de que se pueden obtener transformadas directas con un número de puntos diferentes en ambos dominios (movilidad y voltaje), deben tener el mismo número de puntos en ambos dominios si se requiere una transformación inversa clásica.

2.4.2.4 Relación experimental entre el condensador de aspiración y el espectrógrafo IMS

La matemática propuesta para el condensador de aspiración y la relación que ésta mantiene entre los dominios de la densidad de movilidad iónica (provisto por la espectrometría de movilidad iónica) y la densidad de corriente (obtenido mediante el condensador de aspiración) sugiere la obtención de una función de eficiencia de captura que relacione ambos sistemas a partir de datos experimentales. A partir de la expresión matricial-vectorial de la función de Tammet, podemos re-definir:

$$\mathbf{I} = \mathbf{f} \mathbf{G}^T \mathbf{D}$$

donde \mathbf{I} se define como el conjunto de p vectores del espacio solución *intensidad de corriente* $\mathbf{I} = [\mathbf{i}_1 \mathbf{i}_2 \cdots \mathbf{i}_p]$, donde el i -ésimo vector está determinado por

$$\mathbf{i}_i = [I_i(v_1) I_i(v_2) \cdots I_i(v_m)]^T$$

y de la misma manera \mathbf{D} se define como el conjunto de q vectores de densidad de movilidad iónica correspondiente, $\mathbf{D} = [\mathbf{d}_1 \ \mathbf{d}_2 \ \dots \ \mathbf{d}_q]$, donde el j -ésimo vector está dado por

$$\mathbf{d}_j = [D_j(k_1) \ D_j(k_2) \ \dots \ D_j(k_n)]^T$$

Con estas definiciones, y si $m=n=p=q$, podemos encontrar la relación \mathbf{G}' mediante

$$\mathbf{G}' = \frac{1}{f} \mathbf{ID}^{-1}$$

Obviamente existen varias restricciones para este procedimiento. El primero, $m=n=p=q$, significa que necesitamos tener un número m de densidades de movilidad iónica de m muestras cada una y sus m correspondientes densidades de corriente (correspondientes entre sí) para poder obtener una relación cuadrada de $m \times m$. Si queremos una buena resolución para la función de relación, debemos tener una buena e igual resolución en movilidad y voltaje, además de una grande e igual cantidad de ejemplares \mathbf{d} e \mathbf{i} . Ya que éstos se obtienen mediante aparatos con diferencias bien definidas y bajo diferentes condiciones, la *matriz de relación* \mathbf{G}' reflejará la relación implícita entre el condensador de aspiración y el espectrómetro de movilidad iónica utilizado. Entonces, la *matriz de relación* \mathbf{G}' así obtenida no es la misma ni tiene el mismo significado que aquella definida anteriormente como *matriz* \mathbf{G} , pero juega el mismo papel que ésta al contener la información que determina la relación entre dos espacios diferentes, el espacio de densidad de movilidad iónica y el de densidad de corriente iónica, con la particularidad de que la *matriz de relación* \mathbf{G}' incluye además la relación entre dos sistemas diferentes.

2.5 Química de los gases y agentes anestésicos

Para nuestra investigación utilizamos cuatro gases posibles para la mezcla portadora y uno de cinco agentes anestésicos halogenados volátiles: desflurano, enflurano, halotano, isoflurano y sevoflurano. Cada gas y agente tienen diferentes propiedades físicas y químicas que los hacen únicos y que nos permiten diferenciarlos entre sí.

2.5.1 Gases de la mezcla portadora

2.5.1.1 Oxígeno

El oxígeno utilizado corresponde al oxígeno diatómico (O_2) como el que se encuentra en el aire. Es un gas incoloro, inodoro e insípido, de densidad un poco superior a la del aire. Se combina fácilmente pero no con el flúor. Constituye aproximadamente el 21% del aire que se respira y es fundamental para el metabolismo.

2.5.1.2 Nitrógeno

Es muy abundante en la naturaleza, libre o combinado. Constituye aproximadamente cuatro quintas partes del aire y forma compuestos complejos en los organismos vegetales y animales. Es un gas incoloro, inodoro e insípido. Se caracteriza por su apatía o indiferencia para la combinación debido a la energía de sus enlaces, por lo que es popular como gas de arrastre. No arde ni mantiene la combustión. Por estas razones hemos escogido al nitrógeno como gas diluyente en nuestro sistema, como veremos más adelante.

2.5.1.3 Óxido Nitroso

El óxido nitroso no existe libre en la naturaleza. Es un gas incoloro de sabor y olor dulces que se conoce también con el nombre de gas hilarante o gas de la risa, ya que provoca la risa en algunas personas al respirarlo. Es muy oxidante y es capaz de mantener la combustión del carbón, azufre, fósforo, etc. con mayor energía que el aire. Sin embargo, no es respirable por períodos prolongados y se usa como anestésico secundario y en el laboratorio para lograr bajas temperaturas.

2.5.1.4 Bióxido de Carbono

También conocido como anhídrido carbónico, constituye un pequeño porcentaje de la composición del aire y es producto (de la respiración) de animales, plantas, y la combustión de sustancias carbonadas. Es un gas incoloro, inodoro e insípido, mas denso que el aire y moderadamente soluble en agua. No es combustible ni comburente. No es venenoso en pequeñas cantidades pero si su proporción es superior al 20% en el aire respirado impide que el CO₂ de la sangre se desprenda y que la hemoglobina fije el oxígeno en su lugar.

2.5.2 Agentes anestésicos

Los agentes anestésicos (ciclopropano, halotano, éter di-etil, etc.) son gases inertes no metabólicos o vapores de líquidos los cuales, al ser inhalados, producen una depresión en la excitabilidad del tejido que es reversible y no tóxica [22]. Por un lado deben diferenciarse de los anestésicos locales por razones farmacológicas, bioquímicas y fisiológicas, y por otro, de hipnóticos tales como los barbitúricos, narcóticos como la morfina, y tranquilizantes como la clorpromazina.

La respuesta bioquímica a la inhalación de los agentes anestésicos no es la misma para todos, pero puede dividirse en dos grandes grupos [1]. El primero representa aquellos efectos debidos a la acción directa del agente sobre las membranas celulares, portadores de la membrana celular, sistemas enzimáticos celulares, etc. El segundo cubre aquellos efectos de alteración de la ventilación pulmonar, de la irrigación sanguínea de los órganos, de las tensiones gaseosas del tejido, del nivel hormonal circulatorio, etc., cada uno de los cuales tiene repercusiones a nivel metabólico. La mayoría de estas repercusiones son indirectas y pueden ser ilustradas por seis diferentes situaciones que pueden ocurrir durante la anestesia, cada una asociada con cambios metabólicos:

1. Algunos agentes se asocian con el incremento, mediado por el hipotálamo, de la actividad en el sistema nervioso simpático. Una consecuencia de esto es el aumento del nivel sanguíneo de sustancias metabólicamente activas, tales como la epinefrina. Otro efecto secundario es una glicogenólisis inducida que contribuye a una hiperglicemia (aumento del nivel de glucosa en la sangre) aunque los agentes anestésicos no son la única causa de ello.
2. Los agentes anestésicos inhalados pueden también estar asociados con la secreción reflexiva de hormonas metabólicamente activas (además del aumento de epinefrina). El efecto de los agentes sobre el sistema nervioso simpático y la actividad hormonal y su consecuente aumento del metabolismo, es una de varias razones por las cuales la anestesia no se relaciona con la baja en el consumo de oxígeno a pesar de una actividad somática disminuida.
3. Durante la anestesia ocurren cambios en la tensión gaseosa de los tejidos que resultan en la alteración del metabolismo. El cambio más importante es la disminución en la tensión de oxígeno que ocurre bajo la acción de algunos anestésicos. Esta caída en raras ocasiones se debe a una oxigenación alveolar o arterial disminuida, y en la mayoría de los casos se debe a un flujo decreciente de sangre en los tejidos (menor gasto cardíaco, hipotensión arterial, vasoconstricción

periférica, etc., aisladas o combinadas). Como resultado del poco oxígeno, se da un aumento en los niveles de ácido láctico sanguíneo, evidencia de que no se puede mantener la relación normal entre la difosforidina nucleótida oxidada y la reducida a nivel del tejido. Además, esta falta de ventilación alveolar puede causar aumentos en la tensión de bióxido de carbono. De hecho, la acidosis respiratoria (retención de bióxido de carbono) ocurre con mayor frecuencia en la anestesia moderna que la hipoxia, pues es más fácil oxigenar que remover bióxido de carbono.

4. Las consecuencias metabólicas de la operación quirúrgica y el trauma que conlleva la anestesia, se suman a los efectos bioquímicos que por sí sola tiene la anestesia. Con frecuencia es difícil disociar las consecuencias metabólicas de una intervención de los efectos de la anestesia si se hace un estudio metabólico durante la operación y la anestesia en lugar de hacerlo únicamente durante esta última.
5. Si el paciente entra en shock durante la anestesia, especialmente si el shock es de tipo hemorrágico, los efectos metabólicos del shock se añaden a, y acentúan el efecto metabólico de la anestesia.
6. Durante la anestesia la función renal disminuye, en especial el flujo sanguíneo renal y la filtración glomerular. Cuánto disminuyen es función del tipo y profundidad de la anestesia. Estos cambios se suman a la alteración del metabolismo observable al detener los mecanismos excretores renales. Otros efectos vasculares renales se acentúan por la elevación en la secreción de aldosterona y hormona pituitaria antidiurética bajo ciertos tipos de anestesia.
7. La temperatura corporal también se ve afectada y cambia (asciende y/o desciende) durante la anestesia, con las consecuencias bioquímicas que resultan y que son especialmente prominentes si se permite el desarrollo de una hipotermia.

En la actualidad, se utilizan principalmente cinco agentes anestésicos halogenados volátiles (VHAs) con estructuras moleculares similares, basadas principalmente sobre un alcano o éter de dos a tres carbonos, fluoradas y cloradas: halotano, isoflurano, enflurano, desflurano y sevoflurano. Durante uso clínico, solo uno de ellos debe ser administrado al paciente [98].

2.5.2.1 Agentes anestésicos halogenados inhalables volátiles (VHAs)

Los agentes anestésicos que se manejan en la presente investigación son hidrocarburos que contienen halógenos superiores (los cuales tienen siete electrones en su última capa, lo que los hace propensos a capturar un electrón y formar iones negativos [38,51,78]). En general su potencia es mayor dependiendo del halógeno que contengan, en el siguiente orden creciente (el cual también refleja potenciales de ionización decrecientes):

Flúor < Cloro < Bromo < Iodo

Por otro lado, la presencia de hidrógeno aumenta la potencia grandemente y disminuye el potencial de ionización.

Todos los VHAs son hidrocarburos acíclicos o alifáticos (es decir, en su estructura atómica no se forman cadenas cerradas). Todos tienen átomos de flúor adheridos a sus carbonos y por tanto se pueden clasificar como fluorocarbonos. Estos se caracterizan por su gran estabilidad o inactividad química (mayor a su análogo hidrocarburo) que heredan gracias al flúor, la cual les permite resistir a los agentes químicos más potentes.

Característica	Desflurano	Enflurano
Año de inicio de uso clínico	1988	1972
Fórmula Estructural	$ \begin{array}{c} \text{F} \quad \text{H} \quad \text{F} \\ \quad \quad \\ \text{F}-\text{C}-\text{C}-\text{O}-\text{C}-\text{H} \\ \quad \quad \\ \text{F} \quad \text{F} \quad \text{F} \end{array} $	$ \begin{array}{c} \text{Cl} \quad \text{F} \quad \text{F} \\ \quad \quad \\ \text{H}-\text{C}-\text{C}-\text{O}-\text{C}-\text{H} \\ \quad \quad \\ \text{F} \quad \text{F} \quad \text{F} \end{array} $
Fórmula	$\text{CHF}_2\text{OCHF}_2\text{CF}_3$	$\text{CHF}_2\text{OCF}_2\text{CHFCl}$
Nombre químico	1,2,2,2-tetrafluoroetil difluorometil éter	2-cloro-1,1,2-trifluoroetil difluorometil éter
Peso molecular [g/mol]	168.04	184.5
Presión de saturación de vapor (SVP) a 20°C [mmHg]	669	175
Fórmula para calcular la SVP [mmHg]	$\ln \text{SVP} = \text{C1} - \text{C2}/\text{T} + \text{C3} \cdot \ln \text{T}$ $\text{C1} = 25.501486$ $\text{C2} = -4086.975586$ $\text{C3} = -0.889732$ $\text{T} = ^\circ\text{C} + 273.16$	$\log \text{SVP} = \text{A} + \text{B}/\text{T}$ $\text{A} = 7.967$ $\text{B} = -1678.4$ $\text{T} = ^\circ\text{C} + 273.16$
Concentración de vapor saturado a 20°C y 1 atm [vol %]	87	23
MAC a 1 atm [vol %]	5.2 a 10% en 100% O ₂ 1.7 a 7.5% en 60% N ₂ O	1.68% en 100% O ₂ 1.17% en 30% N ₂ O 0.57% en 70% N ₂ O
PMAC [mmHg]	46 a 55	12.8
Punto de ebullición a 1 atm [°C]	22.8	56.5
Gravedad específica del agente líquido a 25°C	1.45	1.517
Coefficientes de partición a 37°C	Sangre/Gas: 0.424 Aceite de oliva/Gas: 18.7 Cerebro/Gas: 0.54	Sangre/Gas: 1.91 Aceite/Gas: 98.5 Cerebro/Gas: 2.48
Coefficientes de partición a 25°C	Polipropileno: 6.7 Polietileno: 16.2 Latex: 10.4 a 19.3 Polivinilo: 34.7	Hule conductivo: 74 Polivinilo: 120
Características físicas	No inflamable, no explosivo, incoloro	No inflamable, no explosivo, incoloro, aroma suave y dulce.
Estabilidad	Estable a iluminación normal, estable químicamente aún en presencia de ácidos fuertes. Ligera degradación en cal sodada a alta temperatura (80°C)	Estable en presencia aún de luz ultravioleta, y no se descompone en presencia de cal sodada.
Materiales que no ataca	Acero inoxidable, latón, latón niquelado, aluminio, aluminio anodizado, cobre y berilio.	Aluminio, estaño, latón, cobre y acero (sin embargo ataca fuertemente al VITON™).
Efectos secundarios	Mínimamente biotransformado por el hígado (menor a 0.02% de metabolitos urinarios). Sin toxicidad renal.	2.4% de metabolitos urinarios.

Tabla 2.2.a. Características físicas y químicas del Desflurano y el Enflurano.

Característica	Halotano	Isoflurano
Año de inicio de uso clínico	1956	1981
Fórmula Estructural	$ \begin{array}{c} \text{Cl} \quad \text{F} \\ \quad \\ \text{H}-\text{C}-\text{C}-\text{F} \\ \quad \\ \text{Br} \quad \text{F} \end{array} $	$ \begin{array}{c} \text{F} \quad \text{Cl} \quad \text{F} \\ \quad \quad \\ \text{F}-\text{C}-\text{C}-\text{O}-\text{C}-\text{H} \\ \quad \quad \\ \text{F} \quad \text{H} \quad \text{F} \end{array} $
Fórmula	CF ₃ CHBrCl	CF ₃ CHClOCHF ₂
Nombre químico	2-bromo-2-cloro-1,1,1-trifluoroetano	1-cloro-2,2,2-trifluoroetil difluorometil éter
Peso molecular [g/mol]	197.3	184.5
Presión de saturación de vapor (SVP) a 20°C [mmHg]	243	238
Fórmula para calcular la SVP [mmHg]		log SVP = A + B/T A = 8.056 B = -1664.58 T = °C + 273.16
Concentración de vapor saturado a 20°C y 1 atm [vol %]	32	31
MAC a 1 atm [vol %]	0.75% en 100% O ₂ 0.29% en 70% N ₂ O	1.15% en 100% O ₂ 0.5% en 70% N ₂ O
PMAC [mmHg]	5.7	8.7
Punto de ebullición a 1 atm [°C]	50.2	48.5
Gravedad específica del agente líquido a 25°C	1.87	1.496
Coefficientes de partición a 37°C	Sangre/Gas: 2.5 Aceite/Gas: 224 Cerebro/Gas: 4.75	Sangre/Gas: 1.43 Aceite/Gas: 90.8 Cerebro/Gas: 2 Agua/Gas: 0.61
Coefficientes de partición a 25°C	Plásticos: alto	Hule conductivo: 62 Hule de butil: 75 Poliuretano: 1.4 Polietileno: 2 Poliolefina: 1.1 Polivinilo: 110 Butil acetato: 2.5
Características físicas	No inflamable, no explosivo	Incoloro, transparente, inflamable, y con aroma poco irritante, etéreo
Estabilidad	Inestable al ser expuesto a la luz y forma ácidos volátiles. Se le agrega Timol (0.01%) como estabilizador y se almacena en recipientes polarizados. Estable en presencia de cal sodada.	Estable en condiciones normales de iluminación, incluso en presencia de luz ultravioleta. No se degrada en presencia de cal sodada.
Materiales que no ataca	Cobre	Aluminio, estaño, latón, cobre y acero (sin embargo ataca fuertemente al VITON™).
Efectos secundarios	Causa un alto porcentaje de metabolitos urinarios (15 a 20%) y puede causar afecciones hepáticas serias en algunos casos.	0.7% de metabolitos urinarios.

Tabla 2.2.b. Características físicas y químicas del halotano y el isoflurano.

Característica	Sevofluorano	Oxido Nitroso
Año de inicio de uso clínico	1990	
Fórmula Estructural	<pre> F H-F-C-F F-C-O-C-H H F-C-F F </pre>	$N \equiv N = O$
Fórmula	$CFH_2OCH(CF_3)_2$	N_2O
Nombre químico	fluorometil 2,2,2-trifluoro-1-trifluorometil etil éter	Oxido Nitroso
Peso molecular [g/mol]	200.05	44
Presión de saturación de vapor (SVP) a 20°C [mmHg]	157	39000
Fórmula para calcular la SVP [mmHg]	$\log SVP = A + B/T$ $A = 8.086$ $B = -1726.68$ $T = ^\circ C + 273.16$	
Concentración de vapor saturado a 20°C y 1 atm [vol %]	21	
MAC a 1 atm [vol %]	1.7% en 100% O2 0.66% en 70% N2O	115
PMAC [mmHg]	12.9	
Punto de ebullición a 1 atm [°C]	58.6	-88
Gravedad específica del agente líquido a 25°C	1.520 a 1.525	1.226 (a -88°C)
Coefficientes de partición a 37°C	Sangre/Gas: 0.63 a 0.69 Aceite de oliva/Gas: 47 a 54 Cerebro/Gas: 115 Agua/Gas: 0.36	Sangre/Gas: 0.46 Cerebro/Gas: 0.51
Coefficientes de partición a 25°C	Hule conductivo: 14 Hule de butil: 7.7 Polivinilo: 17.4 Polietileno: 1.3	
Características físicas	No inflamable, no explosivo, transparente, incoloro, con aroma no irritante	Incoloro, aroma dulce
Estabilidad	Estable incluso en presencia de luz ultravioleta. No se degrada en presencia de ácidos fuertes ni calor. Se degrada en presencia de absorbedores de CO ₂ .	Altamente inactivo y estable
Materiales que no ataca	Acero inoxidable, latón, latón niquelado, latón cromado, aluminio, cobre-berilio.	
Efectos secundarios	3% de metabolitos urinarios. Puede afectar pacientes con hígado delicado.	0.004% de metabolitos urinarios en el hígado (excelente)

Tabla 2.2.c. Características físicas y químicas del sevofluorano y el óxido nitroso.

Todos, excepto el halotano son éteres. En general, los éteres son compuestos formados por dos radicales, iguales o diferentes, unidos por un átomo de oxígeno. Las propiedades de los éteres con radicales derivados de alcanos (hidrocarburos saturados) se pueden resumir como sigue:

1. Con excepción del éter-dimetil, el cual es un gas, son líquidos volátiles e inflamables, mas ligeros que el agua.
2. Son relativamente inactivos químicamente, pero con un enlace C-O-C débil debido a los 2 pares de electrones no compartidos por el oxígeno.
3. Forman productos de sustitución al reaccionar con cloro y bromo.
4. Se descomponen en ésteres al ser calentados en presencia de ácidos fuertes.
5. Tienen bajo punto de ebullición al no asociarse por enlace de hidrógeno.
6. Son incoloros, de olor agradable, poco solubles en agua.

Algunas de estas propiedades se modifican gracias a la presencia de los halógenos en los agentes anestésicos. Por ejemplo, como hemos mencionado, el flúor le da una estabilidad mucho mayor al VHA que su análogo éter hidrocarburo.

Para nombrar a los VHAs éteres primero hay que determinar de qué alcano se obtuvieron los dos radicales (o directamente el nombre de los radicales):

Alcano		Radical	
CH ₄	Metileno	Metilo	CH ₃
C ₂ H ₆	Etileno	Etilo	C ₂ H ₅

Posteriormente se le asigna un número a los carbonos, desde el enlace libre del radical hacia afuera. Se escriben entonces en orden alfabético los nombres de los halógenos presentes en cada radical, empezando con el radical más grande, y utilizando prefijos si hay más de un átomo de un halógeno dado (di-, tri-, tetra-, penta-, hexa-, etc.), indicando con números los carbonos a los cuales están ligados, y añadiendo al final de cada serie el nombre del radical (sin la -o final). Finalmente, se agrega la palabra 'éter'.

Por otro lado, el halotano es simplemente un etano halogenado; es decir, es un etano con halógenos en lugar de algunos de sus hidrógenos. Para nombrarlo se utiliza un procedimiento análogo al que se explica para los éteres, con la diferencia de que no hay radicales. Simplemente se agrega, después de la indicación de los halógenos, la palabra 'etano'. La posición de los hidrógenos no se menciona en el nombre de ningún VHA, ya que se sabe de antemano que están presentes en todos los enlaces del alcano original que no se substituyen por un halógeno. Los nombres y características de todos los VHAs se incluyen en la tabla 2.2 [90,126].

2.5.2.2 Parámetros importantes de los anestésicos

2.5.2.2.1 Punto de ebullición

La temperatura a la cual la presión de vapor se iguala a la presión atmosférica, pasando todo el agente anestésico de la fase líquida a la gaseosa, se conoce como punto de ebullición.

2.5.2.2.2 Presión de vapor saturado (SVP)

Al colocar un vapor anestésico de los que se discuten en esta sección en un recipiente cerrado a una presión de una atmósfera y a temperatura ambiente (20°C), éste se encuentra en su forma líquida. Algunas de sus moléculas escapan de su superficie como vapor y entran en el espacio por encima de él. A una temperatura dada, se establece un equilibrio entre las moléculas en estado líquido y aquellas en estado de vapor. La fase gaseosa está saturada cuando contiene todo el vapor que puede para esa temperatura. Las moléculas de vapor en estas condiciones

ejercen una cierta presión de vapor sobre las paredes del recipiente, y a ésta se le denomina como la presión de vapor saturado (SVP) para esa temperatura.

2.5.2.2.3 Concentración de vapor

La concentración de un vapor puede medirse como una relación de la cantidad presente en fase gaseosa a la cantidad total (en porcentaje de volumen), y puede ser calculada con la ayuda de la Ley de Dalton como una fracción de la presión parcial del agente anestésico:

$$\text{Concentración [Vol. \%]} = \text{presión parcial del vapor} / \text{presión atmosférica total} * 100 \%$$

2.5.2.2.4 Concentración mínima alveolar (MAC)

La concentración mínima alveolar de un agente anestésico inhalado es aquella concentración que produce parálisis temporal (anestesia) en un 50% de los pacientes que son operados quirúrgicamente, y se usa como una medida de la profundidad de la anestesia. Se expresa comúnmente en porcentaje de volumen de gas alveolar a una atmósfera de presión, aunque es mejor relacionarlo con presión parcial pues es ésta la que, en el cerebro, es responsable de la profundidad de la anestesia.

Este parámetro puede variar con la edad del paciente y otros factores, como condición de salud y/o presencia de otros agentes anestésicos.

2.5.2.2.5 PMAC1

Es la presión parcial de un agente anestésico inhalado a una concentración de 1 MAC.

2.5.2.2.6 Gravedad específica

Para un líquido dado, la gravedad específica se define como la razón de la densidad del líquido a la densidad del agua a una temperatura dada. Para un gas se define como la razón de la densidad del gas a la densidad del aire a una temperatura y presión específicas.

2.5.2.2.7 Coeficiente de partición

- a) **Sangre / Gas:** Es una medida de la solubilidad del gas en sangre, y determina qué tan rápidas pueden ser las fases de inducción / recuperación de la anestesia y qué tan flexible es el control de la profundidad de ésta. Entre más pequeño sea el coeficiente, menos solubilidad tiene el agente, y más rápida y fácil de controlar puede ser la inducción.
- b) **Lípido / Gas:** En muchas ocasiones se utiliza aceite de oliva como el lípido y es una medida de la potencia de un anestésico. Esto se basa en la teoría de Myer-Overton [22], la cual plantea que entre mayor sea la solubilidad de un agente anestésico en un lípido o aceite, mayor será la potencia de éste. Esto se ve directamente reflejado en el MAC, el cual debe ser menor entre más potente sea el anestésico.
- c) **Tejido / Gas:** Generalmente para esta propiedad se da el coeficiente de partición para cerebro / gas pero también puede determinarse para músculo / gas y/o tejido graso / gas. Determina que tan rápido puede eliminarse el agente anestésico del cuerpo, ya que refleja la solubilidad de éste en los tejidos. Entre más soluble, más tarda en eliminarse.

d) **Componente / Gas:** Describe la solubilidad del agente anestésico en elementos tales como tuberías de plástico, polímeros u otro material, y proporciona una medida de cuánto se degradan éstos en presencia del anestésico. Entre más soluble, más activo es en este sentido.

2.5.2.3 Características del agente anestésico inhalado ideal [126]

- **Estabilidad molecular:** No debe alterarse su estructura molecular en presencia de luz, medios alcalinos o cal sodada (utilizada como colector de CO₂ en sistemas cerrados). Debe conservarse estable, preferentemente libre de conservadores, y debe tener una larga vida útil que permita su almacenamiento en diversas condiciones climáticas.
- **No explosivo:** No debe formar mezclas inflamables o explosivas con el aire, oxígeno u óxido nítrico.
- **Alta Potencia:** Debe tener una potencia anestésica considerable que permita su uso con altas concentraciones de oxígeno.
- **Baja solubilidad en sangre:** Debe tener una baja solubilidad en sangre para que la inducción y subsecuente recuperación sean lo más rápidas posible. Esto también permite que sea más flexible el control de la profundidad de la anestesia.
- **Aroma no desagradable y no irritante:** Debe tener un aroma agradable y no irritante que permita una inducción suave por inhalación, sobre todo en pacientes pediátricos.
- **No tóxico:** No debe ser metabolizado por el organismo y debe de estar libre de efectos tóxicos que alteren el funcionamiento de ciertos órganos, aún en condiciones de exposición constante (crónica) a dosis pequeñas, como sucede con el personal del quirófano.
- **Efectos secundarios mínimos:** Los efectos secundarios en el sistema respiratorio y/o cardiovascular deben ser mínimos.
- **Efectos reversibles en el sistema nervioso central (CNS):** Los efectos del agente anestésico sobre el CNS deben ser reversibles en cualquier momento y no debe existir actividad estimulante asociada. Debe proveer un cierto grado de analgesia (ausencia de dolor) e hipnosis.
- **Interacciones con otros medicamentos:** No deben existir interacciones adversas con otros medicamentos ni deben sensibilizar al corazón las quetocolaminas.

2.6 Espectrometría de movilidad iónica y agentes halogenados

Existe poca literatura sobre la aplicación de la espectrometría de movilidad iónica para la determinación de agentes anestésicos halogenados (VHAs) en el ambiente y en los gases respiratorios. En el artículo principal escrito hasta la fecha [30], Eiceman estudió la respuesta de los agentes halotano, enflurano e isoflurano mediante un espectrómetro de movilidad iónica (IMS).

Iones Producto	Abundancia Relativa		
	0.01 ppm	0.1 ppm	0.5 ppm
Cl ⁻	31		
H ₂ O.Cl ⁻	41		
(H ₂ O) ₂ .Cl ⁻	55		
Br ⁻	100	46	15
M.O ₂ ⁻		24	
M.Cl ⁻		100	50
M.Br ⁻		50	100

Tabla 2.3. Distribución de iones producto de halotano en aire a 40°C en un espectrómetro de movilidad iónica, identificados por espectrometría de masas.

En la tabla 2.3 se resumen los iones producto detectados en los espectros medidos para diferentes concentraciones de halotano, identificados mediante un espectrómetro de masa [30]. Es necesario mencionar que las muestras analizadas mediante un IMS generalmente tienen concentraciones muy bajas del gas a ser analizado, en rangos típicos de 0.01 a 1 partes por millón (ppm) por ejemplo. Esto se debe a que uno de los criterios esenciales de desempeño en el campo de espectrometría de movilidad iónica es el trabajo en la región lineal del aparato (sección 2.3.6).

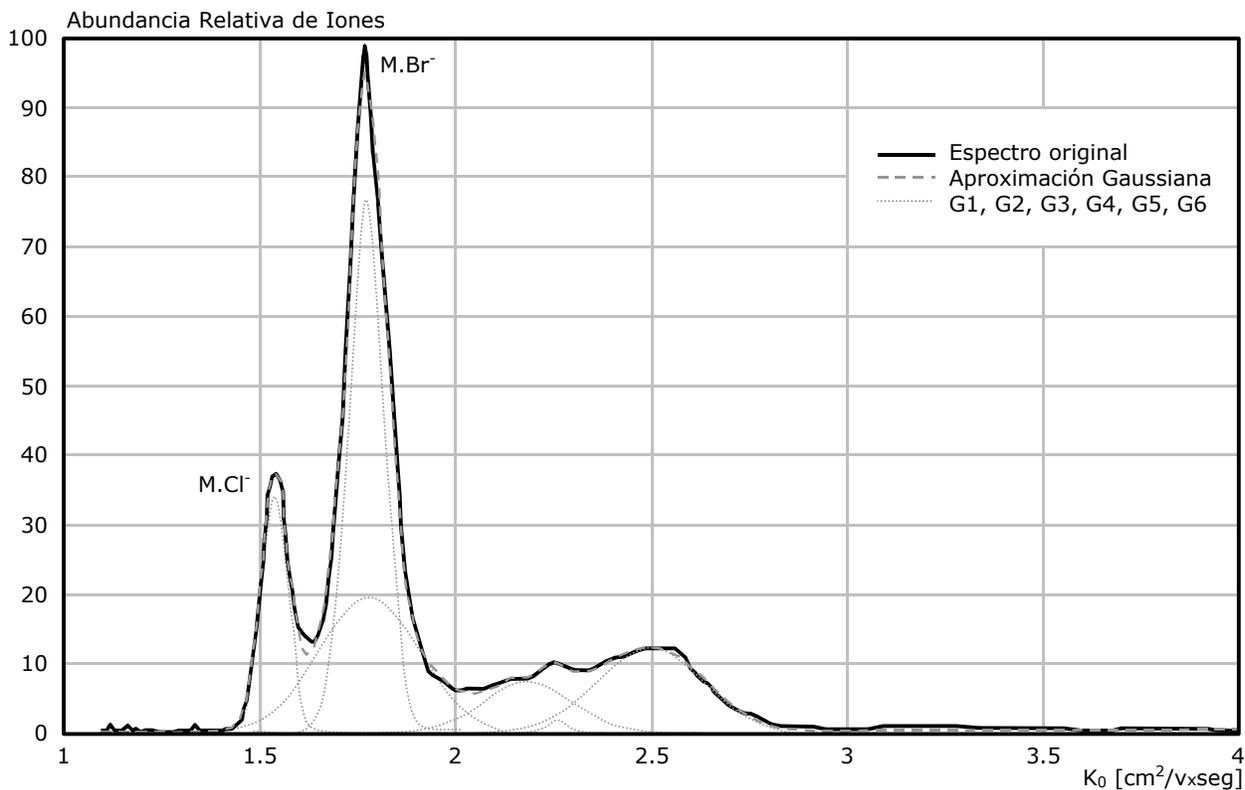


Figura 2.23. Espectro de movilidad iónica para iones negativos de halotano a una concentración de 0.5 ppm en aire, medido a una temperatura de 40°C usando un espectrómetro de movilidad iónica con ^{63}Ni como fuente de radiación, un campo eléctrico de 230 V/cm y un tubo de arrastre de 7 cm. Se utilizó aire como gas de arrastre. Se muestra además el resultado de un análisis Gaussiano utilizando 6 curvas Gaussianas (G1 a G6).

En la figura 2.23 se muestra el espectro de movilidad iónica de una muestra de halotano en aire a una concentración de 0.5 ppm, y se resumen las características del instrumento utilizado para hacer las mediciones [30]. Se muestra además un análisis Gaussiano del espectro, el cual se utiliza normalmente en espectrometría para caracterizar de una manera más simple al instrumento y al gas analizado [74,106]. De hecho se ha determinado que una distribución Gaussiana se acerca bastante bien a la distribución real de la corriente generada en una placa detectora por un grupo de iones de una cierta movilidad en un IMS [76] debido a la naturaleza del funcionamiento del instrumento, ya que los iones se introducen a la región de arrastre – en la cual se separan los iones según su movilidad (sección 2.3.6) – en la forma de un pulso de iones, y para este efecto existen dos mecanismos básicos: a) se suministra un pulso rectangular a una rejilla, la cual se polariza unos instantes, permitiendo el paso de un “pulso” de iones, o b) se “puls” la fuente misma de ionización. En cualquier caso, la corriente iónica tiene una anchura inicial (medida a la mitad de la altura del pico) que depende del tiempo y condiciones de la ionización. Sin embargo, esta anchura tiende a ser mayor (equivalente a una mayor varianza de la Gaussiana equivalente) dependiendo de diversos factores, como por ejemplo el tiempo y longitud del pulso inicial, difusión de la nube de iones [73] por repulsión entre iones debido a fuerzas de Coulomb en las regiones de

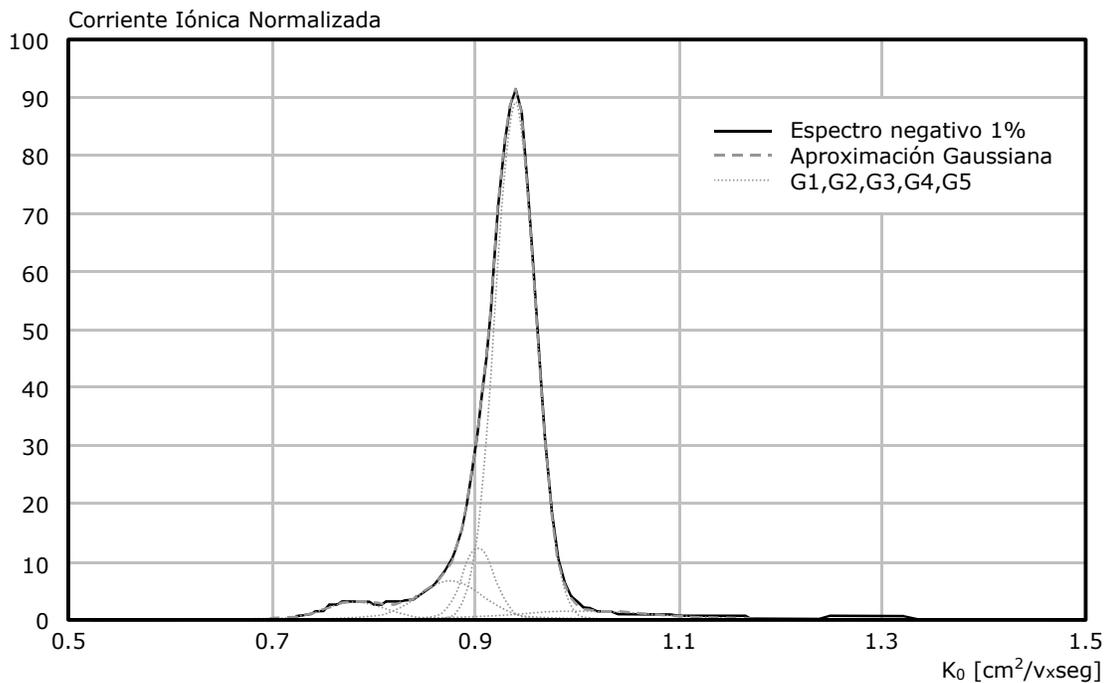
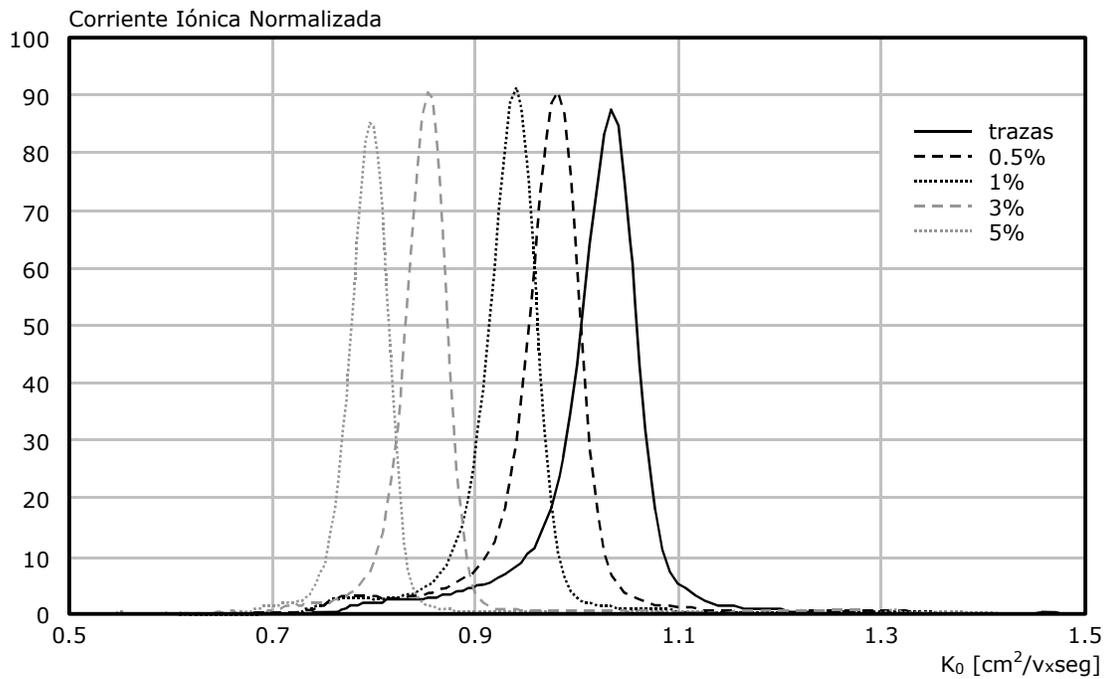


Figura 2.24. Arriba. Espectro de movilidad iónica para iones negativos de halotano a diferentes concentraciones medidos a una temperatura de 37°C usando un espectrómetro de movilidad iónica con ²⁴¹Am como fuente de radiación, un campo eléctrico de 4 KV/cm y un tubo de arrastre de 7.9 cm. Se utilizó nitrógeno como gas de arrastre. Abajo. Espectro de halotano al 1% con su correspondiente Análisis Gaussiano, aproximando el espectro original mediante la suma de 5 curvas Gaussianas G1-G5.

ionización y de arrastre, difusión de la nube de iones por inhomogeneidades del campo eléctrico, reacción entre iones y moléculas del gas analizado en la región de arrastre [41,51], distorsión de la señal de corriente debido a factores como ancho de banda limitada en el amplificador del detector o limitaciones de velocidad del convertidor analógico-digital. Finalmente, la densidad de corriente puede desviarse un poco de una distribución Gaussiana presentando asimetría (mayor varianza de un lado que del otro) [76], aunque esto generalmente sucede a muy bajas movilidades. Estos pulsos pueden aproximarse por dos Gaussianas, aunque no es práctica común hacerlo.

Entonces, el análisis Gaussiano ayuda a identificar en la figura 2.23 los picos importantes y muestra con mayor claridad aquellos que se confunden entre sí. Nótese que el pico correspondiente a $M.Br^-$ está representado por 2 Gaussianas. Esto solo significa que hay un único pico que se desvía un poco de la forma Gaussiana al ensancharse en su base.

En un estudio posterior, al igual que lo hiciera Eiceman, Sacristán [102] utilizó un espectrómetro de movilidad iónica para caracterizar halotano, enflurano y halotano, pero esta vez no en el rango de concentración de partes por millón, sino en el rango de concentraciones clínicas de los agentes anestésicos, lo cual significaría que el instrumento estaría trabajando en el rango de saturación. En la figura 2.24 se muestran los resultados obtenidos para iones negativos de halotano, y en la figura 2.25 para iones positivos.

Lo que se pudo concluir de este estudio es que durante la operación en el rango de saturación, cuando ya no pueden formarse iones reactantes y se han formado ya algunos iones producto como ocurre normalmente, empieza un proceso por el cual las moléculas del gas bajo análisis sin ionizar se adhieren a los iones producto por diversos procesos y se forman agrupaciones o clusters de mayor tamaño que en el rango de operación lineal, teniendo estas formaciones una movilidad menor que los iones producto cuando no ocurre la saturación. Un aumento de la concentración del gas no afecta de manera importante la forma y amplitud de los picos, y por tanto éstos no se relacionan directamente a la concentración del analito como en las mediciones IMS tradicionales, sino que el tiempo de aparición del pico, y por tanto la movilidad relacionada, dejan de ser constantes para un gas en particular a una misma concentración, sino que ahora dependen de la concentración. Sin embargo, dependiendo del tipo de gas si existe un pequeño cambio en la forma del espectro.

En particular, en el espectro de iones negativos de la figura 2.24 se observa claramente que al aumentar la concentración del agente anestésico el pico dominante se traslada a movilidades menores. El mismo efecto se observa en los iones positivos (figura 2.25) aunque este efecto es menos marcado. La mayor sensibilidad a la concentración de los iones negativos y su mayor resolución (relativa a la estrechez de la Gaussiana correspondiente) en comparación con los iones positivos, indican que es adecuado examinar el espectro de iones negativos cuando se requiere examinar la concentración de un compuesto anestésico halogenado.

En general, los mismos fenómenos pueden observarse cuando la medición se realiza con un condensador de aspiración en lugar de un espectrómetro de movilidad iónica [102]. La ecuación de Tamm et al. (sección 2.4.2.3) es una transformación lineal del espectro de movilidad iónica y en la figura 2.26 puede observarse claramente que, a pesar de ser una función suavizada debido a la naturaleza de la función G , la posición del máximo de la curva para cada tipo de iones (negativos a la izquierda, positivos a la derecha) se mueve hacia voltajes de barrido mayores en valor absoluto conforme la concentración aumenta. Es decir, la posición del máximo de cada espectro refleja su concentración. Nótese también que al igual que con el IMS las curvas correspondientes a iones negativos (izquierda) se separan más que las que corresponden a iones positivos (derecha) con cada incremento en la concentración.

El análisis de agentes anestésicos basado en el complicado proceso de agrupamiento o clustering de iones producto bajo condiciones de saturación para propósitos de identificación y cuantificación nunca ha sido realizado antes de esta investigación.

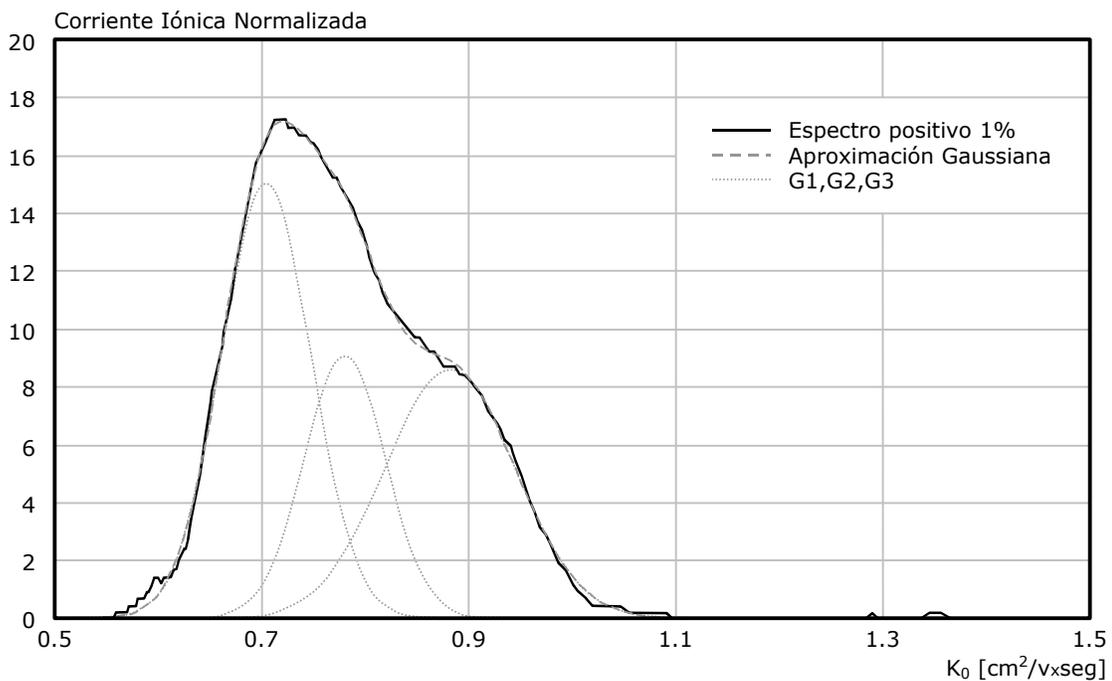
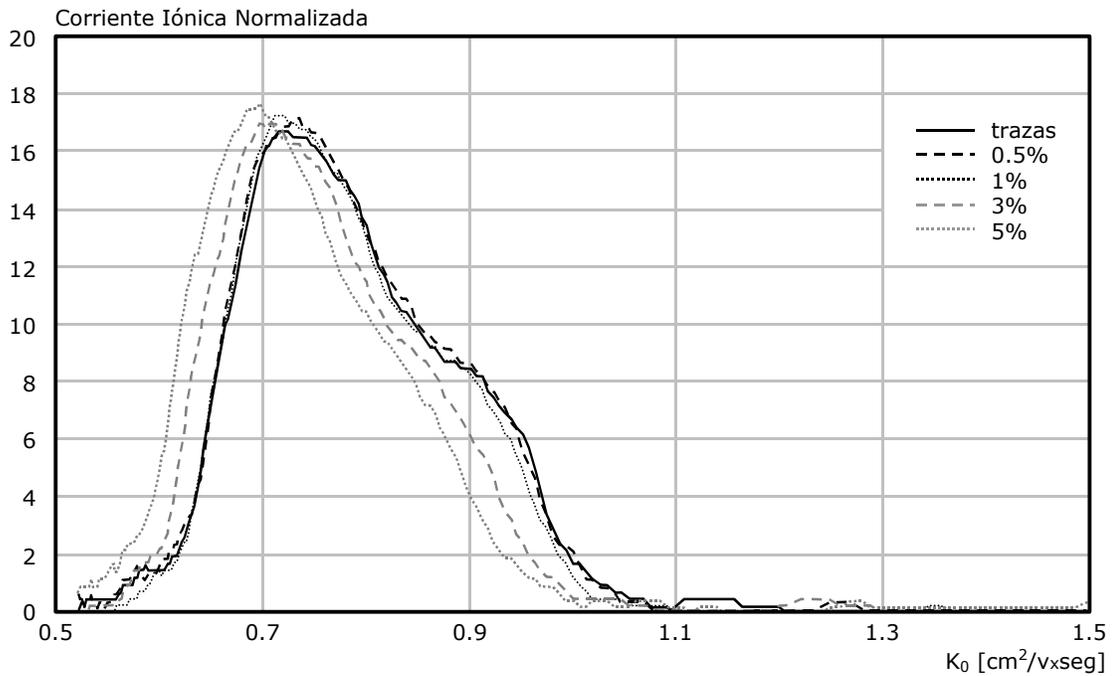


Figura 2.25. Arriba. Espectro de movilidad iónica para iones positivos de halotano a diversas concentraciones en un gas portador 40% O_2 , 50% N_2O , 10% CO_2 , medido a una temperatura de 37°C usando un espectrómetro de movilidad iónica con ^{241}Am como fuente de radiación, un campo eléctrico de 4 KV/cm y un tubo de arrastre de 7.9 cm . Se utilizó nitrógeno como gas de arrastre. Abajo. Espectro de halotano al 1% y su correspondiente Análisis Gaussiano, aproximando el espectro original mediante la suma de 3 curvas Gaussianas G1-G3.

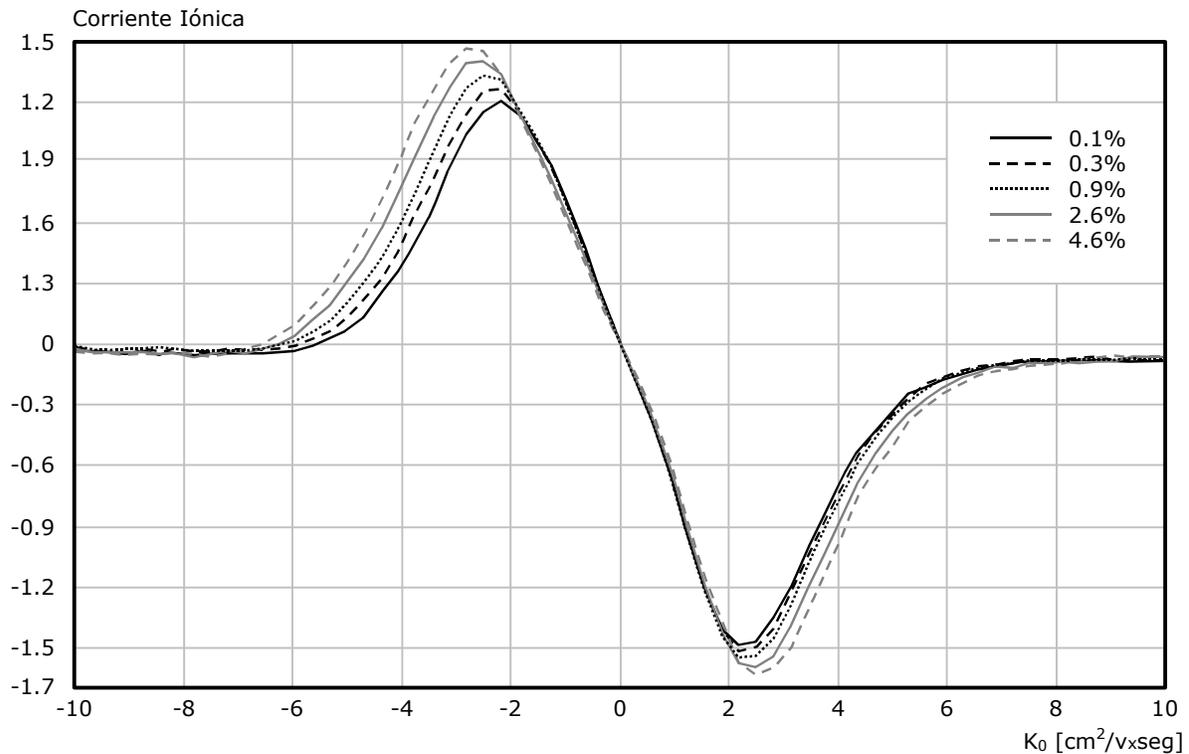


Figura 2.26. Espectro de corriente iónica para halotano a diversas concentraciones en un gas portador 25% O_2 , 75% N_2O , medido a una temperatura de 37°C usando un condensador de aspiración con ^{241}Am como fuente de radiación, precolector de 0.15 cm, colector de 0.25 cm, ancho de placas de 0.6 cm y altura de celda de medición de 0.04 cm, a un flujo de 0.5 lpm.

2.7 Herramientas de Inteligencia Artificial

2.7.1 Redes Neuronales Artificiales

Las redes neuronales representan una tecnología relativamente joven que se alimenta de varias disciplinas. Su origen radica en la imitación de la forma en que el cerebro procesa información, la cual es muy diferente de la forma en que una computadora convencional lo hace. La forma en que ahora entendemos funciona el cerebro tiene mucho que ver con el trabajo pionero de Ramón y Cajal [92], quien introdujo la idea de las *neuronas* como sus elementos constituyentes. Las neuronas son en realidad las unidades fundamentales del sistema nervioso y, en particular, del cerebro. Típicamente una neurona es más lenta que una compuerta lógica de silicio en unos cuantos ordenes de magnitud [49], y más conforme avanza la tecnología. Mientras los eventos suceden en el rango de nano-segundos (10^{-9} s) en las compuertas, en las neuronas se dan en milisegundos (10^{-3} s). Pareciera entonces que el cerebro fuera más lento que una computadora, pero no es así. El cerebro compensa esa relativamente baja velocidad de procesamiento al contar con un número de neuronas realmente exorbitante, cada una interconectada con otras neuronas de forma masiva. Se estima que existen aproximadamente 10 mil millones de neuronas solo en la corteza del cerebro humano y 60 billones de conexiones o *sinapsis* [108]. El resultado es una estructura con una sorprendente eficiencia. Así, el cerebro es un sistema de procesamiento muy complejo, no lineal y masivamente paralelo. Tiene la capacidad de organizar sus neuronas para realizar un gran número de tareas específicas (reconocimiento de patrones, percepción, control motor, etc.) varias veces más rápido que las mejores computadoras que tenemos hoy.

Al momento del nacimiento, un cerebro humano tiene ya una gran estructura y la habilidad de construir sus propias reglas y conexiones a través de la experiencia. Un gran porcentaje de esta interconexión se realiza en los dos primeros años después del nacimiento, pero el desarrollo

continúa mucho más allá de esta primera fase, en la que se estima que se realizan aproximadamente 1 millón de sinapsis por segundo.

En la figura 2.27 se presenta la estructura básica de una neurona biológica. Las *dendritas* son los receptores de la neurona y son ellas quienes reciben las señales que le son enviadas. El *axón*, protegido por una capa de *mielina*, conduce la señal de salida (respuesta) de la neurona hacia las dendritas de otra neurona. En el lugar donde las neuronas se juntan para el intercambio de estas señales ocurre la *sinapsis*. Una *sinapsis* es una unidad estructural elemental que media las interacciones entre las neuronas. La más común se realiza de forma química cuando un proceso pre-sináptico libera una sustancia *neurotransmisora* que se difunde a través de las dendritas a la unión sináptica, convirtiendo una señal eléctrica *pre-sináptica* en una señal química, que a su vez se vuelve a convertir en una señal eléctrica *post-sináptica* en la neurona receptora [108]. En la descripción tradicional de este proceso se asume que una sinápsis es una conexión simple que puede producir excitación o inhibición, pero no ambas al mismo tiempo, en la neurona receptora.

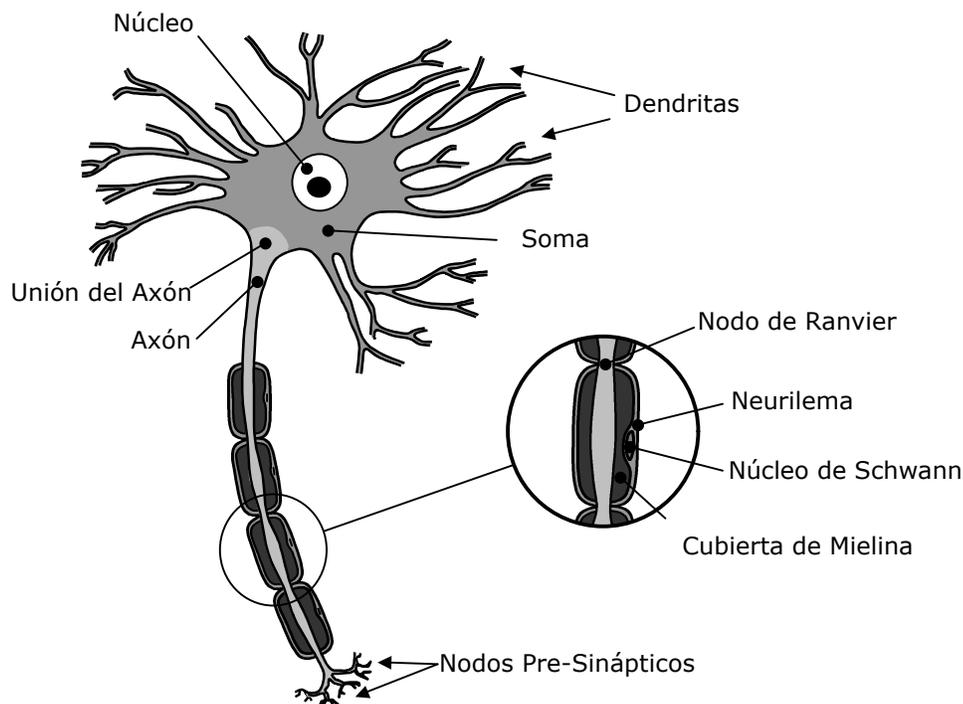


Figura 2.27. Estructura básica de una neurona biológica.

Cuando el cerebro aprende, lo que se modifica es la fuerza o eficiencia de la sinapsis. Esta es una característica de un sistema nervioso *plástico*, en el sentido de que puede adaptarse al medio que lo rodea. Otra característica es la creación de nuevas conexiones sinápticas entre neuronas.

Una red neuronal artificial se basa, en su forma más general, en las características que hemos discutido tiene un sistema biológico. Es un sistema de procesamiento masivamente paralelo con una propensión intrínseca al almacenamiento y generalización del conocimiento después de un proceso de aprendizaje [2]. En este sistema se utilizan unidades análogas a la neurona biológica conocidas como *elementos de procesamiento* o PEs.

En la figura 2.28 se muestra un elemento de procesamiento, el cual tiene varias *entradas* x_i que son equivalentes a las dendritas en un sistema biológico. Todas estas señales se combinan, usualmente por una simple suma ponderada, realizada mediante diferentes *pesos* w_{ji} para cada entrada, los cuales hacen las veces de la fuerza o eficiencia sináptica de la neurona biológica. El resultado es un nivel interno de actividad para la neurona artificial. Este valor se modifica entonces mediante una *función de transferencia* $T(x)$, que puede ser una función de umbral que presente una respuesta solo si la señal de entrada logra un cierto nivel, o puede ser una función continua. En

cualquier caso el resultado de esta función es generalmente la respuesta y_j de la neurona, la cual se puede pasar como entrada a otras neuronas.

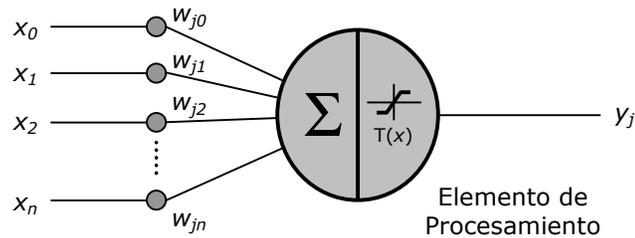


Figura 2.28. Estructura básica de una neurona artificial. Todos los estímulos x_i se suman de manera ponderada de acuerdo a pesos w_{ji} , y el resultado se pasa por una función de transferencia $T(x)$, para obtener una respuesta de salida.

Una red neuronal artificial consiste de muchos de estos elementos de procesamiento organizados en grupos denominados capas. Una red típica tiene dos capas para comunicarse con el medio externo: un buffer de entrada donde se presentan datos a la red, y una capa de salida por medio de la cual se presentan los resultados al exterior. Existen además una o más capas intermedias que se denominan *capas ocultas* y que representan un nivel de abstracción en donde ocurre el aprendizaje y la memorización. Todas estas capas pueden estar parcial o totalmente interconectadas. Cuando como en la figura 2.29 no existe retroalimentación de ninguna neurona hacia otra de una capa anterior o de su misma capa, incluyendo la neurona en cuestión, se dice que se tiene una *red neuronal de alimentación hacia adelante (feedforward network)*. Este tipo de redes es interesante porque, aunque el proceso de aprendizaje puede consumir mucho tiempo, una vez entrenada la red presenta un tiempo de respuesta casi instantáneo. Una red retroalimentada, por otra parte, generalmente pasa por un proceso de oscilación hasta que se estabiliza, y generalmente se utiliza en aplicaciones dependientes del tiempo.

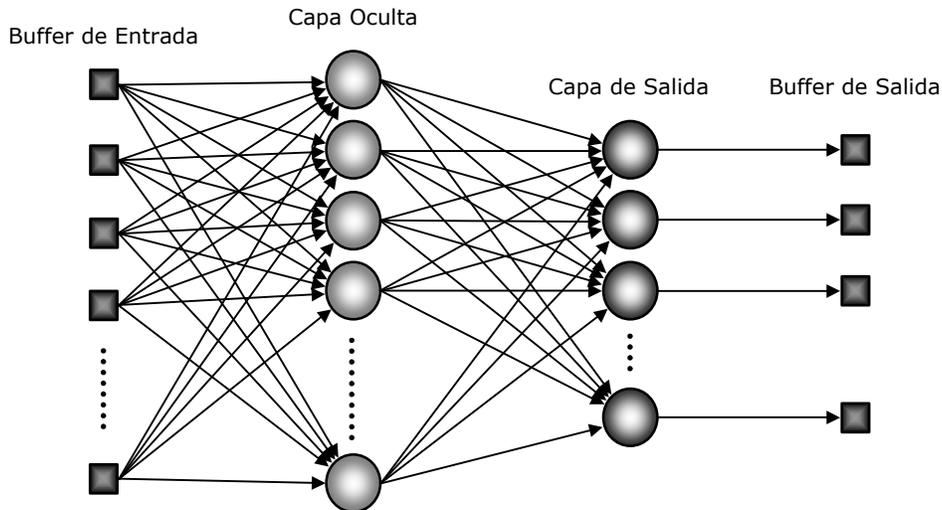


Figura 2.29. Estructura de una red neuronal artificial simple.

Existen tres tipos básicos de aprendizaje para una red neuronal artificial [83]. En el *aprendizaje supervisado* se le presentan a la red entradas y salidas deseadas para cada entrada. En el *aprendizaje no supervisado* se le presentan únicamente las entradas, para que la red construya su propia representación de los datos. Cuando las salidas que se le presentan a la red son iguales a las entradas entonces se presenta un *aprendizaje hetero-asociativo*.

En cualquier caso, el procedimiento empleado para el proceso de memorización se denomina *algoritmo de aprendizaje*. Su función es modificar los pesos sinápticos de la red de manera ordenada de forma que al final se alcance el objetivo deseado. Existen muchos algoritmos de aprendizaje, pero en general son variaciones de estos tres tipos:

- **Aprendizaje Hebbiano:** El peso de una conexión de entrada de un elemento de procesamiento se incrementa si ambos, la entrada y la salida deseada son grandes. En términos biológicos esto corresponde reforzar un camino neural cada vez que la activación en ambos lados de una sinapsis coincide.
- **Regla Delta:** Modifica los pesos de entrada de un elemento de procesamiento con el objetivo de reducir el error entre la salida obtenida y la salida deseada.
- **Competición:** Los elementos de procesamiento compiten entre si y el que genera la mayor respuesta para una entrada se modifica para parecerse un poco más a ella.

Un algoritmo de aprendizaje muy extendido es el que se conoce como *retro-propagación* [86,101], el cual se denomina de esa manera por la forma en que propaga el error de salida de una red desde las salidas hasta las entradas, modificando de manera acorde los pesos de cada elemento de procesamiento de acuerdo a la regla delta. Utilizando la siguiente notación:

$x_j^{[s]}$	Salida de la neurona j de la capa s
$w_{ji}^{[s]}$	Peso de la conexión entre la neurona i de la capa $s-1$ a la neurona j de la capa s
$I_j^{[s]}$	Suma ponderada de todas las entradas de la neurona j en la capa s

podemos escribir la retro-propagación del error como:

$$x_j^{[s]} = f\left(\sum_i (w_{ji}^{[s]} \cdot x_i^{[s-1]})\right) = f(I_j^{[s]})$$

donde $f(x)$ se denomina como *función de transferencia*, siendo tradicionalmente una función sigmoide [124]. Una función sigmoide que se utiliza con frecuencia es $f(x) = (1+e^{-x})^{-1}$, la *función logística*. Otra función común es la *tangente hiperbólica*:

$$f(x) = \frac{e^x - e^{-x}}{e^x + e^{-x}} \quad \text{que tiene por derivada} \quad f'(x) = (1 + f(x))(1 - f(x)).$$

Si la red tiene una función de error global E asociada que sea una función diferenciable que depende de los pesos, podemos escribir para cada nodo:

$$e_j^{[s]} = -\frac{dE}{dI_j^{[s]}}$$

Este gradiente es una medida del error local del elemento de procesamiento j en la capa s y apunta en la dirección de disminución del error en el espacio de pesos.

Dado un vector de entrada \mathbf{i} y una salida deseada \mathbf{d} , el algoritmo de retro-propagación propone los siguientes pasos [83]:

- Presentar el vector \mathbf{i} al buffer de entrada y propagarlo hasta la salida, obteniendo el vector \mathbf{o} .
- Al propagar la información, calcular todas las sumas I_j y los estados de salida x_j .
- Para cada PE de salida calcular el error local de la siguiente forma:

$$e_k^{[salida]} = -\frac{dE}{dI_k^{[salida]}} = -\frac{dE}{do_k} \cdot \frac{do_k}{dI_k} = (d_k - o_k) \cdot f'(I_k)$$

donde el error global se calcula como (el factor 1/2 se añade por conveniencia):

$$E = \frac{1}{2} \sum_k (d_k - o_k)^2$$

- Para cada PE de salida, si \mathbf{b} es un coeficiente de aprendizaje escogido por el usuario, de importante ajuste para obtener una buena velocidad de convergencia y obtener el mejor resultado posible, calcular el cambio en los pesos usando:

$$\Delta w_{ji}^{[salida]} = -\mathbf{b} \frac{dE}{dw_{ji}^{[salida]}} = -\mathbf{b} \frac{dE}{dI_j^{[salida]}} \cdot \frac{dI_j^{[salida]}}{dw_{ji}^{[salida]}} = \mathbf{b} e_j^{[salida]} \cdot x_i^{[salida-1]}$$

- Para cada capa s , comenzando desde la capa previa a la salida y trabajando hacia atrás, hasta la capa posterior al buffer de entrada, y para cada PE de la capa s , calcular el error local (asumiendo tangente hiperbólica como transferencia):

$$e_j^{[s]} = -\frac{dE}{dI_j^{[s]}} = f'(I_j^{[s]}) \cdot \sum_k (e_k^{[s+1]} w_{kj}^{[s+1]}) = (1 + x_j^{[s]})(1 - x_j^{[s]}) \cdot \sum_k e_k^{[s+1]} w_{kj}^{[s+1]}$$

y el cambio en los pesos usando:

$$\Delta w_{ji}^{[s]} = -\mathbf{b} \frac{dE}{dw_{ji}^{[s]}} = -\mathbf{b} \frac{dE}{dI_j^{[s]}} \cdot \frac{dI_j^{[s]}}{dw_{ji}^{[s]}} = \mathbf{b} e_j^{[s]} \cdot x_i^{[s-1]}$$

En concreto, la estrategia de retro-propagación consiste en propagar hacia adelante las entradas de capa en capa hasta la salida, determinar el error, y entonces pasar este error de regreso hasta la entrada, mientras se van haciendo pequeños ajustes en los pesos al multiplicar el error por la derivada de la función de transferencia y por \mathbf{b} , lo cual escala dicho error.

2.7.1.1 Redes Neuronales y la clasificación de patrones

Los problemas de *clasificación de patrones* involucran el asignarle una clase a un patrón desconocido basándose en el reconocimiento de atributos o características significantes. Este trabajo, muchas veces sencillo para un humano, se complica cuando se requiere que lo realice una computadora, la cual debe primero tener la habilidad de procesar la información de entrada, implementar un criterio de semejanza, y decidir la clase a la que pertenece el patrón. Puede decirse que *el problema de clasificación es en realidad un problema de reconocimiento* y que *el reconocimiento es la habilidad de clasificar*.

El reconocimiento de patrones es una ciencia inexacta que involucra muchas disciplinas, admitiendo diferentes aproximaciones al problema. La estrategia de ataque tradicional es la estadística, de la cual la más famosa es la utilización de clasificadores Bayesianos [24,42]. Un clasificador puede considerarse como una máquina que calcula los factores discriminantes y selecciona la categoría correspondiente al discriminante con mayor respuesta. En particular, los clasificadores Bayesianos se basan en la suposición de que el problema de decisión se puede describir en términos estadísticos y que todas las probabilidades requeridas se pueden cuantificar. Si \mathbf{x} es un vector de características, un discriminante para este tipo de clasificadores sería la probabilidad de que este vector pertenezca a una clase dada:

$$g_i(\mathbf{x}) = p\left(\frac{c_i}{\mathbf{x}}\right) = \frac{p\left(\frac{\mathbf{x}}{c_i}\right)p(c_i)}{p(\mathbf{x})} = \frac{p\left(\frac{\mathbf{x}}{c_i}\right)p(c_i)}{\sum_{i=1}^{clases} p\left(\frac{\mathbf{x}}{c_i}\right)p(c_i)}$$

El clasificador Bayesiano se considera óptimo en el sentido de que si se conocen todas las probabilidades relevantes, logra la clasificación máximamente correcta. Ningún otro clasificador puede lograr una mejor clasificación. Desafortunadamente en aplicaciones del mundo real no se tiene un conocimiento completo de las características estadísticas o probabilísticas de un problema dado, y solo se pueden aproximar.

En general existen dos aproximaciones: la paramétrica y la no paramétrica. La *aproximación paramétrica* utiliza muestras para estimar los parámetros probabilísticos, los cuales utiliza como si fueran los reales. Las técnicas no paramétricas se saltan la estimación y se van directamente a las funciones de clasificación. Por ejemplo, el método de clasificación por los *k-vecinos* más cercanos le asigna una clase a un patrón examinando la clase a la que pertenecen sus *k* vecinos más cercanos y escogiendo la clase mayoritaria.

Las redes neuronales, utilizadas en un contexto de reconocimiento de patrones, pertenecen a la clase de *clasificadores no paramétricos*. Las redes multicapa como las que ya se han descrito han demostrado ser aproximadores universales de funciones [49]. Gracias a su capacidad de generalización, aprendizaje y aproximación, las redes neuronales pueden entrenarse para resolver problemas de clasificación al presentarles patrones prototipo y la clase a la que corresponden. En la mayoría de los casos se tiene un número de neuronas en la capa de salida igual al número de clases, y se entrena a la red de forma en que la salida deseada sea binaria, es decir, que se obtenga la unidad únicamente en la neurona de salida correspondiente a la clase correcta, y cero en las demás. Esta representación, sin embargo, presenta un problema: no existe un acoplamiento de las salidas, de forma que cada una aprende de manera independiente. Para resolver este pequeño detalle, Bridle [12] ha propuesto la utilización de una función de activación para las neuronas de la capa de salida que denomina *SoftMax*, la cual es una versión continua y suave de una función competitiva 1 de N que propicia que la suma de todas las salidas sea la unidad. De esta forma se asegura que sea en realidad la neurona que responde mejor a un patrón de entrada la que obtenga una salida más grande.

Los patrones de entrada generalmente son el resultado del pre-procesamiento de los datos a clasificar, que son tratados para resaltar las características principales que facilitarían su identificación y/o para reducir lo más posible su volumen. Durante el proceso de aprendizaje, los pesos de conexión entre las neuronas se ajustan hasta que el error cuadrático medio entre las salidas obtenidas y las deseadas sea mínimo. De esta forma, la información necesaria para realizar la clasificación se distribuye a través de las neuronas, específicamente en sus pesos y conexiones. Una vez entrenada con éxito, la red puede asignarle una clase a un patrón que antes no haya visto durante el aprendizaje, y estas salidas aproximadas se utilizan en el proceso de clasificación, normalmente asignando el patrón a la clase que haya obtenido una salida máxima. De esta forma, una red neuronal se puede considerar una especie de calculadora de discriminantes.

Además de las redes de retropropagación, mencionaremos brevemente las *redes neuronales de base radial*, descritas en su forma tradicional por Moody y Darken [81]. En general, éstas incluyen a cualquier red que tenga una *representación interna radialmente simétrica* en cada elemento de procesamiento. Para cumplir con este requisito, deben poseer tres características:

- Un **centro**, un vector en el espacio almacenado en el vector de pesos que va desde la capa de entrada a una capa oculta denominada *capa de patrones*.
- Una **medida de distancia** para calcular qué tan lejos del centro se encuentra un vector de entrada. Típicamente se utiliza la distancia Euclídeana.
- Una **función de transferencia** de una sola variable, la cual determina la salida de un elemento de procesamiento al transformar la medida de distancia. Una función común es la Gaussiana, la cual produce salidas más grandes cuando la distancia desde el centro es pequeña.

El aprendizaje para los elementos de procesamiento consiste en utilizar primero un algoritmo de agrupamiento (clustering) para determinar los centros y un cálculo heurístico de los vecinos más cercanos para determinar la dispersión o desviación estándar de las Gaussianas. Después se utiliza la regresión lineal o un algoritmo de descenso por gradiente para determinar los pesos que van desde la capa oculta a la capa de salida. En general la capa oculta que contiene las funciones radiales no es lineal, mientras que la función de transferencia de las neuronas de la capa de salida es lineal [72].

2.7.2 Lógica Difusa

Entre los cambios paradigmáticos que han ocurrido en la ciencia y las matemáticas en los últimos cien años se encuentra el concepto de *incertidumbre*. En la ciencia, este concepto se tenía por indeseable, pero se ha caído en la cuenta de que tiene una gran utilidad. Este despertar encuentra su raíz en el estudio, a fines del siglo IX, de los procesos físicos a nivel molecular, cuando surgió la necesidad de una nueva aproximación por métodos estadísticos, los cuales resultaron ser útiles no solo en este campo, sino en muchos otros.

Un punto importante en la evolución del concepto moderno de incertidumbre fue la publicación de un artículo presentado por Lofti A. Zadeh [130], en el que se incluían algunas ideas ya presentadas casi 30 años antes por Max Black [9]. En este artículo se introduce la teoría de *conjuntos difusos (fuzzy sets)*, los cuales son simplemente conjuntos con límites no muy precisos. La *membresía* de un conjunto difuso no es una cuestión de pertenencia o no pertenencia, como en la lógica clásica, sino de pertenencia en un cierto grado. Esta forma de entender las cosas fue revolucionaria en cuanto a que retaba a la lógica bi-valuada tradicional, la lógica Aristotélica, fundamento de grandes teorías, incluyendo la teoría de la probabilidad.

La capacidad de los *conjuntos difusos* de expresar transiciones graduales de membresía entre conjuntos tiene una amplia utilidad. No solo es una buena representación de la incertidumbre, sino que puede describir con mayor facilidad conceptos vagamente definidos como aquellos del lenguaje natural que utilizamos los humanos. Por ejemplo, podemos decir que el día no está muy soleado. Esta aseveración incluye diferentes grados de cantidad de luz solar que llega hasta quien realiza la apreciación. Decir algo así es intuitivo y simple, y no se limita a los extremos de la lógica bi-valuada bajo la cual solo podríamos decir si el día está o no soleado.

Un conjunto difuso puede incluso definirse matemáticamente asignándole a cada individuo del universo de discurso un valor que represente su grado de membresía. En la práctica generalmente se utilizan números reales entre cero y uno para definir la membresía, donde 0 representa la no pertenencia y 1 la pertenencia completa a un conjunto difuso particular. Desde este punto de vista, la lógica Aristotélica es un caso particular de la lógica difusa.

2.7.2.1 Sistemas de control difuso

La cantidad de investigación que se ha realizado desde mediados de los años sesenta es impresionante. En la actualidad existe una amplia gama de aplicaciones de la lógica difusa en todos los campos. Una de ellas es el diseño de *sistemas difusos*, los cuales son todos aquellos sistemas cuyas variables, o al menos algunas de ellas, se definen mediante conjuntos difusos.

Un *controlador difuso* es un sistema difuso que, a diferencia de un controlador clásico, puede incorporar conocimiento de un operador humano o experto. En este sentido, un controlador difuso es un caso especial de un *sistema experto* [109]. Esta capacidad es crucial para enfrentar problemas en los que es imposible construir un modelo matemático del proceso a ser controlado, o en donde el modelo es difícil o costoso de aplicar. Esto incluye no-linealidades, una naturaleza variante en el tiempo, perturbaciones externas, degradación de los sensores u otras dificultades que hagan difícil o imposible la obtención de mediciones precisas y confiables. El conocimiento de un experto humano puede entonces utilizarse como alternativa a un modelo complejo.

Mientras que el conocimiento de un experto es difícil de expresar en términos precisos, una descripción imprecisa puede ser articulada por un operador con relativa facilidad. Esta descripción lingüística consiste en un conjunto de reglas de control que se componen de *proposiciones difusas*, como por ejemplo: **SI** la temperatura es *MUY ALTA* , **Y** la presión es *UN POCO BAJA* , **ENTONCES** el cambio en el calentamiento debe ser *LIGERAMENTE NEGATIVO*. En esta proposición o regla la temperatura y la presión son las variables observadas y la aplicación de calor es la variable controlada. Las expresiones de incertidumbre *MUY ALTA*, *UN POCO BAJA*, y *LIGERAMENTE NEGATIVO* pueden representarse de forma conveniente mediante un conjunto difuso definido sobre la variable que describen o califican.

En general, como se muestra en la figura 2.30, un controlador difuso consiste de cuatro módulos [66]: una *base de reglas difusas* (FRB), un *generador de inferencias difuso* (FIE), un *módulo de difusión ó fuzzificación* (FM) y un *módulo de concentración o de-fuzzificación* (DFM). La fuzzificación consiste en convertir las mediciones de las variables observadas en valores de *membresía* de un *conjunto difuso*. Esos valores se utilizan para evaluar las reglas por medio del generador de inferencias. El resultado de esta evaluación es un conjunto difuso (o varios) definido sobre el conjunto de reacciones de salida posibles. Este conjunto se convierte por medio del proceso de de-fuzzificación en un valor concreto, no difuso, que representa la acción de control a realizarse.

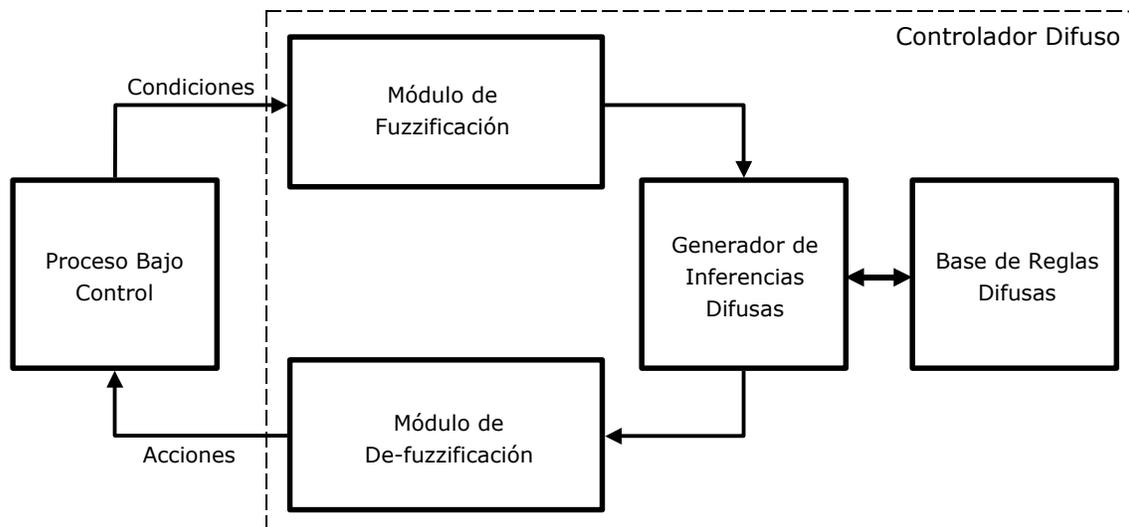


Figura 2.30. Esquema general de un controlador de lógica difusa.

El diseño clásico de un controlador de lógica difusa involucra los siguientes pasos [66]:

1. Habiendo identificado las variables relevantes de entrada y salida, así como los rangos de valores que pueden tomar, es necesario seleccionar estados lingüísticos significativos para describir cada variable, expresándolos por medio de conjuntos difusos. Por ejemplo, si tenemos dos variables de salida A y B que se toman valores entre $[-a,a]$ y $[-b,b]$ respectivamente, así como una salida C definida sobre $[-c,c]$, podemos definir los siguientes estados lingüísticos para cada variable:

NL	Negativo grande	PL	Positivo grande
NM	Negativo mediano	PM	Positivo mediano
NS	Negativo pequeño	PS	Positivo pequeño
AZ	Aproximadamente cero		

Estos estados lingüísticos pueden a su vez ser representados por conjunto difusos que expresan su grado de membresía por medio de una función triangular como se muestra en la figura 2.31, y podemos hacerlo de forma análoga para las variables B y C. Sin embargo, esta solo es una posible distribución de los conjuntos. Las formas de las funciones de membresía pueden no ser triangulares, y ni siquiera necesitan ser simétricas. Por otro lado, un solo valor puede pertenecer a varios conjuntos difusos a la vez, con un grado de membresía o pertenencia para cada uno. En el ejemplo un valor solo puede pertenecer a un máximo de 2 conjuntos, y a un mínimo de uno, pero dependiendo de la forma y distribución de los conjuntos, la situación puede cambiar.

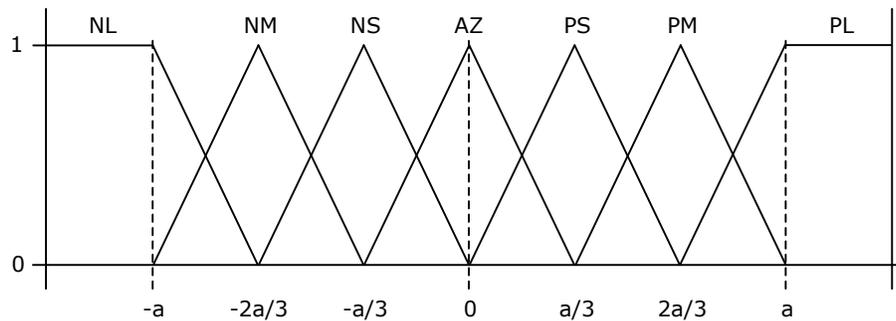


Figura 2.31. Posible asignación de conjuntos difusos en el rango $[-a,a]$.

		B							
		C	NL	NM	NS	AZ	PS	PM	PL
A	NL			PL			PM	AZ	
	BM			PL			PM	AZ	
	NS				PM	PS	AZ	NM	
	AZ		PM		PS	AZ	NS		
	PS		PM		AZ	NS	NM		
	PM							NL	
	PL		AZ		NM			NL	

Tabla 2.4. Ejemplo de una base de reglas difusa. Se han resaltado los renglones y columnas correspondientes a los valores difusos de A y B encontrados en el paso 2. En particular nos interesa su intersección.

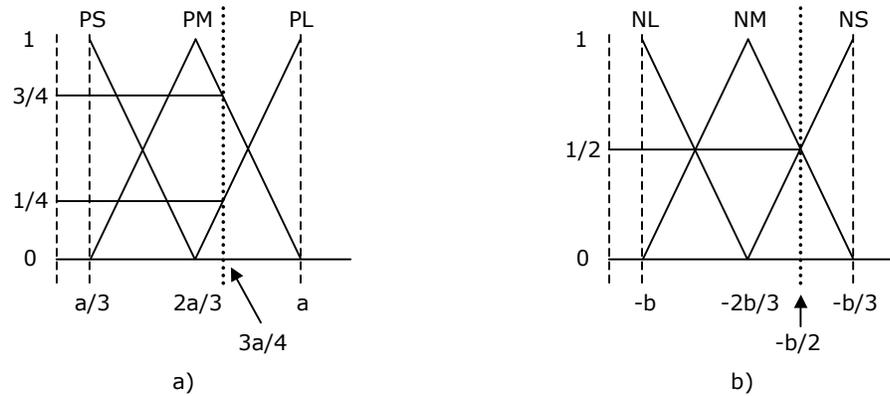


Figura 2.32. Fuzzificación de las variables de entrada. a) La variable A con un valor de $3a/4$ interseca 2 conjuntos difusos: Positivo Mediano (PM) con una membresía de 0.75 y Positivo Grande (PL) con una membresía de 0.25. b) La variable B con un valor de $-b/2$ interseca también 2 conjuntos difusos: Negativo Mediano (NM) y Negativo Pequeño (NS), ambos con una membresía de 0.5.

- Se fuzzifican las variables de entrada usando los conjuntos definidos. Si, por ejemplo, A tuviera un valor de $3a/4$ y B un valor de $-b/2$, se haría como en la figura 2.32.
- Se utilizan las variables difusas para encontrar una respuesta de salida basada en la base de reglas difusas. Aquí empieza el proceso de inferencia. La base de reglas se construye previamente, ya sea obteniendo la información de expertos humanos o de datos empíricos a partir de algoritmos de aprendizaje (mediante redes neuronales, por ejemplo). En general, las reglas tienen la forma canónica

$$\text{Si } A = X \quad \text{y} \quad B = Y \quad \text{entonces} \quad C = Z$$

Dado que en el ejemplo existen 2 variables de entrada y una de salida, y cada variable tiene 7 posibles valores lingüísticos, podemos construir con reglas de este tipo una matriz como la que se muestra en la tabla 2.3. En ella se resumen todas las reglas del sistema, y se han resaltado aquellas que se activan para las entradas descritas en el paso 2, y se puede observar que la decisión también es difusa. La intersección de las zonas sombreadas representa la acción que debe tomar el controlador para las entradas presentadas. Puede verse que han sido cuatro las reglas activadas.

- Ahora podemos evaluar estas reglas. Para ello primero cuantizamos de manera difusa la operación lógica **y**. Existen varias formas de definir esta función en términos difusos, y la más común es la inferencia realizada mediante el *mínimo* de los valores de membresía. Otra es utilizando su *producto*. Es preciso notar que estas definiciones de la función **y** corresponden a la lógica bi-valuada cuando nos limitamos a utilizar ceros y unos. De esta forma evaluamos las cuatro reglas. Las premisas de

Si	A = PM	y	B = NM	entonces	C = AZ
Si	A = PM	y	B = NS	entonces	C = NM
Si	A = PL	y	B = NM	entonces	C = AZ
Si	A = PL	y	B = NS	entonces	C = NM

se evalúan mediante y_{\min} como

$$\begin{aligned} \min\{0.75, 0.5\} &= 0.50 \\ \min\{0.75, 0.5\} &= 0.50 \\ \min\{0.25, 0.5\} &= 0.25 \\ \min\{0.25, 0.5\} &= 0.25 \end{aligned}$$

Estos valores representan la certidumbre que tenemos de que estas reglas aplican en la situación que se nos presenta, y por tanto también representan la membresía de la variable C para el conjunto difuso de salida asociado con la regla.

5. Lo que necesitamos ahora es combinar las varias recomendaciones de las reglas en una sola acción difusa. Esta es la *composición*. Así como en la inferencia hay dos métodos comunes (mínimo y producto), en la composición hay dos métodos análogos: máximo y suma. En la composición por máximo la salida se construye como el máximo punto a punto de los conjuntos de salida activados, cada uno con la altura determinada en el proceso de inferencia. En la composición por suma el conjunto difuso de salida está dado por la suma punto a punto de todos los conjuntos activados durante el proceso de inferencia, con sus alturas respectivas.
6. Por último necesitamos convertir el conjunto difuso de salida obtenido, junto con su grado de membresía asociado, a un valor único con el que podamos trabajar. Este paso se denomina *de-fuzzificación*. El método más común es el del *centro de gravedad* de los conjuntos de salida. Sea m_i el centro de la base del triángulo que representa al conjunto de salida i , y sea h_i el resultado de su premisa, es decir, su valor de membresía, entonces el conjunto resultante se puede describir como un trapecio de ancho $w_i=c/3$ y altura h_i , con un área dada por

$$area_i = w_i \left(h_i - \frac{h_i^2}{2} \right)$$

y el centro de gravedad se calcula entonces como

$$cog = \frac{\sum_i \left(b_i \sum_i area_i \right)}{\sum_i area_i}$$

con lo que se obtiene el valor no difuso de la variable C para tomar la acción de control requerida. Como es evidente, la simplificación de los cálculos es una de las ventajas de utilizar funciones de membresía triangulares. No siempre es fácil calcular el centro de gravedad, sobre todo cuando la forma de los conjuntos difusos de salida no es simple. Otros métodos que existen para combinar los conjuntos difusos y que están más allá del objetivo de esta discusión son el *centro de área*, el *centro de máximos*, la *media de máximos*, y los *unitarios* o *singletons*.

2.7.2.2 Agrupamiento Fuzzy c-means

Una aplicación de la lógica difusa es el *agrupamiento* o *clustering*. El agrupamiento es una noción fundamental en el área del *reconocimiento de patrones* y se ocupa de la partición de un conjunto de datos en diversos grupos de modo que la similitud de los datos dentro de cada grupo sea mayor que de grupo a grupo, por lo que tiene un papel fundamental en la identificación de estructuras dentro de los datos [70,124,128]. Dado un conjunto finito de datos X, el problema del agrupamiento consiste en encontrar los centros de grupos que puedan caracterizar las clases relevantes dentro del conjunto. En el agrupamiento clásico, las relaciones entre los datos de cada grupo tienden a ser muy fuertes o estrictas. Cuando se requiere un agrupamiento en el que las relaciones entre grupos pueden ser graduales o simplemente menos severas, es decir, en el que un elemento no simplemente pertenece o no pertenece a una clase, sino que pertenece con un cierto grado de membresía, se pueden usar métodos de lógica difusa para realizar el

agrupamiento. El *agrupamiento-c difuso* o *fuzzy c-means*, propuesto por Bezdek [8], es una de estas soluciones, y la *c* del nombre se refiere al número de clases difusas que se le piden al algoritmo encontrar. Para aplicarlo hay que seguir los pasos que se presentan a continuación [66]:

1. Primero se selecciona, a criterio de quien lo aplica, un número de clases en las que se desean agrupar los datos. Se determina además un parámetro de fuzzificación, $m > 1$, por el cual, si tiende a 1, el algoritmo convergirá a una solución *k-means* [70] o *c-means* clásica [75] (no difusa), y si m tiende a infinito, entonces todos los centros tienden hacia el centroide del conjunto de datos. Es decir, las particiones son más difusas en cuanto mayor sea m . Otro parámetro que se fija es ϵ , un número positivo pequeño que sirve como criterio para detener el algoritmo. Primero hay que inicializar $t=0$. A partir del conjunto de datos $X=\{x_1, x_2, \dots, x_n\}$, se seleccionan al azar c grados de membresía de los datos $P=\{A_1, A_2, \dots, A_c\}$. Estas particiones deben ser de la forma

$$A_i = \frac{a_{i1}}{x_1} + \frac{a_{i2}}{x_2} + \dots + \frac{a_{in}}{x_n}$$

y para todo valor de i deben cumplir

$$\sum_{k=1}^n a_{ik} = 1$$

2. Calcular los c centros de los grupos utilizando

$$v_i = \frac{\sum_{k=1}^n [A_i(x_k)]^m x_k}{\sum_{k=1}^n [A_i(x_k)]^m}$$

donde $m > 1$ es un número real que influencia los grados de membresía de los grupos.

3. Recalcular las particiones. Para cada dato x_k y centro de grupo v_i :

- Si $\|x_k - v_i\|^2 > 0$ para toda i , entonces $A_i(x_k) = \left[\sum_{j=1}^c \left(\frac{\|x_k - v_j\|^2}{\|x_k - v_i\|^2} \right)^{\frac{1}{m-1}} \right]^{-1}$
- Si $\|x_k - v_i\|^2 = 0$ para alguna $i \in I$, entonces $A_i(x_k)$ se define como cualquier número real no negativo que satisfaga $\sum_{i \in I} A_i(x_k) = 1$ para $i \in I$, y $A_i(x_k) = 0$ para $i \notin I$

4. Si la distancia $|P_{anterior} - P_{nuevo}| \leq \epsilon$ entonces detener el algoritmo. Si no, ir al paso 2.

2.8 Minería de datos y la selección o extracción de características [123]

Un sistema que captura información sobre un proceso puede encontrarse con el problema de que la cantidad de datos que ha recopilado es mucha, y no necesariamente todo lo que ha recopilado es información relevante para lo que la aplicación requiere. La *minería de datos* representa el proceso por medio del cual se induce información previamente desconocida, no trivial, y potencialmente útil a partir del conjunto de datos provisto por el sistema de medición o captura. La minería de datos incluye todos los pasos realizados en el proceso de resaltar la información escondida de un conjunto de datos, como la selección del conjunto, su limpieza, adecuación, pre-procesamiento, correlación, y posterior transformación, e inclusive los procesos de *selección y extracción de características* [59,124].

En el caso de un sistema de reconocimiento de patrones, el objetivo es clasificar ejemplos de determinados procesos u objetos en diferentes clases o categorías preestablecidas (en un *sistema supervisado*) o automáticamente generadas (en un *sistema no supervisado*). El patrón se describe por medio de un conjunto de observaciones físicas, a partir de las cuales deben construirse *vectores de características*. Mediante los vectores de características se construye un mapa de relaciones entre el espacio de características y el conjunto de clases, de forma que dado un vector particular se pueda determinar la clase a la que corresponde. El problema es que en muchos casos no se tiene un modelo o teoría establecida previamente que facilite la identificación de las características relevantes que permiten discriminar entre las diversas categorías. Entonces, el problema de la *selección de características* consiste en seleccionar un subconjunto de n características de entre un conjunto original de m características ($m > n$), bajo algún criterio de desempeño. En general [31], existen un total de

$$\binom{m}{n} = \frac{m!}{n!(m-n)!}$$

tales subconjuntos, y se antoja impráctica la búsqueda exhaustiva, aún para valores pequeños de m . Entre otras cosas, la selección de características busca

- Reducir la complejidad del clasificador y su implementación
- Comprimir la información al eliminar características redundantes e irrelevantes
- Proveer una mejor clasificación al reducir el número de características relevantes

y se aplica en un gran número de problemas diversos:

- Aplicaciones donde se fusionan datos de diversos sensores
- Integración de múltiples modelos matemáticos
- Aplicaciones donde se requiere recuperar las relaciones escondidas entre un gran número de datos

Existen muchos métodos de selección de características, generalmente divididos en métodos estadísticos y métodos de inteligencia artificial. Dentro de los primeros se tienen a su vez subdivisiones, como por ejemplo métodos óptimos y subóptimos, con solución múltiple o única, determinísticos o estocásticos. Aunque solo el método exhaustivo es realmente óptimo, se considera también como tal el método de *ramificación y acotamiento (branch & bound)*, el cual es exhaustivo bajo condiciones de monotonicidad. Más aún, Cover y Van Campenhout han demostrado que ningún procedimiento secuencial puede garantizar la selección del subconjunto óptimo, excepto la búsqueda exhaustiva [18].

En general, un sistema de selección de características requiere [18]:

- Un criterio de evaluación para comparar un subconjunto de características
- Un procedimiento de búsqueda
- Un criterio de detención, típicamente un umbral de significancia o la dimensión final del espacio de características

Por otro lado, desde el punto de vista Bayesiano no existen malas características. No se puede mejorar un clasificador Bayesiano por la eliminación de características, es decir, éste cuenta con una propiedad de monotonicidad. Sin embargo, en la práctica no se cumplen los requerimientos ideales y siempre se cuenta con una muestra de datos finita.

2.8.1 Reducción dimensional

Cada vez es más común, sobre todo en el ámbito de la investigación, el estudiar conjuntos de datos obtenidos mediante varios sensores, cada uno de éstos con una buena resolución, lo que se traduce en un finito conjunto de datos multidimensional. El análisis de estos conjuntos representa un reto para quien los analiza debido al gran número de parámetros. Más aún, uno de los principales problemas de estos datos es que en la mayoría de los casos un gran número de las dimensiones no es "importante" para el entendimiento, clasificación o detección del fenómeno de estudio, por lo que es de gran interés el estudio de métodos para reducir el número de dimensiones de los datos antes de extraerles información o incluso como parte del proceso mismo de extracción. En términos matemáticos, si tenemos un conjunto \mathbf{x} de datos esto se expresaría como

$$\mathbf{x} = (x_1 \dots x_p) \rightarrow \mathbf{y} = T(\mathbf{x}) = (y_1 \dots y_q), \quad p > q$$

donde utilizamos un método de reducción dimensional, una transformación $T(\mathbf{x})$, para obtener un nuevo conjunto de datos \mathbf{y} de menor dimensión.

En las muestras finitas se presenta además un problema conocido como la *maldición de la dimensionalidad*, que implica que, además de no poder visualizar datos de dimensión elevada, para su clasificación se requiere un número de muestras exponencialmente relacionadas con la dimensión de los datos. Esto implica que, si se parte de un número pequeño de características, el desempeño de un clasificador mejora al agregar características continuamente hasta alcanzar un máximo, para después de él empezar a decaer [120]. Este fenómeno se conoce como *despunte* (*peaking phenomenon*) [94]. El desempeño es producto de el número de muestras, el número de características y la complejidad del clasificador. Jain y Zongker además muestran los peligros de ocupar la selección de características para clasificación cuando se tienen relativamente pocos datos esparcidos en altas dimensiones [31]. Básicamente la selección resultará muy pobre, aunque se puede mejorar al aumentar el tamaño del conjunto de entrenamiento. Otra forma de combatir este efecto es la inclusión de conocimiento previo en el proceso de clasificación.

En este contexto, es necesario que el problema de reducción dimensional sea tratado de la manera correcta. Hay dos razones principales para reducir el número de dimensiones (y directa o indirectamente de características) de los datos: el costo que implica manejar datos grandes (que incluye el no poder visualizarlos) y, debido al fenómeno de despunte, mejorar la clasificación en caso de tener pocas muestras. Por otro lado, al reducir las dimensiones se corre el riesgo de perder información discriminatoria en detrimento de la clasificación.

En este sentido sería importante hacer una distinción entre dos términos relacionados y que comparten el mismo objetivo: *selección de características* y *extracción de características*. La selección implica escoger las mas sobresalientes características presentes en una muestra de datos, mientras que la extracción implica la creación de características nuevas, más útiles, a partir de combinaciones o transformaciones de otras. La reducción de la dimensión de un conjunto de

datos también puede realizarse por selección o extracción, pero en un sentido práctico, mediante la extracción de características se logran representaciones de menor dimensión mejor relacionadas con el conjunto de datos original, ya que en la simple selección se escogen algunas características y se descartan las demás. Sin embargo, en algunas ocasiones las características descartadas son irrelevantes para el objetivo y no es necesario utilizar un método más complejo.

Es importante introducir en este punto el concepto de *dimensión intrínseca*, bajo el cual podemos suponer que un conjunto de datos, debido a los procesos por los cuales fueron generados, poseen estructuras subyacentes, gobernadas por un n número de parámetros significantes. En este caso, la dimensión intrínseca de tal conjunto de datos es n . La interpretación geométrica es entonces que el conjunto de datos yace sobre una hiper-superficie n -dimensional.

Existe una gran variedad de métodos de reducción dimensional y escoger el adecuado depende del conjunto de datos y del objetivo final de su aplicación. Por ejemplo, no es lo mismo utilizar la reducción dimensional para la visualización, en donde se busca una representación de los datos que conserve las características estructurales originales pero que se pueda proyectar en dos o máximo tres dimensiones, que utilizarla para extraer la información relevante para construir vectores de características adecuados para la clasificación. Sin embargo, no hay duda que ambas aplicaciones tienen mucho en común.

Los métodos de reducción dimensional por extracción de características pueden dividirse en dos categorías generales: métodos lineales y no lineales. Los *métodos lineales* incluyen el Análisis de Componentes Principales (PCA), el Análisis de componentes independientes (ICA), el Análisis de Discriminantes Lineales (LDA), diferentes técnicas de Escalamiento Multidimensional (MDS), métodos de Persecución o Búsqueda de Proyecciones (PP), modelos de Variable Latente, y Análisis de Factores (FA), entre otros. Entre los *métodos no lineales* encontramos versiones no lineales de los algoritmos lineales ya mencionados, versiones *kernel*, o *neurales* de estos y otros algoritmos, Mapeado de Sammon, ISOMAP, Empotramiento Localmente Lineal (LLE), Mapas Auto-Organizados (SOMs), Análisis de Curvas Principales (PC), Análisis de Componentes Curvilíneos (CCA), Análisis de Distancias Curvilíneas (CDA), Autocodificadores Multicapa, Mapeado Topográfico Generativo (GTM), Mapeado de Perspectiva Relacional (RMP) y Máquinas de Soporte Vectorial (SVM).

2.8.1.1 Análisis de Componentes Principales (PCA) [61]

La forma en que se presentan los datos influye de gran manera los patrones que se pueden identificar en ellos y la información que se les puede extraer. Uno de los principales objetivos del reconocimiento de patrones es encontrar un sistema de coordenadas intrínseco a los datos y que ayude a que su estructura interna sea más evidente. Tradicionalmente se ha utilizado la información de las estadísticas de primer y segundo orden (media, varianza, covarianza) para construir estos sistemas de coordenadas al desarrollar técnicas Gaussianas como el Análisis de Componentes Principales y el Análisis Factorial. El primero, PCA, muy relacionado con el análisis de factores, y también conocido como la transformada de Karhunen-Loève (debido a que se trata de la expansión de un vector de datos mediante los eigen-vectores de la matriz de correlación, conocida como la versión discreta de la expansión de Karhunen-Loève) es probablemente la técnica de reducción dimensional más utilizada y una de las más antiguas, propuesta en 1901 por Pearson [87] y posteriormente desarrollada de forma práctica por Hotelling [56].

Cuando se tiene un conjunto de datos obtenidos de la misma forma o generados por un mismo proceso, estos pueden estar correlacionados entre sí de forma que se obscurecen las características sobresalientes que poseen. En este sentido PCA también puede ser utilizado como una técnica de extracción de características.

En un sistema ortogonal de coordenadas, si se calcula la suma de las varianzas para cada eje y posteriormente se transforman los datos a otro sistema ortogonal de coordenadas cualquiera, se observa que la *varianza total* se preserva [128]. Así, mediante PCA se realiza una proyección de los datos hacia un sistema de coordenadas cuyos ejes ortogonales no presentan correlación (es decir, los datos se des-correlacionan), preservan una varianza máxima y, de manera equivalente, minimizan el error cuadrático de una reconstrucción de los datos originales, asumiendo de forma implícita una distribución Gaussiana.

Esta transformación se describe como

$$\mathbf{Y} = \mathbf{W}(\mathbf{X} - \boldsymbol{\mu})$$

en donde \mathbf{Y} es el conjunto n -dimensional proyectado, \mathbf{X} es el conjunto m -dimensional de datos original ($m > n$), $\boldsymbol{\mu}$ es el valor medio de los datos, y \mathbf{W} contiene los vectores de proyección de PCA. Estos m vectores n -dimensionales están dados por los eigen-vectores $\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \dots, \mathbf{e}_m$ de la matriz de covarianza \mathbf{C} de los datos centrados, que corresponden a sus eigen-valores $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_m$. Los eigen-valores de la matriz de covarianza son invariantes bajo transformaciones lineales ortonormales. La matriz de covarianza es

$$\mathbf{C} = \frac{1}{m-1} \sum_{i=1}^m (\mathbf{x}_i - \boldsymbol{\mu})(\mathbf{x}_i - \boldsymbol{\mu})^T$$

mientras que los eigen-vectores y eigen-valores se obtienen al resolver

$$(\mathbf{C} - \lambda_i \mathbf{I})\mathbf{e}_i = \mathbf{0}, \quad i=1, 2, \dots, m$$

Una vez obtenidos los eigen-vectores, se ordenan de mayor a menor de acuerdo a la magnitud de su eigen-valor asociado, y éstos representan los ejes del nuevo sistema de coordenadas. Cada eje se considera un *componente* y cada uno retiene un porcentaje de la varianza total original. Para reducir la dimensión de los datos originales se utilizan entonces los primeros n eigen-vectores para la matriz de transformación y los demás se descartan [3]. La proporción de la varianza retenida por los primeros n eigen-vectores es

$$r = \left(\frac{\sum_{i=1}^n \lambda_i}{\sum_{i=1}^m \lambda_i} \right) \cdot 100\%$$

En la mayoría de las aplicaciones se procura que al menos 90% o 95% de la varianza sea retenida, y en general con esto no se pierde mucha información debido a que la mayoría de la varianza retenida se encuentra en los primeros componentes (de ahí que se les denomine *principales*) y ésta decae rápidamente para los demás. En algunas aplicaciones inclusive se piensa en la varianza descartada como debida al ruido, y entonces PCA se interpreta como una especie de filtrado, lo que representa una útil propiedad.

Otra propiedad de PCA, como ya se ha mencionado, es que des-correlaciona los datos. Es decir, la matriz de correlación de los datos proyectados es una matriz diagonal. Para datos con una verdadera distribución Gaussiana, la no correlación es equivalente a la independencia estadística. Si además se normalizan los datos mediante una matriz de eigen-valores, la matriz de correlación será una matriz identidad \mathbf{I} . Cuando el proceso se aplica de esta forma se denomina *PCA esférico* o *PCA blanqueador*.

Por su gran utilidad, existen ya muchas variaciones de PCA, como por ejemplo PCA probabilístico (una modificación para incluir un modelo probabilístico de los datos y del ruido) y PCA neural (una implementación en redes neuronales del algoritmo PCA).

2.8.1.1.1 Descomposición en Valores Singulares (SVD) y algunas de sus aplicaciones

La descomposición en valores singulares es una de las varias técnicas establecidas para encontrar los eigen-vectores y eigen-valores de una matriz, importante para algoritmos como el de PCA. Para ello se reduce una matriz rectangular a su forma diagonal al pre-multiplicarla y post-

multiplicarla por dos diferentes matrices ortogonales [48]. Los elementos de la diagonal se conocen como los valores singulares de la matriz. Sea \mathbf{X} una matriz de m por n , entonces existe una matriz ortogonal \mathbf{V} de n por n y una matriz ortogonal \mathbf{U} de m por m tales que

$$\mathbf{U} \mathbf{X} \mathbf{V} = \mathbf{S}$$

en donde \mathbf{S} es una matriz diagonal de m por n definida por

$$\mathbf{S} = \begin{bmatrix} \mathbf{S} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} \end{bmatrix}, \mathbf{S} = \text{diag}(s_1, s_2, \dots, s_w), s_1 \geq s_2 \geq \dots \geq s_w \text{ y } s_{w+1} = s_{w+2} = \dots = s_n = 0$$

donde s_i son los valores singulares de la matriz \mathbf{X} . Las columnas de \mathbf{V} se denominan como los *vectores singulares diestros* de \mathbf{X} , y las columnas de \mathbf{U} se conocen como los *vectores singulares siniestros* de \mathbf{X} . Solo los valores singulares diferentes de cero tienen algún interés.

Los valores y vectores singulares de \mathbf{X} tienen propiedades importantes:

- Los valores singulares de \mathbf{X} son las raíces no negativas de los eigen-valores de $\mathbf{X}^T \mathbf{X}$
- En el caso de matrices como las de covarianza y de correlación, los valores singulares y los eigen-valores son idénticos
- La matriz de componentes principales encontrada mediante el algoritmo de PCA no iterativo (por fórmula) es idéntica a la matriz de vectores singulares diestros encontrada al realizar la SVD sobre la matriz de covarianza
- El número de posibles valores singulares de \mathbf{X} es igual al *rango* de \mathbf{X} , definido como el número de columnas linealmente independientes que posee la matriz
- La *norma* de \mathbf{X} es igual a su valor singular más grande: $\|\mathbf{X}\| = s_1$

2.8.1.1.1.1 La Pseudoinversa

La SVD tiene además otras aplicaciones más allá de simplemente ser una herramienta para encontrar valores singulares y eigen-valores, y aprovechando este contexto discutiremos algunas relevantes a este trabajo. La SVD también es importante porque permite encontrar una alternativa a la inversa \mathbf{X}^{-1} de una matriz \mathbf{X} cuando ésta no puede ser calculada porque las características de dicha matriz no lo admiten (i.e. es una matriz mal condicionada, como es el caso de la función- \mathbf{G}). En este caso se puede calcular la pseudo-inversa \mathbf{X}^+ , definida de la siguiente forma:

$$\mathbf{X}^+ = \mathbf{V} \mathbf{S}^+ \mathbf{U}^T$$

en donde \mathbf{S}^+ es una matriz diagonal de n por m definida por

$$\mathbf{S}^+ = \begin{bmatrix} \mathbf{S}^{-1} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} \end{bmatrix}, \mathbf{S}^{-1} = \text{diag}(s_1^{-1}, s_2^{-1}, \dots, s_w^{-1})$$

en donde w es el rango de \mathbf{X} . La pseudo-inversa tiene las siguientes características:

- Las dimensiones de \mathbf{X}^+ son las dimensiones invertidas de \mathbf{X} . Debido a esto los productos $\mathbf{X} \mathbf{X}^+$ o $\mathbf{X}^+ \mathbf{X}$ forman una matriz cuadrada.
- Los valores singulares diferentes de cero de \mathbf{X}^+ son los recíprocos de los valores singulares de \mathbf{X} correspondientes. Su número es el rango de \mathbf{X} .
- Los valores singulares siniestros de \mathbf{X}^+ son los diestros de \mathbf{X} y viceversa.

2.8.1.1.1.2 Regularización por el método de Tikhonov

La descomposición en valores singulares es una herramienta invaluable en el análisis de problemas mal condicionados. Un *problema mal condicionado* se define de forma general como aquel en el que, teniendo en forma discreta un sistema lineal de ecuaciones

$$\mathbf{Kf} = \mathbf{g}$$

a) los valores singulares de la matriz \mathbf{K} decaen de forma gradual a cero, y b) la razón entre los valores singulares más grande y más pequeño es grande. De hecho es precisamente el grupo de valores singulares más pequeños lo que causa la sub-determinación del problema. Un ejemplo clásico de mal condicionamiento es el que surge con la solución discreta de ecuaciones integrales de Fredholm de primer orden [47,89]:

$$g(s) = \int K(s, x)f(x)dx$$

para las cuales, de la misma forma que para otros tipos de problemas mal condicionados, no existe una solución discreta directa bajo condiciones generales. En este caso se tiene una función $f(x)$ que se desea encontrar a partir de una función conocida $g(s)$, generalmente obtenida por muestreo, y de una función núcleo o kernel $K(s,x)$ relacionada con las variables independientes. La aplicación del núcleo a la función de entrada $f(x)$ es una operación suavizante, por lo que la solución, la cual requiere de la inversión de esta operación, será extremadamente sensible a pequeños cambios o errores en la entrada (como se explica en la sección 2.4.2.3, en donde se describe la transformada de Tammet, la cual no es más que una ecuación integral de Fredholm del primer tipo, y que es invertible de forma exacta únicamente bajo condiciones estrictas).

El problema principal es que la suavización es una operación que en términos generales causa pérdida de información, la cual no puede recuperarse al realizar la inversa. Sin embargo, lo interesante de los problemas discretos mal condicionados es que se puede aproximar una solución significativa de estos problemas, conocidos como *problemas inversos*. Existen diversas técnicas de regularización para la obtención de soluciones suaves, las cuales intentan integrar al problema información sobre su naturaleza con el fin de substituir la que se perdió.

En general, en estos métodos se definen dos funciones positivas, A y B . La primera es una medida de la aproximación del modelo a los datos o una medida relacionada. Cuando A se minimiza por si sola, la aproximación de la solución se hace muy buena (y en la mayoría de los casos, demasiado buena) pero no realista. Es inestable, no suave, con grandes oscilaciones, lo cual refleja que la minimización de A es típicamente un problema altamente degenerado.

De ahí la existencia de la función B , la cual estima la suavidad de la solución o una medida similar, la cual parametriza su estabilidad. B se conoce entonces como la *función estabilizadora* o el *operador de regularización*. La minimización de esta función por si sola proporciona una solución suave, pero que no tiene nada que ver con los datos originales.

Entonces, la idea central de la teoría inversa es la minimización de $A + \lambda B$, donde se utiliza λ ($0 < \lambda < \text{infinito}$) en la notación no para representar un valor singular, sino un parámetro de regularización que se busca optimizar. Diversos métodos de regularización proponen funciones A y B distintas, así como una forma recomendada para encontrar el valor óptimo de λ . En cualquier caso, en un contexto Bayesiano, la función B tiene que ver con la *expectación a priori* de una solución, mientras que A tiene que ver con su *conocimiento a posteriori*, y λ es una constante que mantiene un delicado balance entre ambos. En algunos métodos es más notoria esta conceptualización Bayesiana, mientras que en otros no lo es tanto.

Sin duda, la técnica de regularización más común y conocida es la *regularización de Tikhonov* [118]. La idea central en este método es la definición de la solución regularizada \mathbf{f}_λ como aquella que minimiza la combinación ponderada (por λ) de la norma residual del sistema lineal de

ecuaciones que se desea resolver y a la del requerimiento de que la norma de la solución sea pequeña. En forma general esto se escribe como [88]

$$\mathbf{f}_\lambda = \arg \min_f \|\mathbf{Kf} - \mathbf{g}\|^2 + \lambda^2 \|\mathbf{Lf}\|^2$$

en donde utilizamos la norma Euclídeana. La matriz \mathbf{L} de p por n es una matriz de regularización o penalización tal que si \mathbf{K} es una matriz de m por n ($m \geq n$), el producto de $\mathbf{K}^T \mathbf{L}$ resulte en una matriz de rango completo (es decir, que no sea singular), con $m \geq n \geq p$.

Si introducimos la *descomposición en valores singulares generalizada* (GSVD) [44] para (\mathbf{K}, \mathbf{L}) ,

$$\mathbf{K} = \mathbf{USF}^{-1} \quad \text{y} \quad \mathbf{L} = \mathbf{VMF}^{-1}$$

donde \mathbf{U} y \mathbf{V} tienen columnas ortonormales de forma que $\mathbf{U}^T \mathbf{U} = \mathbf{I}$ y $\mathbf{V}^T \mathbf{V} = \mathbf{I}$, \mathbf{F} es una matriz no singular, y \mathbf{S} y \mathbf{M} son matrices de p por p definidas de la siguiente forma

$$\mathbf{S} = \begin{bmatrix} \mathbf{S}_p & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{I}_{n-p} \end{bmatrix} \quad \text{y} \quad \mathbf{M} = (\mathbf{M}_p \quad \mathbf{0})$$

donde

$$\mathbf{S}_p = \text{diag}(\sigma_i) \quad \text{y} \quad \mathbf{M}_p = \text{diag}(\mu_i),$$

y los valores singulares de \mathbf{S} y \mathbf{M} tienen las siguientes restricciones

$$\sigma_i^2 + \mu_i^2 = 1, \quad 0 \leq \sigma_1 \leq \dots \leq \sigma_p \quad \text{y} \quad 0 < \mu_p \leq \dots \leq \mu_1$$

entonces podemos definir los valores singulares generalizados para (\mathbf{K}, \mathbf{L}) como

$$\gamma_i = \sigma_i \mu_i^{-1}$$

y la solución regularizada por el método Tikhonov se convierte en

$$\mathbf{f}_\lambda = \sum_{i=1}^p [\gamma_i^2 / (\gamma_i^2 + \lambda^2)] (\mathbf{u}_i^T \mathbf{g} / \sigma_i^2) \mathbf{f}_i + \sum_{i=p+1}^n (\mathbf{u}_i^T \mathbf{g}) \mathbf{f}_i$$

donde los términos de $[\gamma_i^2 / (\gamma_i^2 + \lambda^2)]$ se conocen como *factores de filtrado*. Estos factores amortiguan o filtran las contribuciones a la solución de los valores singulares generalizados menores aproximadamente a λ . De esta manera queda claro que la solución regularizada es menos sensible a perturbaciones que la solución que simplemente minimiza el error de reconstrucción o en su caso la solución real, si es que esta existe.

2.8.1.1.1.3 Regularización por truncamiento de la SVD (TSVD)

En este caso, se puede utilizar como método de regularización la *descomposición en valores singulares truncada* o TSVD [44-47], en la cual se descartan los valores singulares más pequeños hasta un valor $k < w$, conocido como parámetro de truncamiento, el cual controla la "suavidad" de la solución:

$$\mathbf{x}_k^+ = \mathbf{V} \mathbf{S}_k^+ \mathbf{U}^T, \quad \mathbf{S}_k^+ = \begin{bmatrix} \mathbf{S}_k^{-1} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} \end{bmatrix}, \quad \mathbf{S}_k^{-1} = \text{diag}(s_1^{-1}, s_2^{-1}, \dots, s_k^{-1}, 0, \dots, 0)$$

Para ecuaciones integrales como las que hemos mencionado, se puede realizar una expansión en valores singulares del kernel K de la función:

$$K(s, x) = \sum_{i=1}^{\infty} m_i u_i(s) v_i(x)$$

en donde u_i y v_i son secuencias de funciones ortonormales y toda $m_i > 0$. Utilizando esta expansión, la solución (inversa) para $f(x)$ de la ecuación integral se puede escribir como

$$f(x) = \sum_{i=1}^{\infty} \frac{(u_i \bullet g)}{m_i} v_i(x)$$

en donde $(u_i \bullet g)$ significa una operación de producto punto. La naturaleza mal condicionada de la ecuación integral se refleja en el hecho de que m tiende a cero como único límite y que entre más "suave" sea la función kernel, más rápidamente decaen los valores de m a cero [20]. Así, una solución integrable $f(x)$ solo puede existir si los coeficientes $(u_i \bullet g)$ decaen a cero más rápidamente que los valores de m de manera que podemos escribir

$$\sum_{i=1}^{\infty} \left(\frac{(u_i \bullet g)}{m_i} \right)^2 < \infty$$

y esta es la bien conocida *condición de Picard* [43]. Hansen ha demostrado que la TSVD y la regularización de Tikhonov son métodos que funcionan bien y de forma muy similar cuando la condición de Picard se satisface [45,46].

2.8.1.2 Análisis de Componentes Independientes (ICA)

Uno de los problemas que se pueden presentar con PCA es que tiene una visión Gaussiana del mundo. Es un método que factoriza distribuciones hasta el segundo momento estadístico para encontrar una base ortogonal de ejes con el objetivo de diagonalizar la matriz de covarianza. Para factorizar distribuciones no Gaussianas se requiere más bien utilizar todos los momentos estadísticos (media, covarianza, sesgo, kurtosis, etc.) de los datos. La separación de todos estos momentos produce una representación basada en la independencia estadística y no en la simple descorrelación [14].

Un conjunto de datos puede ser generado por una serie \mathbf{s} de n procesos diferentes $\mathbf{s} = \{s_1, s_2, \dots, s_n\}$ a partir de los cuales se realizan m mediciones que reflejan únicamente el resultado de su mezcla $\mathbf{x} = \{x_1, x_2, \dots, x_m\}$. Se considera entonces que existen diferentes fuentes en nuestras mediciones y se requiere su separación. El Análisis de Componentes Independientes (ICA) se puede entender como la proyección lineal de un espacio muestral m -dimensional a un espacio de fuentes n -dimensional en el que las distribuciones probabilísticas de cada fuente son estadísticamente independientes, medidas de acuerdo a una función de independencia f , y los ejes no necesariamente son ortogonales. Esta es una de las aplicaciones canónicas de ICA conocida como la *separación ciega de fuentes* (BSS) y que fue uno de los problemas que sirvió como base de su desarrollo. En este sentido ICA se aplica a muchos problemas de la Ingeniería Biomédica como el procesamiento de señales ECG, EEG y MRI.

ICA fue introducido como tal en 1994 por Comon [15], pero la separación ciega de fuentes fue ya introducida en 1986 por Herault y Jutten [50]. Existen varios modelos para la separación de componentes, entre modelos con ruido y modelos sin ruido, pero en todos ellos se aplican las siguientes restricciones fundamentales [63]:

- Todos los componentes $\mathbf{s} = \{s_1, s_2, \dots, s_n\}$ deben ser estadísticamente independientes
- Los componentes s_i deben ser no Gaussianos (con la posible excepción de un solo componente)
- El número de señales observadas debe ser al menos igual o mayor que el número de componentes independientes ($m \geq n$)
- La matriz de mezcla \mathbf{A} tal que $\mathbf{x} = \mathbf{A}\mathbf{s} + r$, donde r es un componente opcional de ruido, debe tener rango completo
- Si \mathbf{x} y \mathbf{s} son el resultado de un proceso estocástico deben ser estacionarios en sentido estricto

La estimación de los datos puede resultar escalada por algún factor con respecto a las fuentes originales. Otro factor que puede ser estimado diferente es el orden de las señales independientes. Al contrario de PCA, que puede ordenar los componentes por su retención de varianza, ICA no puede determinar ningún orden puesto que cualquier permutación de \mathbf{s} es una solución para el modelo.

La estimación de los parámetros del modelo se realiza mediante una función objetivo, conocida como *función de costos* o *de contraste*, y que representa qué tan bien se ajustan los parámetros al modelo y qué tan independientes resultan las fuentes calculadas. Para medir la independencia de las fuentes se utilizan funciones provenientes del campo de la teoría de la información o de consideraciones geométricas. Para la optimización de la función de contraste se han desarrollado muchos algoritmos.

Una de las posibles formas de medir la independencia es mediante la *entropía*, aunque existen otras como el usar otros momentos estadísticos o la independencia espacial, entre otros. A mediados del siglo veinte, el iniciador de la teoría de la información, Shannon, propuso que una medición de la señal x es una medida de la información que ésta lleva, dependiendo de la función de probabilidad $f(x)$

$$I(x) = \log(f(x))$$

y el valor esperado de la información se conoce como la *Entropía de Shannon*:

$$E\{I(x)\} = \sum_x f(x) \log(f(x))$$

Partiendo de esta entropía se puede establecer una medida de la distancia conocida como la *divergencia de Kullbach-Leibler* entre dos distribuciones $f(x)$ y $f(y)$

$$K(f(x), f(y)) = \sum_{x,y} f(x) \log\left(\frac{f(x)}{f(y)}\right)$$

y esta divergencia solo es igual a cero cuando $f(x)$ y $f(y)$ son iguales. Usando esta característica, una medida de la independencia, la *información mutua*, puede describirse como

$$M(x, y) = K(f(x, y), f(x)f(y)) = \sum_{x,y} f(x, y) \log\left(\frac{f(x, y)}{f(x)f(y)}\right)$$

Dos señales o variables aleatorias son independientes si $f(x, y) = f(x)f(y)$, es decir, si su densidad conjunta de probabilidad es igual a la multiplicación de la densidad probabilidad de sus componentes. Dado que la divergencia de Kulbach-Leibler solo es cero cuando sus argumentos

son iguales, la información mutua será cero solo cuando las distribuciones sean independientes. Estas definiciones se extienden al caso continuo y multidimensional.

Sin embargo, la optimización de una función de contraste como la información mutua es muy difícil ya que la función es altamente no lineal y contiene muchos mínimos locales. Los métodos más fáciles de aplicar y los más intuitivos son los de la tradicional familia de *descenso por gradiente*. Desafortunadamente estos métodos no necesariamente convergen al mínimo global. La solución es combinar estos algoritmos con métodos alternativos como los algoritmos genéticos o el enfriamiento lento simulado (*simulated annealing*).

Algunas implementaciones de ICA que han sido bien recibidas y utilizadas son el algoritmo *InfoMax*, de Bell y Sejnowski [6] y el algoritmo *FastICA* de Hyvärinen y Oja [58]. Otros algoritmos y modificaciones incluyen a JADE (diagonalización conjunta de la kurtosis conjunta), TDSep (diagonalización conjunta de la correlación conjunta con retraso), NSVsep (diagonalización conjunta de las varianzas no estacionarias), y el algoritmo de Bell-Sejnowski con gradiente natural.

2.8.1.3 Persecución Exploratoria de Proyecciones (EPP)

Otro método que utiliza información estadística de mayor orden que PCA, y que se encuentra estrechamente ligado a ICA, es la Persecución Exploratoria de Proyecciones [36,57,62]. El objetivo de EPP es encontrar una proyección de menor dimensión (típicamente de 2 o 3 dimensiones) de datos multidimensionales que permita la visualización de estructuras más allá de las encapsuladas en la matriz de covarianza, como por ejemplo el agrupamiento o clustering. Para ello se asigna un *índice de persecución* que cuantifica la relevancia de cada proyección para alcanzar el objetivo, y puede argumentarse que la Gaussiana es la menos interesante de muchas distribuciones [36,57] porque no tiene mayor estructura después de la covarianza. Las proyecciones se optimizan numéricamente de acuerdo a este índice, el cual puede construirse como una medida de la "no Gaussianidad" de la distribución de un conjunto de datos. Estos índices pueden construirse utilizando momentos estadísticos superiores o entropía, entre otros.

Diferentes proyecciones pueden revelar diferentes estructuras en los datos, así que el proceso de EPP se itera normalmente un número de veces. Después de maximizar cada índice, la dirección encontrada se extrae y se buscan más direcciones, hasta que no quedan más. El conjunto de direcciones o proyecciones refleja los diferentes componentes de la distribución. Se puede demostrar que, bajo ciertas condiciones, estos componentes son de hecho los componentes independientes de la distribución original [40], y de la misma forma también ICA puede utilizar una medida de la "no Gaussianidad" de los datos como medida de independencia.

Aunque más sofisticado y complejo que PCA, EPP puede tener un uso limitado. Las mediciones realizadas son complejas desde el punto de vista del cómputo y suelen utilizarse aproximaciones, las cuales tienden a "suavizar" demasiado las distribuciones de los datos a un grado tal que se pierden las estructuras cercanas al segundo momento estadístico. Además, la efectividad de EPP decrece conforme se realizan proyecciones a más de dos o tres dimensiones, también debido al problema del costo de cómputo. ICA es una buena alternativa en este caso.

2.8.1.4 Análisis de Discriminantes Lineales (LDA)

Mientras que mediante PCA se busca encontrar la proyección que maximiza la varianza de los datos, mediante el Análisis de Discriminantes Lineales se puede incorporar un mayor conocimiento previo acerca de los datos en la forma de información de clases. Se busca así una proyección lineal que, tomando en cuenta las diferentes clases a las que pertenece cada dato, maximice la separación entre clases y minimice la dispersión dentro de cada clase. Es decir, se requiere de una matriz de transformación \mathbf{T} de m por n ($m > n$) tal que se genere un espacio óptimo n -dimensional que describa r clases $\mathbf{R} = \mathbf{TX}$ a partir de un conjunto de datos m -dimensional \mathbf{X} .

Los clasificadores lineales son los más simples en cuanto a implementación y cálculo, y están relacionados directamente a muchas técnicas conocidas, como los cálculos de correlaciones y distancias Euclidianas. Sin embargo, en un sentido Bayesiano, estos clasificadores son solo óptimos

para datos con distribuciones normales con matrices de correlación iguales. Se han desarrollado entonces muchos clasificadores para distribuciones más generales y con matrices de correlación desiguales que, sin embargo, no son óptimos, pero que encuentran la compensación de la simplicidad lineal. Estos utilizan una función lineal, conocida como *discriminante lineal*, para aproximar lo mejor posible la decisión óptima a tomar mediante la minimización de un error o la maximización de un índice de desempeño.

El criterio utilizado en LDA es el *discriminante de Fischer* [34], al cual se sujeta esta transformación y que se desea maximizar. Una forma de expresarlo se describe como

$$J = \text{Traza} (\mathbf{S}_w^{-1} \mathbf{S}_b)$$

el cual se satisface cuando [37]

$$(\mathbf{S}_w^{-1} \mathbf{S}_b - \lambda) \mathbf{V} = 0$$

Esta ecuación se resuelve para obtener los eigen-vectores \mathbf{V} que corresponden a los $r-1$ eigen-valores λ_i , en donde \mathbf{S}_b es la matriz de dispersión entre clases y \mathbf{S}_w es la matriz de dispersión interna de cada clase, dadas por

$$\mathbf{S}_b = \sum_{i=1}^r n_i (\mathbf{m}_i - \mathbf{m})(\mathbf{m}_i - \mathbf{m})^T \quad \text{y} \quad \mathbf{S}_w = \sum_{i=1}^r \sum_{\forall \mathbf{x}} (\mathbf{x} - \mathbf{m}_i)(\mathbf{x} - \mathbf{m}_i)^T$$

y en donde las medias de clase y la media global están dadas por

$$\mathbf{m}_i = \frac{1}{n_i} \sum_{\forall \mathbf{x}} \mathbf{x}_i \quad \text{y} \quad \mathbf{m} = \frac{1}{n} \sum_{\forall \mathbf{x}} \mathbf{x}$$

siendo n_i el número de datos en cada clase y n el número de datos global. La matriz de transformación \mathbf{T} se construye utilizando como sus columnas los eigen-vectores \mathbf{V} .

Aunque el método de LDA puede encontrar la transformación óptima para la preservación de los agrupamientos descritos por las clases, no puede hacerlo bien cuando los datos describen clases que solo son separables de forma no lineal. Otro problema que puede tener este método se presenta cuando la media de cualquier clase es igual a la media global, en cuyo caso se produce una indeterminación. Por otro lado, si la distribución de los datos es significativamente no Gaussiana, LDA puede no conservar estructuras complejas. Además, si la información discriminatoria se encuentra realmente en las varianzas más que en las medias es mejor utilizar PCA. Por último, LDA presenta una tendencia a separar más las clases en dimensiones superiores.

2.8.1.5 Escalado Multidimensional (MDS)

El *Escalado Multidimensional* se ha vuelto muy popular para el análisis y exploración de datos multi-variable. El término MDS generalmente se aplica a un grupo de técnicas matemáticas relacionadas que se enfocan a representar alguna *medida de disimilitud* de un conjunto de datos, y no a los datos en sí, en una dimensión menor. Siguiendo este razonamiento, un algoritmo MDS se alimenta con *proximidades*, extraídas de los datos y generalmente organizadas en una *matriz de proximidades*. Existen dos grandes grupos de métodos para derivar estas proximidades: métodos directos e indirectos. Ambos le proporcionan información de entrada a un algoritmo MDS, el cual intentará encontrar una configuración espacial de los datos basado únicamente en ella.

Los *métodos directos* involucran la asignación de alguna medida de similitud o disimilitud a pares de datos. Dependiendo de la aplicación, estas mediciones pueden ser objetivas, como alguna estimación de la distancia entre los datos, o pueden ser subjetivas, como juicios humanos que les son asignados. La medida de disimilitud es generalmente la distancia (Euclideana, casi

siempre) inter-puntual, de manera que las relaciones de distancia entre los puntos en un espacio de alta dimensión se conserven en un espacio de dimensión menor. Una conservación exacta no es posible si la dimensión intrínseca de los datos es mayor a la del espacio de proyección, pero en general se trata de minimizar este error. La ventaja de los métodos directos es que las mediciones derivadas están listas para que se les aplique un algoritmo MDS.

En los métodos *indirectos* las medidas de proximidad o similitud no se miden directamente, sino que se utilizan mediciones auxiliares, como por ejemplo matrices de correlación o de confusión, siendo estas últimas matrices que indican qué tan a menudo un objeto se identifica como otro cuando no lo es y cuándo se identifica correctamente. La decisión del método depende de la aplicación. Usar un algoritmo MDS con una matriz de correlación o confusión puede revelar estructuras de relación entre los datos que antes no eran obvias.

Existen varios algoritmos de Escalado Multidimensional. El algoritmo MDS clásico asume que las entradas que se le muestran representan distancias métricas y al tratar de encontrar una representación intenta preservar las relaciones e intervalos entre las mediciones lo mejor posible. Otro algoritmo es el MDS no métrico, el cual no conserva relaciones tan estrictas de las mediciones de proximidad, y puede utilizarse cuando éstas son más subjetivas. En este algoritmo se preserva más el orden de las proximidades que sus intervalos y relaciones.

El algoritmo de MDS métrico clásico fue introducido por Torgerson en 1952 [119] siguiendo un razonamiento inverso parecido a este: si se cuenta con el nombre de varias ciudades y la distancia entre ellas, ¿es posible reconstruir un mapa de ellas? El algoritmo asume que se utilizan mediciones Euclidianas de distancia, aunque se pueden utilizar otras mediciones en diversas aplicaciones. La ventaja del algoritmo clásico es que puede dar una solución analítica incluso para matrices grandes sin iterar el proceso, lo cual la hace ideal. Se basa en que una matriz \mathbf{X} de coordenadas puede encontrarse por medio de la descomposición en eigen-valores de su matriz de producto escalar $\mathbf{B} = \mathbf{X}\mathbf{X}^T$. El problema de construir \mathbf{B} a partir de la matriz \mathbf{P} de n por n de proximidades o distancias se resuelve por un procedimiento conocido como *centrado doble*. Si denominamos a $\mathbf{P}^{(2)}$ como la matriz de n por n de distancias elevadas cada una al cuadrado, a \mathbf{I} como la matriz identidad de n por n y a \mathbf{U} como la matriz de n por n cuyos elementos son todos la unidad, el doble centrado se realiza de la siguiente forma:

$$\mathbf{B} = -2^{-1} (\mathbf{I} - \mathbf{U}) \mathbf{P}^{(2)} (\mathbf{I} - \mathbf{U})$$

Es a esta matriz a la que se le extraen los primeros m eigen-valores $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_m$ asociados a los correspondientes m primeros eigen-vectores $\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \dots, \mathbf{v}_m$, $m < n$. Posteriormente se extrae una matriz de coordenadas

$$\mathbf{X} = \mathbf{E}_m \mathbf{D}_m^{1/2}$$

donde \mathbf{E}_m es la matriz de m eigenvectores de \mathbf{B} y \mathbf{D}_m es la matriz diagonal de sus m eigen-valores.

Por otro lado, como se mencionaba anteriormente, si asumir que las proximidades se comportan como distancias es demasiado restrictivo, se puede aplicar a los datos el algoritmo MDS no métrico, desarrollado primero por Shepard [107] y luego por Kruskal [68,69]. En este algoritmo se aplica primero una transformación monótonica a la matriz de proximidades, produciendo una escalada *matriz de disparidades*, y el problema que se busca resolver es encontrar una configuración óptima de los puntos que minimice el error cuadrático medio entre las proximidades escaladas óptimas y las distancias inter-puntuales. La desviación de la monotonicidad de las distancias y las proximidades propuesta por Kruskal es una *función de estrés*:

$$\text{Estrés} = \sqrt{\frac{\sum (f(\mathbf{p}) - \mathbf{d})^2}{\sum \mathbf{d}^2}}$$

en donde \mathbf{p} denota un vector de proximidades, $f(\mathbf{p})$ es la transformación monótonica estrictamente creciente de \mathbf{p} , que puede ser lineal, exponencial o logarítmica, y \mathbf{d} es la matriz de

distancias interpuntuales. Existen diferentes funciones de estrés, pero en todos los casos los algoritmos de MDS no métrico intentan minimizarlas. Una dimensión mayor siempre tendrá menor stress que una dimensión menor, pero generalmente existe una dimensión a partir de la cual si se intenta un mapeado a una dimensión menor el estrés aumentará considerablemente.

La principal desventaja de muchos algoritmos MDS es que el número de mediciones de disimilitud aumenta exponencialmente con cada dato que se intenta analizar. Algunos algoritmos modificados intentan reducir este problema. Otro problema es que el algoritmo es lineal, pero también este problema se ha enfrentado introduciendo medidas no lineales de disimilitud.

2.8.1.6 Mapeado de Sammon

El Mapeado de Sammon [105] se utiliza también para realizar una reducción dimensional, generalmente para la visualización de datos multi-variable en dos o tres dimensiones, y es similar al escalado multidimensional en que utiliza una matriz de disimilitud \mathbf{d} de los datos originales y otra matriz de disimilitud \mathbf{d} para los datos proyectados en un espacio de dimensión menor por medio de una transformación \mathbf{Y} . También se requiere de una *función de estrés* particular que mide la calidad de la proyección

$$S(\mathbf{Y}) = \frac{1}{\sum_{i < j}^N \mathbf{d}_{ij}} \sum_{i < j}^N \frac{1}{\mathbf{d}_{ij}} (\mathbf{d}_{ij} - d_{ij}(\mathbf{Y}))^2$$

la cual se busca minimizar, generalmente mediante algoritmos de descenso por gradiente. El principal problema que presenta este método es el alto coste computacional en cuanto a tiempo y memoria ya que, como se mencionó en el caso de MDS, las matrices de disimilitud crecen exponencialmente con respecto al número de objetos que miden, y el Mapeado de Sammon requiere de dos de ellas.

2.8.1.7 ISOMAP

En las técnicas de escalado multidimensional se intenta conservar la distancia inter-puntual cuando se realiza la proyección a una dimensión menor, pero eso no garantiza la conservación de la forma estructural de los datos. Recientemente se han creado algoritmos que combinan las ventajas de PCA y MDS – su eficiencia computacional, el contar con pocos parámetros libres, la optimización no iterativa de una función de costo global – con la habilidad de recobrar estructuras intrínsecas de baja dimensión escondidas en datos de alta dimensión. Estos nuevos algoritmos generalmente se clasifican en dos tipos: globales y locales. Los algoritmos globales buscan preservar estructuras a todos los niveles o escalas, mapeando puntos cercanos entre sí en alta dimensión a puntos cercanos en baja dimensión, y puntos lejanos a puntos lejanos. La principal ventaja de los métodos globales es que tienden a preservar mejor la estructura intrínseca, y sus métodos de preservación métrica de la distancia son más fáciles de sustentar.

Al definir de forma alternativa a la distancia entre dos puntos como la longitud del camino *superficial* más corto trazado desde el primer punto, pasando por otros hasta llegar al segundo, conocida como *distancia geodésica*, y luego aplicar el algoritmo MDS clásico, obtenemos una técnica global de reducción dimensional que preserva la estructura de los datos originales y que se conoce como ISOMAP [115].

Para seleccionar los puntos a través de los que este algoritmo mide las distancias se utilizan dos alternativas: a) se van tomando los k -vecinos más cercanos [70] como los únicos puntos conectados directamente al punto en cuestión y b) se toman todos los puntos dentro de una esfera de un radio m pequeño. Con esta información se construye una gráfica de vecindades \mathbf{G} . Posteriormente se aplica un algoritmo para encontrar los caminos más cortos entre puntos y se

construye una matriz de distancias \mathbf{D} , a la cual se le aplica el algoritmo MDS clásico para encontrar el nuevo espacio de menor dimensión \mathbf{Y} que aproxime al conjunto original \mathbf{X} .

La premisa del funcionamiento de este algoritmo es que la información métrica local, en este caso la gráfica de vecindades \mathbf{G} , es una guía confiable de la estructura métrica local en el espacio de alta dimensión. El cómputo de las distancias más cortas es a su vez un buen estimado de la estructura global, el cual puede alimentarse al algoritmo MDS para encontrar el espacio de menor dimensión. De hecho se sabe que, dados suficientes puntos, la métrica de la distancia geodésica aproximada converge a la real [7].

El algoritmo ISOMAP tiene un cuello de botella importante: el cálculo de la matriz de caminos más cortos \mathbf{D} de n por n , donde n es el número total de puntos. Para ello se utiliza el algoritmo de Floyd [35], el cual es bastante lento, o el algoritmo de Dijkstra [21], el cual es de un orden más rápido. En cualquier caso, para un número de puntos importante, el algoritmo ISOMAP es lento. Otra desventaja que tiene es que no se puede utilizar con puntos nuevos que no se hayan utilizado para generar el mapeado, ya que no proporciona una matriz de transformación.

2.8.1.8 Empotramiento localmente lineal (LLE)

Las principales ventajas de los algoritmos locales son: a) Eficiencia – generalmente utilizan matrices parcialmente descritas, lo cual puede aumentar su velocidad y disminuir los requerimientos de memoria, y b) Capacidad de representación – pueden dar resultados útiles sobre un rango mayor de problemas cuya geometría local se acerca a la Euclídeana, aunque no así la global. Un algoritmo local que utiliza un método diferente que ISOMAP para realizar prácticamente el mismo objetivo, LLE [100] emplea el mapeado lineal para capturar las relaciones espaciales de un pequeño conjunto de datos vecinos, las cuales representan la geometría local de la estructura que forman realmente los datos. Estas relaciones se preservan lo mejor posible al transformar los datos para preservar también así la estructura global.

El algoritmo LLE consiste en tres fases. Primero se escogen los k -vecinos más cercanos [70] de cada punto x_i . Posteriormente se representa a cada punto como una combinación lineal de sus vecinos, utilizando pesos w_{ij} para minimizar el error cuadrático $e(w)$ de reconstrucción de cada punto a partir de ésta:

$$e(w) = \sum_{\forall i} \left| \mathbf{x}_i - \sum_{\forall j} w_{ij} \mathbf{x}_j \right|^2$$

Finalmente se realiza la proyección o empotramiento. Cada vector o dato de alta dimensión se proyecta a una dimensión menor. La posición de los datos se escoge de manera que se minimice el error al representar ese punto empleando la misma combinación lineal de vecinos que se utilizó en el espacio original y minimizando la siguiente función de costo (los pesos finales son invariantes a las rotaciones, escalamientos o traslaciones que puedan sufrir los puntos y sus vecinos):

$$P(Y) = \sum_{\forall i} \left| \mathbf{y}_i - \sum_{\forall j} w_{ij} \mathbf{y}_j \right|^2$$

De esta forma, LLE e ISOMAP son ambos algoritmos que pueden utilizarse para “desenrollar” las estructuras latentes de un conjunto de datos en alta dimensión para poder verlas en una dimensión menor, pero sus métodos son diferentes. Mientras que ISOMAP intenta preservar las distancias geodésicas, LLE intenta preservar la geometría local de los datos originales.

III METODOLOGÍA EXPERIMENTAL

3.1 Sistema experimental

El sistema experimental que se propone para cumplir con los objetivos de la investigación consta de dos módulos básicos que trabajan de forma interactiva, como se muestra en la figura 3.1. Por un lado, el *sistema proveedor de mezclas gaseosas* es un módulo de apoyo para el desarrollo del prototipo del sensor y método de análisis que se presenta, e incluye un *sistema automático mezclador de gases para anestesia* que realiza y suministra las mezclas que se desean caracterizar mediante el nuevo sensor, así como un *monitor de referencia*, el cual permite saber con precisión la composición de cada mezcla. Por otra parte, el *sistema de monitoreo y análisis*, el núcleo de nuestra investigación, incluye al condensador de aspiración y sus sistemas de control, soporte, almacenamiento y análisis.

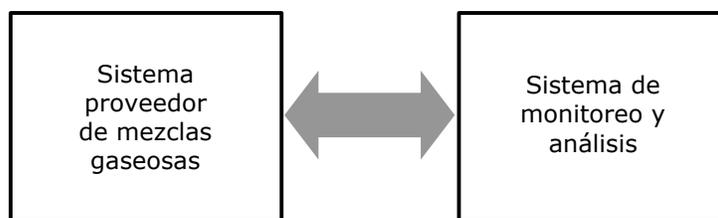


Figura 3.1. Diagrama a bloques del sistema experimental propuesto.

3.1.1 Sistema proveedor de mezclas gaseosas

El sistema que provee de mezclas gaseosas al sistema de monitoreo y análisis, como se ha mencionado, consta de dos módulos. El primer módulo es un sistema automático mezclador de gases para anestesia y el segundo es un monitor de referencia, el cual nos permite conocer con certeza la composición de la mezcla que se ha generado. El diagrama a bloques de este sistema se muestra en la figura 3.2.

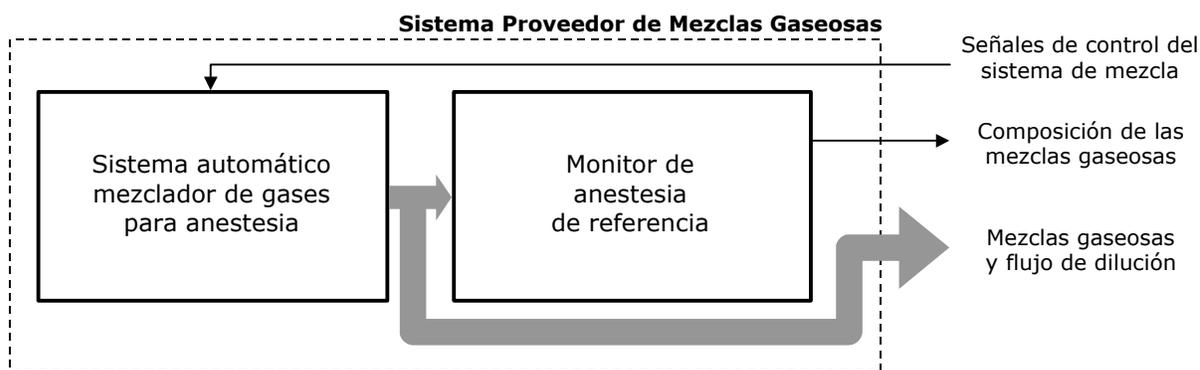


Figura 3.2. Diagrama a bloques del sistema proveedor de mezclas gaseosas.

3.1.1.1 Sistema automático mezclador de gases anestésicos

Con el objetivo de desarrollar y evaluar el prototipo del condensador de aspiración, se requiere del diseño de un sistema de soporte experimental que permita la mezcla automática de

gases y agentes anestésicos, el cual a su vez, será también el prototipo de una máquina de anestesia para uso clínico controlada digitalmente. El sistema debe ser capaz de mezclar cuatro diferentes gases portadores (O_2 , N_2 , N_2O y CO_2) con uno de cinco diferentes agentes anestésicos halogenados volátiles (halotano, isoflurano, enflurano, sevoflurano o desflurano) en una proporción determinada por el usuario en cualquiera de dos modalidades: a) *manual*, controlando directamente los vaporizadores anestésicos (FluoTec 4, IsoTec 4, EnfluraTec 4, SevoTec 5 y Tec 6, respectivamente) y/o los reguladores de cada gas, o b) *automática*, a través de un archivo previamente almacenado en la computadora que controla el equipo, el cual detalla las proporciones de gases y agentes que se desean mezclar. Las mezclas se realizan por el método de proporción de flujos (sección 2.1.1.1), y el sistema debe evaluarse de acuerdo a un patrón para conocer la verdadera composición de las mezclas, el tiempo de respuesta del sistema y su estabilidad.

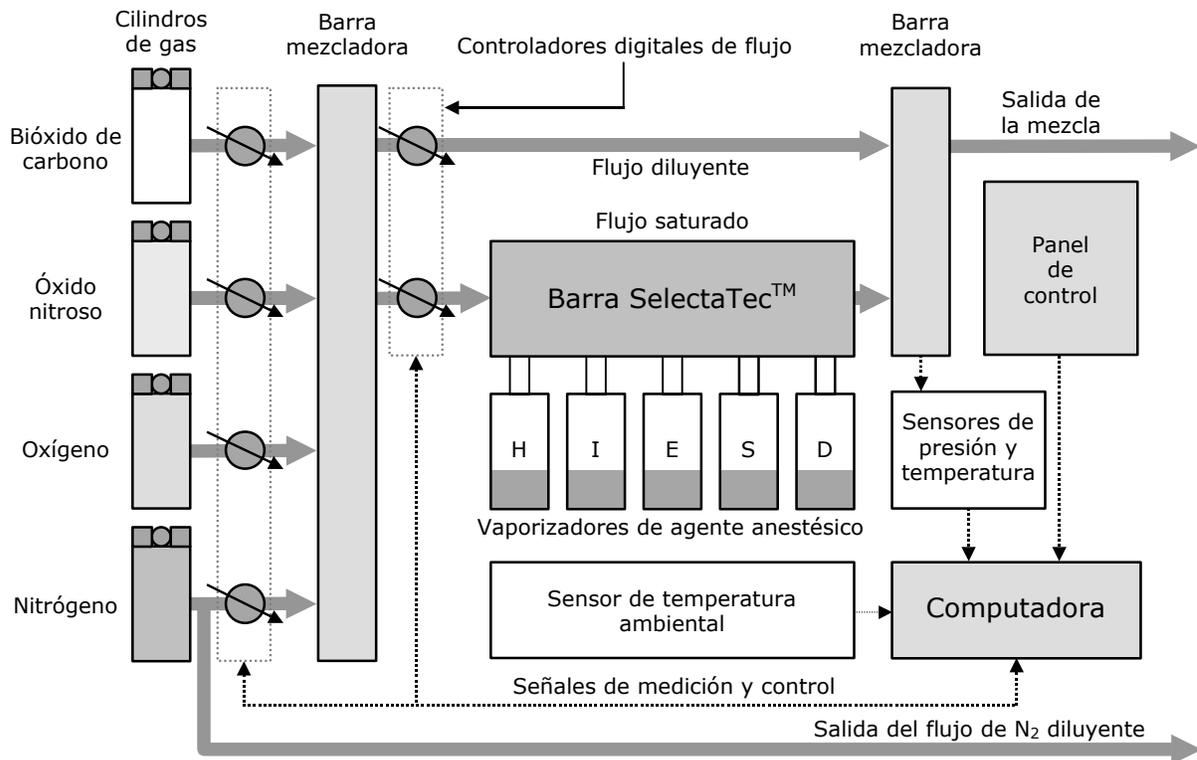


Figura 3.3. Diagrama a bloques del sistema automático mezclador de anestesia.

El diagrama del sistema automático mezclador de gases para anestesia se muestra en la figura 3.3. Para cualquier modo de operación utilizado, se introducen al sistema gases puros regulados y la concentración del gas portador se dosifica manipulando controladores de flujo digitales por medio de una computadora. El flujo así conseguido se homogeneiza en una barra mezcladora, obteniendo una pre-mezcla. Este flujo se bifurca en una proporción determinada por la computadora de acuerdo a la concentración deseada de agente anestésico, obteniendo dos flujos: un flujo portador de vapor anestésico y un diluyente sin anestésico. El flujo portador se hace pasar a una barra SelectaTec™, a la cual se conectan los vaporizadores anestésicos, en donde se mezcla con el agente anestésico. La perilla de concentración de los vaporizadores (la cual es manual) se abre a concentración máxima. El gas a la salida de la barra será entonces una mezcla portadora saturada al 100% con vapor anestésico. Este flujo se diluye posteriormente mediante la derivación del gas sin anestésico, el flujo diluyente, en proporciones reguladas por la computadora y los controladores digitales de flujo. En este sistema los vaporizadores no funcionan como fueron diseñados (vaporizadores de bypass variable) sino como vaporizadores de flujo medido, en los

cuales no existe un control de concentración por medio de una perilla, sino que el flujo a ser saturado con anestésico se calcula de antemano.

Para escoger el modo de funcionamiento del sistema se necesita solo mover un switch colocado en el panel de control, el cual avisa a la computadora. Si se desea que sea manual, el usuario tendrá que seleccionar la concentración deseada del vapor anestésico mediante potenciómetros, también fijos en un panel de control y conectados a la computadora a través de un convertidor analógico-digital. En el caso de seleccionar el modo automático, las concentraciones de gases y vapores anestésicos deben ser alimentadas desde un archivo de concentraciones previamente creado y almacenado en la computadora.

Cantidad	Max. flujo [lpm]	Calibración
2	5	O ₂
1	1	O ₂
1	1	N ₂
1	1	N ₂ O
1	1	CO ₂

Tabla 3.1. Descripción de los reguladores digitales de flujo. En total se cuenta con 6 reguladores marca Porter™, todos calibrados para 760 mmHg y 21.1°C, de los cuales cuatro están calibrados para cada uno de los gases portadores y dos para O₂. Estos últimos se usan para bifurcar la mezcla.

Los controladores de flujo digitales empleados, cuya descripción se resume en la tabla 3.1, requieren trabajar en un sistema con una cierta presión mínima para su correcto funcionamiento (50 psi, regulada al salir de los tanques). Además, para lograr mantener una presión constante en la tubería se implementó un control en el sistema de entrega de gases que permite mantener una presión constante de alrededor de 10 psi. Para ello se instaló un sensor de presión (ver figura 3.3) y se diseñó un control mediante lógica difusa que se implementó en software como una red neuronal de base radial con 2 entradas, 33 neuronas en la capa oculta y una salida. Una vez entrenada la red mediante el software Neuralworks Professional II Plus™ de Neuralware™, se realizó una implementación neuro-difusa del controlador, tomando la decisión de emplear esta solución debido a las restricciones del equipo de cómputo que se utilizó como cerebro del sistema, el cual cuenta con un microprocesador 386SX a 25 MHz, posee solo 640 Kb de memoria base y 3 Mb de memoria extendida, un disco duro de 40 Mb, y el sistema operativo DOS 5.0. Una implementación difusa que realizara todos los cálculos en tiempo real estaba fuera de la discusión, y solo se tenían dos opciones reales: a) una implementación en forma de tabla con los valores de salida del control para cada entrada, empleando algún tipo de interpolación para encontrar los valores no almacenados explícitamente en la tabla, y b) la implementación neural. Esta última resulta ser la opción óptima dado que utiliza menos memoria de la máquina al almacenar únicamente los pesos de cada neurona, y además porque la red neuronal es un interpolador por naturaleza. Las especificaciones de las funciones de membresía del control propuesto se muestran en la figura 3.4, las reglas asociadas a estas funciones se especifican en la tabla 3.2, y la superficie de control representada por las funciones y las reglas en la figura 3.5. Puede apreciarse que el control solo maneja presiones entre 7 y 13 psi. Para presiones entre cero y 7 psi simplemente se cierra la salida, la presión se empieza a acumular, y una vez que la presión alcanza el valor de 7 psi el controlador entra en juego. Por otro lado, si la presión es mayor a 13 psi, el máximo valor que nos proporciona el sensor de presión, la salida se abre completamente ya que tal presión necesita bajarse rápidamente como regla de control y como precaución para no dañar al sensor.

Finalmente, la máquina entrega 2 flujos a la salida, un flujo con la mezcla deseada y un flujo adicional de un gas (N₂ en este caso, por ser poco reactivo, pero puede utilizarse O₂, disponible con mayor facilidad en un ambiente clínico) que se utilizará más adelante para diluir la mezcla anestésica. Se incluye esta posibilidad porque el condensador de aspiración, al manejar corrientes iónicas, requiere un flujo mayor de gas para producir señales con una intensidad adecuada. Además, con este flujo se homogeneizan las muestras para caracterizar mejor al anestésico.

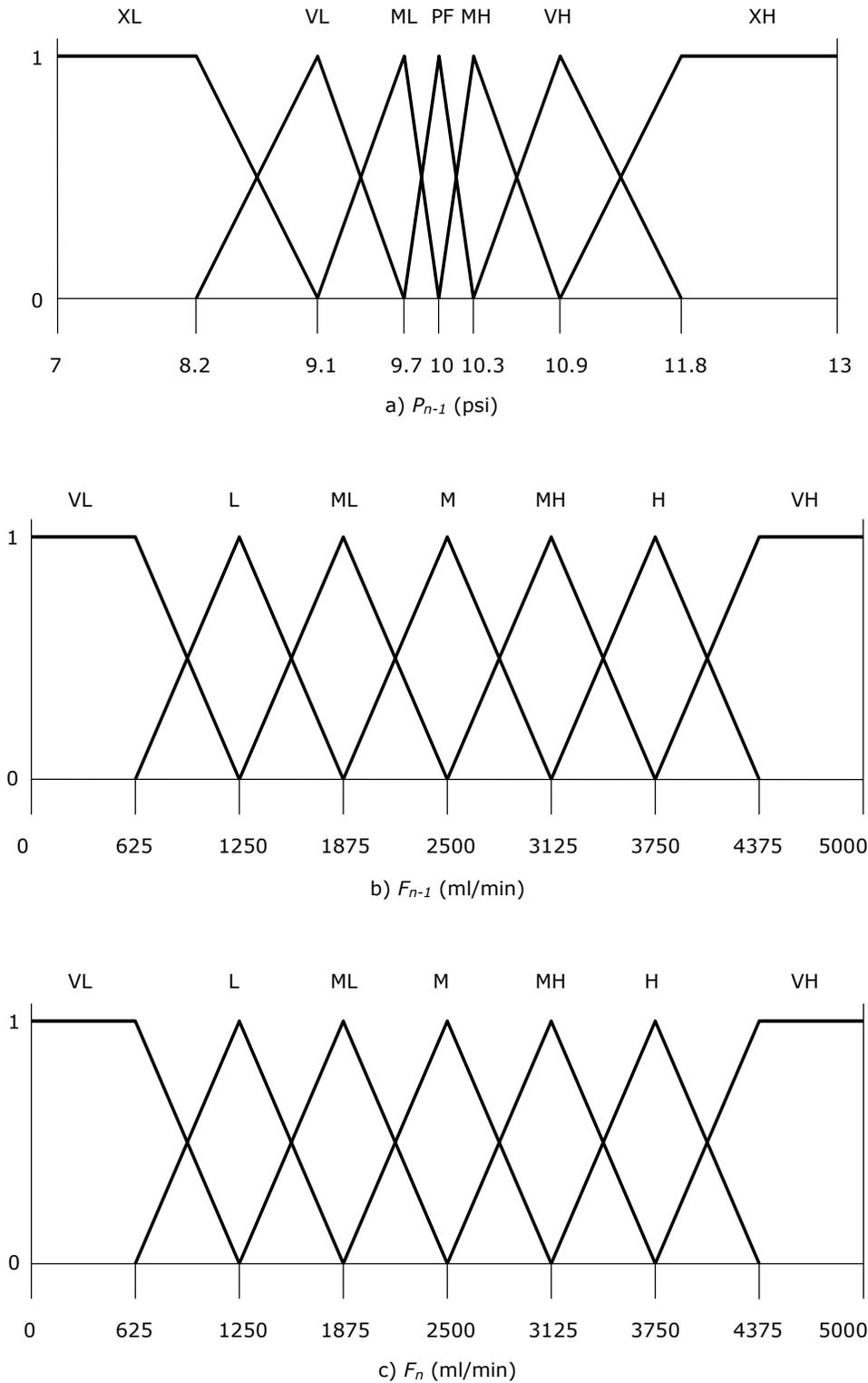


Figura 3.4. Funciones de membresía difusa para la presión P_{n-1} y el flujo F_{n-1} en el ciclo anterior de control y para el nuevo flujo F_n . La particular distribución y forma de las funciones de membresía para P_{n-1} se debe a que se desea un control más fino alrededor de la meta de 10 psi.

		P_{n-1}						
		F_n	XL	VL	ML	PF	MH	VH
F_{n-1}	VL	VL	VL	VL	VL	L	L	L
	L	VL	VL	VL	L	L	ML	ML
	ML	VL	L	L	ML	ML	M	M
	M	L	ML	ML	M	M	MH	MH
	MH	ML	M	M	MH	MH	H	H
	H	H	MH	MH	H	H	VH	VH
	VH	MH	H	H	VH	VH	VH	VH

Tabla 3.2. Conjunto de reglas difusas del control de presión. Se encuentran asociadas a las funciones de membresía difusa para el flujo de salida de la figura 3.4, y regulan la presión existente en la barra mezcladora de salida. La estructura de las reglas es: **SI** la presión P_{n-1} es (XL- extremadamente baja, VL - muy baja, ML - media baja, PF - perfecta, MH - medio alta, VH - muy alta, XH - extremadamente alta) **Y** el flujo F_{n-1} es (VL - muy bajo, L - bajo, ML - medio bajo, M - mediano, MH - medio alto, H - alto, VH - muy alto) **ENTONCES** el conjunto difuso para el nuevo flujo está dado por las casillas de la matriz al cruce de los renglones y columnas activados.

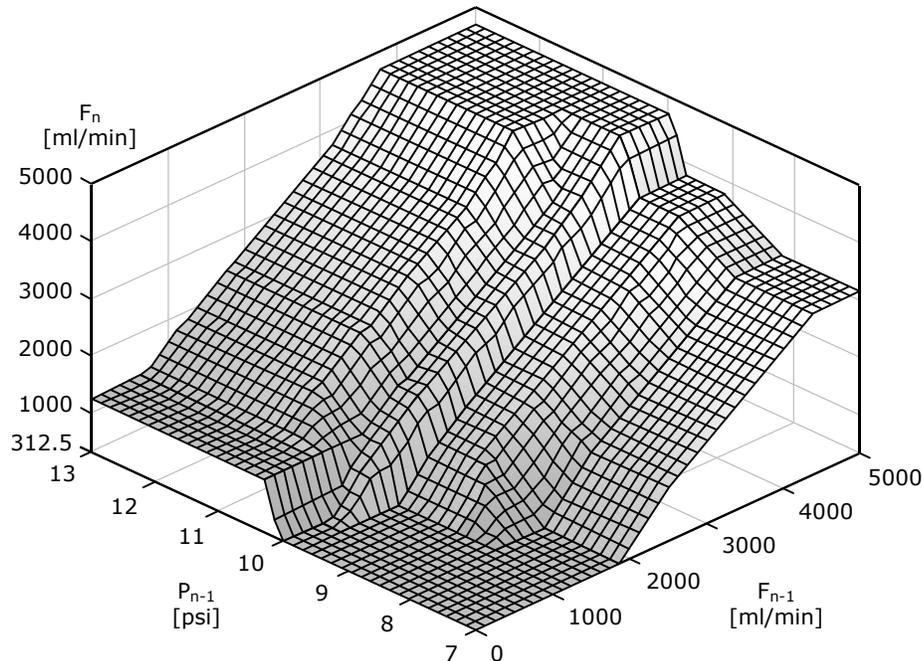


Figura 3.5. Superficie difusa del control de presión. A partir de una presión de salida P_{n-1} y un flujo F_{n-1} en el ciclo de control anterior se determina un nuevo flujo F_n para mantener la presión de salida P_n en un valor de aproximadamente 10 psi, de acuerdo a la base de reglas difusas.

- 1 Inicialización de constantes, variables y opciones de default
- 2 Inicialización de las tarjetas de adquisición A/D y D/A
- 3 Rutina principal
 - 3.1 Sub-rutina principal de operaciones
 - 3.1.1 Ir a sub-rutina de control de presión
 - 3.1.1.1 Recordar presión y flujo total anterior
 - 3.1.1.2 Leer valor actual del sensor de presión
 - 3.1.1.3 Determinar nuevos flujos mediante la red neuro-difusa
 - 3.1.1.4 Regresar
 - 3.1.1 Enviar flujos por el convertidor D/A a los reguladores digitales
 - 3.1.2 Leer flujos reales en los reguladores mediante convertidor A/D
 - 3.1.3 Leer porcentajes de volumen medidos por el monitor de referencia
 - 3.1.4 Regresar
 - 3.2 Determinar el modo (manual - ir a 3.2.1, automático - ir a 3.2.2)
 - 3.2.1 Sub-rutina de modo manual
 - 3.2.1.1 Leer potenciómetros (concentraciones deseadas)
 - 3.2.1.2 Determinar flujos deseados
 - 3.2.1.3 Ejecutar Sub-rutina principal de operaciones (3.1)
 - 3.2.1.4 Regresar
 - 3.2.2 Sub-rutina de modo automático
 - 3.2.2.1 Leer mezcla desde el archivo de concentraciones del disco duro
 - 3.2.2.2 Determinar flujos deseados
 - 3.2.2.3 Ejecutar Sub-rutina principal de operaciones (3.1)
 - 3.2.2.4 Regresar
 - 3.3 Actualizar pantalla
 - 3.4 Usuario oprime tecla para hacer cambios? (si - 3.4.1, no - 3.4.2)
 - 3.4.1 Sub-rutina de menú de opciones de configuración
 - 3.4.1.1 Pedir a usuario opción de configuración (3.4.1.1.1 a 3.4.1.1.5)
 - 3.4.1.1.1 Sub-rutina de cambio de agente anestésico
 - 3.4.1.1.1.a Pedir a usuario introducir nombre de nuevo agente
 - 3.4.1.1.1.b Recordar a usuario asegurarse del agente en uso
 - 3.4.1.1.1.c Actualizar agente anestésico
 - 3.4.1.1.1.d Regresar
 - 3.4.1.1.1.2 Sub-rutina de establecimiento de presión atmosférica
 - 3.4.1.1.1.2.a Pedir a usuario introducir presión atmosférica actual
 - 3.4.1.1.1.2.b Actualizar valor de presión atmosférica
 - 3.4.1.1.1.2.c Regresar
 - 3.4.1.1.1.3 Sub-rutina de calibración, sensor de temperatura ambiente
 - 3.4.1.1.1.3.a Leer valor actual del sensor de temperatura
 - 3.4.1.1.1.3.b Pedir a usuario valor real de temperatura ambiental
 - 3.4.1.1.1.3.c Calcular nuevo factor de calibración de temperatura
 - 3.4.1.1.1.3.d Actualizar valor de temperatura ambiental
 - 3.4.1.1.1.3.e Regresar
 - 3.4.1.1.1.4 Sub-rutina de calibración de potenciómetros
 - 3.4.1.1.1.4.a Pedir a usuario poner potenciómetros al mínimo
 - 3.4.1.1.1.4.b Leer valor de cada potenciómetro
 - 3.4.1.1.1.4.c Pedir a usuario poner potenciómetros al máximo
 - 3.4.1.1.1.4.d Leer valor de cada potenciómetro
 - 3.4.1.1.1.4.e Calcular nuevos factores de calibración
 - 3.4.1.1.1.4.f Actualizar lecturas de potenciómetros
 - 3.4.1.1.1.4.g Regresar
 - 3.4.1.1.1.5 Sub-rutina de terminación del programa
 - 3.4.1.1.1.5.a Pedir a usuario confirmación de terminación
 - 3.4.1.1.1.5.b Si finalizar, cerrar flujos e ir a 5. Si no, proseguir
 - 3.4.1.1.1.5.c Regresar
 - 3.4.1.2 Regresar
 - 3.4.2 Regresar
 - 3.5 Fin de la rutina principal
- 4 Ir a 3
- 5 Fin

Figura 3.6. Pseudo-algoritmo del programa de control de la máquina automática de anestesia.

El control difuso, así como el resto del software que se requiere para manejar el sistema automático mezclador de gases para anestesia, está escrito en QBasic 1.0 de Microsoft™ y almacenado en el disco duro de la computadora de control. El archivo auto-ejecutable de arranque del sistema llama al programa cada vez que se enciende la máquina. El pseudo-código que describe con claridad el funcionamiento del programa se muestra en la figura 3.6. La interfase con el usuario se muestra en la figura 3.7.

Controladores de flujo							
Flujos en ml/min							
REGULADOR:	2	3	4	5	6	7	---
GAS:	N2	N2O	O2	CO2	MIX Di1	MIX/AA	Pmix[psi]
ESPERADO:	0	0	1000	0	478	437	10.00
MEDIDO:	0	0	986	0	296	310	10.06

AGENTE=	HAL	TEMP.VAP.=	21 C	PRES.VAP.=	---	mmHg	PRES.BAR.=
							780 mmHg

Composición de la mezcla							
%VOL	N2	N2O	O2	CO2	AGENTE	Flujo Tot	
MONITOR:	0.00	0.00	97.71	0.00	2,29	-----	
REGULADOR:	0.00	0.00	96.89	0.00	3.21	967	
ESPERADO:	0.00	0.00	97.00	0.00	3.00	986	

Modo: Automático --- La hora es: 10:53:40 A.M.							
Presione una tecla para ver el menú							

Figura 3.7. Pantalla de interfase con el usuario del sistema mezclador de gases. Se muestran arriba los flujos escogidos por el usuario y los que miden los controladores digitales. En medio se muestra el agente anestésico en uso y la presión y temperatura de trabajo. Abajo se muestran los valores en porcentaje del volumen total de cada gas y el agente anestésico, incluyendo además la lectura entregada por el monitor de referencia. Se le indica también al usuario que tiene la posibilidad de acceder a un menú con opciones para calibrar los potenciómetros que se usan para fijar los flujos, calibrar el sensor de temperatura, poner al día la lectura de presión y cambiar el agente anestésico que se desea usar.

3.1.1.2 Monitor de anestesia de referencia

Como referencia para determinar los componentes y cantidad de éstos que se encuentran realmente en cada mezcla de gases generada se utilizó un monitor clínico de anestesia Capnomac Ultima™ de Datex-Ohmeda™ (figura 3.8), el cual es capaz de identificar y cuantificar tres de los gases portadores (O₂, CO₂, N₂O) y todos los agentes anestésicos (desflurano, enflurano, halotano, isoflurano, sevoflurano) que se emplearon. El porcentaje de volumen de nitrógeno se calcula como lo que falta para alcanzar el 100% después de sumar los otros tres gases y el agente anestésico. El monitor puede además identificar y cuantificar mezclas de hasta dos agentes anestésicos. Cuenta con una salida analógica y dos salidas digitales (serial y paralela) para comunicar estas lecturas a un sistema externo. En este caso hemos utilizado la salida paralela para comunicar los resultados de las mezclas a nuestra computadora de control.

El monitor emplea un flujo de muestreo de 200 ml/min con una desviación máxima de este valor del 10%, y sus características de precisión en la identificación de gases y agentes se resumen en la tabla 3.3.

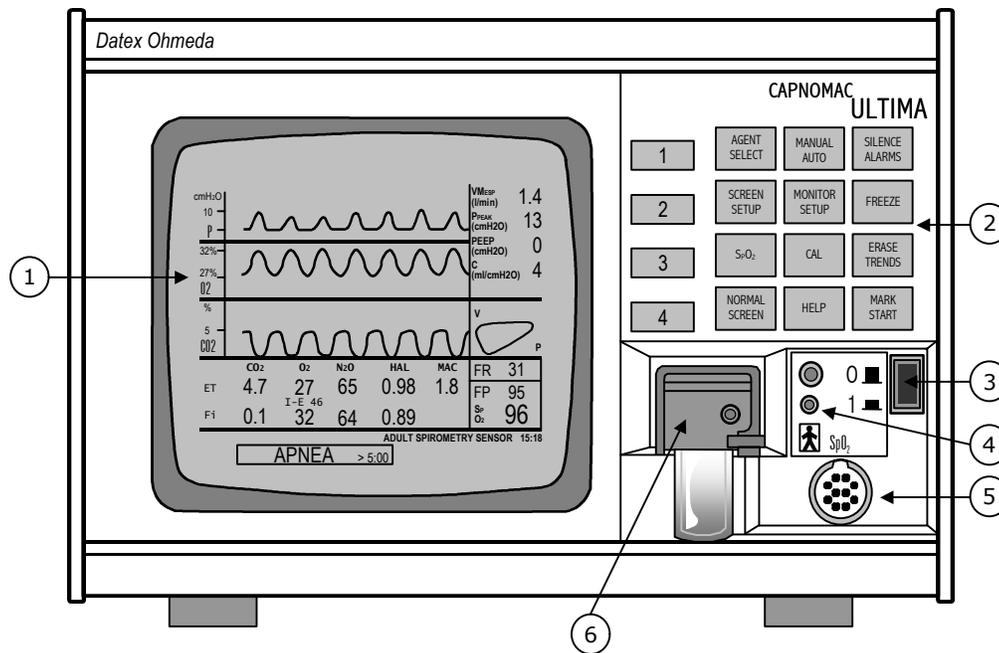


Figura 3.8. Monitor de gases y agentes anestésicos Capnomac Ultima™, el cual se ha utilizado como instrumento de referencia en esta investigación. En el diagrama se muestran algunas de sus partes más sobresalientes: (1) Pantalla de video, (2) Teclado, (3) Interruptor de encendido, (4) Conectores para la espirometría del paciente, (5) Conector para el sensor de oximetría de pulso, (6) Trampa de agua con conector para la línea de muestreo.

Gas/Agente	Rango	Tiempo de Respuesta	Máximo error
O ₂	0 a 100%	menor a 480 ms	2 %Vol
CO ₂	0 a 10%	menor a 360 ms	0.4 %Vol
N ₂ O	0 a 100%	menor a 360 ms	2 %Vol
Desflurano	0 a 18%	menor a 30 s	0.2 %Vol
Enflurano	0 a 5%	menor a 30 s	0.2 %Vol
Halotano	0 a 5%	menor a 30 s	0.2 %Vol
Isoflurano	0 a 5%	menor a 30 s	0.2 %Vol
Sevoflurano	0 a 8%	menor a 30 s	0.2 %Vol

Tabla 3.3. Características de monitoreo del Capnomac Ultima™ de Datex-Ohmeda™ en la identificación de gases y agentes anestésicos.

3.1.2 Sistema de monitoreo y análisis

El sistema de monitoreo y análisis representa la realización física del objetivo principal de este trabajo, el desarrollo de un método clínico alternativo de bajo costo para la detección y cuantificación de gases y agentes anestésicos. Los diversos componentes de este sistema se muestran en la figura 3.9. El corazón del sistema es el condensador de aspiración diferencial con barrido de campo propuesto por Sacristán [102,103], controlado por una computadora. Adicionalmente existe electrónica periférica y un control para regular la temperatura dentro de la celda de medición, así como una campana de extracción para eliminar los gases de desecho.

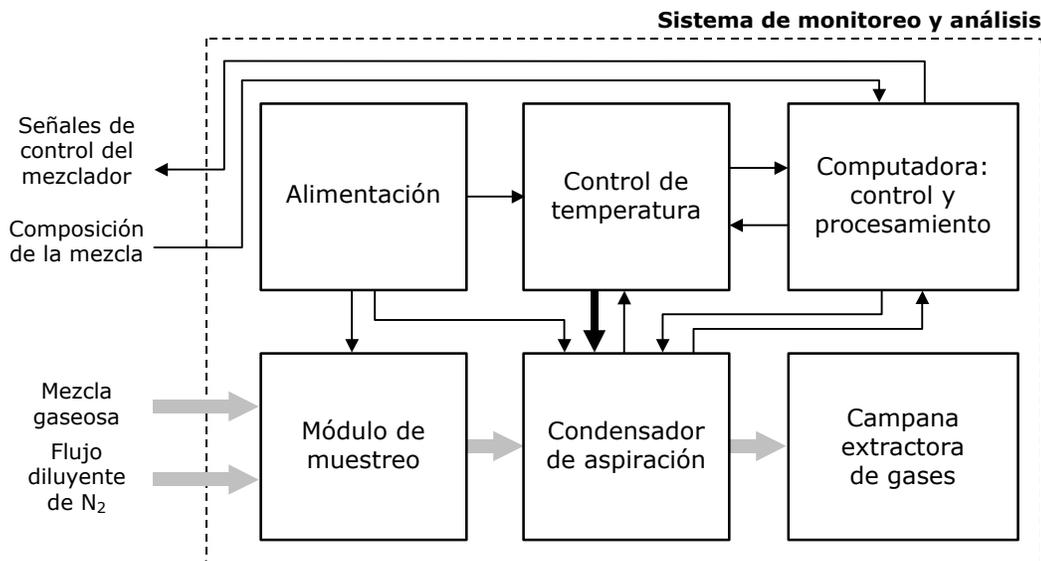


Figura 3.9. Diagrama del sistema de monitoreo y análisis. El sistema es controlado por una computadora equipada con tarjetas de adquisición A/D y de conversión D/A. Su corazón es el condensador de aspiración diferencial con barrido de campo, el cual se mantiene a una temperatura de 40°C y recibe muestras gaseosas del sistema mezclador automático de gases. Los resultados de la medición de la movilidad iónica de los gases proporcionados por la celda de medición del condensador son procesados y almacenados por la computadora de control del sistema, y los gases de desecho son succionados por una campana extractora de gases como medida de seguridad.

3.1.2.1 Diseño del condensador de aspiración

Para lograr los objetivos planteados al principio de este trabajo, se requiere antes que nada diseñar y construir un nuevo sensor que tome en cuenta las características descritas en el modelo matemático (sección 2.4.2.3) para obtener las mediciones más adecuadas y representativas y así aprovechar al máximo la información contenida en ellas. Para ello se ha examinado el modelo y se ha relacionado con nuestros requerimientos.

3.1.2.1.1 Consideraciones teóricas sobre la celda de medición

El conocimiento del núcleo o kernel de la ecuación de Tammet, la función G , es básico para proceder al diseño del sensor, ya que es éste el que determina las características de la celda de medición, el corazón del condensador de aspiración diferencial con barrido de campo. Como se ha mostrado ya en la sección 2.4.2.3, la función kernel tiene tres regiones en las que presenta un comportamiento distinto (figuras 2.20 y 2.21). La primera, desde el origen hasta la hipérbola $KV=A$, tiene una pendiente positiva. La segunda, entre las hipérbolas $KV=A$ y $KV=B$, tiene una pendiente negativa. La tercera, desde la hipérbola $KV=B$ hacia fuera, tiene una pendiente cero. Además, la altura de la función G también está determinada de manera única por la relación entre A y B , ya que $G_{\max}=1-(A/B)$. Es decir, los valores de las constantes A y B son los factores básicos a considerar en el diseño de la celda de medición.

Entonces, las variables de diseño que afectan la delimitación de estas regiones, dado que determinan el valor de A y B en un condensador, incluyen: x_b (tamaño del pre-colector), x_a (tamaño del pre-colector y el colector juntos), h (distancia entre las placas colectoras y de

referencia – la altura de la celda de medición), w (el ancho de la celda) y f (flujo del gas). La modificación de estos parámetros involucra cambiar lo siguiente:

- Valor pico de la función G
- Pendiente de la región 0-A
- Pendiente de la región A-B
- Laminaridad del flujo
- Número de paredes impulso hiperbólicas en la función G inversa (lo que afecta directamente el error que pudiera introducirse al efectuar una transformada inversa de Tammet)
- La resolución en el dominio de la movilidad
- La velocidad de flujo

La altura pico de la función G , como hemos mencionado, está dada por

$$G_{\max} = 1 - \frac{x_b}{x_a} = 1 - \frac{A}{B}$$

por lo que cuando x_b/x_a tiende a cero la altura se aproxima a la unidad. Es decir, si $x_a \gg x_b$ la altura de la función, y por lo tanto la eficiencia de captura iónica, serán máximas, y para que esto ocurra la longitud del colector debe ser mucho mayor que la del pre-colector. Claro está que existe un límite para esta condición pues queremos que el condensador sea lo más pequeño posible, además de las limitaciones físicas que implica el hacer una placa muy pequeña o la otra muy grande, y el error que podrían introducir las simplificaciones del modelo matemático propuesto.

La pendiente de la región 0-A es directamente proporcional a la altura de la celda de medición e inversamente proporcional a la suma de las longitudes del pre-colector y el colector. Esta pendiente también determina un aspecto importante de la función G inversa, la cual presenta una serie de paredes-impulso hiperbólicas localizadas en

$$kv = A \left(\frac{x_b}{x_a} \right)^l$$

donde $l=0,1,2,\dots,\infty$. Esto significa que la primera pared-impulso se encuentra en $KV=A$, es decir, en el límite de la región 0-A, y todas las demás paredes quedarán en algún lugar entre esta pared y el origen. Dado que estas paredes introducen grandes errores en el cálculo de la transformada inversa de Tammet cuando existe ruido presente en la densidad de corriente, inevitable cuando se realizan mediciones, es deseable que el número de estas paredes-impulso sea mínimo dentro de nuestra región de interés. Esto puede hacerse manipulando la pendiente de la primera región para fijar la primera pared y posteriormente cambiando la relación x_b/x_a para ubicar las demás paredes.

La pendiente de la región A-B es directamente proporcional a la altura de la celda de medición e inversamente proporcional a su anchura y la longitud de la placa pre-colectora. Como en el caso de la región 0-A, esta pendiente determina la forma de la transformada directa de Tammet. Las pendiente de ambas regiones se ve afectada por el flujo.

Por otro lado, la laminaridad del flujo está dada por el número de Reynolds:

$$R_D = \frac{f}{wu}$$

donde u es la viscosidad cinética del gas, la cual aproximamos por la del aire ya que las mezclas no serán siempre iguales, y w es el ancho de la celda de medición. A bajos valores de R_D se asegura un flujo laminar, mientras que a valores mayores se vuelve turbulento. La laminaridad puede entonces asegurarse aumentando el ancho de la celda o disminuyendo el flujo.

Para obtener un intervalo de interés uniformemente espaciado en el dominio de la movilidad sería necesario espaciar el dominio del voltaje de forma hiperbólica de acuerdo a la relación $KV=A$ para asegurar la existencia de la función inversa tradicional de G . Sin embargo, aunque no se utilizara un espaciado hiperbólico, siempre sería posible encontrar la pseudo-inversa de la función G . En ambos casos sería necesario aplicar algún algoritmo de regularización (sección 2.8.1.1.1).

Considerando un posible espaciado hiperbólico, sería deseable que el intervalo de voltaje escogido se ajustara lo mejor posible a la fuente de alimentación para que el mínimo espaciado existente entre muestras de voltaje no fuera menor a la resolución mínima proporcionada por el convertidor A/D de la tarjeta de adquisición. Utilizando este criterio como guía, el valor de A puede determinarse a partir de $K_{\max}V_{\min}$ o $K_{\min}V_{\max}$, dependiendo de las especificaciones de diseño. En el caso general, la segunda cantidad es la más adecuada si se conoce de antemano el rango de movilidad aproximado en que se desea realizar la medición de movilidad iónica, dado que el máximo voltaje manejado por el convertidor A/D de una tarjeta de adquisición siempre se conoce.

3.1.2.1.2 Diseño de una nueva celda de medición

Como primer paso en el diseño de un nuevo condensador de aspiración óptimo es necesario entonces conocer el rango de movilidades de los iones y macro-moléculas iónicas que nos interesa capturar. En nuestro caso, basados en investigaciones anteriores (sección 2.6) y pensando en que queremos capturar iones a movilidades bajas (ya que en saturación las moléculas se hacen grandes y pesadas), se ha establecido que se desean realizar experimentos en un rango desde aproximadamente 0.18 hasta 1.5 $\text{cm}^2/\text{V}\cdot\text{seg}$. Con estos datos definimos nuestras primeras variables:

$$k_{\min}=0.18 \frac{\text{cm}^2}{\text{V} \times \text{s}}, \quad k_{\max}=1.5 \frac{\text{cm}^2}{\text{V} \times \text{s}}$$

El segundo factor importante a considerar es el flujo. En nuestro caso hemos decidido que las muestras de mezclas gaseosas serán de 100 ml/min para cumplir con la norma clínica de 200 ml/min para pacientes adultos (como ya se ha mencionado, nuestro monitor de referencia, el Capnomac Ultima™ de Datex-Ohmeda™, muestrea a esta mayor tasa de flujo), estando muy cerca de también cumplir con el flujo recomendado para pacientes pediátricos de 80 cc/min. Sin embargo, como se ha señalado en la sección 3.1.2.1.1, se ha previsto la utilización de un flujo diluyente adicional de N_2 para incrementar el rango de flujo a entre 1 y 2 lpm, dado que la utilización de un flujo dentro de este rango para el muestreo ayudará a mantener una buena relación señal a ruido y evitará que los cúmulos iónicos sean demasiado grandes. De esta forma:

$$f_{\max} = 2 \text{ lpm}$$

Para establecer el valor de la constante A , utilizaremos el rango máximo de voltaje del convertidor A/D de nuestra tarjeta de adquisición, el cual es fijo y tiene un valor de:

$$V_{\max} = 10 \text{ v}$$

Con esta información podemos determinar el valor de A de la siguiente forma:

$$A = k_{\min} \times V_{\max} = 0.18 \times 10 = 1.8$$

El conocimiento del valor de esta constante nos permite encontrar el voltaje mínimo requerido para muestrear todo el rango de movilidad que hemos establecido:

$$V_{\min} = \frac{A}{k_{\max}} = \frac{1.8}{1.5} = 1.2 \text{ v}$$

Utilizando estos datos ahora podemos establecer un buen valor para el número de Reynolds, dado por:

$$R_D = \frac{v_f h}{u} = \left(\frac{f \times 1000}{60 \times w \times u} \right)$$

donde v_f es la velocidad de flujo (que depende del flujo volumétrico y el área transversal de la celda), h y w representan la altura y ancho de la celda de medición, respectivamente, y u refleja la viscosidad cinética de la mezcla gaseosa, la cual indica la relación entre el coeficiente de viscosidad y la densidad del gas. En la ecuación se han utilizado además factores de conversión para transformar todas las unidades al sistema métrico cgs. La viscosidad cinética es un parámetro físico que cambia de fluido a fluido, y ya que estaremos utilizando diferentes mezclas gaseosas, estableceremos una viscosidad típica para determinar R_D . Aproximaremos la viscosidad cinética de nuestras mezclas por la del aire:

$$u_{\text{aire}} = 0.1487603306 \frac{\text{cm}^2}{\text{s}} \text{ a } 20^\circ\text{C y } 1 \text{ atm}$$

El criterio de Reynolds establece de forma empírica (por lo que algunos de los límites no están claramente definidos) que el flujo es laminar si R_D es menor a 1500, se encuentra en transición para valores entre 1500 y 4000, y es turbulento para valores mayores a 4000. Escogemos entonces un número de Reynolds que asegure laminaridad bajo diversas condiciones de trabajo, por ejemplo $R_D=700$, y con esto podemos fijar el ancho de la celda que garantice estas condiciones. Utilizaremos el valor máximo del flujo que emplearemos en la práctica puesto que R_D es directamente proporcional a este valor (si decidimos en todo caso disminuir el flujo, estaremos seguros de que sigue siendo laminar):

$$w = \frac{f \times 1000}{R_D \times u \times 60} = \frac{2 \times 1000}{700 \times 0.14876 \times 60} = 0.32 \text{ cm}$$

Con esta información podemos ahora establecer la longitud de cada placa. x_a puede determinarse si conocemos la altura de la celda. En nuestro caso, contamos con espaciadores de Teflón™ de dos gruesos, 0.025 y 0.040 cm, así es que tenemos por lo menos dos posibilidades para la altura (eso sin utilizarlos en combinación). Así es que haremos cálculos utilizando ambos con el propósito de compararlos. Para estos valores de h :

$$x_a = \frac{1000 \times h \times f}{60 \times A \times w} = \frac{1000 \times h \times 2}{60 \times 1.8 \times 0.32} = \begin{cases} 1.4468 \text{ cm, si } h = 0.025 \text{ cm} \\ 2.3148 \text{ cm, si } h = 0.040 \text{ cm} \end{cases}$$

Si ahora establecemos el valor pico deseado de la función G (G_{max}), podemos determinar x_b . El valor de G_{max} debe ser lo más cercano posible a la unidad porque de él depende el valor máximo de la corriente iónica generada en las placas del sensor. Se requiere que esta señal sea lo más fuerte posible, dado que se encuentra en el rango de micro-amperes, para lograr la mejor relación señal a ruido. Por otro lado, se indicó anteriormente que x_b determina la pendiente negativa de la región A-B, la cual quisiéramos que fuera grande para que la función G sea lo más selectiva posible. El problema en este caso es que la altura es inversamente proporcional a la pendiente, como se ha visto antes de acuerdo a la relación

$$G_{\text{max}} = 1 - \frac{A}{B}, \quad \text{y} \quad m_{ab} = -\frac{1}{B}$$

y habrá que determinar qué factor es más relevante o llegar a un compromiso. Tomando esto en cuenta, estableceremos que el valor de B (del cual depende x_b) no puede hacerse muy pequeño sin afectar el valor de G_{max} . Determinaremos un valor x_{bmax} calculando primero un valor B_{min} de acuerdo a

$$x_{bmax} = \frac{h \times f \times 1000}{w \times B_{min} \times 60}$$

Este valor mínimo de B puede calcularse usando la función G inversa como criterio. Como se ha mencionado ya, esta función se compone de paredes hiperbólicas localizadas en

$$kv = A \left(\frac{xb}{xa} \right)^l, \quad l = 0, 1, \dots, \infty$$

Cuando se obtiene una densidad de corriente ruidosa mediante un condensador de aspiración, estas paredes tienen el efecto de amplificar el ruido en la transformada inversa de forma impresionante. Es entonces deseable que estas paredes queden fuera del rango de medición en la medida de lo posible. Para que esto suceda es necesario que

$$k_{min} \times v_{min} > A \frac{x_b}{x_a}, \quad \text{o de forma equivalente } k_{min} \times v_{min} > \frac{A^2}{B}$$

por lo que estableceremos

$$B_{min} = \frac{A^2}{k_{min} \times v_{min}} = \frac{1.8^2}{0.18 \times 1.2}, \quad B_{min} = 15$$

y por consiguiente

$$x_{bmax} = \begin{cases} \frac{0.025 \times 2 \times 1000}{0.32 \times 15 \times 60} = 0.1736 \text{ cm, si } h = 0.025 \text{ cm} \\ \frac{0.040 \times 2 \times 1000}{0.32 \times 15 \times 60} = 0.2778 \text{ cm, si } h = 0.040 \text{ cm} \end{cases}$$

Ahora tenemos un límite superior para x_b . Cuánto lo disminuyamos desde ese valor depende de nuestro criterio de decisión. Empleando el criterio de G_{max} :

$$x_b = (1 - G_{max})(x_a)$$

y podemos probar con diferentes valores pico. Algunas posibilidades se resumen en la tabla 3.4.

G_{max}	$h=0.025 \text{ cm}$	$h=0.040 \text{ cm}$
0.80	0.2893	0.4630
0.85	0.2170	0.3472
0.90	0.1447	0.2315
0.95	0.0723	0.1157

Tabla 3.4. Posibles valores de x_b para diferentes ganancias de la función G.

Como puede observarse, con x_{bmax} se obtiene una buena eficiencia de captura ($G_{max}=0.88$). Si escogiéramos la distancia x_b más larga que el máximo perderíamos eficiencia e introduciríamos una mayor sensibilidad a ruido, mientras que si lo hiciéramos mucho más corto encontraríamos limitaciones físicas de manufactura y probablemente evidenciaríamos las simplificaciones del modelo matemático. Un buen compromiso entonces es escoger $x_b=0.1447$ para $h=0.025$ o $x_b=0.2315$ para $h=0.040$, obteniendo una ganancia $G_{max}=0.90$. Esto corresponde a la relación

$$B = 10 \times A$$

Si siguiendo este criterio que hemos determinado, podemos escoger $B=18$ (que es mayor que nuestro límite inferior $B_{min}=15$). Con esto hemos determinado todos los parámetros de diseño requeridos, y los hemos resumido en la tabla 3.5.

	$h=0.025$ cm	$h=0.040$ cm
V_{min} [v]	1.2	1.2
V_{max} [v]	10	10
K_{min} [cm ² /v s]	0.18	0.18
K_{max} [cm ² /v s]	1.5	1.5
x_b [cm]	0.1447	0.2315
x_a [cm]	1.4468	2.3148
w [cm]	0.32	0.32
f [l/min]	2	2

Tabla 3.5. Parámetros establecidos mediante la metodología de diseño.

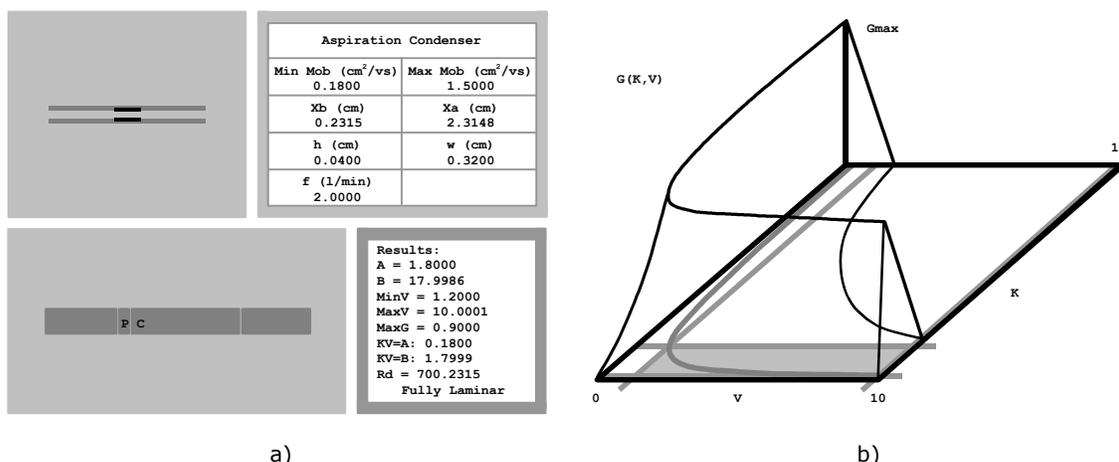


Figura 3.10. Dos pantallas capturadas del programa interactivo de CAD para la visualización del diseño de una celda de medición. **(a)** Visualización de los parámetros físicos. En la esquina superior izquierda se representa la altura h entre las placas. Directamente debajo se muestra el tamaño relativo entre el pre-colector P y el colector C. En la esquina superior derecha se encuentra una ventana en la que el usuario puede modificar los parámetros de diseño del sensor: K_{min} , K_{max} , x_b , x_a , h , w y f . En la ventana de abajo se muestran los parámetros de salida: A , B , V_{min} , V_{max} , G_{max} , $KV=A$ (K para $V=10v$, hipérbola A), $KV=B$ (K para $V=10v$, hipérbola B), y R_D . **(b)** Pantalla de visualización de la función G y su inversa. En este caso se aprecia la forma triangular de la función G en una gráfica pseudo-3D que tiene una escala de 0 a 10 para ambos ejes. Se muestra la región de interés mediante líneas rectas en el plano KV y también así se marca la localización de las paredes hiperbólicas de impulsos de la inversa. En este caso, la región de interés se encuentra en la parte inferior de la gráfica, y abarca una gran parte del plano en sentido horizontal (voltaje). Puede apreciarse que en toda esta región solamente hay una pared hiperbólica ($KV=A$), lo cual es uno de los propósitos de la metodología de diseño propuesta.

Por cuestiones de fabricación se ha decidido que lo más conveniente es escoger el conjunto de parámetros determinado para el espaciador más grueso ($h=0.040$ cm).

3.1.2.1.3 Software CAD para el diseño de la celda de medición

La búsqueda del diseño óptimo del nuevo sensor nos conduce al desarrollo de herramientas computacionales de visualización y apoyo que permitan la mejor comprensión de los parámetros involucrados y su interacción, la cual es, como hemos visto, algo complicada. En este caso, se ha desarrollado un paquete de CAD sencillo, programado en Borland Turbo Pascal™ 4.0 para DOS, el cual permite la modificación de todos los parámetros de diseño y, como retroalimentación, la visualización interactiva de lo que sucede físicamente con el núcleo de la ecuación de Tammet, la función G , y su inversa. Un par de pantallas capturadas del programa pueden apreciarse en la figura 3.10, en donde se aprecian los datos específicos del sensor diseñado en la sección 3.1.2.1.2.

3.1.2.1.4 Construcción de la celda de medición

En diseños anteriores del condensador de aspiración la única electrónica que se incluía dentro del cuerpo del condensador era la celda de medición en sí. Durante el diseño de este nuevo condensador se ha decidido incluir dentro del cuerpo del sensor una etapa de conversión de corriente a voltaje y amplificación, y un sensor de temperatura. El cuerpo del sensor es un bloque de cobre que sirve para contener la radiación de la cámara de ionización, pero también puede ser calentado para mantener una temperatura interna constante para el gas, lo cual ayuda al proceso de ionización. Colocar un sensor de temperatura dentro del bloque, en el camino del flujo del gas, preferentemente antes de la salida de este para no afectar sus características de flujo, es una alternativa conveniente. Por otro lado, una característica adicional del bloque de cobre es que nos sirve también como aislante electromagnético, como una caja de Faraday, para reducir el ruido que pudiera introducirse al amplificar miles de veces la pequeñísima corriente iónica, por la cual además, entre más cerca se encuentre el convertidor de corriente y amplificador a la celda de medición, mejor. Basado en esto y en experiencias previas, se ha diseñado el circuito convertidor de corriente y amplificador mostrado en la figura 3.11 para ser incluido en el diseño de las placas de circuito impreso que conforman la celda de medición.

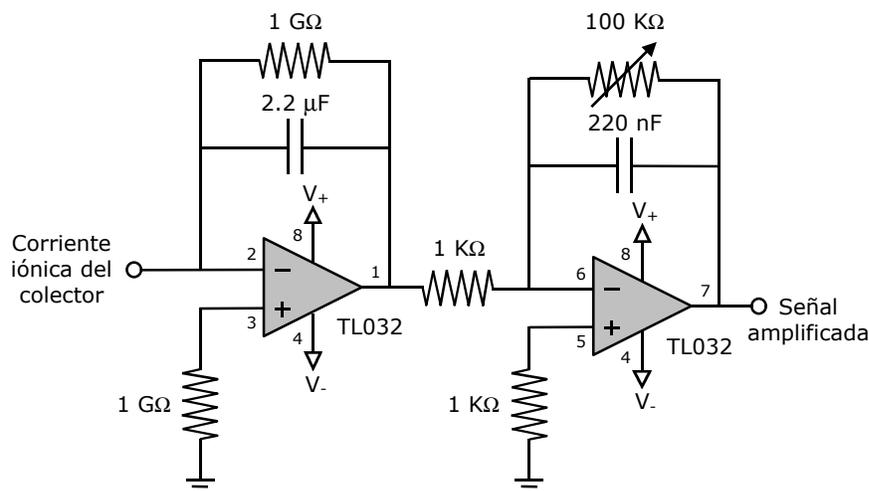


Figura 3.11. Convertidor de corriente iónica a voltaje y amplificador de salida del sensor. Este circuito está construido en base a un amplificador operacional TL032 y consta de dos etapas. La primera etapa es de conversión de corriente a voltaje, gracias a la resistencia de 1 GW, y hace las veces también de primera etapa de amplificación. La segunda etapa de amplificación tiene una ganancia variable, dependiendo del valor del potenciómetro de 100 KW, el cual permite ajustar el valor requerido de la señal de salida. Este potenciómetro es accesible en el exterior del bloque de cobre que funciona como el cuerpo del condensador de aspiración.

Con esto en mente, y tomando en cuenta los resultados del diseño matemático de la celda de medición, se ha propuesto en la figura 3.12 la construcción de las placas PCB que contienen la celda de medición. Las dos tarjetas se colocan una sobre la otra, con las placas de referencia y colectoras hacia adentro, y se emplea un espaciador de Teflón™ como el de la figura 3.14, con un canal interior sobre las placas para formar las paredes de la celda de medición.

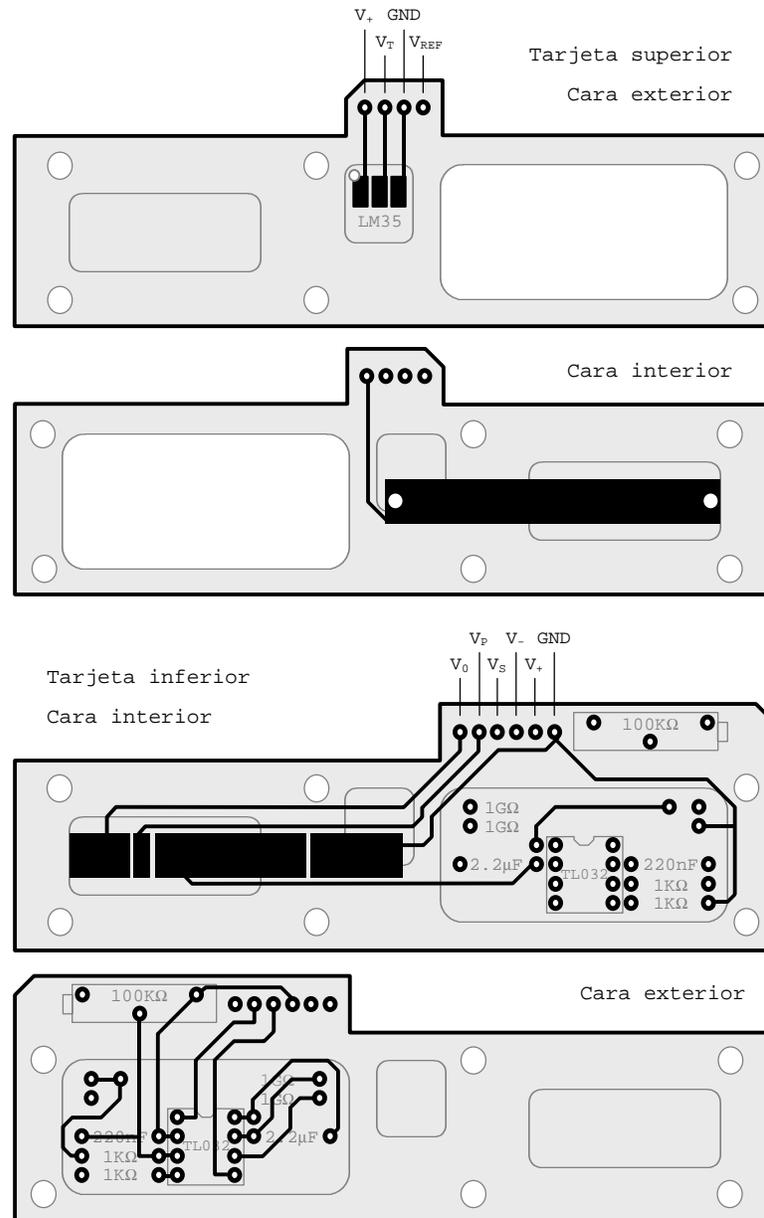


Figura 3.12. Placas de circuito impreso para la construcción de la celda de medición. Ambas tarjetas tienen pestañas que sobresalen del cuerpo del sensor para hacer todas las conexiones desde y hacia el condensador. Las dos tarjetas están perforadas para permitir el paso de tornillos. Sobre la tarjeta superior, en la cara exterior, se coloca el sensor de temperatura LM35 en el lugar designado. El circuito de conversión de corriente a voltaje y amplificación de la señal se coloca en el lugar indicado de la cara interior de la placa inferior. La placa superior presenta una sección perforada para no estorbar al circuito. Entre las dos placas se coloca un espaciador de Teflón™ con perforaciones para los tornillos y un canal, la pared de la celda de medición, entre las placas de referencia (tarjeta superior) y colectoras (tarjeta inferior). Hay que señalar que existen además otros dos electrodos, el anterior y el posterior, para uniformizar el campo eléctrico en los extremos de la celda de medición.

3.1.2.1.5 Diseño del cuerpo del condensador de aspiración

El cuerpo del sensor es básicamente un bloque de cobre, en dos mitades, el cual como ya se ha mencionado, aísla la radiación de la cámara de ionización, en la cual se coloca una fuente radioactiva de Americio 241, y aísla también térmica y electromagnéticamente a la celda de medición. Ha sido maquinado para tener la entrada de gas, la cámara de ionización, una cámara para colocar el circuito para convertir en voltaje la corriente iónica y amplificarla, y una cámara para colocar un sensor de temperatura interno, justo antes de la salida del gas. No se ha desarrollado aún un modelo matemático para diseñar la cámara de ionización ni los accesos del gas, pero se ha basado el diseño del bloque de cobre en trabajos previos [96-99,103]. El resultado se muestra en la figura 3.13. Los circuitos impresos y el espaciador se colocan entre ambas mitades.

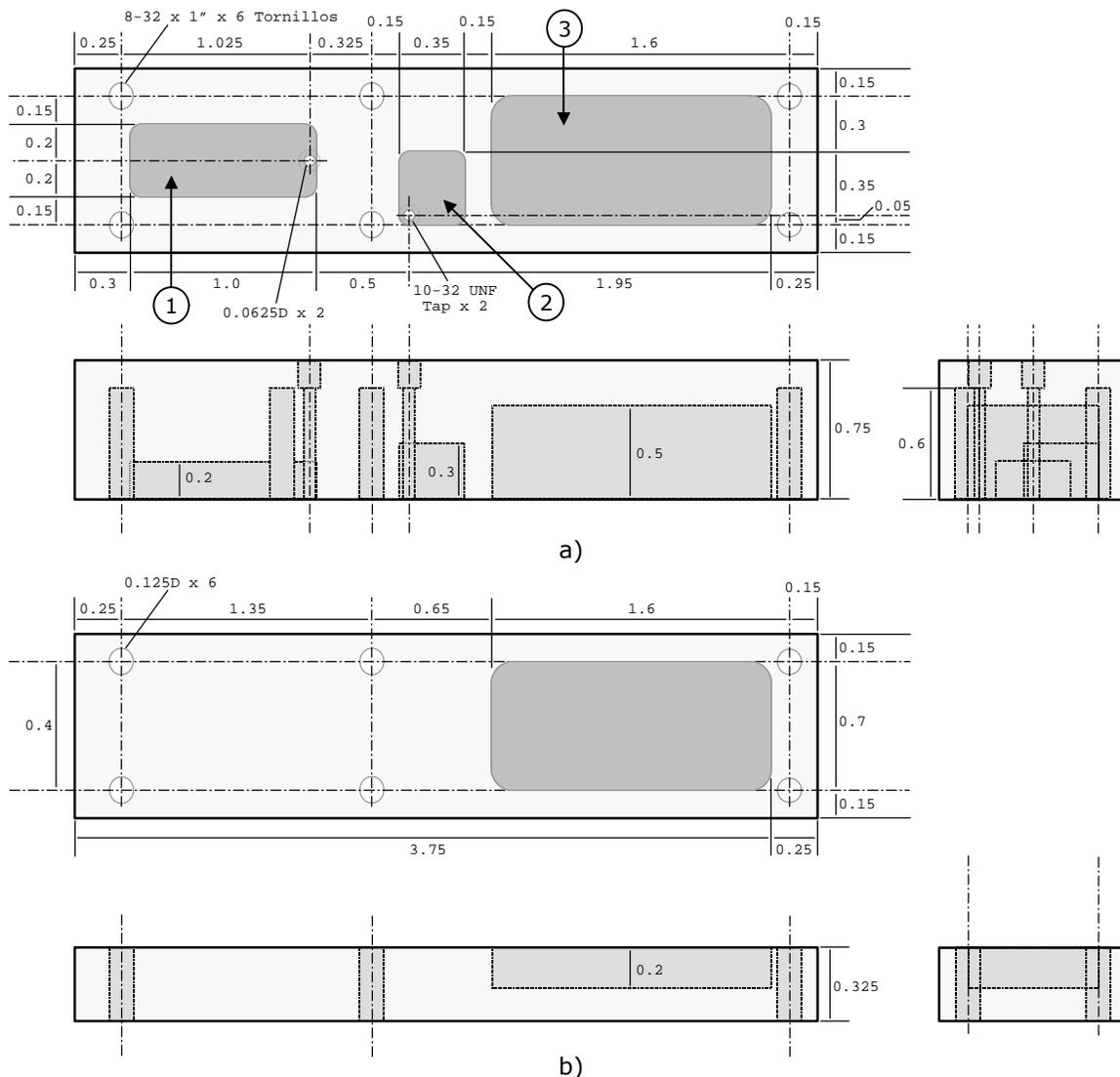


Figura 3.13. Diagrama técnico de las medidas del cuerpo del condensador. Se trata de un bloque de cobre maquinado para obtener una entrada y salida de gas, además de 3 cámaras. Se fabricaron también entradas para seis tornillos que mantendrán firmemente cerrado el sensor. **a)** Parte superior. Aquí se aprecian las 3 cámaras: (1) Cámara de ionización, a la entrada del gas, (2) cámara del sensor de temperatura, a la salida del gas, y (3) cámara del circuito convertidor corriente a voltaje y amplificador. **b)** Parte inferior. Aquí se aprecia un pequeño receso para evitar hacer corto circuito con las soldaduras del circuito amplificador.

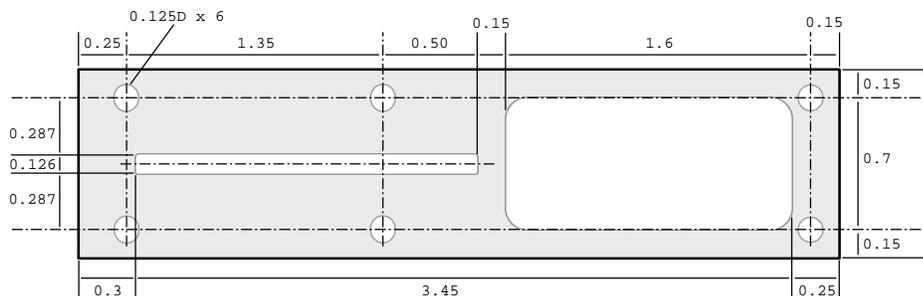


Figura 3.14. Diagrama del espaciador de Teflón™. Tiene un grueso de 0.4 mm y se coloca entre las dos placas impresas. Cuenta con perforaciones para los tornillos, una perforación grande para no interferir con el circuito de conversión de corriente a voltaje y amplificación, y un canal, el cual hace las veces de pared de la celda de medición, entre las placas de referencia y colectoras, a lo largo del cual fluye la mezcla ionizada de gases anestésicos.

3.1.2.2 Diseño del control de temperatura

El condensador de aspiración requiere de una buena ionización y de un posterior proceso de formación de macromoléculas iónicas adecuado para su óptimo funcionamiento, y se ha observado que al calentar el gas en el interior del sensor y mantenerlo a una temperatura constante este proceso se hace más eficiente [96-99]. En este trabajo se ha desarrollado un control de lógica difusa para este efecto, y su diagrama de bloques se muestra en la figura 3.15.

En este caso se identifica el proceso a ser controlado como la *temperatura del gas* dentro del prototipo del condensador de aspiración, antes de la salida del flujo. Las variables de control que utilizaremos para caracterizar al proceso de control son la diferencia entre la temperatura deseada y la que realmente mide el sistema (T_{ERROR}) y la diferencia ciclo a ciclo de la temperatura medida (T_{DELTA}), es decir, un indicador de la razón de cambio de la temperatura.

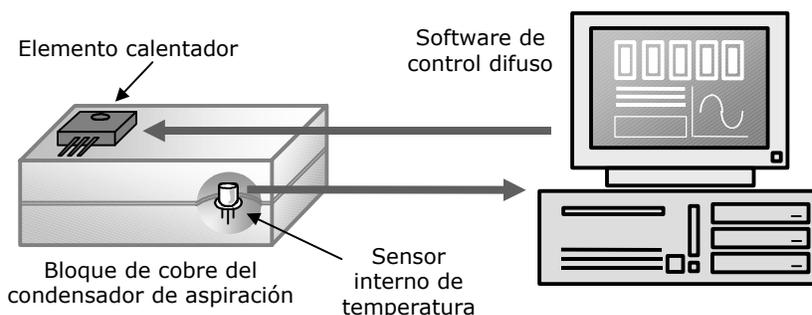


Figura 3.15. Diagrama a bloques del control de temperatura difuso.

Para medir la temperatura utilizamos un circuito integrado LM35, un transductor de temperatura de estado sólido, colocado dentro del bloque, en el camino de salida del gas que fluye a través del condensador de aspiración. Este sensor proporciona un voltaje base más un voltaje de 10mV por grado centígrado registrado. La salida de este circuito, la señal de temperatura, se amplifica mediante el circuito mostrado en la figura 3.16, y posteriormente se conduce a la computadora por medio de una tarjeta de adquisición de datos analógicas CIO-DAS08 de ComputerBoards, Inc. Basados en las características del LM35, del amplificador propuesto y los componentes de este sub-sistema de medición de temperatura, la respuesta que la computadora esperaba recibir al monitorear la temperatura se muestra en la figura 3.17.

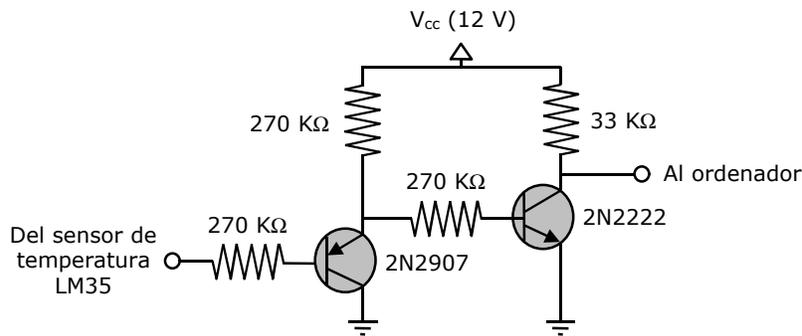


Figura 3.16. Diagrama del circuito amplificador de la señal de temperatura.

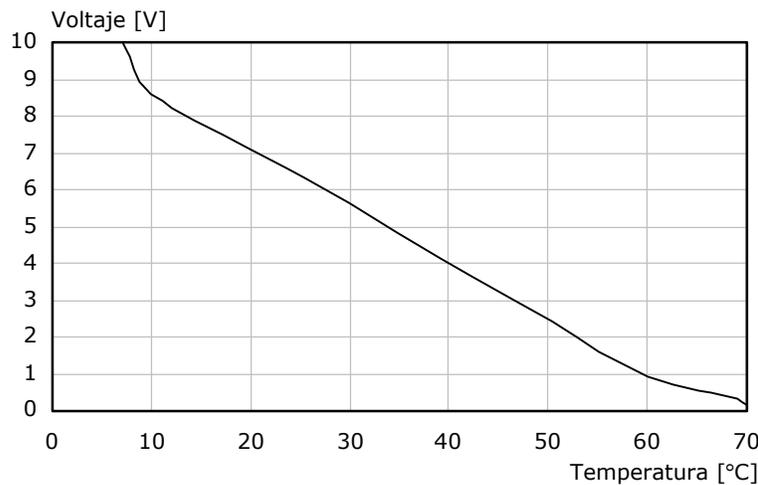


Figura 3.17. Respuesta teórica del sub-sistema de medición de temperatura.

		T_{ERROR}						
		$V_{CALENTADOR}$	N	VS	S	MS	MB	B
T_{DELTA}	XS	VL	ML	M	MH	VH	XH	XH
	VS	VL	L	ML	MH	H	XH	XH
	S	VL	VL	L	M	H	XH	XH
	MS	VL	VL	VL	M	H	XH	XH
	MB	VL	VL	VL	ML	MH	XH	XH
	B	VL	VL	VL	ML	MH	XH	XH
	VB	VL	VL	VL	L	MH	VH	XH

Tabla 3.6. Conjunto de reglas difusas para el control de temperatura. Se encuentran asociadas a las funciones de membresía difusa de la figura 3.18. La estructura de las reglas es: **SI** el error T_{ERROR} entre la temperatura real y la deseada es (**N** - negativo, **VS** - muy pequeño, **S** - pequeño, **MS** - mediano pequeño, **MB** - mediano grande, **B** - grande, **VB** - muy grande) **Y** el cambio de la temperatura T_{DELTA} en este ciclo ha sido (**XS** - extremadamente pequeño, **VS** - muy pequeño, **S** - pequeño, **MS** - mediano pequeño, **MB** - mediano grande, **B** - grande, **VB** - muy grande) **ENTONCES** el conjunto de salida para el voltaje del calentador $V_{CALENTADOR}$ está dado por las casillas de la matriz al cruce de los renglones y columnas activados.

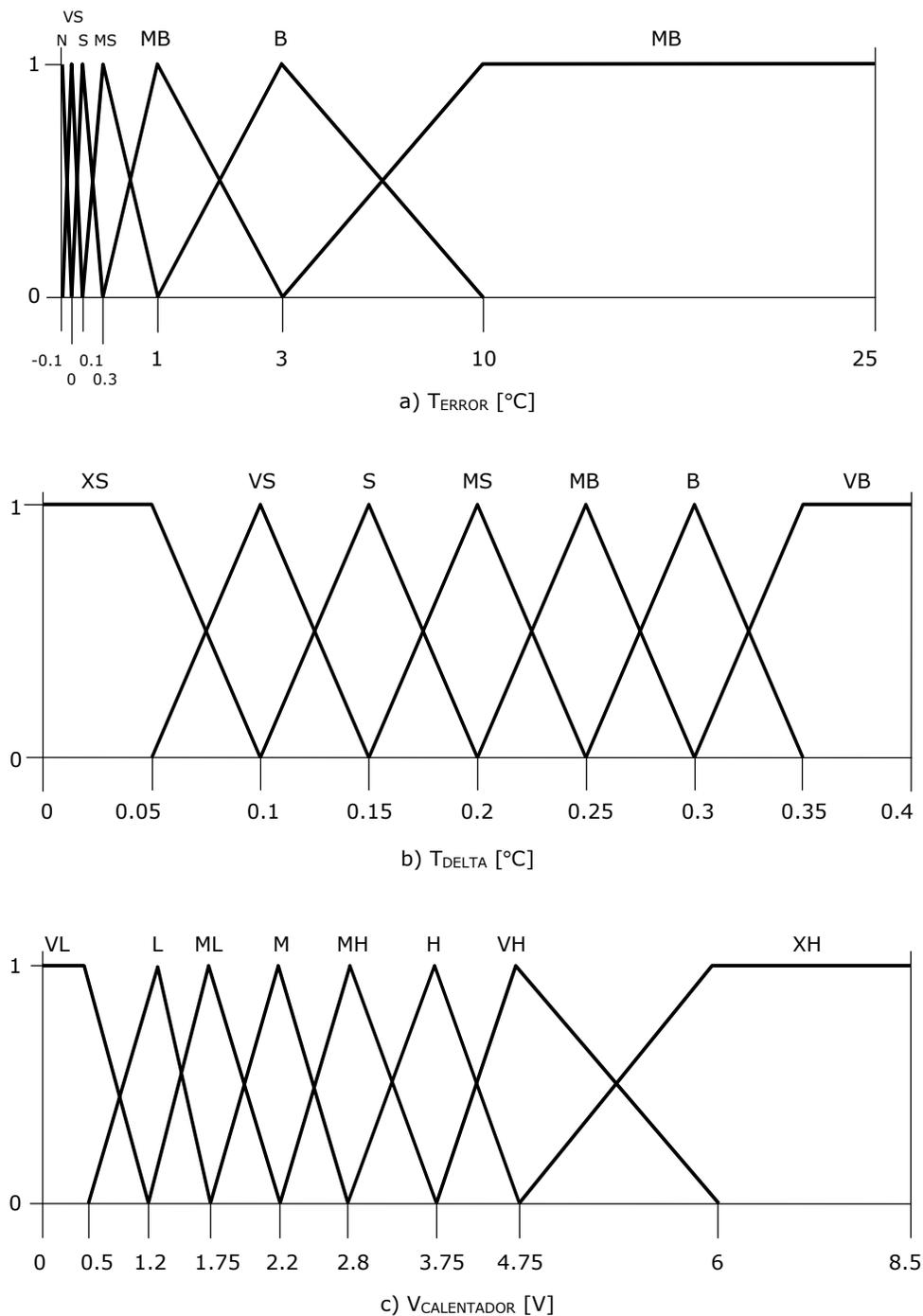


Figura 3.18. Funciones de membresía difusa para a) el error de temperatura T_{ERROR} , b) el cambio ciclo a ciclo T_{DELTA} del valor de la temperatura y c) el voltaje de salida para el calentador $V_{CALENTADOR}$. La particular distribución que presentan las funciones para el error de temperatura T_{ERROR} se debe a que se desea un control más fino conforme el error se va haciendo pequeño hasta llegar a la temperatura deseada.

La computadora recibe entonces la información proporcionada por el sub-sistema de medición de temperatura y determina el error ($T_{DESEADA}-T_{ACTUAL}$) y la razón de cambio de la temperatura entre períodos de muestreo (T_{DELTA}). Conociendo la relación de la figura 3.17, el software convierte el voltaje que le entrega el circuito de medición de temperatura a un valor en grados centígrados, del cual pueden derivarse las variables de control y ser fuzzificadas. Los conjuntos apropiados para cada variable de entrada (T_{ERROR} y T_{DELTA}) y de salida ($V_{CALENTADOR}$) se muestran en la figura 3.18. El conjunto de reglas difusas para el control se muestran en la tabla 3.6.

Las reglas y los conjuntos se utilizaron para pre-calcular una tabla de decisión utilizando la superficie de control generada por un sistema de inferencia de lógica difusa. Esto fue posible ya que ni las reglas ni los conjuntos varían con el tiempo. Ya que el sistema de inferencia proporciona la misma salida para un conjunto de entradas determinado, no tiene caso el cálculo en tiempo real de la salida, ya que esto incrementaría el tiempo de respuesta y la complejidad del software de control. Utilizando una tabla el tiempo de respuesta es inmediato y la complejidad del software se transfiere a otro software (el que calcula la tabla) y que no forma parte del sistema, con lo cual éste se simplifica. El único inconveniente de este método es que se requiere de un espacio en memoria para almacenar la tabla, pero no es muy molesto si la tabla es de tamaño modesto, aunque no muy pequeña para no perder resolución. En este caso se empleó una tabla de 18 puntos para T_{ERROR} y 41 para T_{DELTA} . Se pudo reducir el número de puntos correspondientes a T_{ERROR} ya que una gran parte de la tabla corresponde a un valor constante, por lo que se utilizaron algunas simplificaciones. La superficie de control descrita por la tabla se muestra en la figura 3.19.

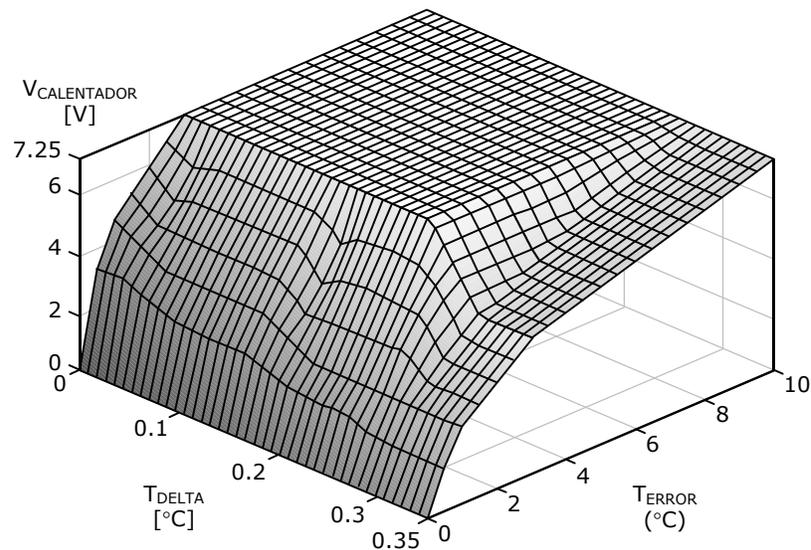


Figura 3.19. Superficie difusa para el control de la temperatura del condensador. A partir de un error (diferencia entre la temperatura deseada y actual) T_{ERROR} y un indicador del cambio (diferencia entre la temperatura actual y la del período de muestra anterior) T_{DELTA} se determina un nuevo voltaje $V_{CALENTADOR}$ de entrada para el circuito calentador, de manera que se pueda alcanzar y mantener una temperatura deseada en el condensador de aspiración.

El control difuso permite mantener una temperatura alrededor de un punto escogido por el usuario, siendo 40°C la temperatura estándar para nuestros experimentos. La variable de salida $V_{CALENTADOR}$ es el voltaje que debe proporcionarse al circuito de calentamiento en donde el elemento actuador es un transistor de potencia TIP36, el cual se atornilla al condensador de aspiración, disipando el calor que genera en el bloque de cobre y a su vez calentando el gas que circula en el interior. El circuito calentador propuesto se muestra en la figura 3.20. La corriente de colector-emisor del actuador, y su relación con el voltaje del control difuso – proporcionado al circuito por la computadora a través de una tarjeta de adquisición con salidas analógicas CIO-DDA06 de ComputerBoards, Inc – se muestra en la figura 3.21.

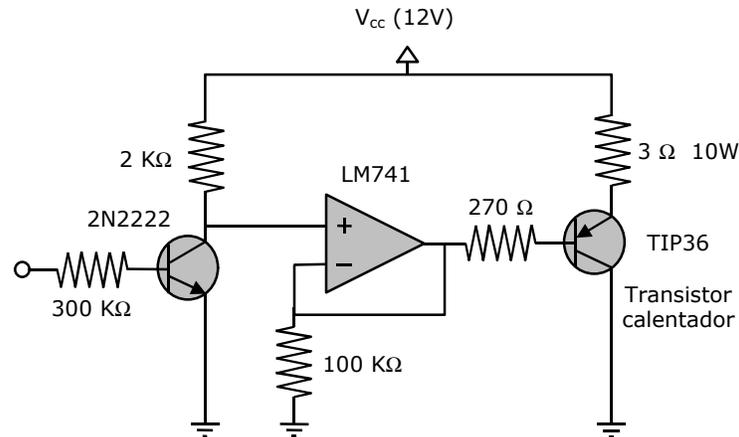


Figura 3.20. Circuito calentador propuesto como actuador para el control de temperatura. Se ha diseñado de tal forma que la corriente de colector del transistor TIP36 de salida tenga un rango de entre 0 y 2 Amperes. El transistor genera entonces una temperatura que va desde despreciable hasta considerable, y que se disipa a través del condensador de aspiración.

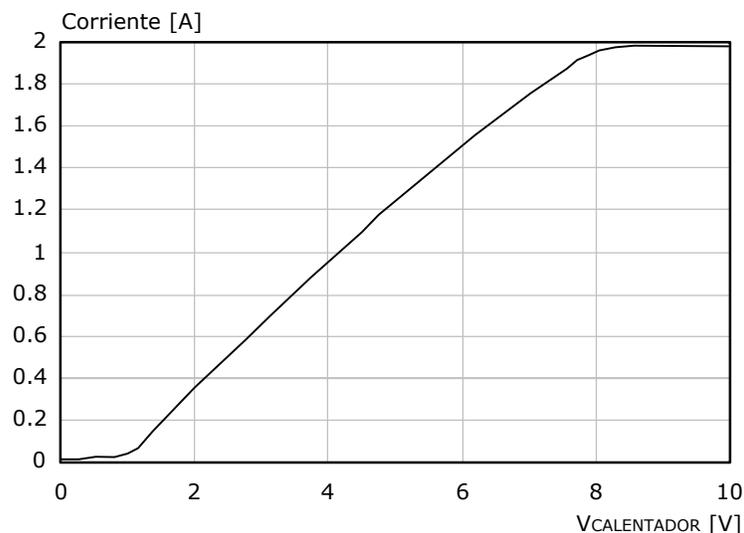


Figura 3.21. Relación entre $V_{\text{CALENTADOR}}$ y la corriente de colector-emisor del transistor de salida TIP36 del circuito calentador, el cual funciona como actuador. No es necesario aplicar más de 8.5 V para obtener la máxima corriente de salida.

Por otro lado, puede apreciarse que el control solo maneja diferencias entre la temperatura deseada y la actual (T_{ERROR}) desde 0 a 10 grados centígrados a pesar de que los conjuntos difusos se habían diseñado para diferencias de hasta 25°C. Durante el diseño se observó que para diferencias de temperatura mayores a aproximadamente 10 grados el control aplicaba calor máximo, así es que se tomó la decisión de eliminar esa porción de la tabla (poco menos de la mitad) para ahorrar espacio. Así, se aplica calor máximo siempre que la diferencia en temperatura es mayor a 10 grados. Es de notarse también que se había definido un conjunto para errores negativos pequeños (N), el cual tampoco se tomó en cuenta en la tabla para describir la superficie de control (para todo error negativo simplemente se deja de aplicar voltaje, ya que no existe un sistema de enfriamiento), y se incluyó en el sistema difuso solo para mejorar la aproximación alrededor de la temperatura deseada.

3.1.2.4 Software para el control del condensador de aspiración

Para el control del condensador de aspiración y el calentador del sensor se cuenta con una computadora Pentium I a 133 MHz, con 16 Mb de memoria total, un disco duro de 1 Gb, y equipada con Windows 95. El software se implementó en LabView 4.0.1, un lenguaje visual de alto nivel que representa cada función requerida como un instrumento virtual, y que cuenta de entrada con instrumentos pre-construidos para diversos propósitos, permitiendo además fabricar instrumentos propios. Cada instrumento virtual cuenta con un panel de control, en el que se muestran todas las variables de entrada y salida en forma de controles de variadas características que aceptan datos del usuario o despliegan resultados, y un diagrama de cómo se interconectan los controles, de forma simple o mediante construcciones auxiliares como bucles, condicionales, etc. El panel de control principal es en realidad el instrumento virtual que hace las veces de interfase con el usuario, y el correspondiente al control del condensador de aspiración se muestra en la figura 3.24. En él el usuario puede leer los resultados de las mediciones y modificar sus parámetros. El pseudo código del software de control se muestra en la figura 3.23.

```

1 Inicializar instrumentos
2 Inicializar archivos de salida
3 Leer la lista de voltajes para cada placa
4 Leer tabla de control difuso para la temperatura
5 Si el botón virtual que selecciona el modo de control de la temperatura se
  encuentra en manual, aplicar el voltaje de calentamiento escogido por el
  usuario. Si no, ejecutar el instrumento de control automático de temperatura:
5.1 Leer sensor de temperatura y calcular temperatura actual
5.2 Determinar T-ERROR y T-DELTA a partir de la temperatura deseada por el
  usuario, introducida en el panel del instrumento virtual principal
5.3 Utilizar estos datos para determinar el nuevo voltaje de salida del
  calentador, utilizando interpolación con la tabla de control difuso
5.4 Actualizar el instrumento de visualización de la temperatura
5.5 Si está activado el botón que pide guardar el registro de la temperatura,
  entonces grabar a disco la hora y la temperatura actual
5.6 Si la temperatura se encuentra en rango (temperatura deseada +/- 1°C)
  entonces activar el LED virtual que así lo indica
5.7 Fin de sub-rutina del instrumento
6 Actualizar instrumento que muestra la hora
7 Si la temperatura está en rango y el usuario ha activado el botón virtual
  para realizar una medición de la curva I-V de un gas bajo análisis, entonces:
7.1 Inicializar tabla de voltajes
7.2 Para cada ciclo del bucle principal del software, mientras no se termine
  de aplicar toda la lista de voltajes:
7.2.1 Aplicar un voltaje de la lista. Existen 3 voltajes que se envían:
  placa anterior - utilizada únicamente para estabilizar el campo
  eléctrico antes de la celda de medición, placa precolectora, y
  placa de referencia. La placa posterior está a tierra (0 volts)
7.2.2 Esperar el tiempo indicado por el usuario en el panel de control
  para que se establezca la corriente iónica
7.2.3 Tomar un número de lecturas (indicado por el usuario) de la placa
  colectora y promediarlos para obtener la lectura definitiva
7.2.4 Almacenar la lectura en un arreglo que representa el resultado del
  barrido actual, es decir, una curva I-V para el gas analizado
7.2.5 Actualizar el instrumento de visualización de la curva I-V
7.2.6 Si no se ha terminado con la lista de voltajes, regresar a 7.2.1,
  de otra forma, almacenar el vector en el archivo de resultados
7.2.7 Realizar un ciclo de control de temperatura para mantener
  estable la temperatura durante la medición de la curva
7.2.7 Fin del bucle
7.3 Fin de la sub-rutina del instrumento de medición de la curva I-V
8 Si el usuario no ha activado la palanca para apagar el instrumento virtual,
  entonces volver al paso cinco. Si lo ha hecho, entonces purgar y cerrar todos
  los archivos, y finalizar.

```

Figura 3.23. Pseudo-código del software de control del condensador de aspiración.

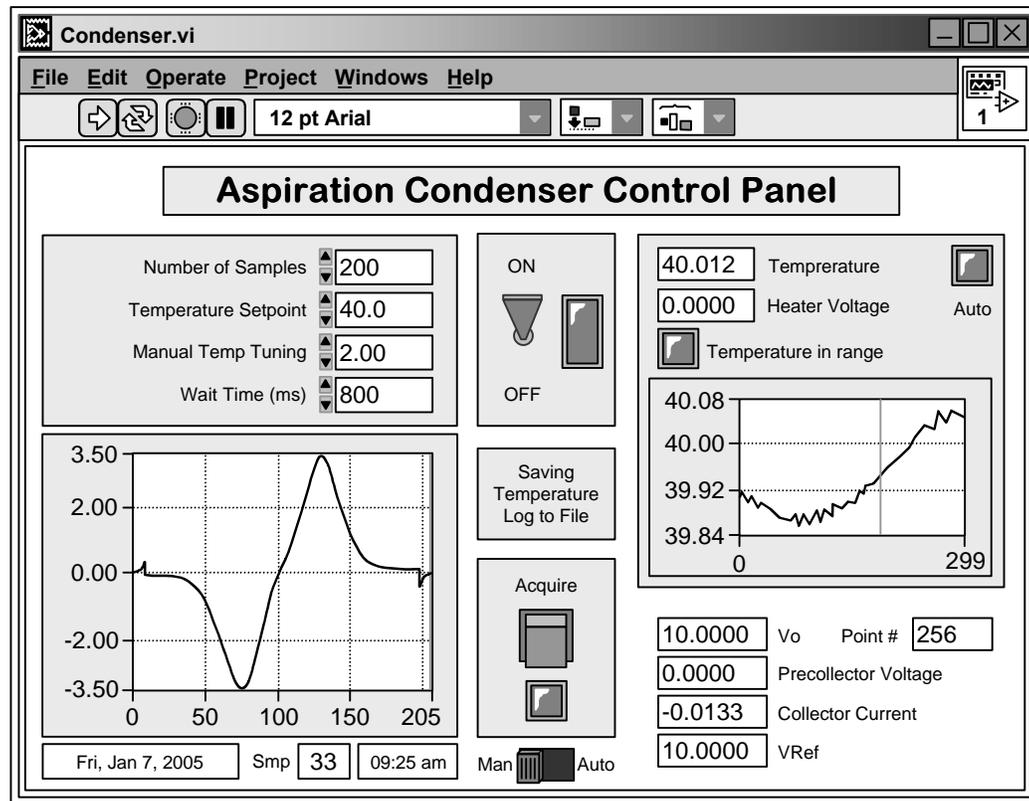


Figura 3.24. Instrumento virtual para el control del condensador de aspiración. Esta interfase virtual cuenta con controles para que el usuario pueda manipular los diversos parámetros del software, así como elementos de visualización gráfica y numérica de los resultados.

3.2 Diseño de los experimentos

3.2.1 Características de la base de datos experimental

Como parte de los objetivos de este trabajo, se desea obtener y evaluar una base de datos completa y representativa del uso de los gases y agentes anestésicos de uso clínico para posteriormente estudiarla y proponer un sistema de reconocimiento de patrones adecuado que permita tomar en cuenta las diferentes condiciones que puedan presentarse en la realidad (incluyendo algunas condiciones de emergencia) y que pueda reconocer y cuantificar los gases y agentes componentes de una muestra.

Siguiendo este razonamiento, es necesario primero establecer los porcentajes de cada gas y agente anestésico que deben ser incluidos en la base de datos. Conociendo los límites de los vaporizadores, y basados en experiencias anteriores, se escogieron seis porcentajes de cada uno de los agentes anestésicos para ser incluidos en los experimentos, haciendo coincidir algunos porcentajes en cada agente de forma que éstos pudieran ser comparados posteriormente al mismo porcentaje si es necesario. Los porcentajes propuestos son:

Desflurano:	1.5, 3.5, 5, 7, 12.5, 18%
Enflurano:	0.5, 1.5, 2, 3.5, 5, 7%
Halotano:	0.5, 1, 1.5, 2, 3.5, 5%
Isoflurano:	0.5, 1, 1.5, 2, 3.5, 5%
Sevoflurano:	0.5, 1, 1.5, 2, 3.5, 5%

En el caso de los gases anestésicos, se establecieron diversas combinaciones (tabla 3.7) que pueden presentarse durante la actividad clínica, desde un extremo hasta el otro:

N ₂	N ₂ O	O ₂	CO ₂
0	0	80	20
0	0	100	0
0	10	80	10
0	20	60	20
0	20	80	0
0	40	40	20
0	40	60	0
0	60	20	20
0	60	40	0
0	80	20	0
10	0	80	10
10	10	60	20
10	10	80	0
10	20	60	10
10	40	40	10

N ₂	N ₂ O	O ₂	CO ₂
10	60	20	10
20	0	60	20
20	0	80	0
20	10	60	10
20	20	40	20
20	20	60	0
20	40	20	20
20	40	40	0
20	60	20	0
30	0	60	10
30	10	40	20
30	10	60	0
30	20	40	10
40	0	40	20
40	0	60	0

N ₂	N ₂ O	O ₂	CO ₂
40	10	40	10
40	20	20	20
40	20	40	0
40	40	20	0
50	0	40	10
50	10	20	20
50	10	40	0
50	20	20	10
60	0	20	20
60	0	40	0
60	10	20	10
60	20	20	0
70	0	20	10
70	10	20	0
80	0	20	0

Tabla 3.7. Combinaciones de porcentajes de gases anestésicos para la base de datos.

Se cuenta entonces con 45 combinaciones de porcentajes de gases y 30 porcentajes de agentes anestésicos. Si tomamos en cuenta una medición adicional de los gases sin anestésico, entonces tendremos un total de 45×31 o 1395 combinaciones diferentes de gases y agentes. Se realizaron además 3 repeticiones de cada experimento para determinar la repetibilidad de las mediciones, lo que nos da un total de 1395×3 o 4185 elementos en nuestra base de datos global.

También es importante establecer las características de muestreo de cada una de las curvas obtenidas para cada mezcla gaseosa. De nuevo nos hemos basado en las experiencias obtenidas al trabajar con anteriores prototipos del condensador de aspiración para diseñar la estrategia de muestreo. Por un lado se ha observado que las curvas no siempre resultan medidas respecto a una línea de base común. Esto sucede al parecer porque existe una acumulación de carga en las placas, la cual debe ser eliminada o al menos estimada de alguna forma para poder ser tomada en cuenta para su posterior eliminación. En trabajos anteriores lo que se hacía era intentar limpiar completamente las placas antes de una medición aplicando el mayor campo eléctrico posible antes de cada medición, con el fin de barrer y eliminar las cargas presentes en las placas, y posteriormente encontrar la línea base estimando que cuando se aplica un voltaje de cero en las placas no debe haber corriente iónica de salida. De esta manera todas las curvas se centraban verticalmente alrededor de cero volts.

En este trabajo hemos decidido acercarnos al problema de otra forma, porque una dificultad que se presentó con el anterior procedimiento fué que las curvas parecían presentar un desplazamiento no solo vertical, sino también horizontal. En lugar de aplicar el campo inicial para barrer la carga parásita, lo que se propone en este trabajo es identificar el funcionamiento del sensor como un condensador. De esta forma, lo que se hace es aplicar un voltaje de cero volts durante un tiempo, mediante el cual se descarga el capacitor (se puede determinar la línea de base para el centrado vertical al estabilizar la corriente inicial de salida) y posteriormente se aplica un voltaje escalón de -10 volts, de forma que la celda de medición, funcionando como un capacitor, se carga hasta un valor y posteriormente comienza a descargarse. Esta descarga permite que el condensador se encuentre en las condiciones estables requeridas para iniciar el barrido a -10 volts, y así, después de un tiempo fijo de descarga, comenzamos a realizar el muestreo. Para el barrido se propone la medición de 64 puntos para iones negativos, desde -10

volts hasta 0 volts, y los mismos para iones positivos, desde 0 volts hasta 10 volts, para un total de 127 puntos distintos de la curva I-V característica, igualmente espaciados a intervalos de 0.1587 volts. Al terminar el barrido mantenemos fijo el último voltaje aplicado de 10 volts, y después de un período realizamos un cambio escalonado a 0 volts, los cuales se mantienen otro período de tiempo. Así, el condensador se carga de nuevo, con una carga contraria a la carga inicial, y comienza a descargarse. Esto permite que el condensador esté listo para la siguiente medición. Dado que la primera medición solo cuenta con una carga/descarga para preparar al condensador para que las mediciones realizadas se realicen sobre una línea base adecuada, la primera medición se considera no confiable, y solo se toman en cuenta las curvas posteriores, en las que el condensador se encuentra en mejores condiciones, habiendo una preparación previa adicional al final de la curva anterior. Por otro lado, las muestras correspondientes a los períodos previos, durante y posteriores a cada carga y descarga nos permiten tener una referencia sobre el comportamiento del condensador de aspiración y la forma de centrar las mediciones.

Para centrar los datos verticalmente se decidió utilizar los datos estables de descarga a -10V, mediante la cual establecemos la línea base de cada curva (aunque en teoría lo sea, no resulta igual que medir a 0 volts). Posteriormente se procede al centrado horizontal, para el cual se examina cada curva y se aplica el criterio de que la corriente debe ser cero cuando el voltaje es cero, a la mitad de cada barrido. Para este sensor es necesario notar que no se produce el mismo resultado al aplicar un voltaje de cero volts al principio de la medición, a la mitad, o al final, y ese es un fenómeno que también debe examinarse y tenerse en cuenta.

El tiempo entre muestras se fijó en 800 ms, período que se consideró más que suficiente para la estabilización de la corriente en cada medición (esto también puede comprobarse al observar la carga/descarga provocada por el cambio escalonado del voltaje). La duración de las cargas/descargas al principio y al final de la medición es de 1.6 segundos, correspondientes a 20 muestras cada uno. El tiempo total en la obtención de cada curva I-V es de 165 segundos, lo cual puede ser un poco largo para un propósito clínico, pero se determinó como adecuado para propósitos experimentales.

Una vez adquirida la base de datos se ha planteado un análisis preliminar para conocer algunas características de distribución y sensibilidad de las curvas. Este análisis también se aplica a las inversas de Tammet obtenidas para cada curva de la base de datos. En primer lugar, se propone un análisis visual de las curvas para observar la forma en que se distribuyen de acuerdo a cada una de sus características de composición. Para lograr este objetivo se grafica en color oscuro el conjunto de curvas en el que todas las repeticiones de cada combinación se promedian para obtener solo 1395 curvas diferentes (para disminuir la aglomeración visual). Sobrepuesto al conjunto total se grafica en color claro el subconjunto de curvas que presenta la característica particular que deseamos estudiar. Este procedimiento se realiza para característica de composición de portador y de agente anestésico en sus diversas concentraciones.

Por otro lado, también se desea determinar la repetibilidad de las curvas. Para este efecto se pueden aplicar diferentes ecuaciones que describan qué tan similares son las tres repeticiones de cada curva, como distancias espaciales multidimensionales, entre las cuales se encuentra la distancia Euclideana, o se pueden aplicar ecuaciones que involucren la varianza o cantidades equivalentes. En nuestro caso hemos escogido la siguiente ecuación, la cual proporciona una buena descripción equivalente a una inspección visual:

$$error_i = \sum_{j=1}^n s \left[abs(y_{i,j}^{rep=1} - y_{i,j}^{media}), abs(y_{i,j}^{rep=2} - y_{i,j}^{media}), abs(y_{i,j}^{rep=3} - y_{i,j}^{media}) \right]$$

en donde el error (o falta de repetibilidad) de la curva i del conjunto de las 1395 diferentes curvas que existen en la base de datos está dado por la suma de las desviaciones estándar de los errores absolutos de cada uno de los n puntos de la curva respecto a la media de las repeticiones. Esta ecuación se ha utilizado en ambas, las curvas de corriente iónica y sus inversas. Las inversas se han obtenido como 64 puntos calculados por regularización de la función G mediante el truncamiento de la descomposición en valores singulares (TSVD), utilizando los primeros 12 componentes.

También se ha querido obtener una indicación visual de la sensibilidad de las curvas a un cambio en el tipo de agente anestésico o en el porcentaje de este. Para este caso se ha empleado la base de datos con las repeticiones promediadas (1395 curvas en total) y se han separado las curvas en grupos que contienen curvas que tienen las mismas características pero que varían en el tipo de agente anestésico que contienen o por su porcentaje. Para cuantificar la separación se ha utilizado una ecuación similar a la anterior, pero que concuerda mejor con la observación visual:

$$error_i = \sum_{k=1}^m \sum_{j=1}^n abs(y_{k+1,j} - y_{k,j})$$

donde la separación del grupo i con m curvas se calcula como la sumatoria en valor absoluto de las distancias Inter-puntuales de todas las curvas del grupo.

3.2.2 Diseño del sistema de identificación y cuantificación

Basado en técnicas de inteligencia artificial, se propone el desarrollo de un sistema de reconocimiento de patrones fundamentado en la base de datos representativa, descrita en la sección 3.2.1, para identificar y cuantificar los gases anestésicos presentes en una determinada muestra. El núcleo del sistema es un conjunto de redes neuronales, en el que se cuenta con una red particular para cada característica: identificación del rango de concentración de cada gas portador, identificación del agente anestésico y concentración del agente. Se propone la aplicación de la arquitectura de redes de retropropagación, la cual ha sido utilizada en experimentos previos y ha demostrado ser útil para este propósito.

Además, se presenta un pre-procesamiento de las señales alternativo a la determinación de la inversa, el cual es novedoso para esta aplicación, y está basado en técnicas de reducción dimensional. Para este efecto, se realiza una comparación de varios métodos lineales y no lineales descritos en la sección 2.8 a fin de encontrar el que mejor funciona para esta investigación.

Basados en que las diferentes especies iónicas pueden aproximarse en un espectro de movilidad por medio de una Gaussiana (como se comenta en la sección 2.6), y asumiendo, de acuerdo a lo que ha podido observarse en investigaciones previas, que bajo condiciones de saturación - al emplear muestras en concentraciones superiores al rango de partes por millón (como estamos haciendo con el condensador de aspiración) - el número de especies iónicas tiende a reducirse y agruparse en torno a una sola principal debido a procesos de formación de macro-moléculas de baja movilidad, se espera que el Análisis de Componentes Principales (PCA) arroje buenos resultados, ya que este método de reducción dimensional (sección 2.8.1.1) funciona mejor en cuanto la distribución de los datos tiende a parecerse a una distribución normal porque utiliza los dos primeros momentos estadísticos de los datos (media y varianza) como base para su operación. Es decir, si la información relevante de los datos se encuentra en esas características, PCA proporcionará una transformación de los datos óptima para nuestros propósitos. Más aún, la ecuación de Tammeth, la cual gobierna la forma de los espectros de corriente obtenidos mediante el condensador de aspiración, es una transformada suavizante de los espectros de movilidad iónica semi-Gaussianos, y las curvas resultantes (como las de la figura 2.26), separadas para cada polaridad, tienden a tener una forma semi-Gaussiana también, siendo importantes de manera determinante en cada una de estas funciones la posición del pico y el área bajo cada curva, las cuales reflejan respectivamente la concentración y la composición del gas analizado. Por ello esperamos, y eso es algo que debe probarse finalmente al comparar PCA con otros métodos de reducción dimensional, que la distribución total de los datos sea de naturaleza Gaussiana o al menos semi-Gaussiana. Adicionalmente, sabemos que toda la información se genera por procesos similares en el condensador de aspiración: utilizamos una sola fuente de radiación y un mismo gas diluyente para todas las mezclas, y las condiciones de formación de macro-moléculas y clusters iónicos son siempre las mismas. Incluso la forma de aplicar el campo eléctrico es la misma en todos los casos. Esperamos entonces que exista gran correlación entre cada uno de los puntos medidos

para cada espectro. PCA es un método adecuado para descorrelacionar los datos y obtener solo información relevante para su discriminación.

Examinamos también el Análisis de Discriminantes Lineales o LDA (sección 2.8.1.4) como una alternativa a PCA, ya que LDA permite incorporar información de clasificación a la reducción dimensional. Si la distribución de los datos es Gaussiana, la aplicación de LDA permitirá saber si la información discriminativa (que es lo que nos interesa en el desarrollo de un sistema de identificación y cuantificación de mezclas gaseosas) se encuentra más bien en las medias o en las varianzas de los datos, ya que PCA funciona mejor si la información más importante se encuentra en las varianzas y LDA funciona mejor si ésta se encuentra en las medias.

En el caso de que nuestras suposiciones sean erróneas y la distribución de los datos fuera alejada de la normal, debemos probar otras opciones. Un método lineal que utiliza todos los momentos estadísticos de los datos y no solo los dos primeros es el Análisis de Componentes Independientes o ICA (sección 2.8.1.2). Sin embargo, este método puede no resultar adecuado si los datos resultan ser generados por una sola fuente o proceso (como suponemos), y se usa más bien cuando se requiere separar un número de fuentes con distribuciones estadísticamente independientes. Sin embargo, no debemos descartar este método sin probarlo, porque no sabemos con seguridad si existen procesos independientes en el condensador de aspiración.

Finalmente exploramos el desempeño de un par de algoritmos no lineales de reducción dimensional, ISOMAP y el Empotramiento Localmente Lineal (LLE), los cuales intentan reducir la dimensión de los datos preservando de alguna forma sus estructuras geométricas espaciales (secciones 2.8.1.7 y 2.8.1.8).

Otra estrategia de pre-procesamiento que se estudia para mejorar la identificación de los agentes y la cuantificación de los rangos de concentración de los gases portadores de la mezcla gaseosa, aunque no se utiliza para la cuantificación del agente anestésico, es mediante el agrupamiento (clustering) previo de las curvas pertenecientes a una clase dada en sub-clases arbitrarias, en base a alguna medida de similitud, en este caso el agrupamiento fuzzy c-means (sección 2.7.2.2), cuyo conocimiento se integra posteriormente a las red neuronales como una capa adicional de salida, la cual tendrá un número de neuronas correspondiente al número de clases originales, mientras la capa anterior a la salida tiene un número de neuronas lineales igual al producto de la cantidad de clases y sub-clases (figura 3.25). La clasificación en sub-grupos puede no tener un sentido físico en cuanto al significado de cada grupo, pero es una herramienta que facilita el posterior aprendizaje al dividir la información que procesará la red neuronal. La capa de salida está solo parcialmente conectada a la anterior, de manera que solo las sub-clases de una clase tienen correspondencia con la neurona de salida que representa a dicha clase, y el resultado de cada neurona es la suma de las salidas de las neuronas correspondientes a las sub-clases asociadas. Así se asignan los resultados de la clasificación neuronal de las sub-clases a las clases originales. Para entrenar una red de este tipo se suprime la capa de clases, se le presentan únicamente las entradas y las sub-clases a las que corresponde cada curva, y una vez entrenada, se integra a la red la capa de salida. Así, lo que se propone es la creación de construcciones artificiales intermedias que permitan mejorar la identificación.

El entrenamiento de las redes se realiza empleando un conjunto de datos previamente procesado mediante alguna técnica de reducción dimensional. La fase de aprendizaje se lleva a cabo mediante la presentación ante cada red de únicamente dos de las tres repeticiones existentes de cada mezcla gaseosa en la base de datos, escogidas al azar, mientras que se evalúa el desempeño haciendo una prueba con la tercera parte restante. La salida de cualquier red puede utilizarse como entrada de una red posterior, para mejorar el desempeño. Un diagrama del funcionamiento del sistema de identificación y cuantificación se muestra en la figura 3.26 (ver apéndice A.2 para mayor información). Es necesario recalcar, antes de continuar, que para propósitos de investigación, el sistema de identificación y cuantificación, así como cualquier otro procesamiento de los datos, se realiza fuera de línea. En el futuro, una vez establecida la mejor estrategia, el procesamiento, y las mejoras que a posteriori resulten de este y otros trabajos, todo se integrará en un solo producto.

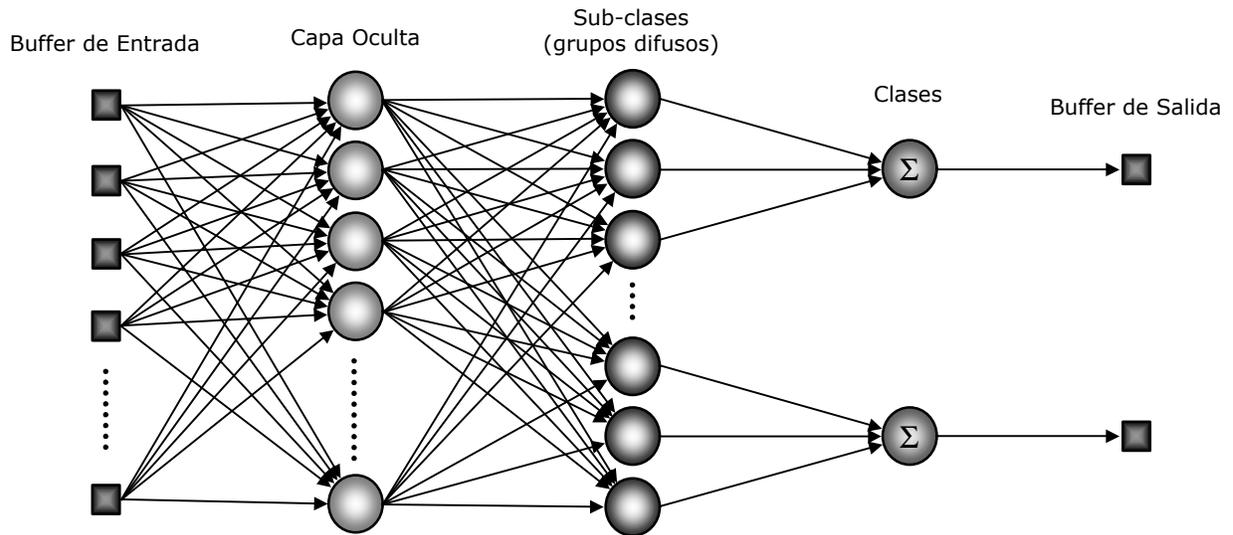


Figura 3.25. Estructura de la red neuronal clasificadora propuesta.

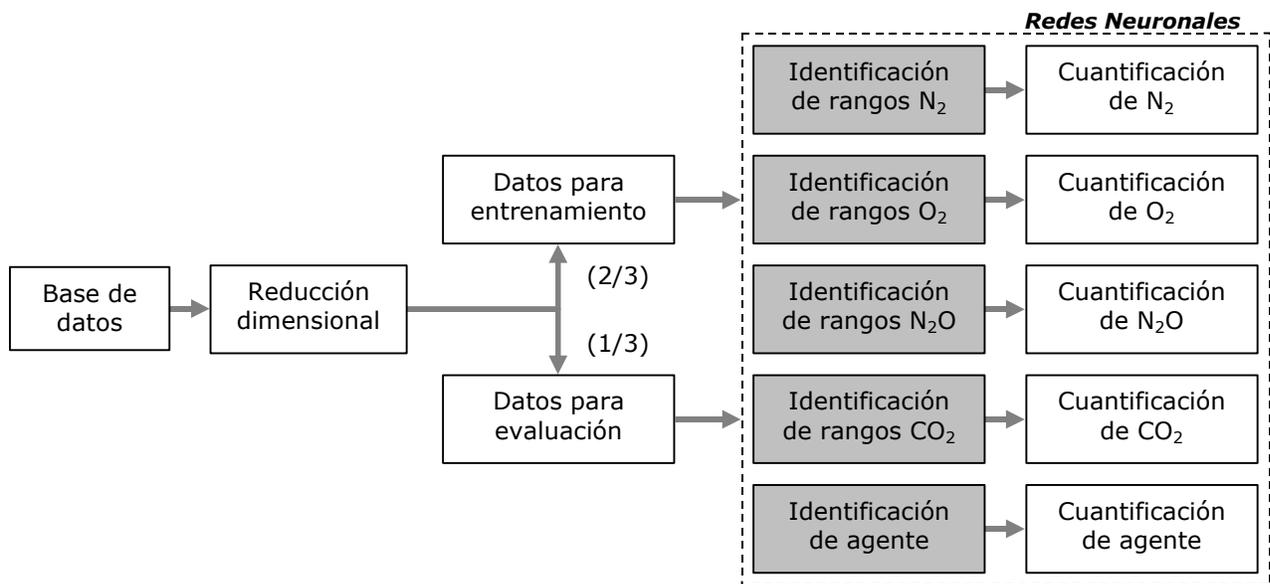


Figura 3.26. Diagrama del sistema de identificación y cuantificación.

IV RESULTADOS

4.1 Sistema experimental

4.1.1 Sistema proveedor de mezclas gaseosas

4.1.1.1 Respuesta del control de presión

Como se mencionó en la sección 3.1.1.1, se implementó un control difuso de presión para la máquina mezcladora de gases anestésicos en forma de una red neuronal. La arquitectura de la red – por restricciones de memoria – no pudo construirse con más de dos neuronas en la capa de entrada, 33 neuronas en la capa oculta y una neurona de salida. La primera red que se probó fue del tipo de retropropagación y la segunda fue del tipo de base radial. Ambas redes tuvieron un desempeño relativamente pobre en cuanto a la aproximación de la superficie de control original, mostrada en la figura 3.5. El programa que se utilizó para el entrenamiento de las redes, NeuralWorks Professional II/PLUS, reportó un error RMS normalizado (de 0 a 1) de 0.0506 para la red de retropropagación y de 0.0466 para la red de base radial. Se escogió la red entrenada mediante base radial para aproximar la superficie de control de la presión, la cual se muestra en la figura 4.1.

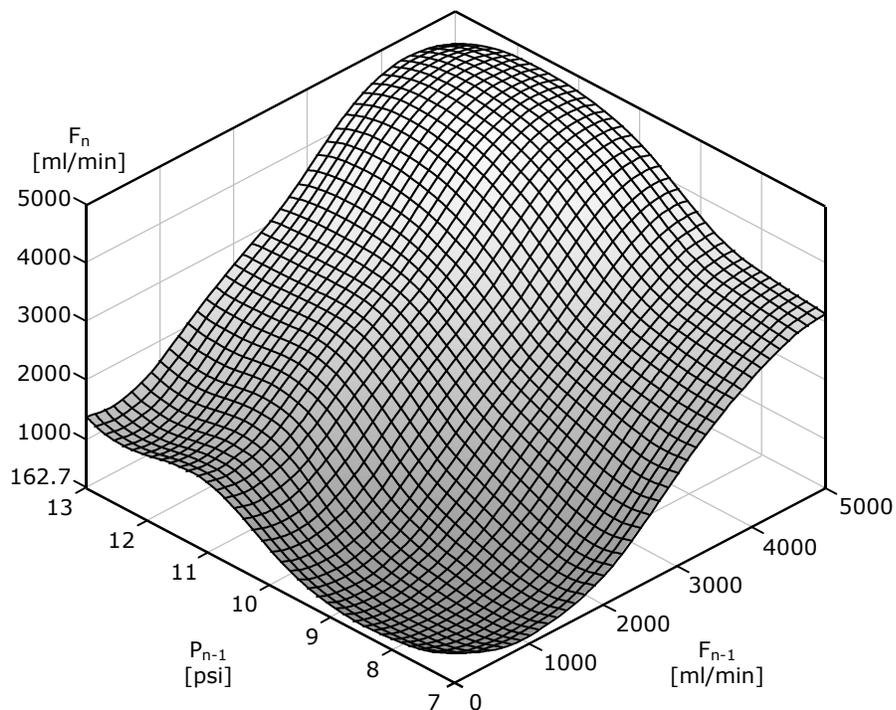


Figura 4.1. Aproximación de la superficie de control difuso de la presión aprendida por una red neuronal de base radial. La superficie ideal se muestra en la figura 3.5.

Esta aproximación resulta pobre en las esquinas, comparándola con el resultado obtenido mediante retropropagación, debido a las funciones de base radial, lo cual puede producir algunas fluctuaciones iniciales. Sin embargo, la aproximación es mejor que la de retropropagación conforme se aleja de las esquinas y se aproxima al centro de la superficie, donde se encuentra el estado final que deseamos mantener, alrededor de 10 psi. Esto hace que este tipo de red sea la más adecuada para nuestra aplicación, dadas las restricciones que se tienen.

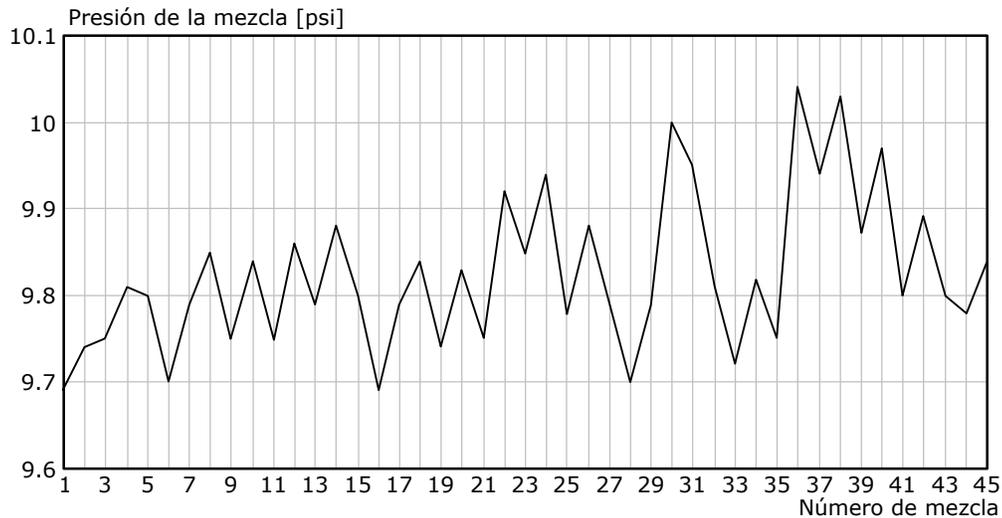


Figura 4.2. Punto de estabilización de la presión para cada mezcla de la tabla 3.7 (numeradas del 1 al 45 en orden de aparición). La presión ideal es de 10 psi para todas las muestras.

En la figura 4.2 se muestra la presión final para cada una de las mezclas de la tabla 3.7 (sin anestésico), las cuales constituyen el alma de la base de datos que se obtuvo posteriormente mediante el sistema de monitoreo y análisis, a través del condensador de aspiración. Por otro lado, en la figura 4.3 se muestra la respuesta en el tiempo del control para los cuatro gases portadores, cada uno a 1 litro por minuto. Las características de esta respuesta se resumen en la tabla 4.1.

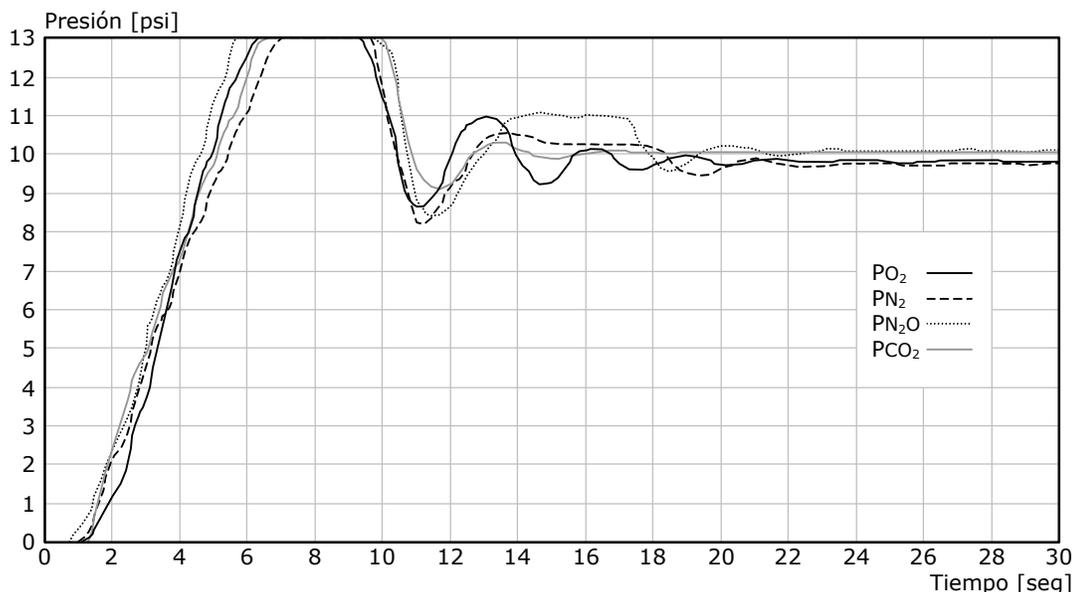
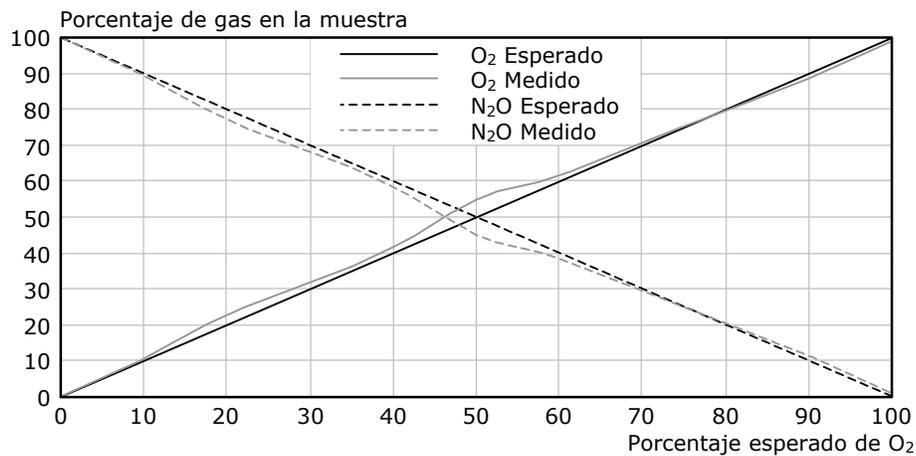


Figura 4.3. Respuesta transitoria del control de presión para los gases portadores a 1 lpm. La presión máxima medida por el sensor es de 13 psi.

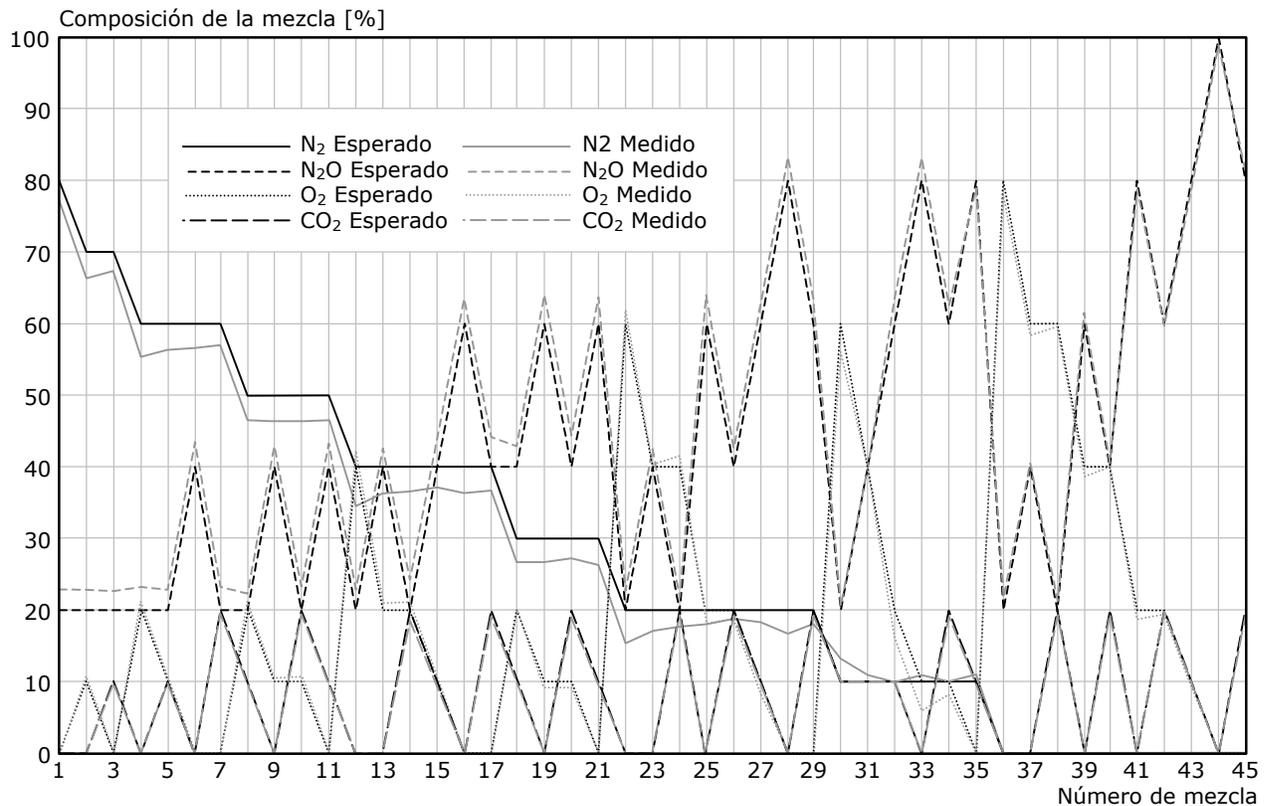
	PO ₂	PN ₂	PN ₂ O	PCO ₂
Tiempo de retardo ($t_{0.5\%}$) [seg]	3.313	3.094	3.000	3.053
Tiempo de crecimiento ($t_{90\%}-t_{10\%}$) [seg]	2.606	3.209	2.716	3.020
Tiempo de estabilización ($t_{+/-2\%}$) [seg]	17.798	19.855	19.170	12.877
Tiempo de pico ($(t_{max2}-t_{max1})/2$) [seg]	7.833	8.500	7.667	8.333
Máximo sobretiro (interpolación) [psi]	~14.2	~15.4	~15.9	~15.1
Presión de estabilización [psi]	9.84	9.76	10.10	10.07

Tabla 4.1. Características de la respuesta transitoria del control de presión.

4.1.1.2 Caracterización de las mezclas

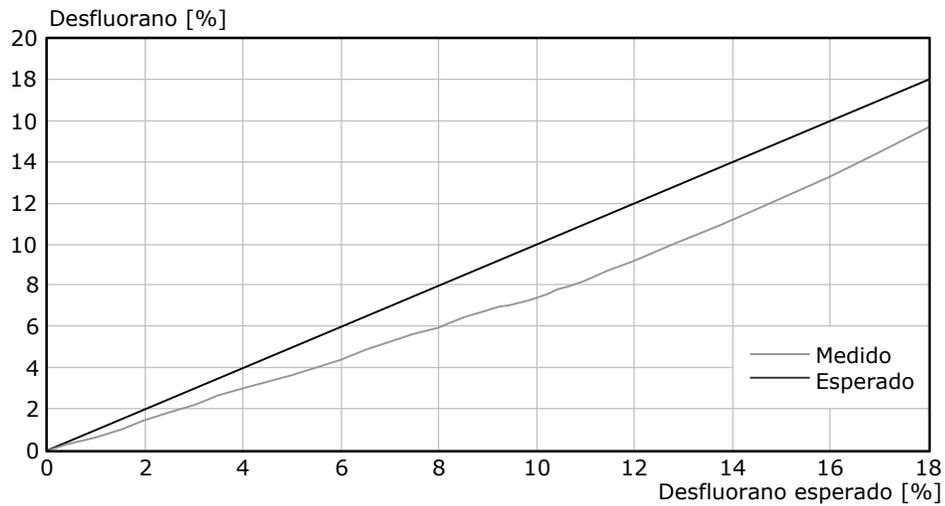


a)

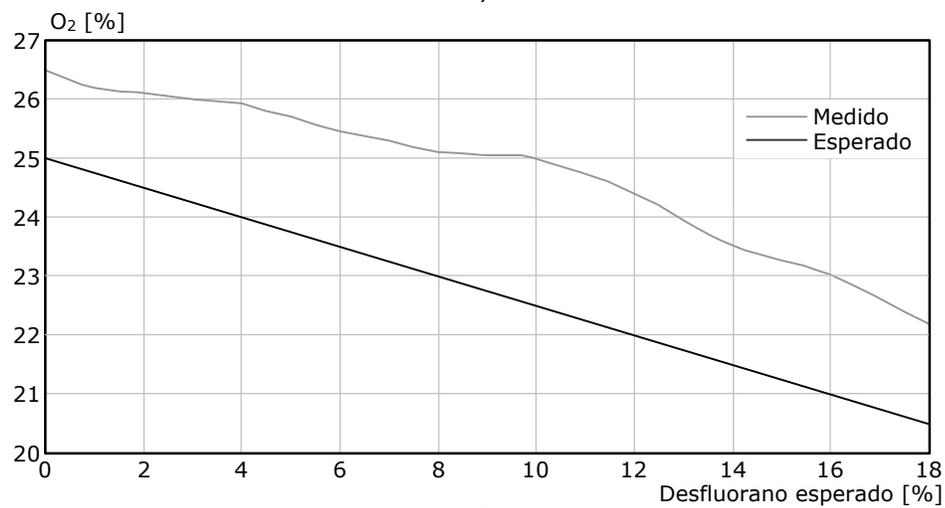


b)

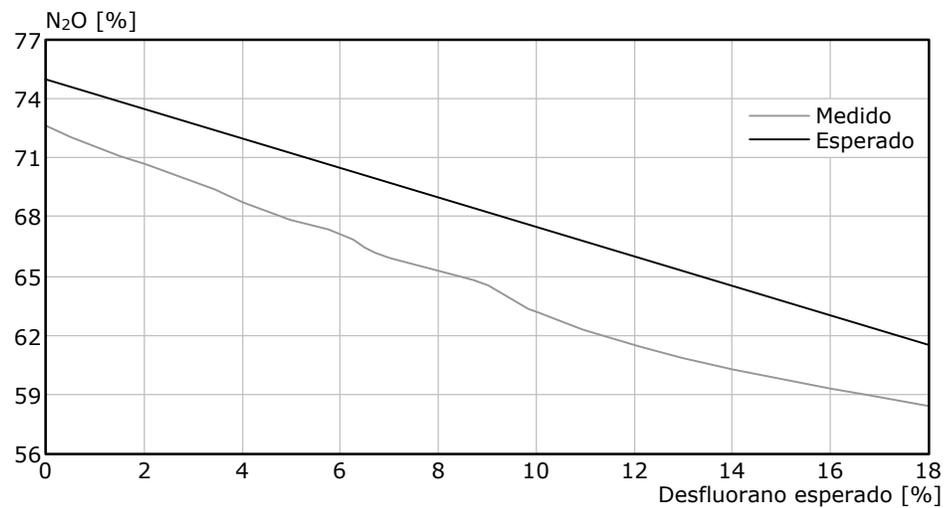
Figura 4.4. Caracterización mediante el monitor de referencia de diversas mezclas gaseosas. a) Mezcla de O₂ y N₂O en diversos porcentajes a 1 lpm. b) 45 mezclas de gases (sin anestésico) a 1 lpm, correspondientes a las combinaciones de la base de datos descritas en la tabla 3.7 y numeradas del 1 al 45 en el orden en que aparecen en la lista. La máquina automática mezcladora de anestesia creó automáticamente las mezclas en forma sucesiva.



a)

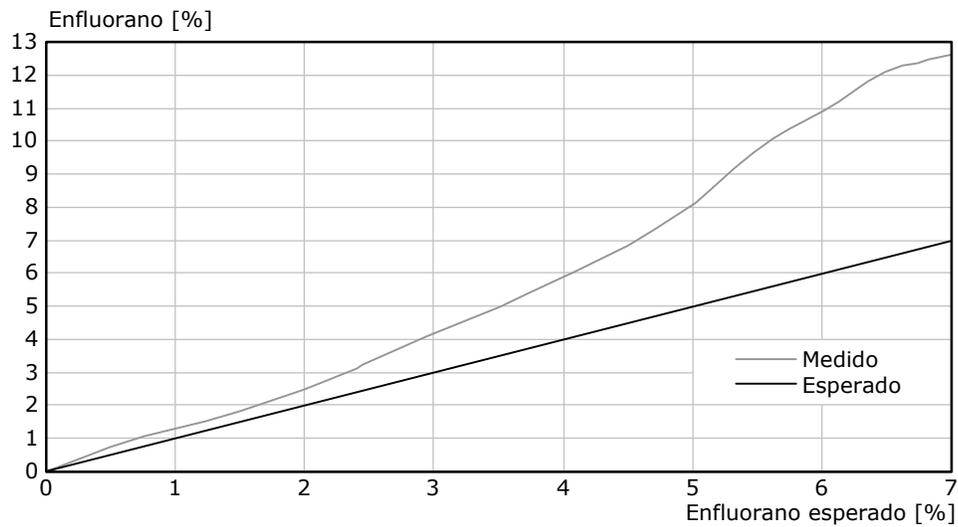


b)

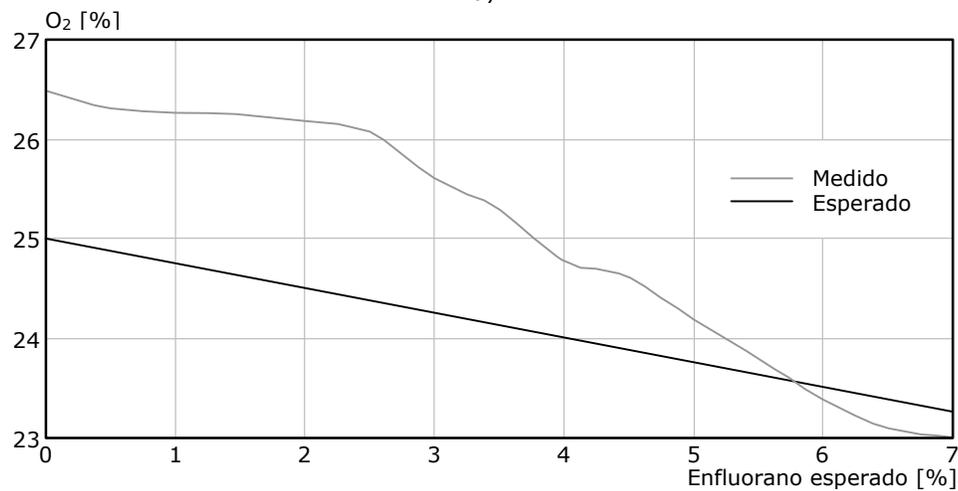


c)

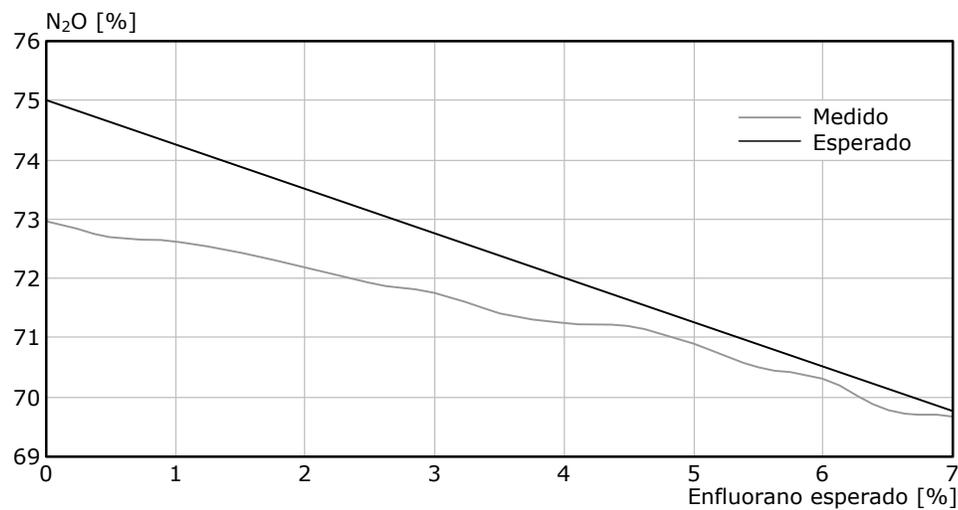
Figura 4.5. Caracterización de una mezcla de 25% O_2 y 75% N_2O con desfluorano. a) Proporción de oxígeno en la muestra para diversos porcentajes de anestésico. b) Respuesta del óxido nítrico.



a)



b)



c)

Figura 4.6. Caracterización de una mezcla de 25% O₂ y 75% N₂O con enflurano. a) Proporción del anestésico medido en la muestra para diversos porcentajes de anestésico esperados. b) Respuesta del oxígeno correspondiente a cada porcentaje de anestésico. c) Respuesta del óxido nitroso.

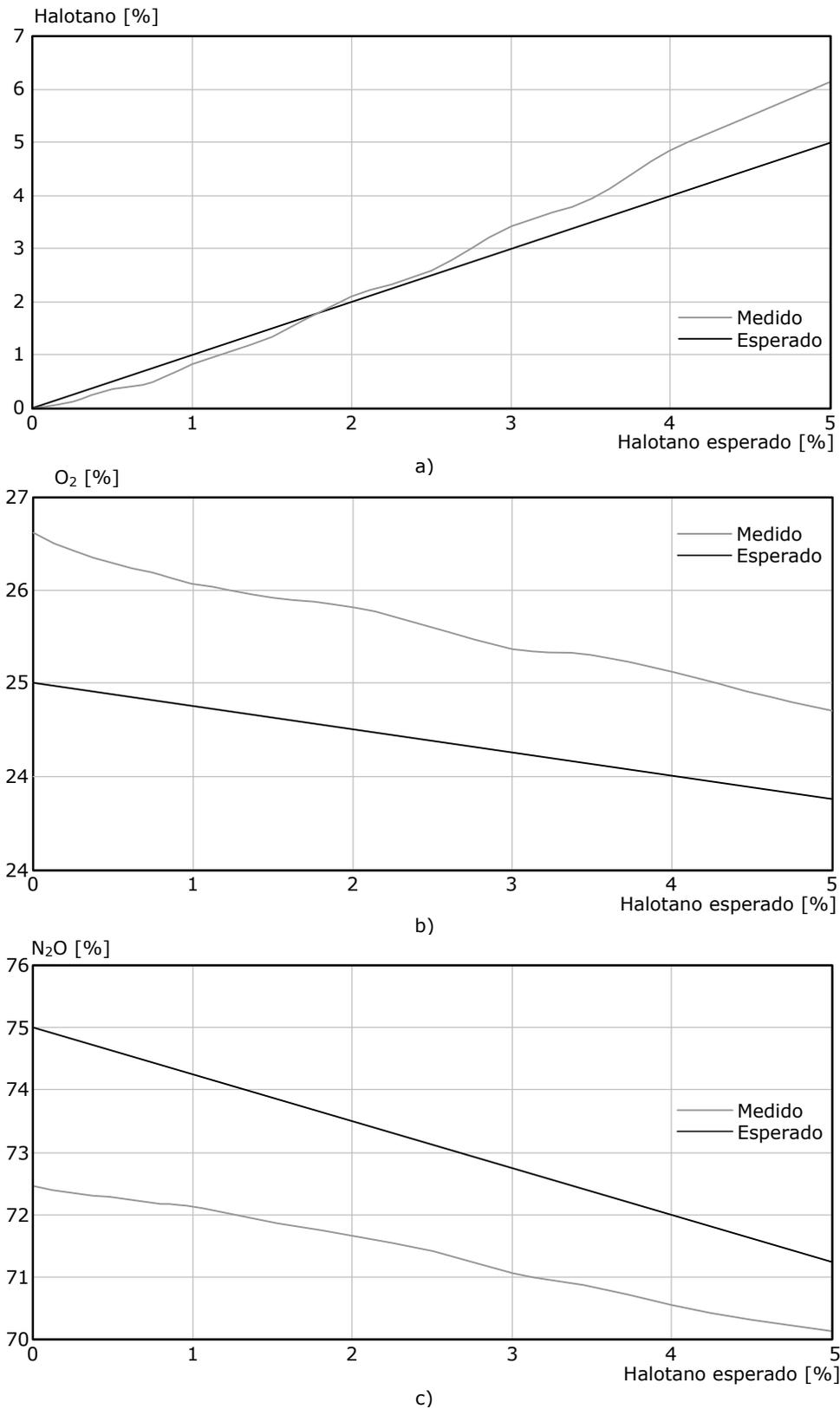


Figura 4.7. Caracterización de una mezcla de 25% O₂ y 75% N₂O con halotano. a) Proporción del anestésico medido en la muestra para diversos porcentajes de anestésico esperados. b) Respuesta del oxígeno correspondiente a cada porcentaje de anestésico. c) Respuesta del óxido nítrico.

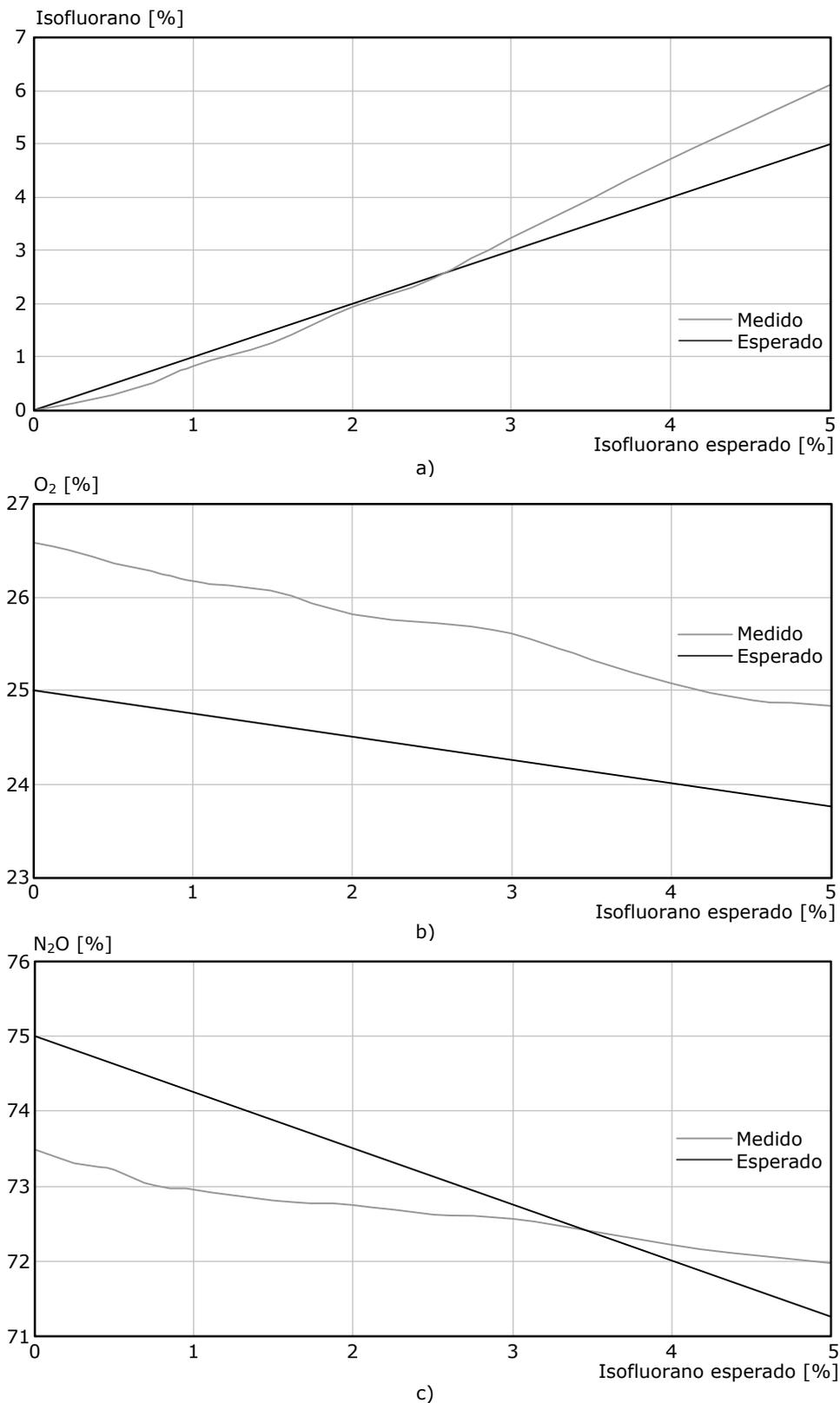


Figura 4.8. Caracterización de una mezcla de 25% O₂ y 75% N₂O con isofluorano. a) Proporción del anestésico medido en la muestra para diversos porcentajes de anestésico esperados. b) Respuesta del oxígeno correspondiente a cada porcentaje de anestésico. c) Respuesta del óxido nitroso.

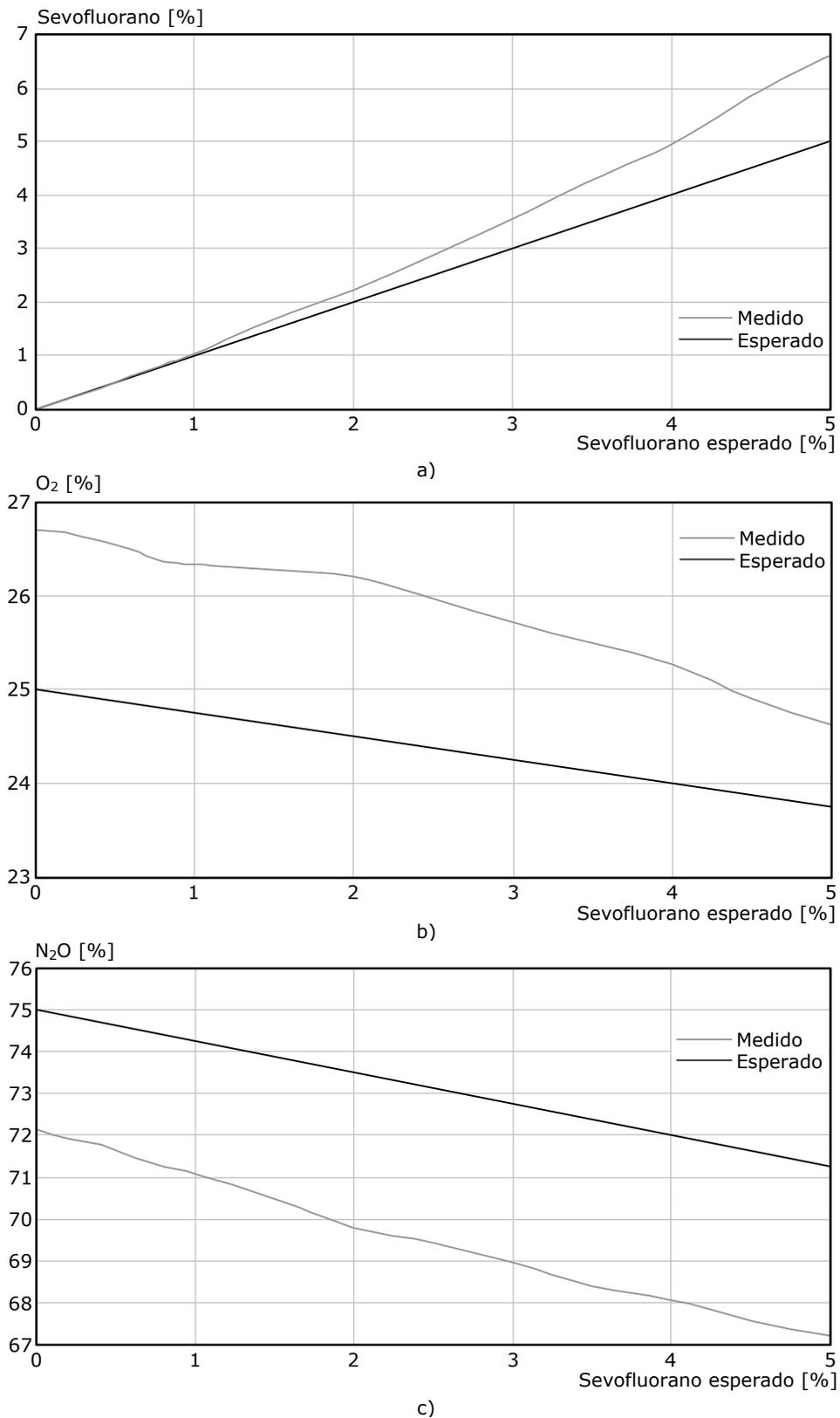


Figura 4.9. Caracterización de una mezcla de 25% O₂ y 75% N₂O con sevoflurano. a) Proporción del anestésico medido en la muestra para diversos porcentajes de anestésico esperados. b) Respuesta del oxígeno correspondiente a cada porcentaje de anestésico. c) Respuesta del óxido nitroso.

4.1.2 Sistema de monitoreo y análisis

4.1.2.1 Respuesta del control de la temperatura del condensador

El sistema de medición de temperatura, el cual tiene como base al circuito integrado LM35 presenta, una respuesta real como la que se muestra en la figura 4.10, que puede compararse con la respuesta ideal descrita en la figura 3.17.

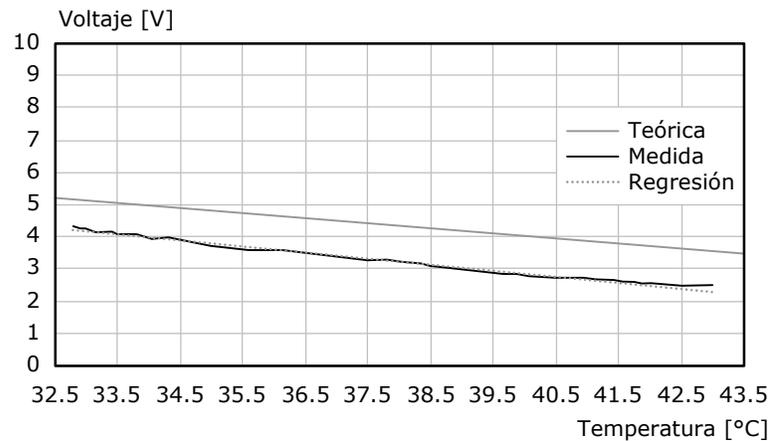


Figura 4.10. Respuesta del sistema de medición de temperatura. La línea punteada indica la curva de ajuste.

Por otro lado, el sistema actuador del control difuso, el cual tiene por elemento calentador un transistor TIP36, presenta una respuesta real (figura 4.11) bastante similar a la teórica (figura 3.21).

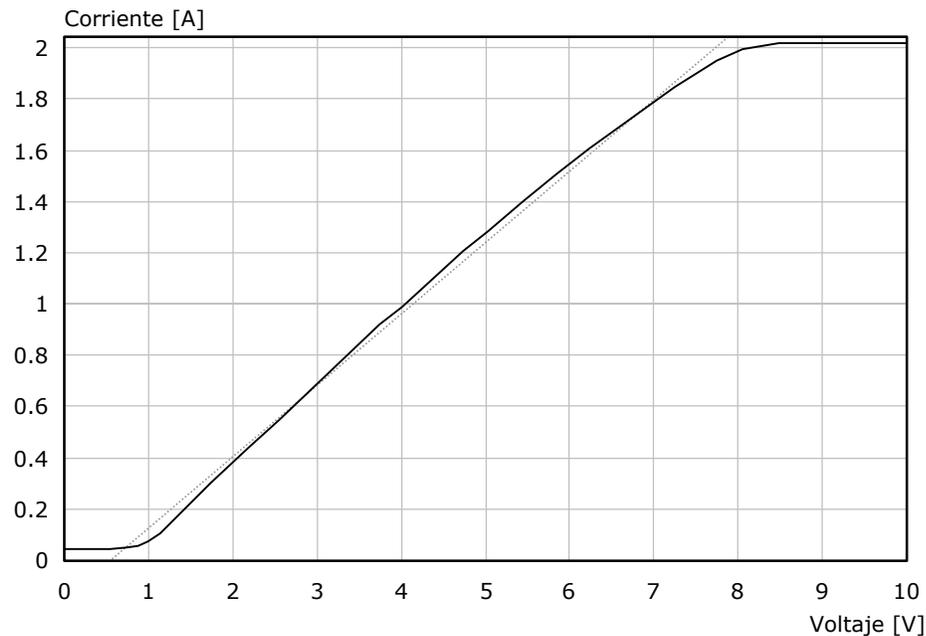


Figura 4.11. Respuesta del sistema actuador del control. La línea punteada indica la curva de ajuste para la parte lineal entre 1 y 8 V.

La respuesta del control de temperatura cuando no existe un flujo de aire pasando por el interior del bloque de cobre que forma el cuerpo del condensador de aspiración se muestra en la figura 4.12. La respuesta con un flujo de 2 lpm se muestra en la figura 4.13.

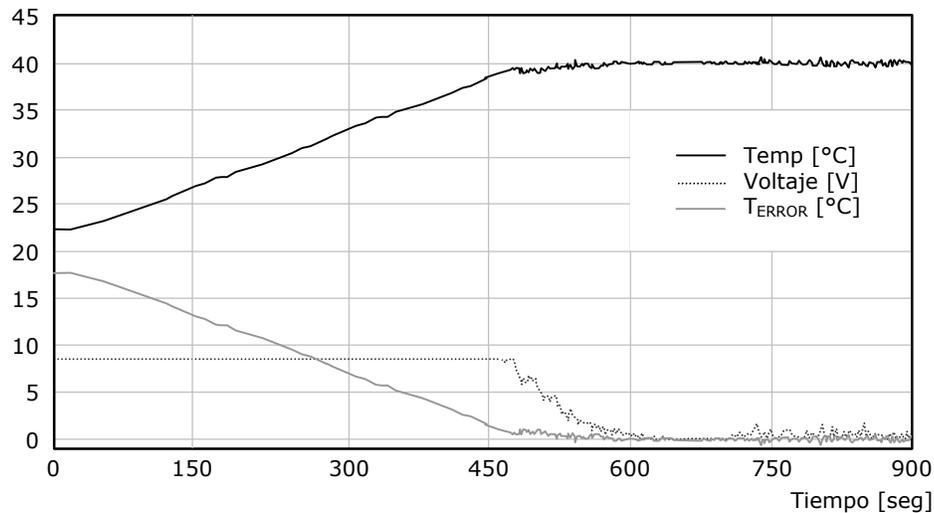


Figura 4.12. Respuesta del control difuso de temperatura en un condensador sin flujo de aire. La temperatura deseada es de 40°C. La pendiente de la parte lineal del calentamiento es de aproximadamente 0.044°C/seg. La temperatura promedio en estado estable es de 39.88°C y la desviación estándar es de 0.26°C. El rizo promedio es de aproximadamente 0.27°C. La respuesta es óptimamente amortiguada. El tiempo de estabilización total, calculado a partir de 30°C es de aproximadamente 373 segundos (6 minutos, 13 segundos).

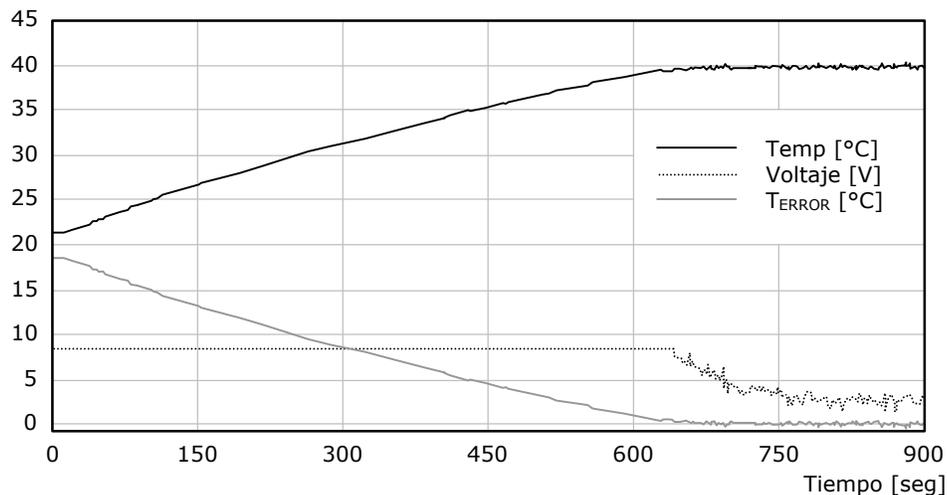


Figura 4.13. Respuesta del control difuso de temperatura en un condensador con un flujo de 2 lpm de aire. La temperatura deseada es de 40°C. La pendiente de la parte lineal del calentamiento es de aproximadamente 0.019°C/seg. La temperatura promedio en estado estable es de 39.73°C y la desviación estándar es de 0.23°C. El rizo promedio es de aproximadamente 0.27°C. La respuesta es óptimamente amortiguada. El tiempo de estabilización total, calculado a partir de 30°C es de aproximadamente 424 segundos (7 minutos, 4 segundos).

Como referencia, se realizó también un experimento utilizando los mismos sistemas de calentamiento y medición de temperatura, pero no realizando la acción difusa de control, sino manteniendo la temperatura deseada mediante un control simple de encendido/apagado. El resultado se muestra en la figura 4.14.

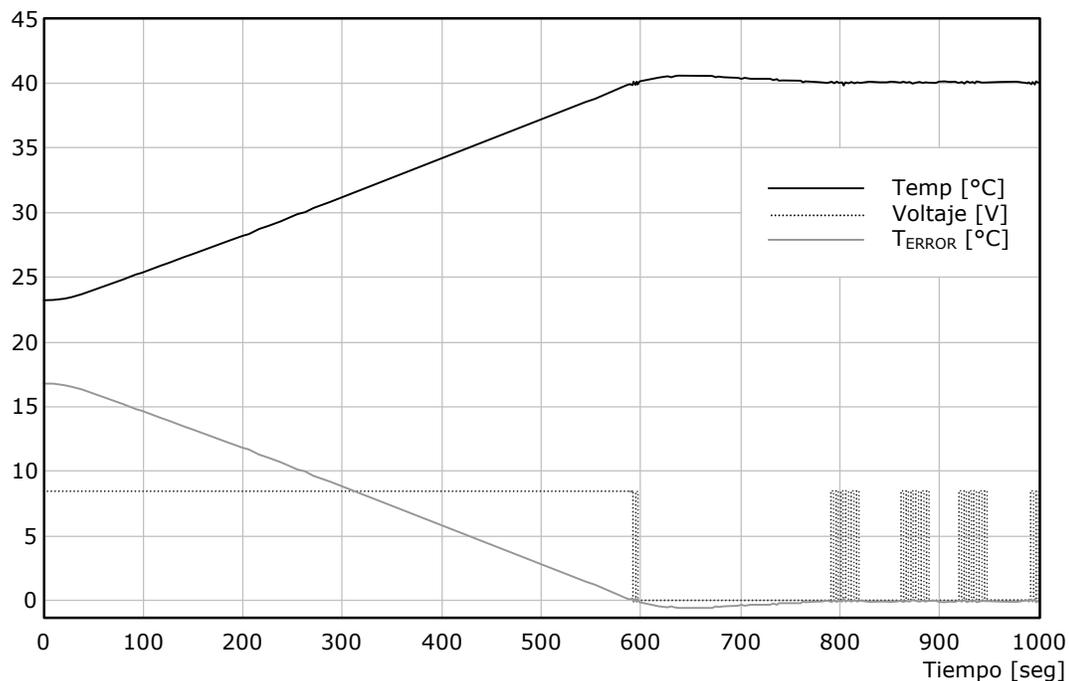


Figura 4.14. Respuesta de un control on/off de temperatura en un condensador con un flujo de 2 lpm de aire. La temperatura deseada es de 40°C. La pendiente de la parte lineal del calentamiento es de aproximadamente 0.030°C/seg. La temperatura promedio en estado estable es de 40.033°C y la desviación estándar es de 0.045°C. La respuesta es subamortiguada. El máximo sobretiro es de 0.547°C. El tiempo de estabilización total, calculado a partir de 30°C es de aproximadamente 530 segundos (8 minutos, 50 segundos).

4.1.2.2 Características de la base de datos

4.1.2.2.1 Distribución de las curvas de corriente iónica

El conjunto de datos promediado – eso es, el conjunto obtenido al promediar las tres repeticiones de cada curva para lograr un total de 1395 curvas – presenta un pico positivo en iones negativos con un valor máximo de 4.4806 v (para un voltaje de deflexión de -1.2698 v), y un pico mínimo de 2.9717 v (para un voltaje de deflexión de -0.9524 v). Para iones positivos se presenta un pico negativo en iones negativos con un valor máximo de -4.0708 v (para un voltaje de deflexión de 1.4286 v), y un pico mínimo de -2.4806 v (para un voltaje de deflexión de 0.9524 v).

Una serie de gráficas en donde se puede obtener de forma visual un mejor sentido de la distribución de las curvas y cómo se relaciona esta distribución espacial con cada una de sus características de composición se incluye en el apéndice A3.

4.1.2.2.2 Distribución de las inversas

Los valores singulares de la matriz G caen rápidamente a cero y la relación entre el valor singular mayor y el menor es muy grande, lo cual implica que la solución de la ecuación inversa de Tammes es muy sensible a las perturbaciones, y el problema está mal condicionado, por lo que la regularización es necesaria. Separando el conjunto de datos promediado en iones negativos

(obtenidos al barrer de -10 a 0 volts) e iones positivos (correspondientes al barrido entre 0 y 10 volts) y aplicando la inversa discreta de Tammet, regularizada mediante una descomposición en valores singulares truncada a los primeros 12 componentes, obtenemos dos conjuntos de curvas inversas con 64 puntos discretos igualmente espaciados en el dominio de la movilidad, en donde hemos escogido rangos desde 0.3 hasta 2.7 cm^2/vxs para iones negativos, y desde 0.3 hasta 2.2 cm^2/vxs para iones positivos, ya que es en esos intervalos donde se presenta la parte importante de la señal. Para iones negativos, el conjunto presenta dos picos principales entre 0.5 y 1.5 cm^2/vxs , con un pico pequeño alrededor de 1.75 cm^2/vxs y picos angostos de pequeña amplitud positiva y negativa a baja movilidad. En general, el pico principal de la derecha tiene una mayor amplitud que el de la izquierda, pero cuando el agente anestésico aumenta, el pico principal derecho tiende a disminuir en amplitud, mientras que el pico izquierdo crece.

Para iones positivos, el conjunto presenta también dos picos principales entre 0.5 y 1.5 cm^2/vxs , pero en este caso es el pico izquierdo el de mayor amplitud y el derecho el más pequeño. Conforme aumenta la concentración de agente anestésico el pico izquierdo disminuye en amplitud mientras el derecho crece. También en este caso existe un pico de relativamente baja amplitud al rededor de 1.75 cm^2/vxs , y picos angostos y de baja amplitud, positiva y negativa, a bajas movilidades.

Una serie de gráficas en donde se puede obtener de forma visual un mejor sentido de la distribución de las curvas inversas y cómo se relaciona esta distribución espacial con cada una de sus características de composición se presenta en el apéndice A4.

4.1.2.2.3 Sensibilidad de las curvas de corriente iónica

A continuación se presentan algunas características de sensibilidad que presentan las curvas de la base de datos. Las más importantes y que pueden analizarse fácilmente incluyen la repetibilidad, la sensibilidad al tipo de agente anestésico, y la sensibilidad al porcentaje del agente anestésico presente en la muestra.

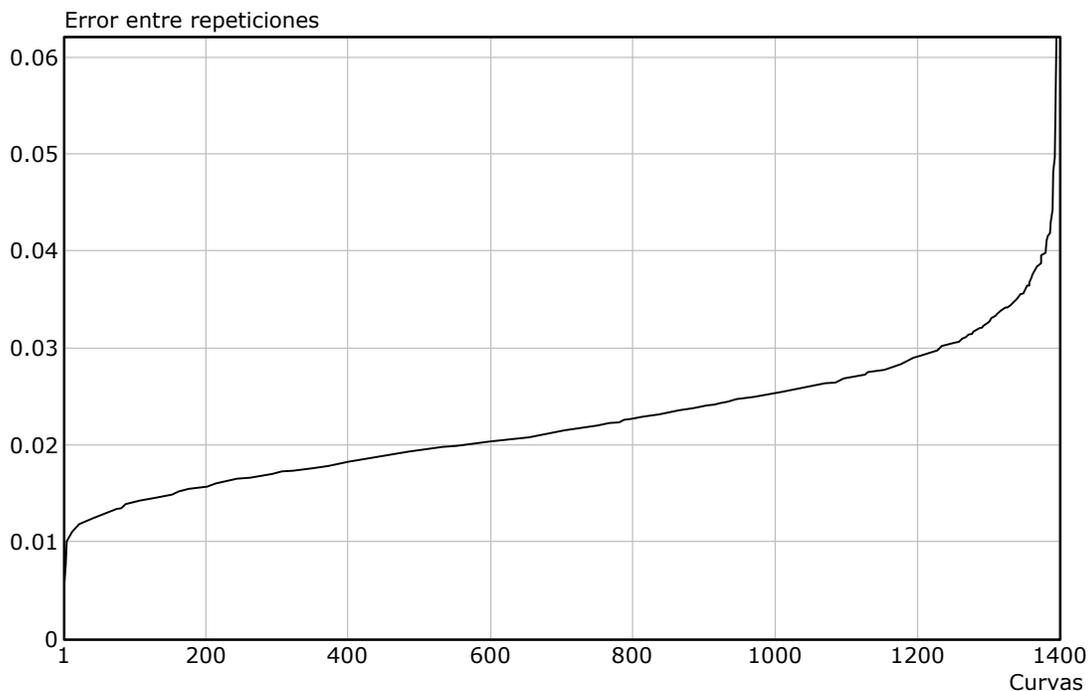


Figura 4.15. Repetibilidad de las 1395 diferentes curvas de la base de datos: error ordenado. El máximo error es de 0.0622 y el mínimo error es de 0.0069.

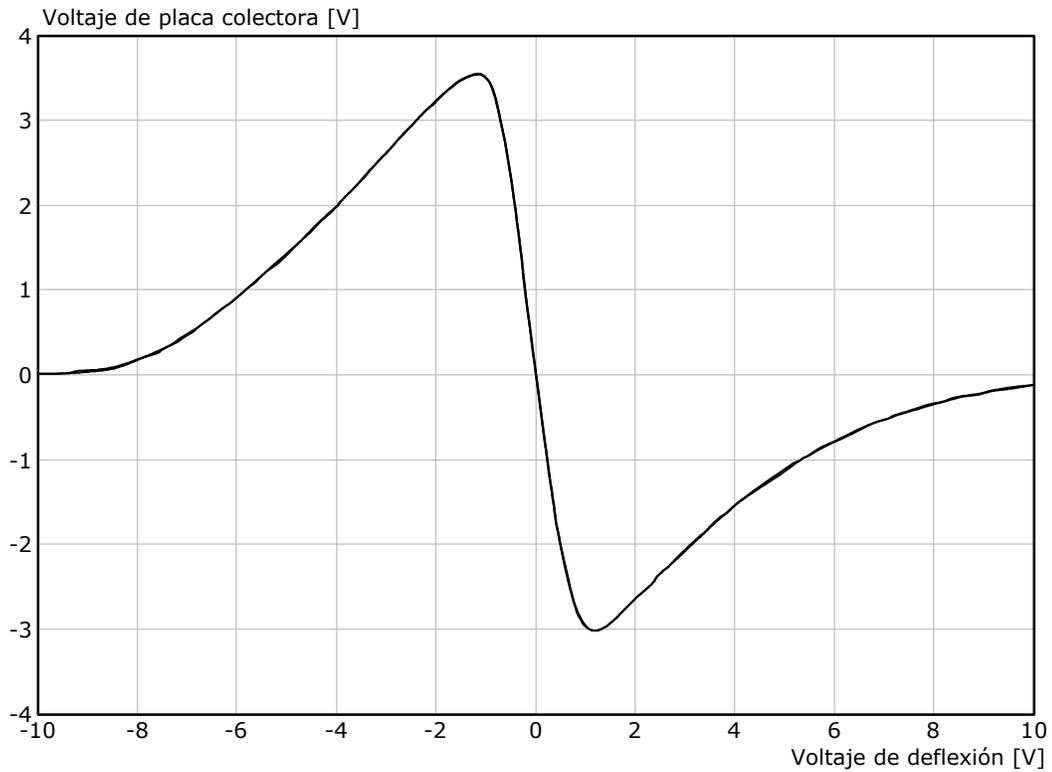


Figura 4.16. Curvas que presentan la mayor repetibilidad.
Las tres repeticiones corresponden a la mezcla con gas portador 40% N_2 , 40% N_2O y 20% O_2 , sin anestésico.

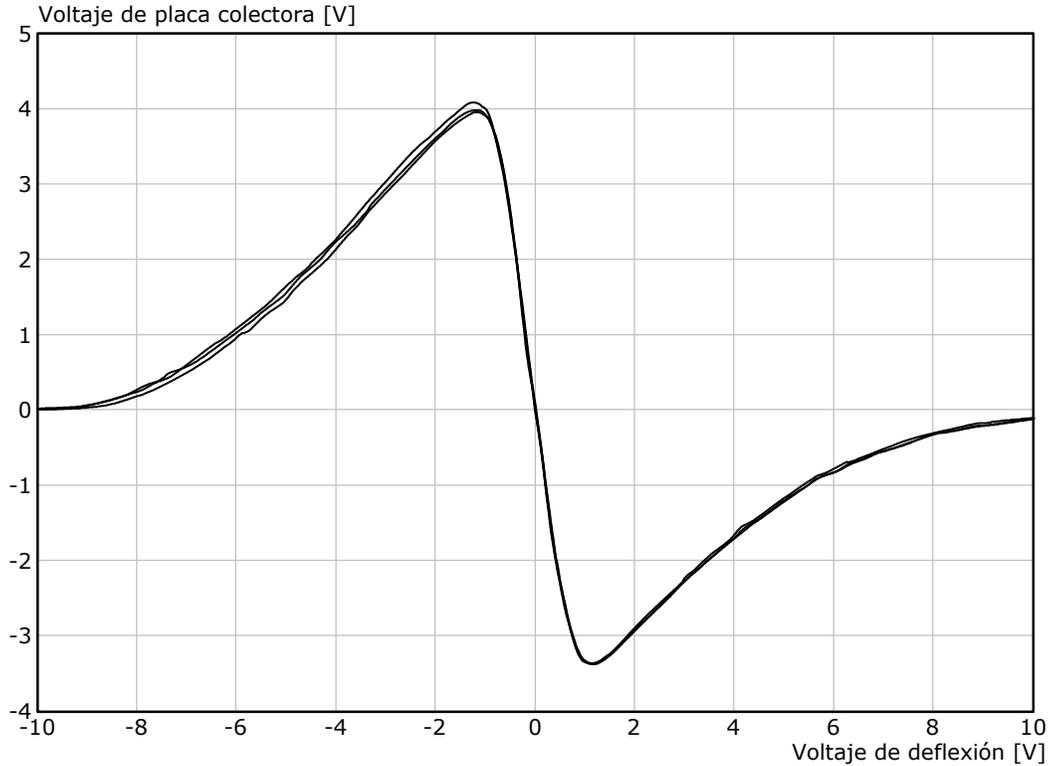


Figura 4.17. Curvas que presentan la menor repetibilidad.
Las tres repeticiones corresponden a la mezcla de un gas portador 40% N_2 , 80% O_2 y 20% CO_2 con halotano al 0.5%.

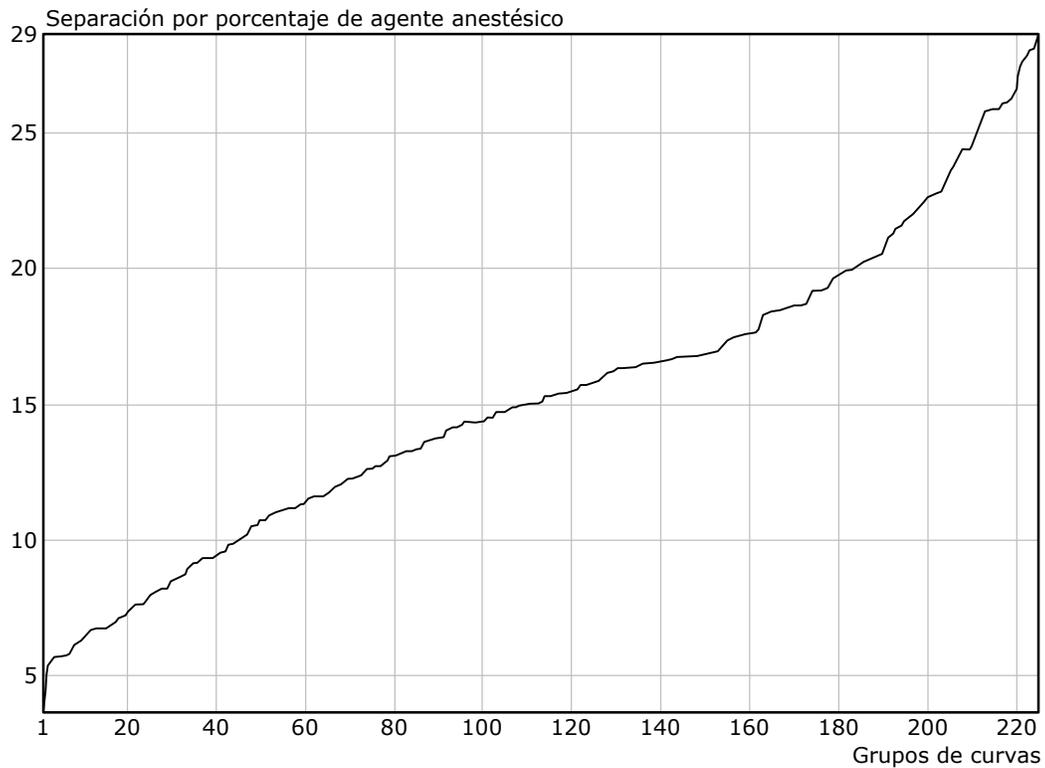


Figura 4.18. Separación por porcentaje de agente anestésico. Se identifican 225 grupos. La separación mínima es de 3.6766, mientras que la máxima es de 28.6897. En realidad hay 270 grupos pero se eliminaron aquellos integrados por una sola curva.

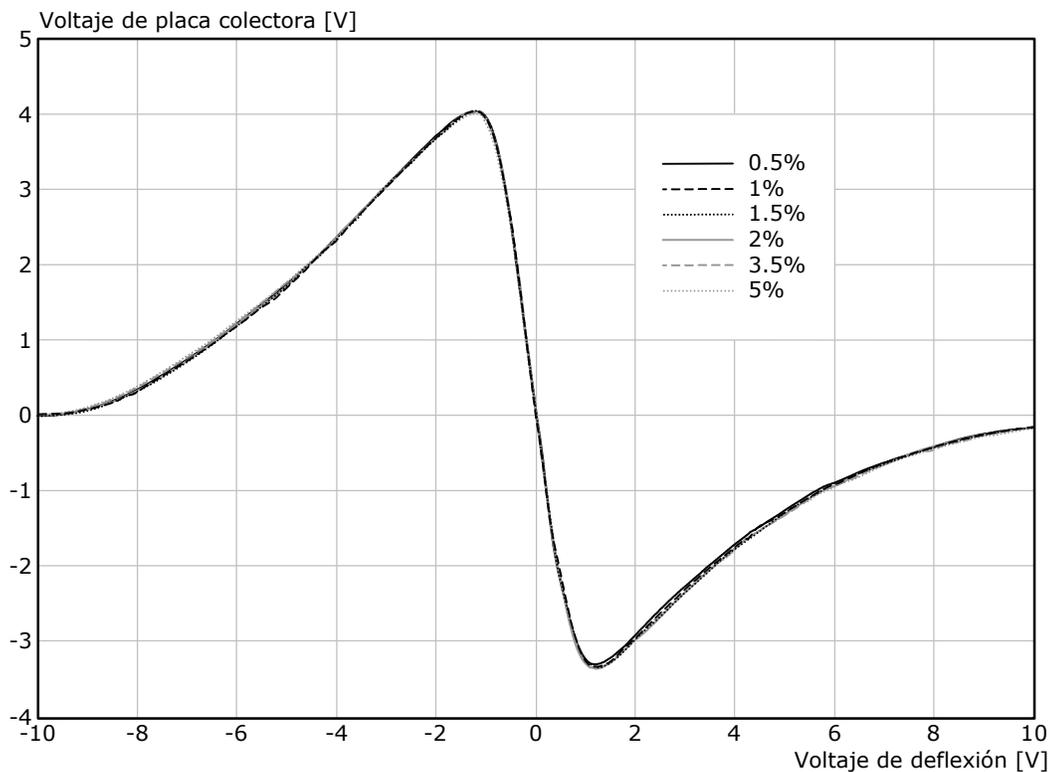


Figura 4.19. Grupo de curvas que presentan la mínima separación por porcentaje de agente anestésico, en este caso isoflurano, correspondientes a un mismo portador con 10% N_2 , 10% N_2O y 80% O_2 .

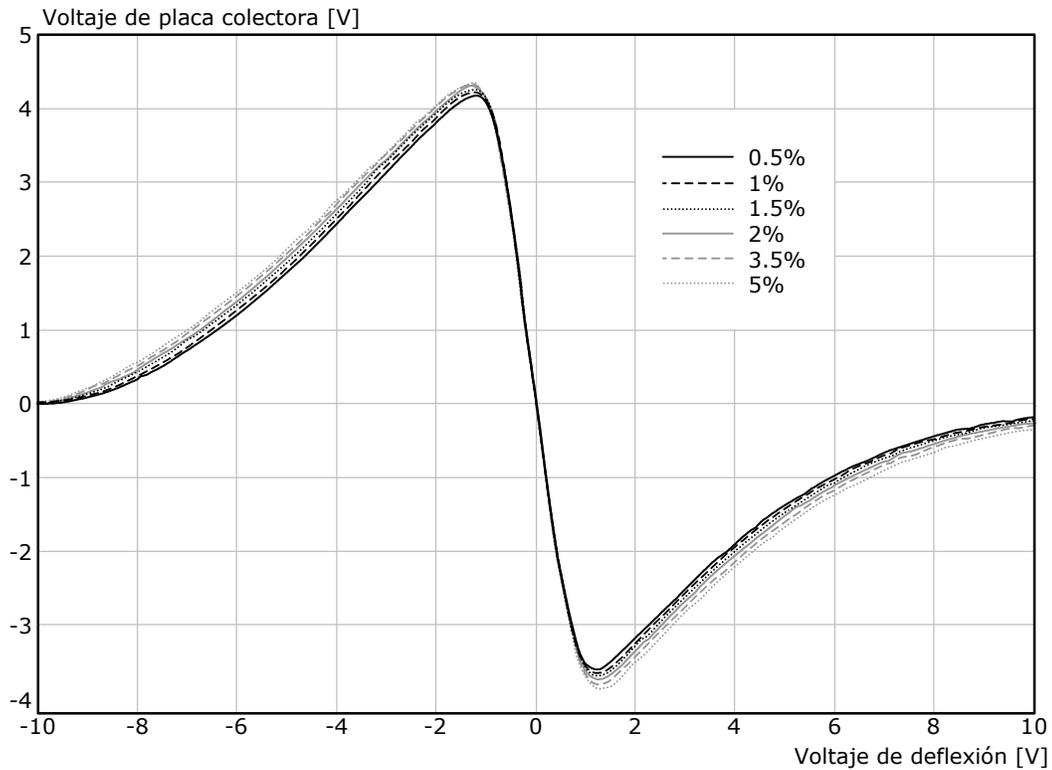


Figura 4.20. Grupo de curvas que presentan la máxima separación por porcentaje de agente anestésico, en este caso sevofluorano, correspondientes a un mismo portador con 80% O₂ y 20% CO₂.

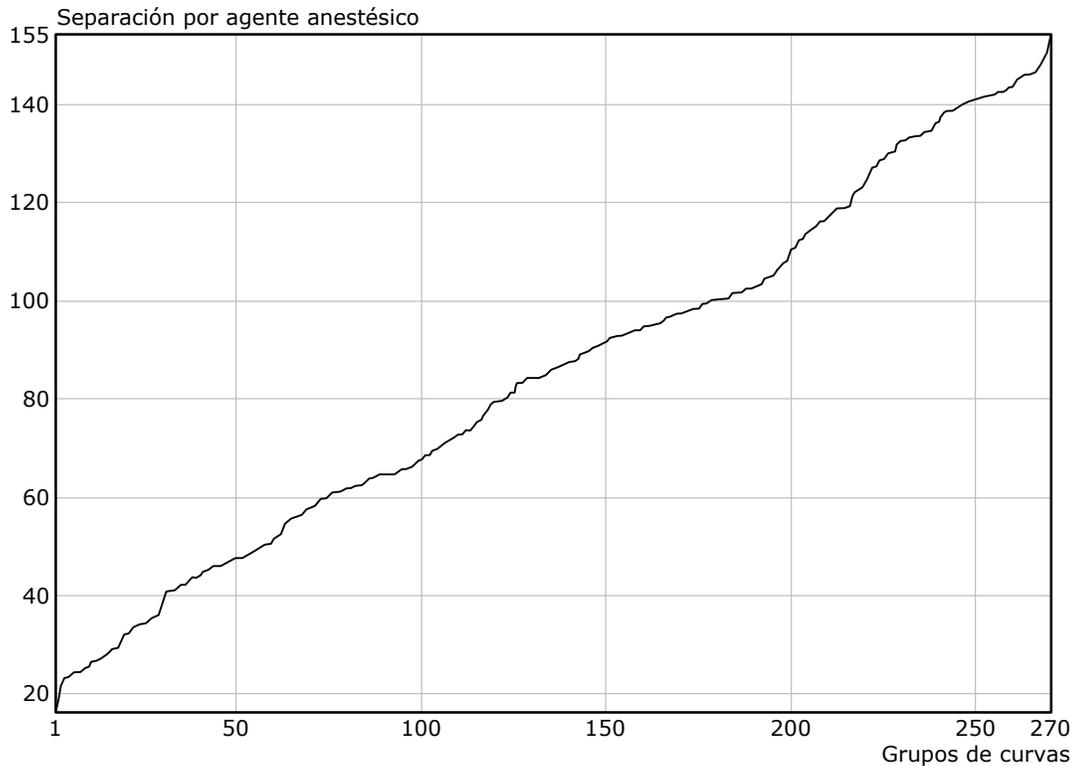


Figura 4.21. Separación por agente anestésico. Se identifican 270 grupos. La mínima separación es de 16.4152, y la máxima es de 154.436. En realidad existen 450 grupos pero se han eliminado aquellos integrados por solo una o dos curvas.

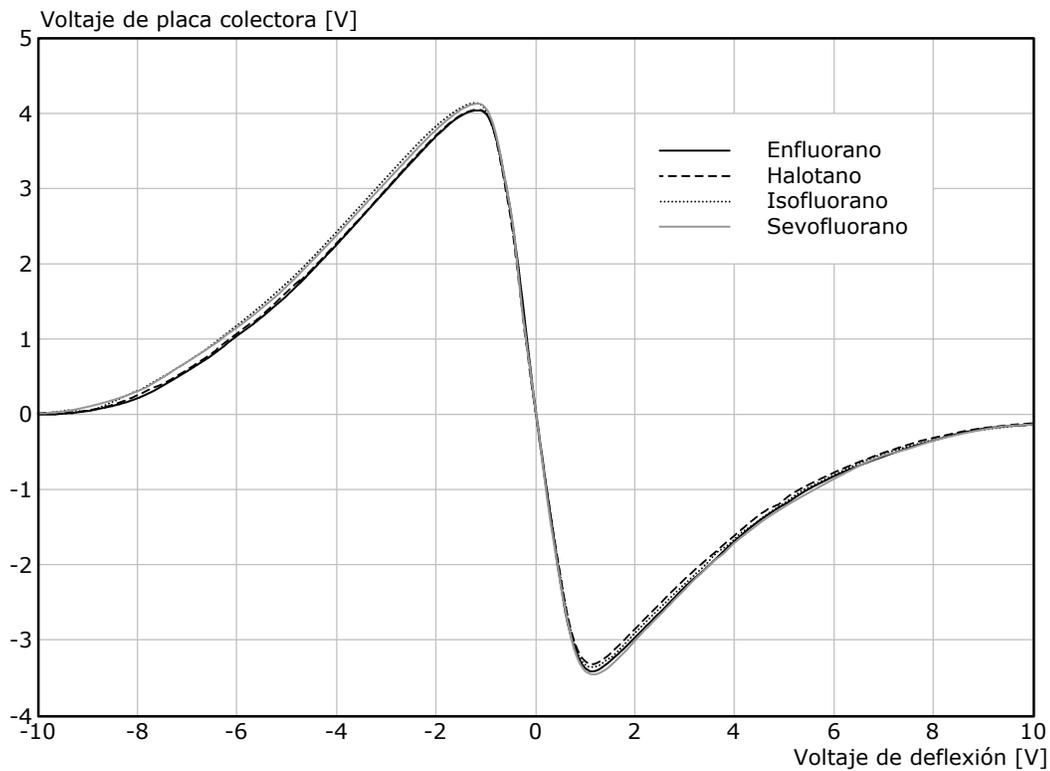


Figura 4.22. Grupo de curvas que presentan la mínima separación por agente anestésico, correspondientes a un mismo portador con 100% O₂ y 0.5% de cada agente.

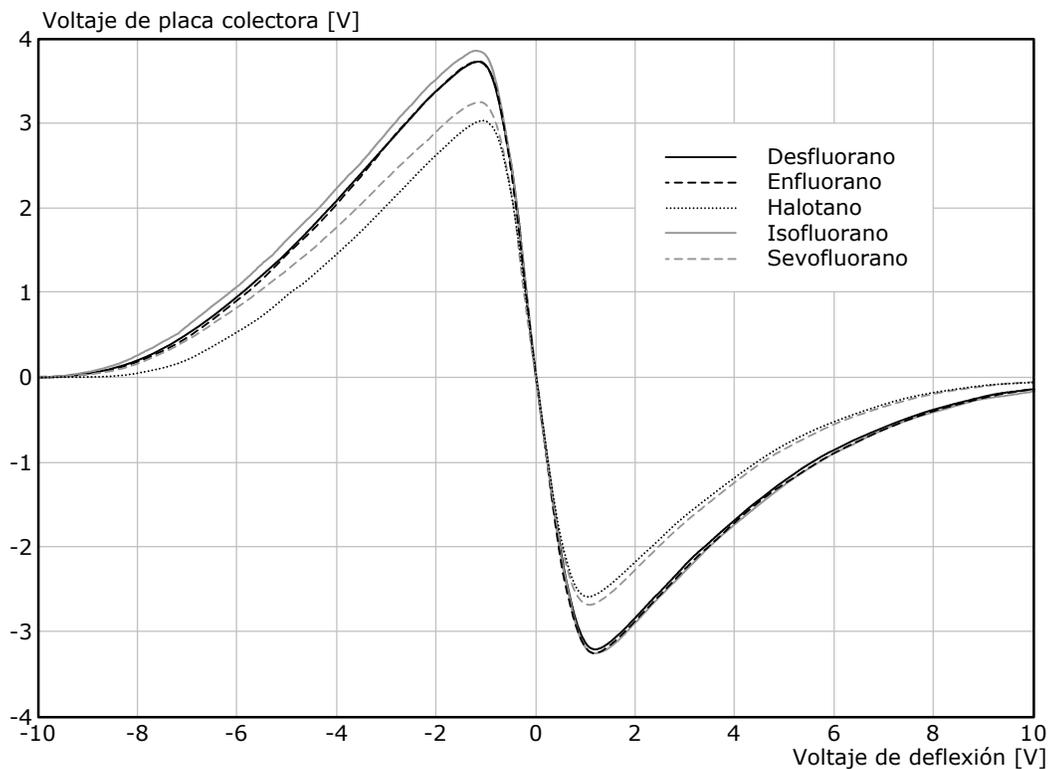


Figura 4.23. Grupo de curvas que presentan la máxima separación por agente anestésico, correspondientes a un mismo portador 50% N₂, 20% N₂O, 20% O₂ y 10% CO₂, con 1.5% de cada agente.

4.1.2.2.4 Sensibilidad de las inversas

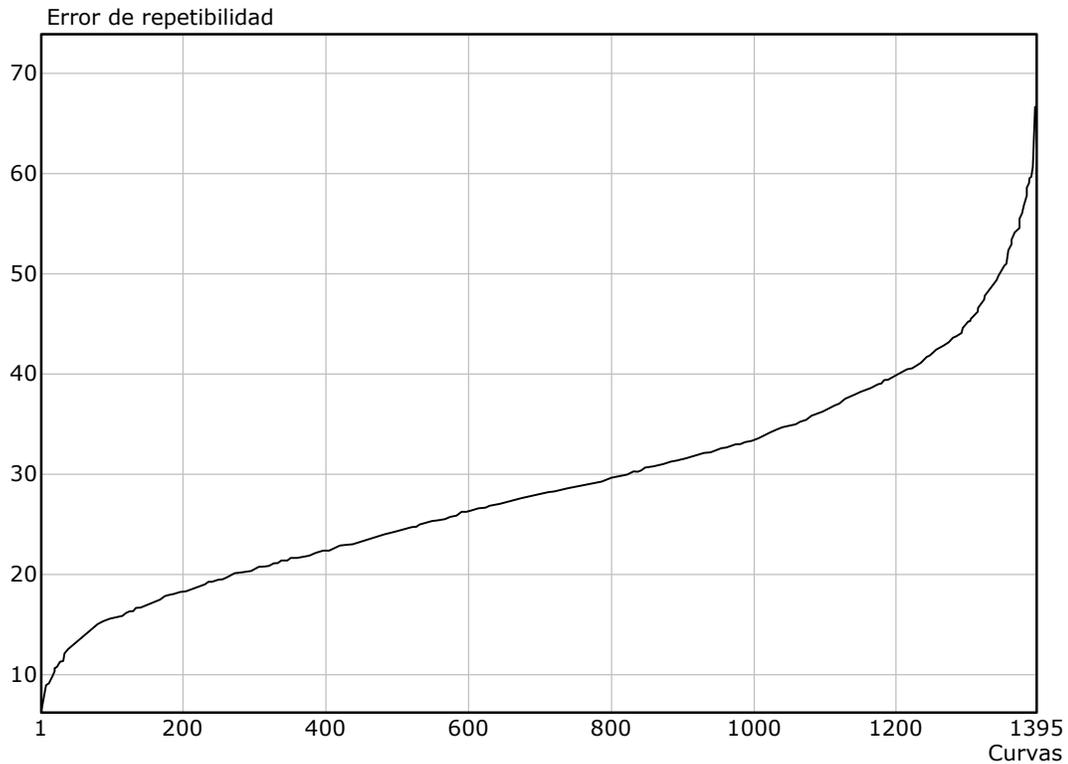


Figura 4.24. Repetibilidad de las inversas para iones negativos: error ordenado. El menor error es de 6.2939 y el mayor de 73.9066.

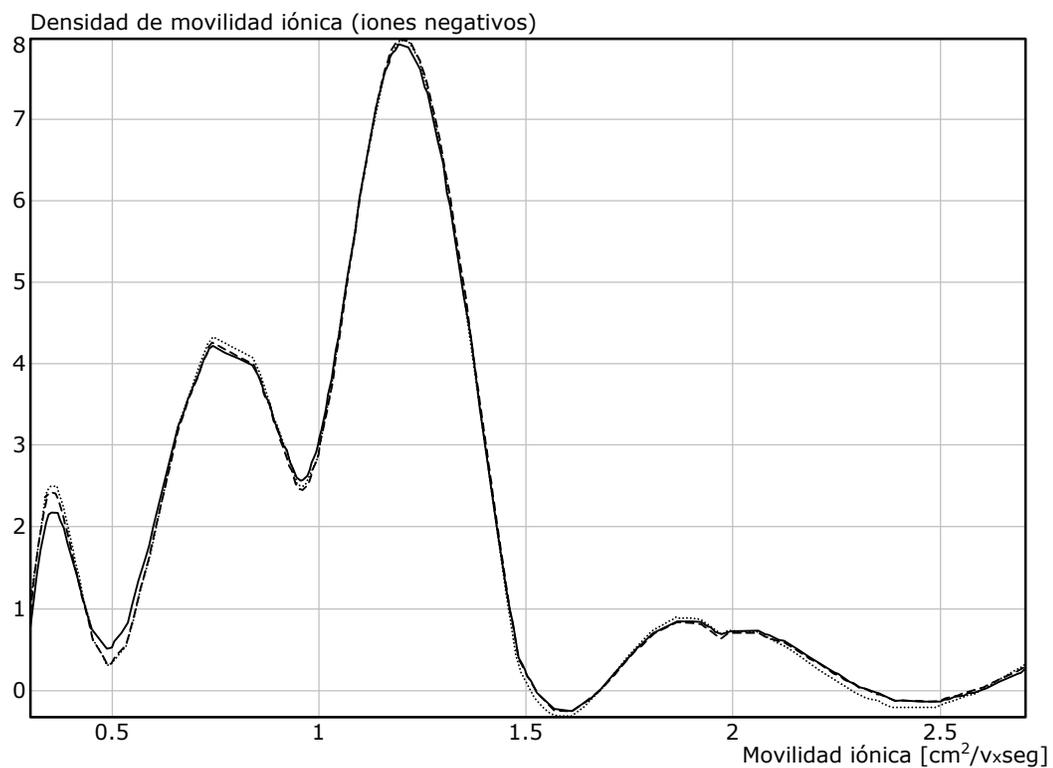


Figura 4.25. Curva de densidad de movilidad iónica más repetible para iones negativos: isofluorano al 0.5% en un portador 60% N₂, 10% N₂O, 20% O₂, 10% CO₂.

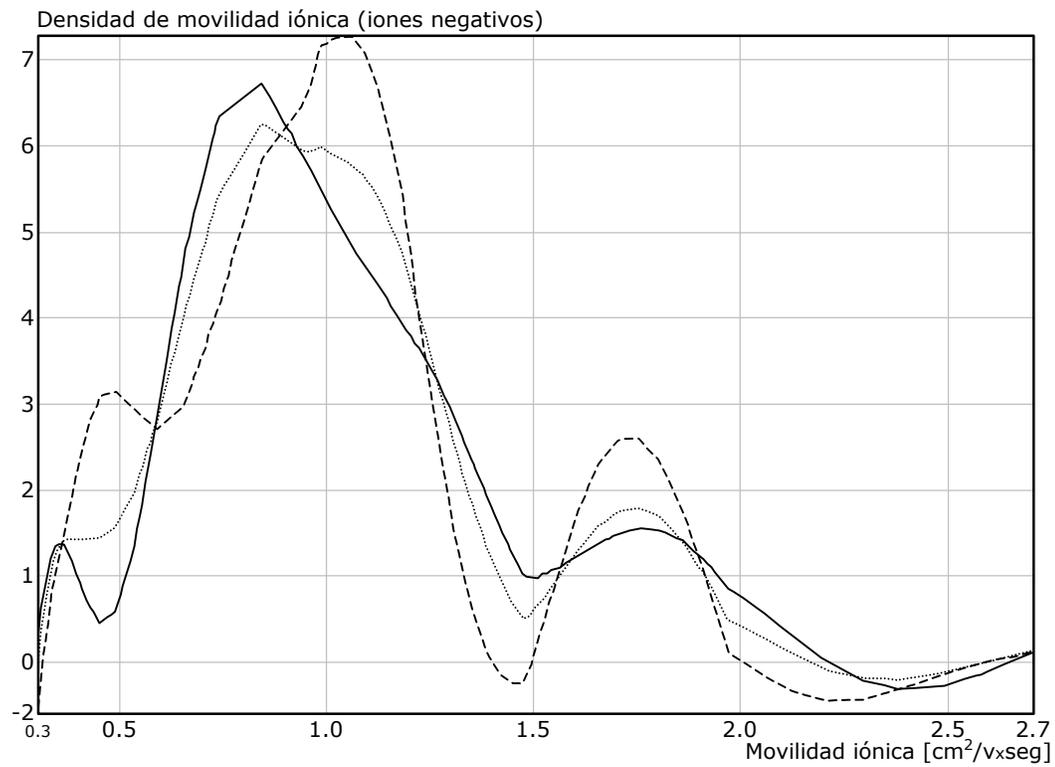


Figura 4.26. Curva de densidad de movilidad iónica menos repetible para iones negativos: desfluorano al 18% en un portador 30% N_2 , 10% N_2O , 40% O_2 , 20% CO_2 .

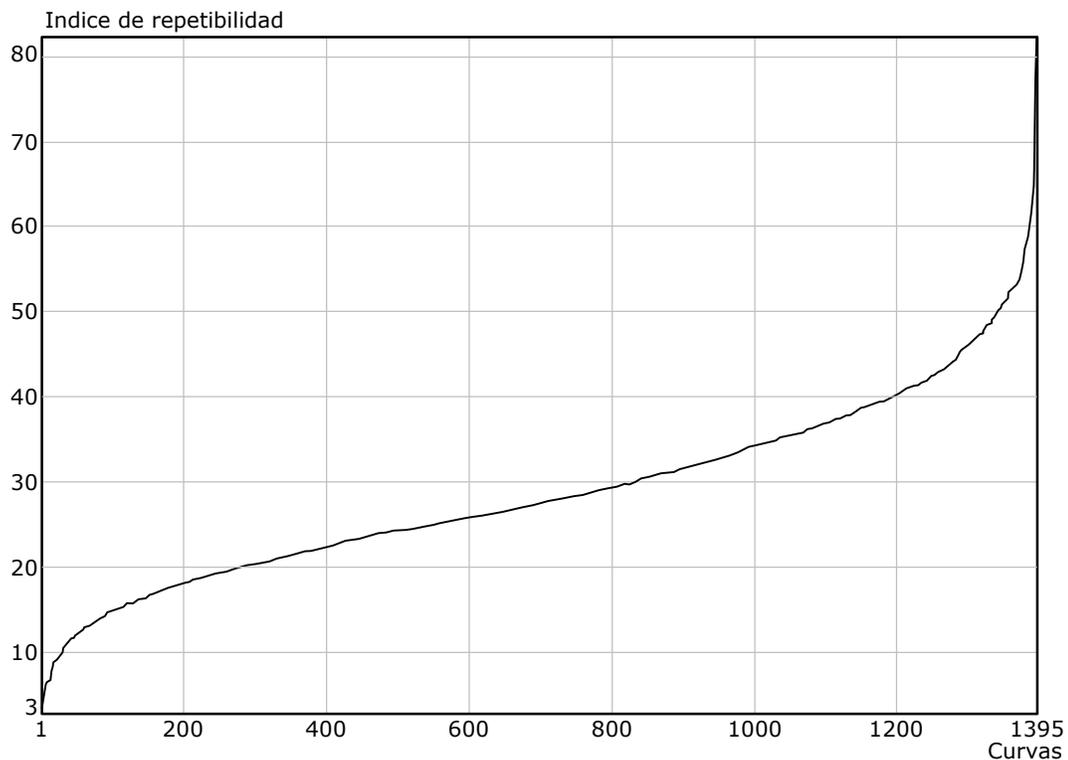


Figura 4.27. Repetibilidad de las inversas para iones positivos; error ordenado. El menor error es de 2.72028 y el mayor de 82.3757.

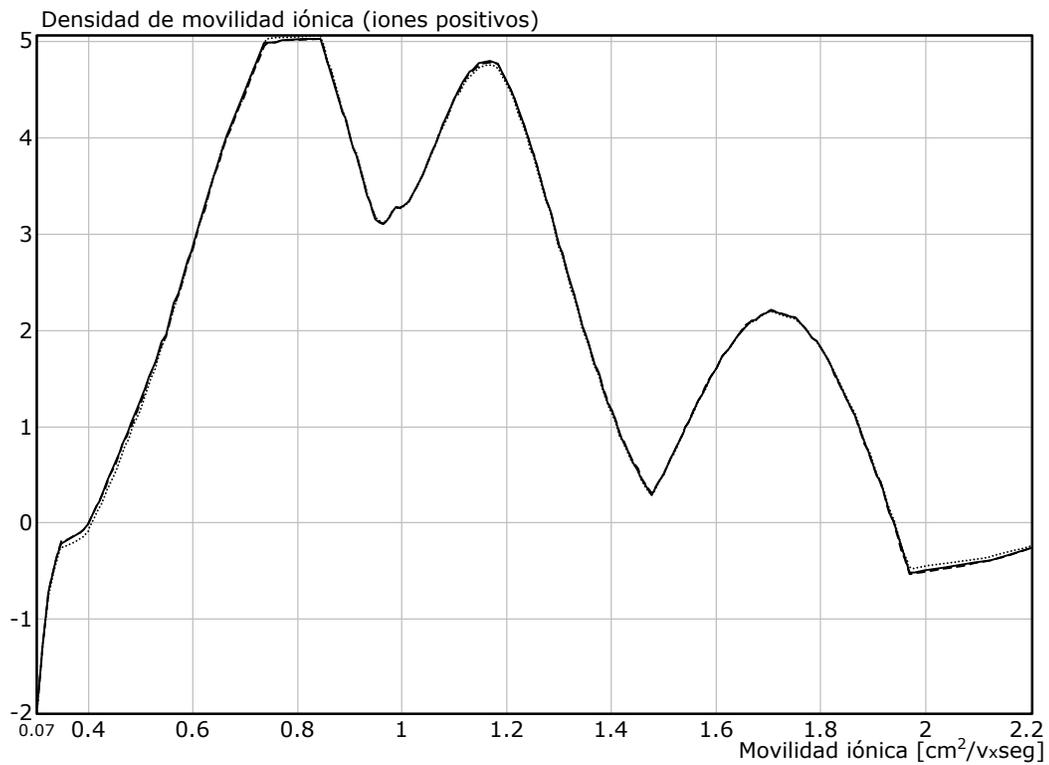


Figura 4.28. Curva de densidad de movilidad iónica más repetible para iones positivos: halotano al 0.5% en un portador 10% N_2 , 10% N_2O y 80% O_2 .

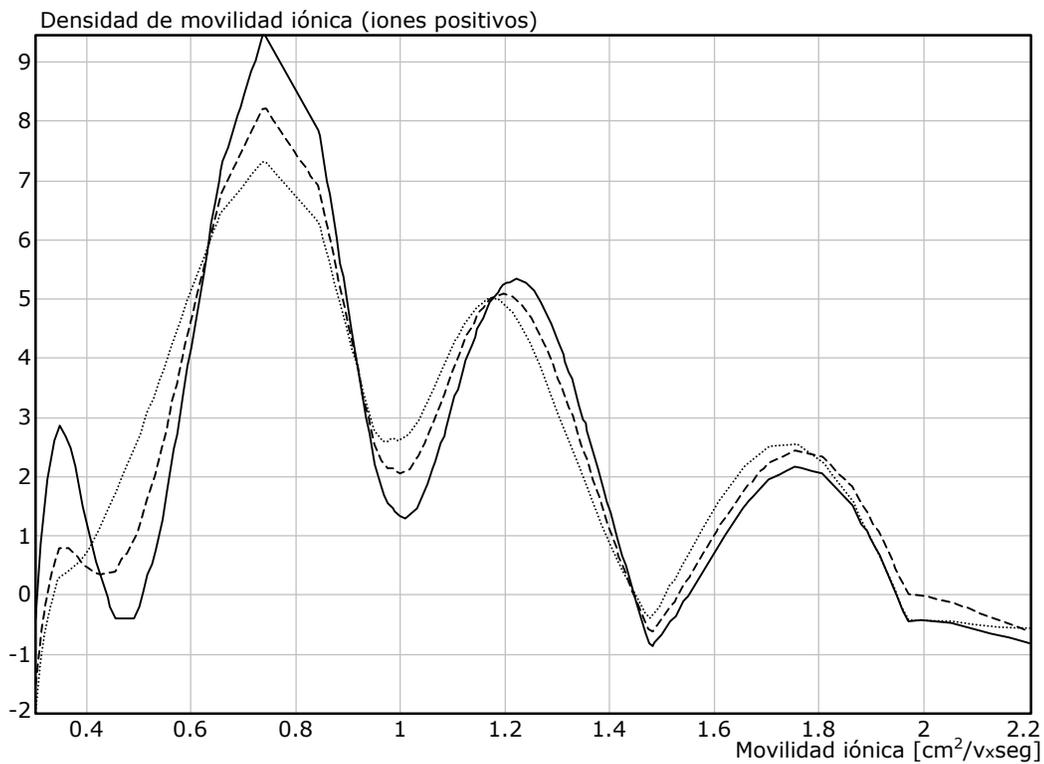


Figura 4.29. Curva de densidad de movilidad iónica menos repetible para iones positivos sevoflurano al 0.5% en un portador 80% N_2O , 20% O_2 .

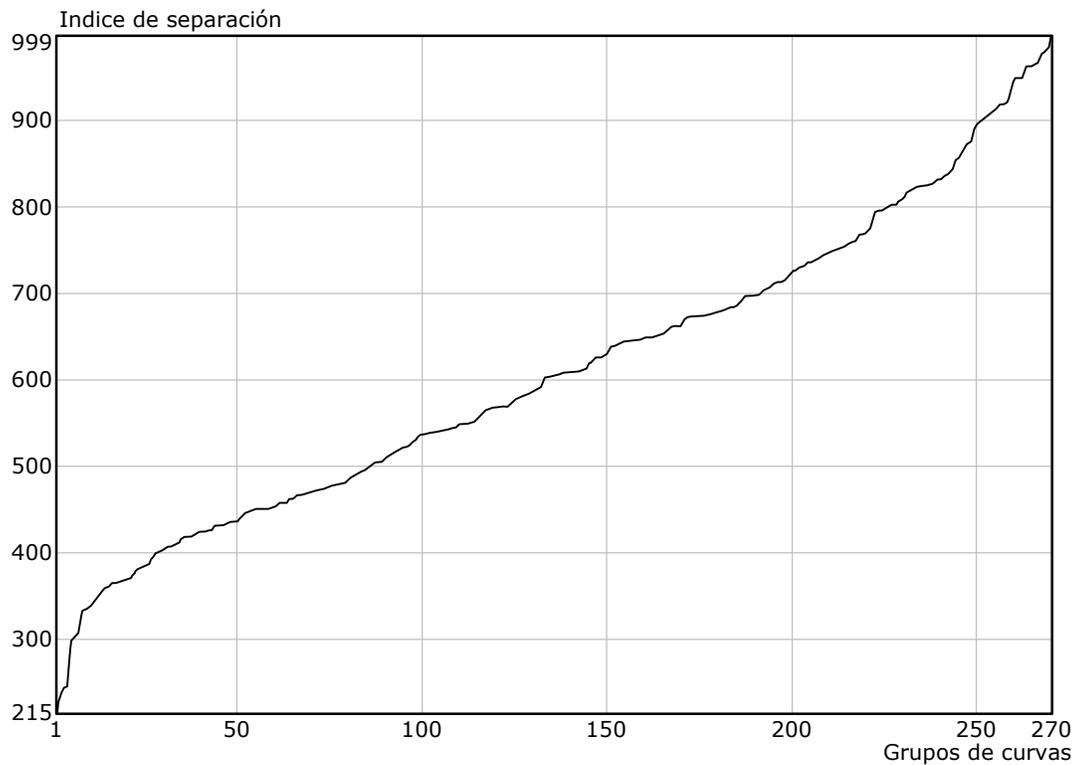


Figura 4.30. Separación de grupos de inversas correspondientes a iones negativos por tipo de agente anestésico. Se identifican 270 grupos. La mínima separación es de 215.937, y la máxima es de 999.315. En realidad existen 450 grupos pero se han eliminado aquellos integrados por solo una o dos curvas.

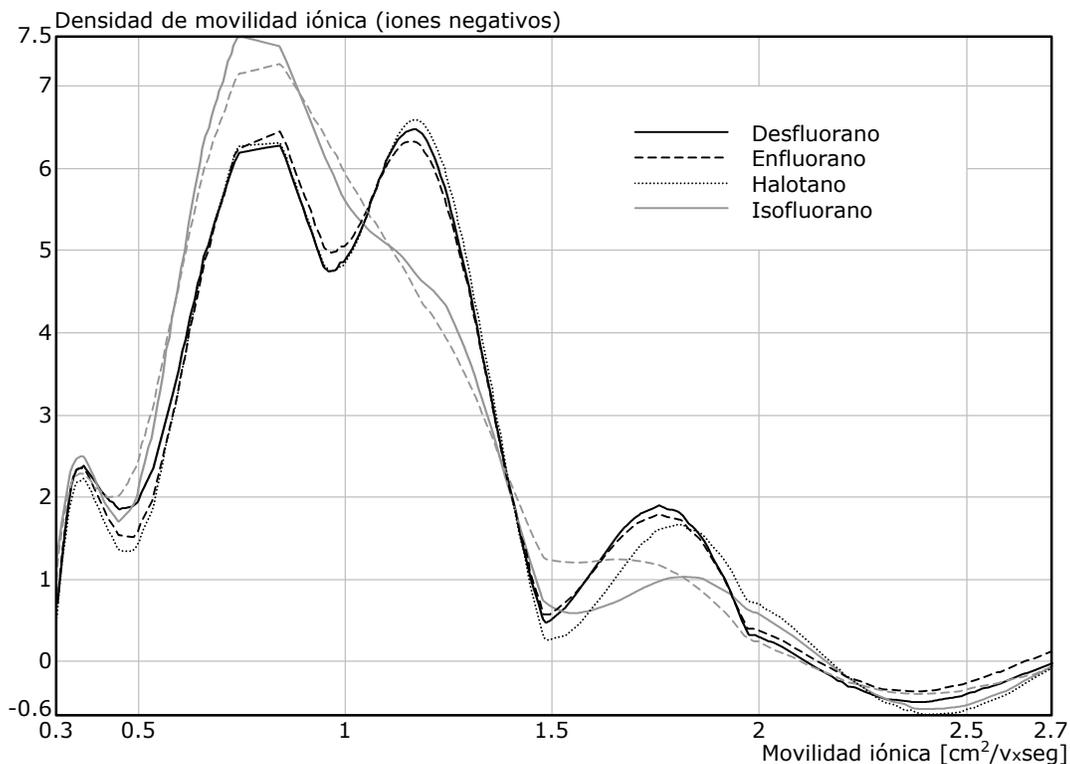


Figura 4.31. Conjunto de curvas de densidad de movilidad iónica para iones negativos que presentan la menor sensibilidad a variaciones en el tipo de agente anestésico, correspondiente a 5% de agente en un portador con 60% N₂O y 40% O₂.

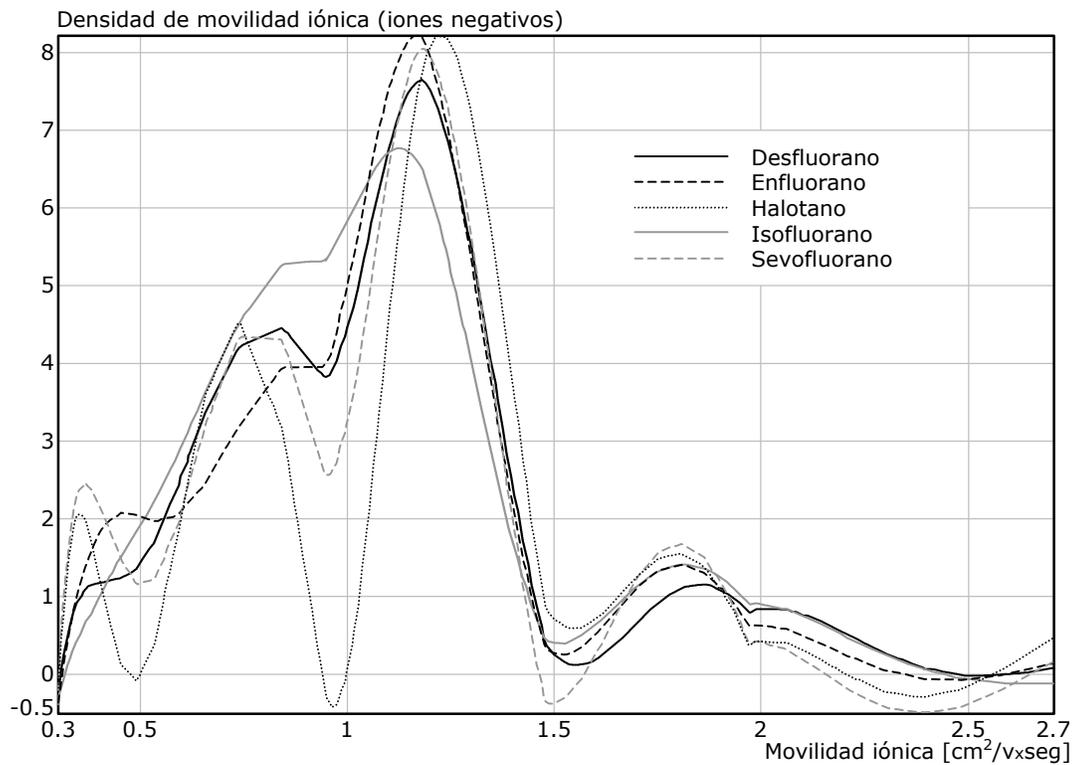


Figura 4.32. Conjunto de curvas de densidad de movilidad iónica para iones negativos que presentan la mayor sensibilidad a variaciones en el tipo de agente anestésico, correspondiente a 1.5% de agente en un portador con 30% N_2 , 10% N_2O y 60% O_2 .

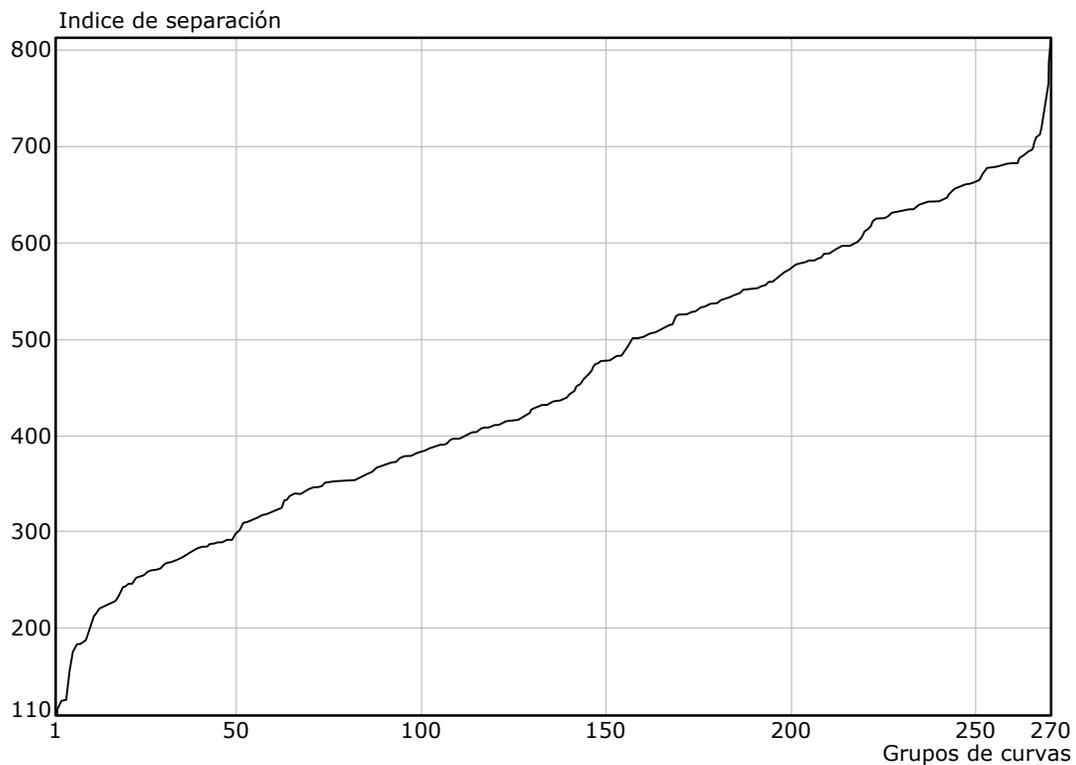


Figura 4.33. Separación de grupos de inversas correspondientes a iones positivos por tipo de agente anestésico. Se identifican 270 grupos. La mínima separación es de 110.079, y la máxima es de 813.524. En realidad existen 450 grupos pero se han eliminado aquellos integrados por solo una o dos curvas.

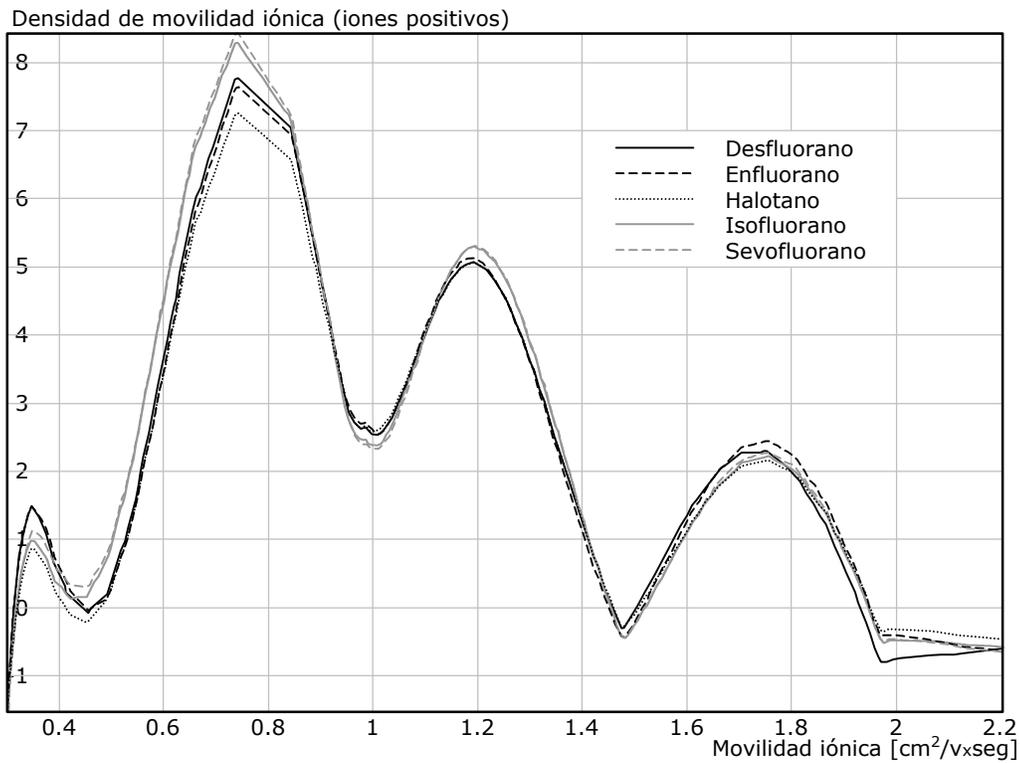


Figura 4.34. Conjunto de curvas de densidad de movilidad iónica para iones positivos que presentan la menor sensibilidad a variaciones en el tipo de agente anestésico, correspondiente a 1.5% de agente en un portador con 60% N_2O y 40% O_2 .

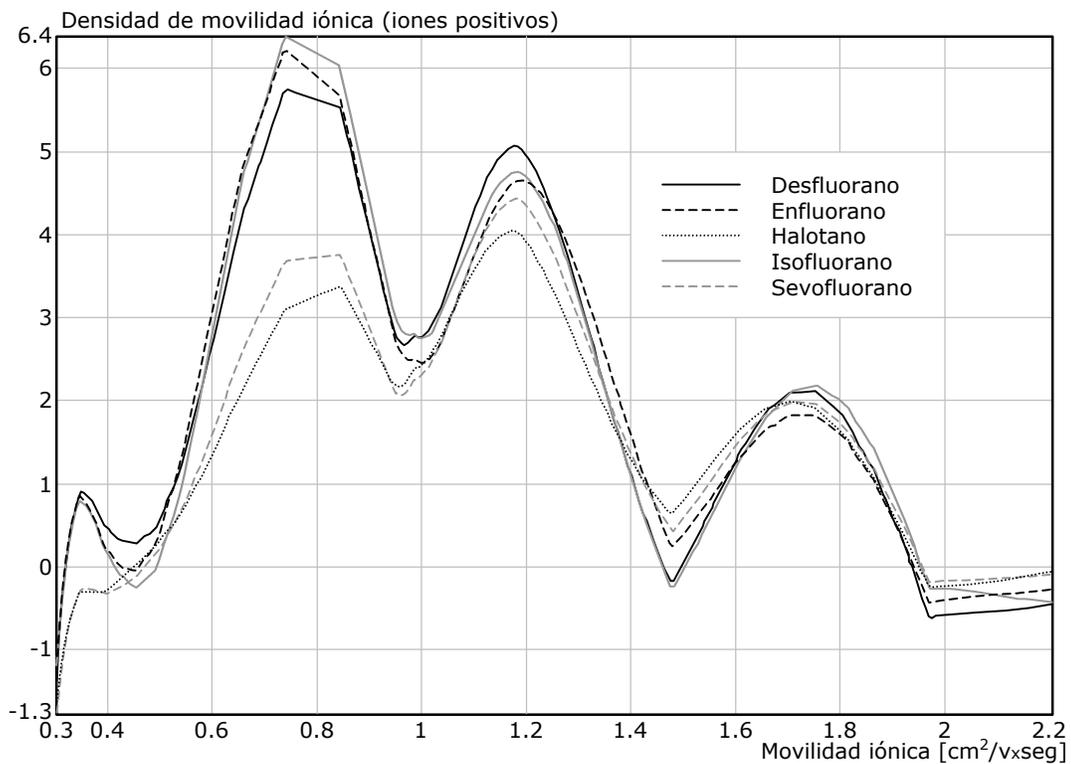


Figura 4.35. Conjunto de curvas de densidad de movilidad iónica para iones positivos que presentan la mayor sensibilidad a variaciones en el tipo de agente anestésico, correspondiente a 3.5% de agente en un portador con 50% N_2 , 20% N_2O , 20% O_2 y 10% CO_2 .

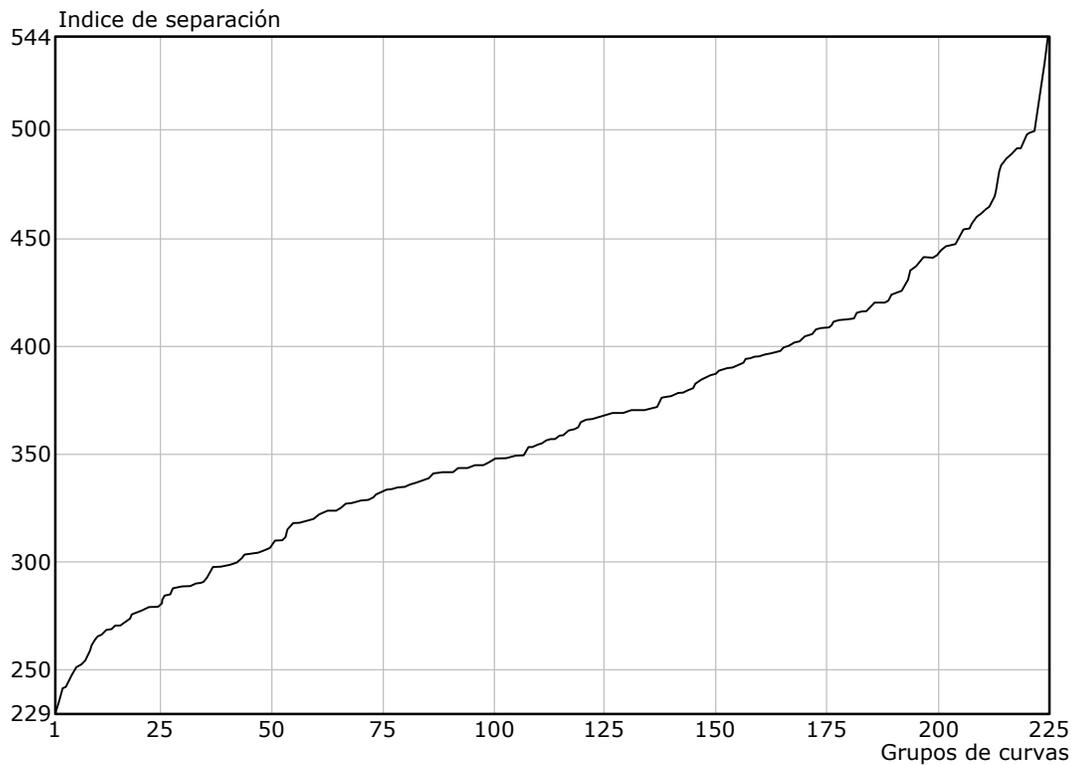


Figura 4.36. Separación de grupos de inversas correspondientes a iones negativos por porcentaje de agente anestésico. Se identifican 225 grupos. La mínima separación es de 229.819, y la máxima es de 544.119. En realidad existen 270 grupos pero se han eliminado aquellos integrados por solo una curva.

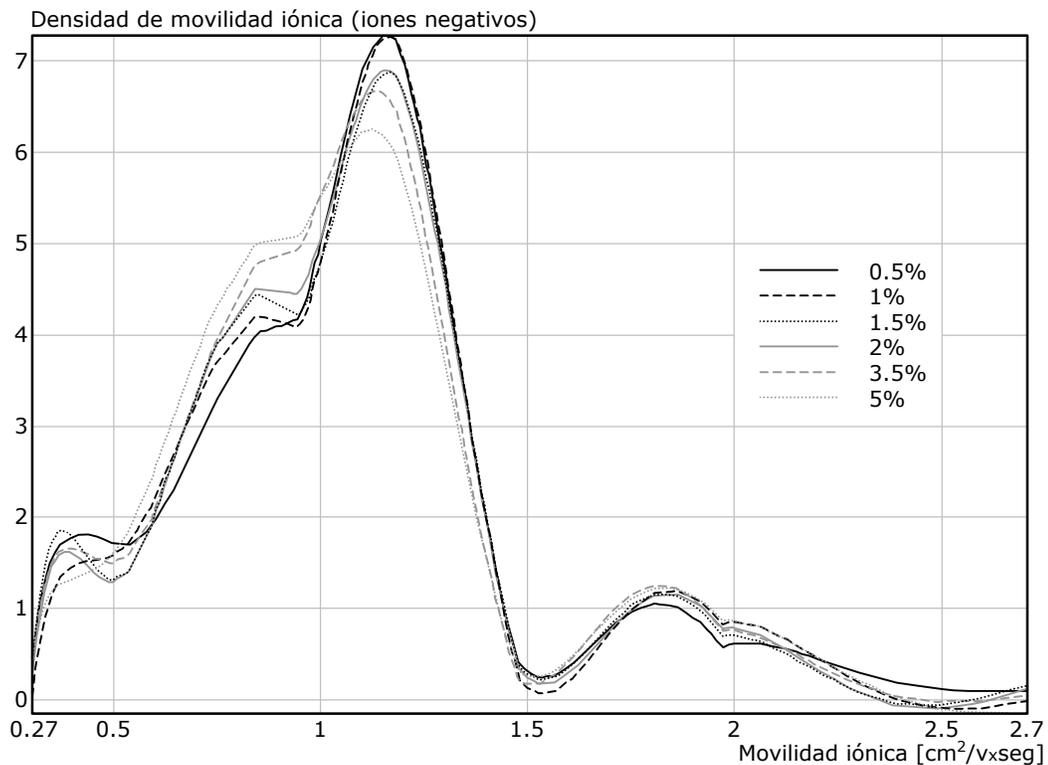


Figura 4.37. Conjunto de curvas de densidad de movilidad iónica para iones negativos que presentan la menor sensibilidad a variaciones en el porcentaje de agente anestésico, correspondiente a isoflurano en un portador con 70% N_2 , 20% O_2 y 10% N_2O .

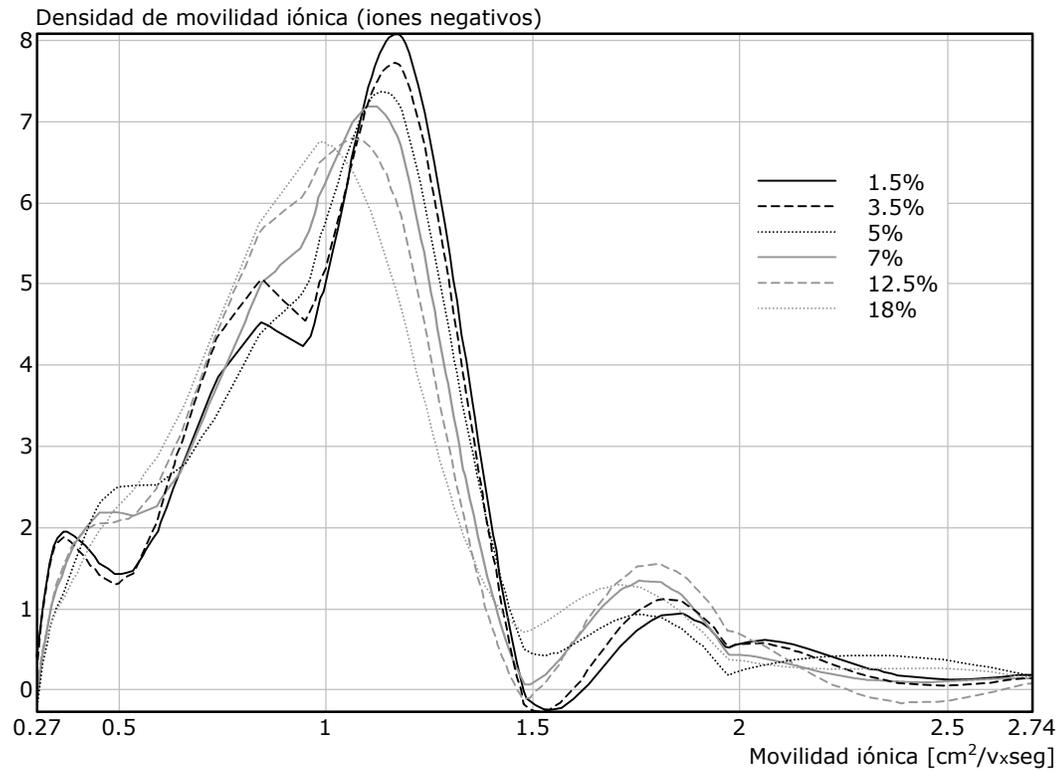


Figura 4.38. Conjunto de curvas de densidad de movilidad iónica para iones negativos que presentan la mayor sensibilidad a variaciones en el porcentaje de agente anestésico, correspondiente a desflurano en un portador con 20% N_2 , 20% N_2O y 60% O_2 .

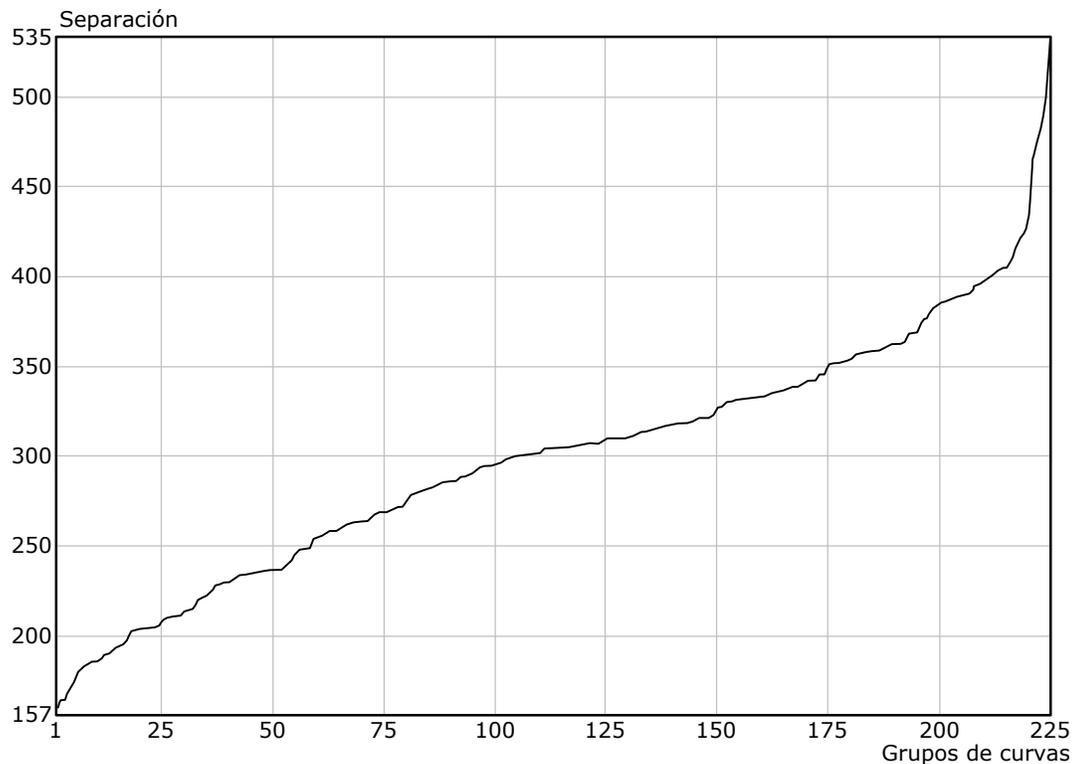


Figura 4.39. Separación de curvas de densidad de movilidad iónica para iones positivos por variaciones en el porcentaje de agente anestésico. La mínima separación es de 157.6923 y la máxima es de 534.375.

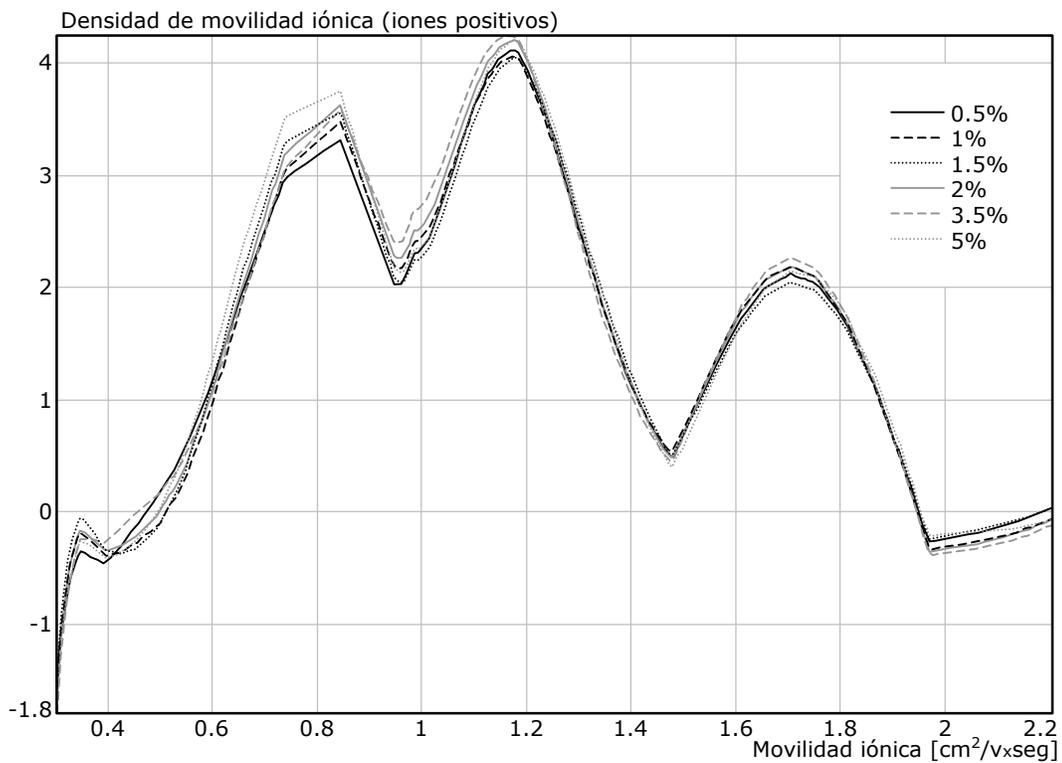


Figura 4.40. Conjunto de curvas de densidad de movilidad iónica para iones positivos que presentan la menor sensibilidad a variaciones en el porcentaje de agente anestésico, correspondiente a halotano en un portador con 50% N_2 , 40% O_2 y 10% CO_2 .

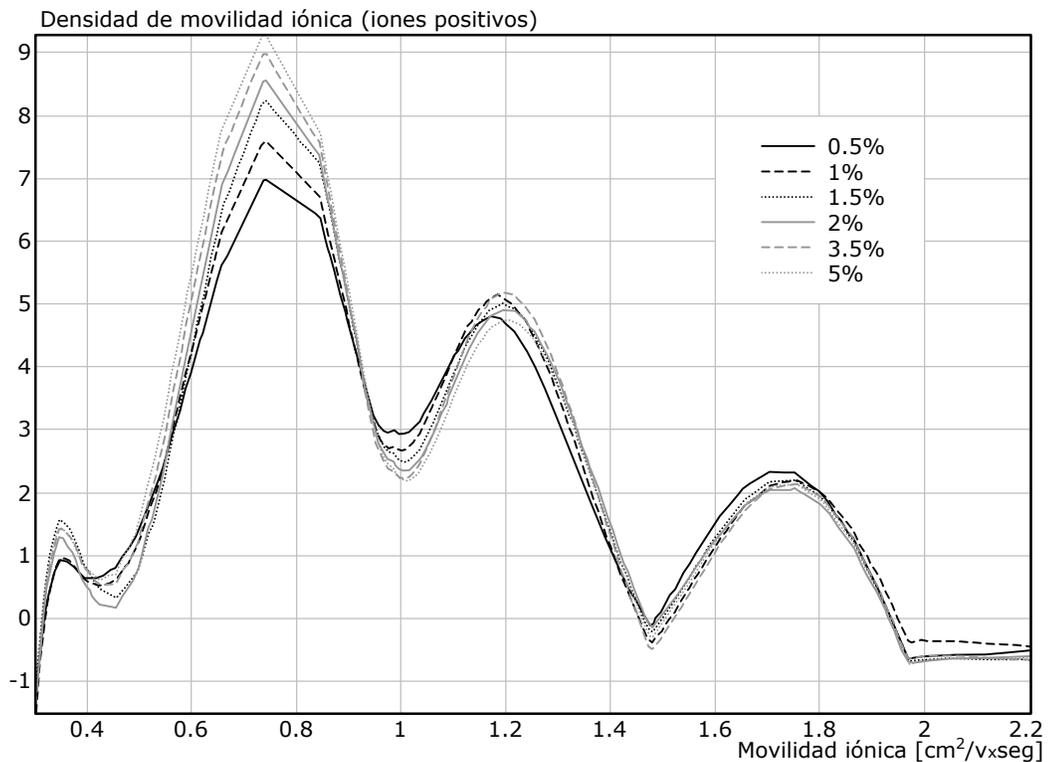


Figura 4.41. Conjunto de curvas de densidad de movilidad iónica para iones positivos que presentan la mayor sensibilidad a variaciones en el porcentaje de agente anestésico, correspondiente a sevofluorano en un portador con 20% N_2O y 80% O_2 .

4.1.2.3 Aplicación de la reducción dimensional a la base de datos

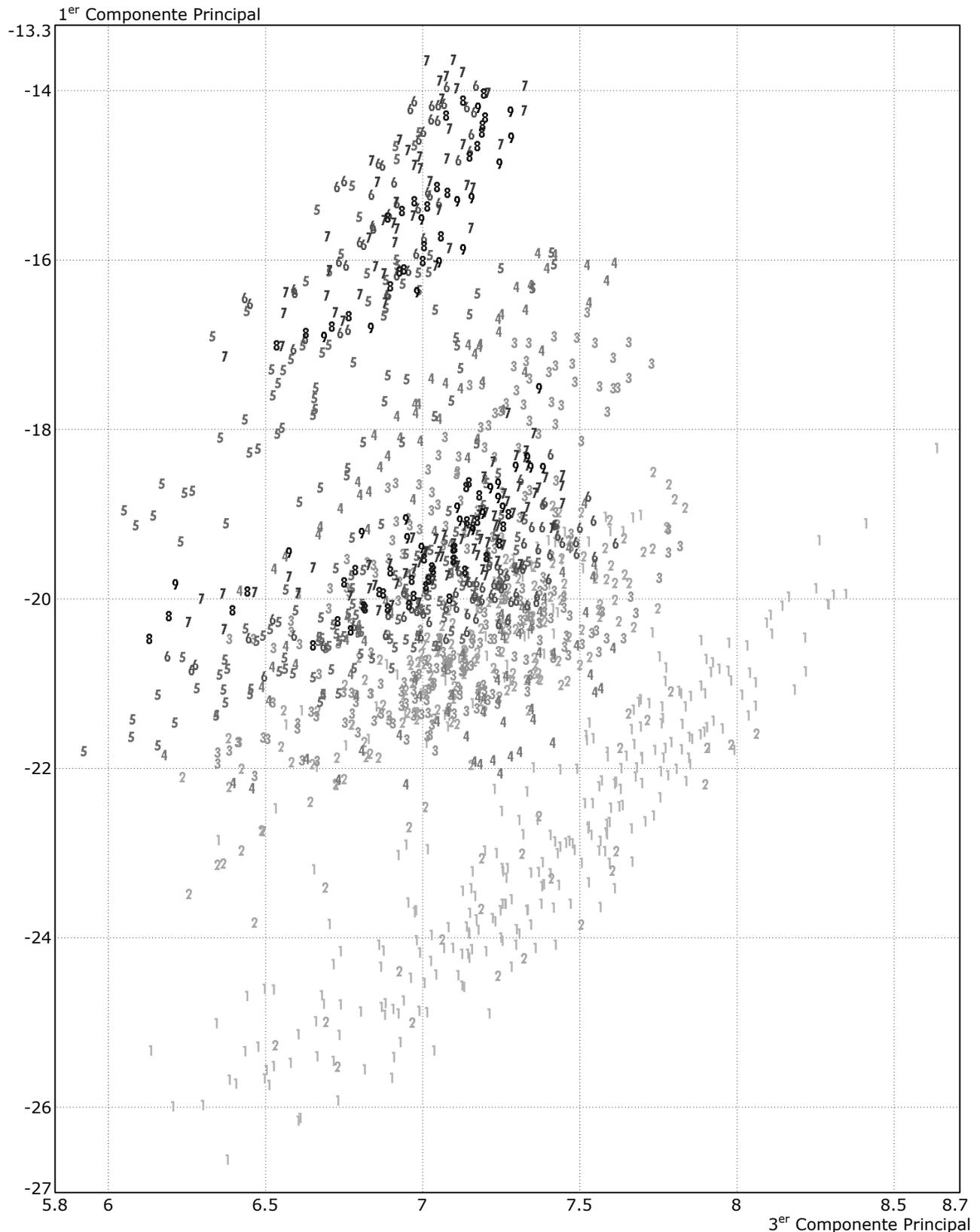
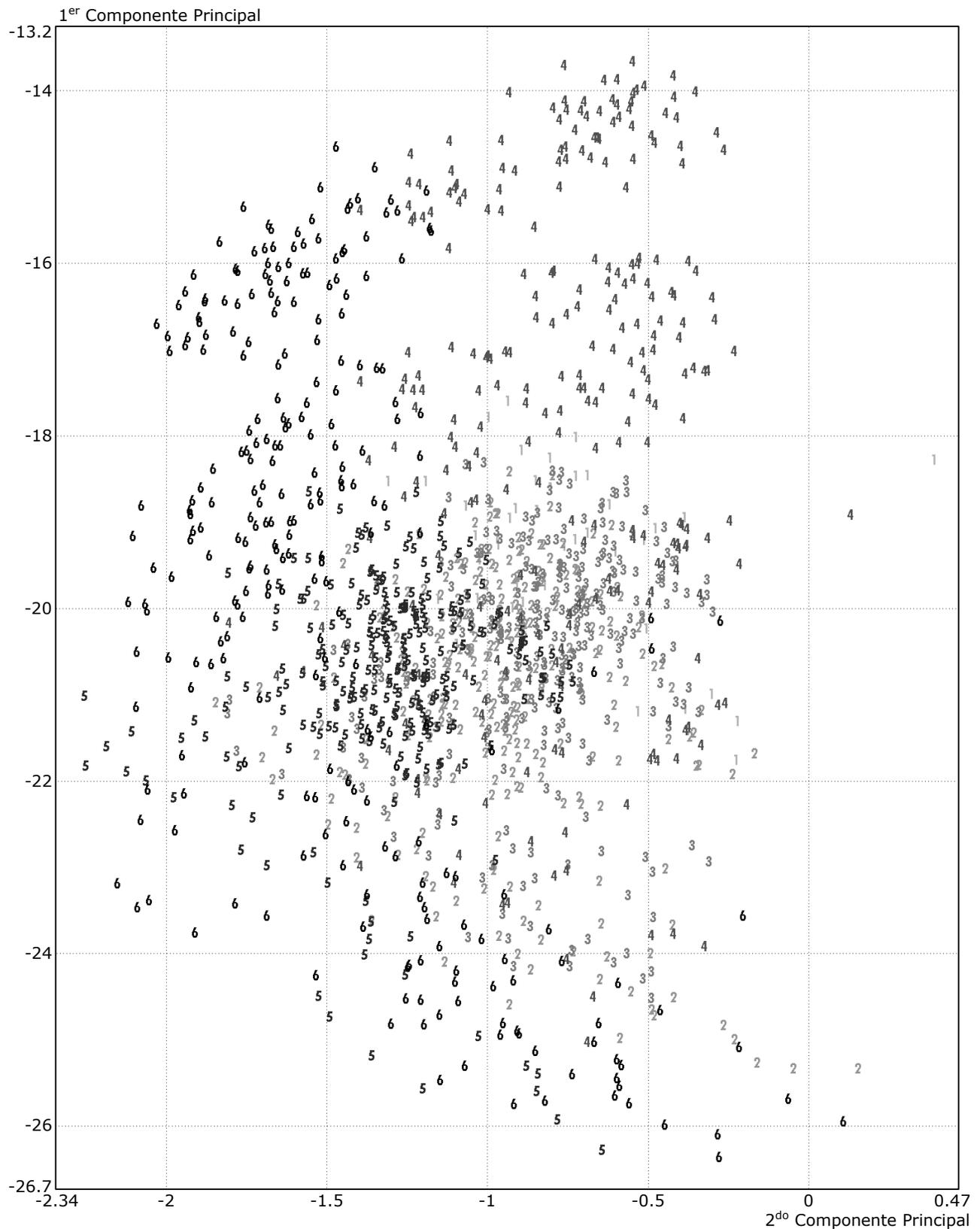
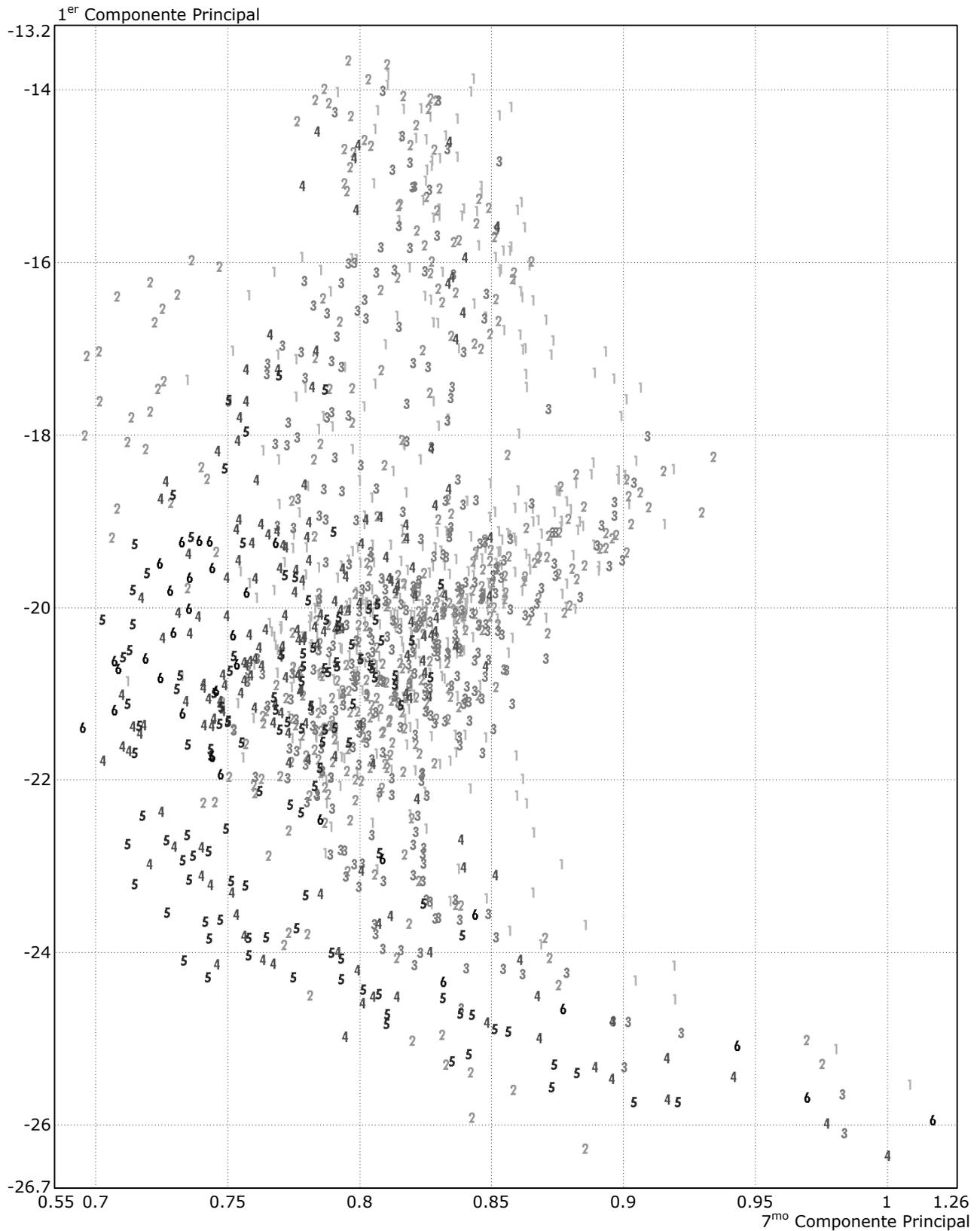


Figura 4.42. Componentes principales calculados mediante PCA y agrupados por N_2 . Existen 9 conjuntos: 1) 0%, 2) 10%, 3) 20%, 4) 30%, 5) 40%, 6) 50%, 7) 60%, 8) 70% y 9) 80%.





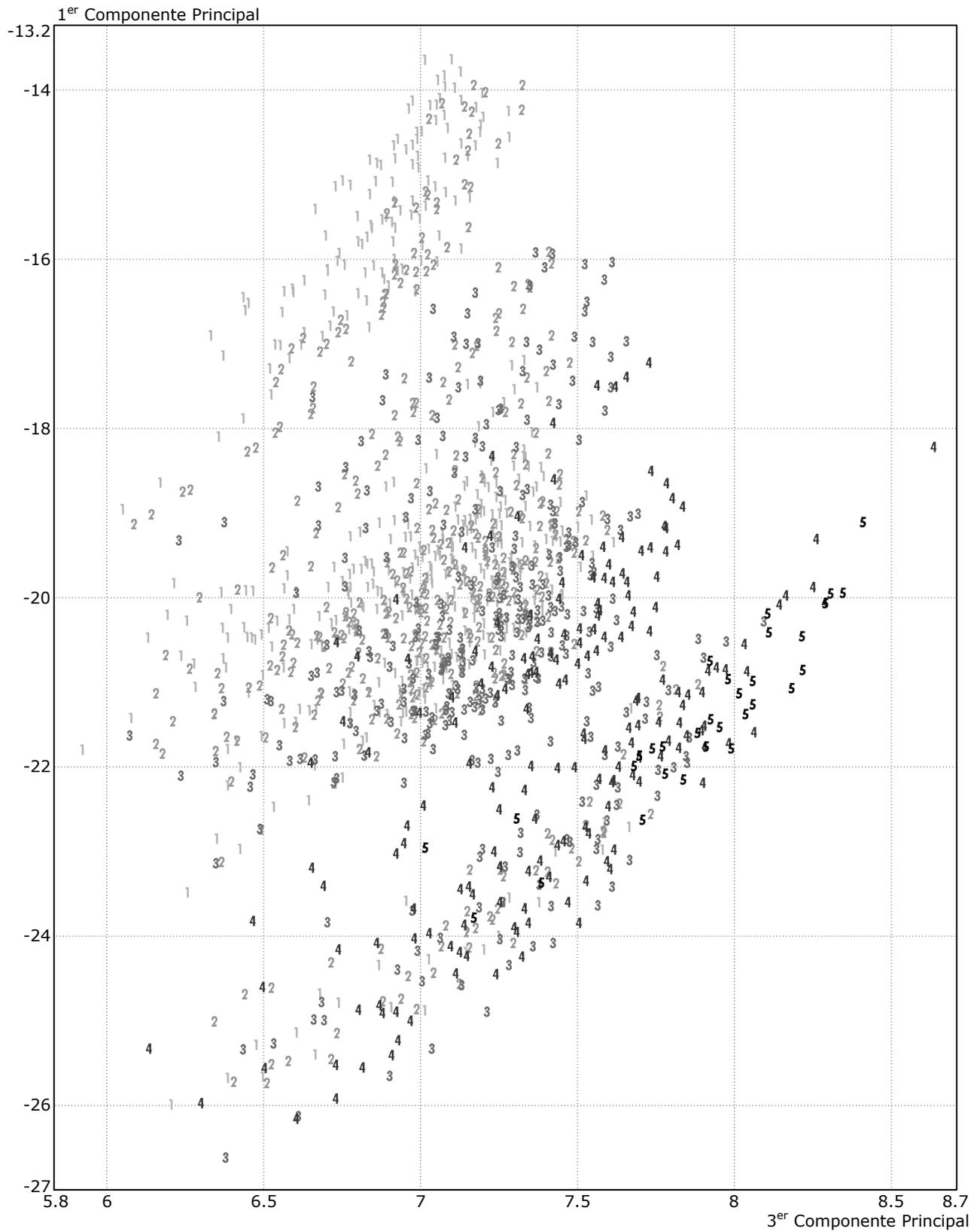


Figura 4.45. Componentes principales calculados mediante PCA y agrupados por O_2 . Existen 5 conjuntos: 1) 20%, 2) 40%, 3) 60%, 4) 80% y 5) 100%.

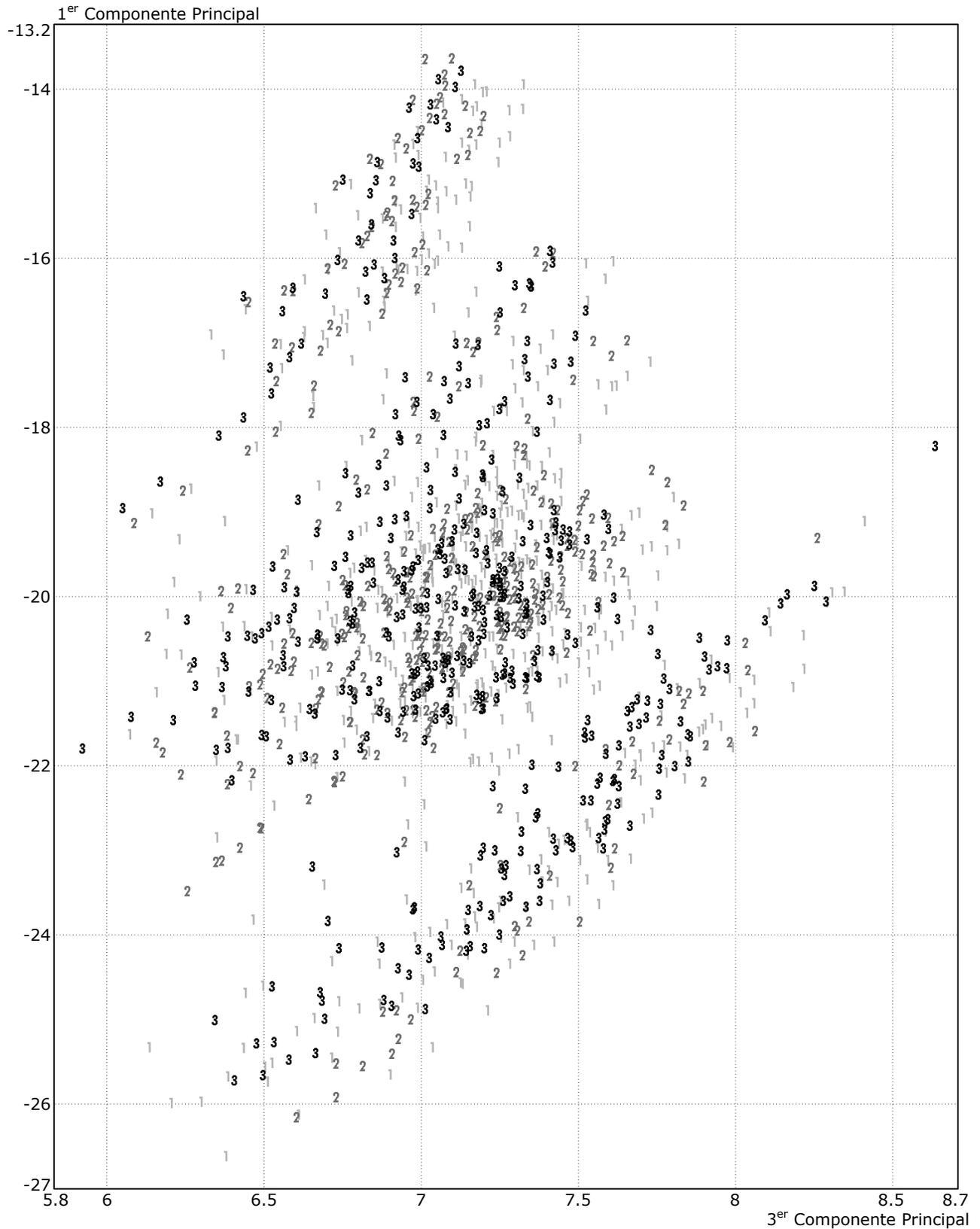
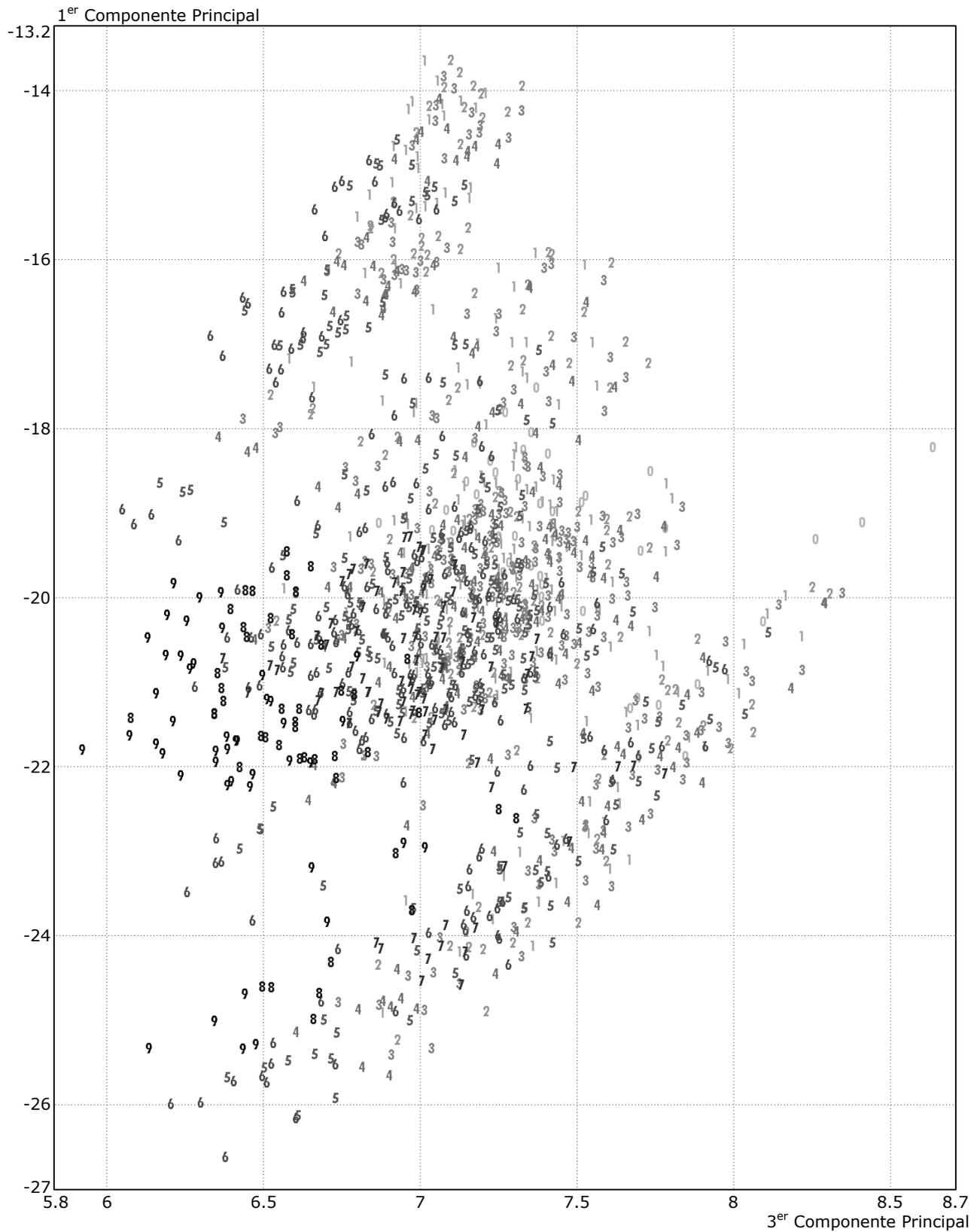


Figura 4.46. Componentes principales calculados mediante PCA y agrupados por CO₂. Existen 3 conjuntos: 1) 0%, 2) 10% y 3) 20%.



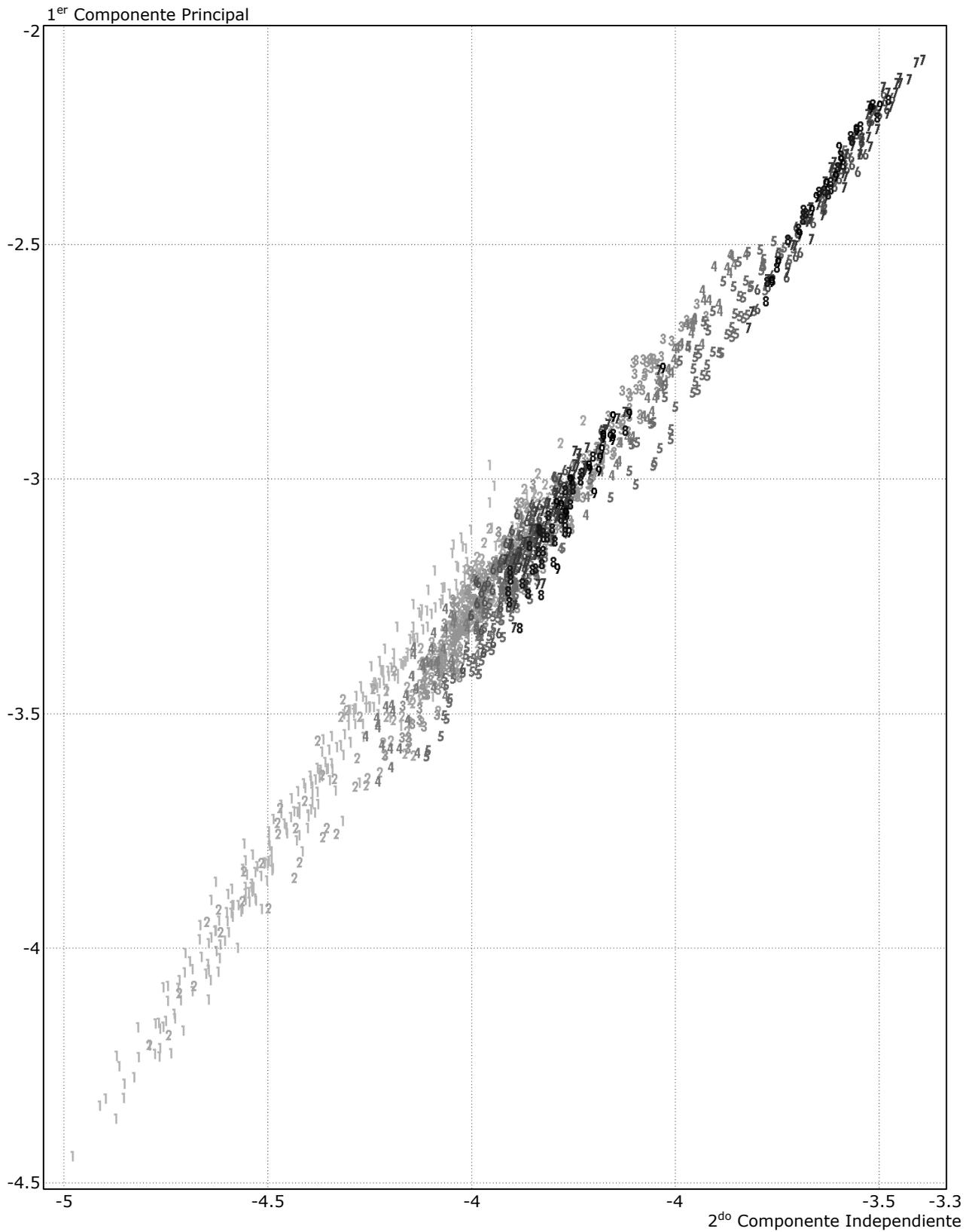


Figura 4.48. Resultado del análisis de componentes independientes (ICA) agrupado por porcentaje de nitrógeno. Existen 9 conjuntos: 1) 0%, 2) 10%, 3) 20%, 4) 30%, 5) 40%, 6) 50%, 7) 60%, 8) 70% y 9) 80%.

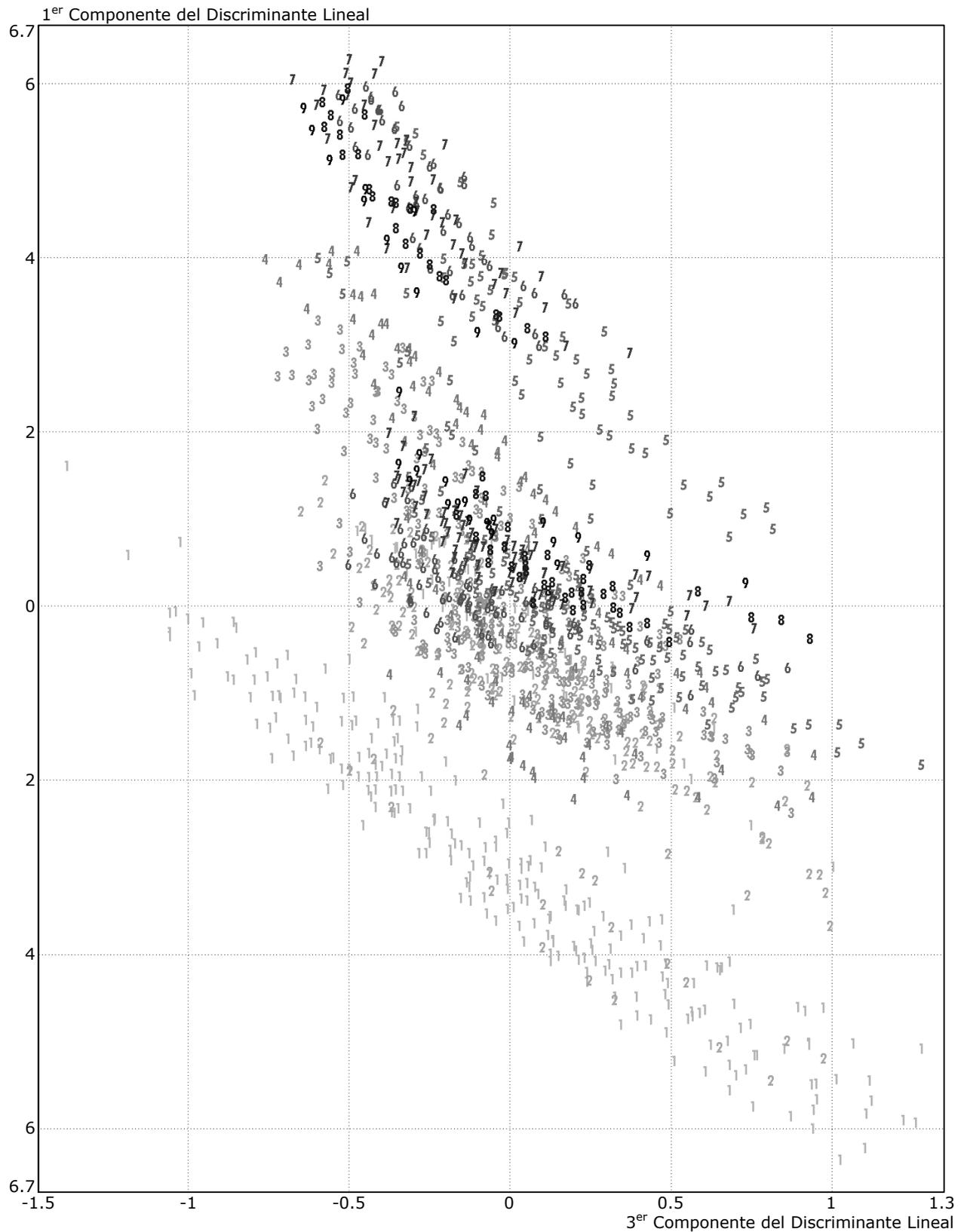


Figura 4.49. Resultado del análisis de discriminante lineal (LDA) agrupado por porcentaje de nitrógeno. Existen 9 conjuntos: 1) 0%, 2) 10%, 3) 20%, 4) 30%, 5) 40%, 6) 50%, 7) 60%, 8) 70% y 9) 80%.

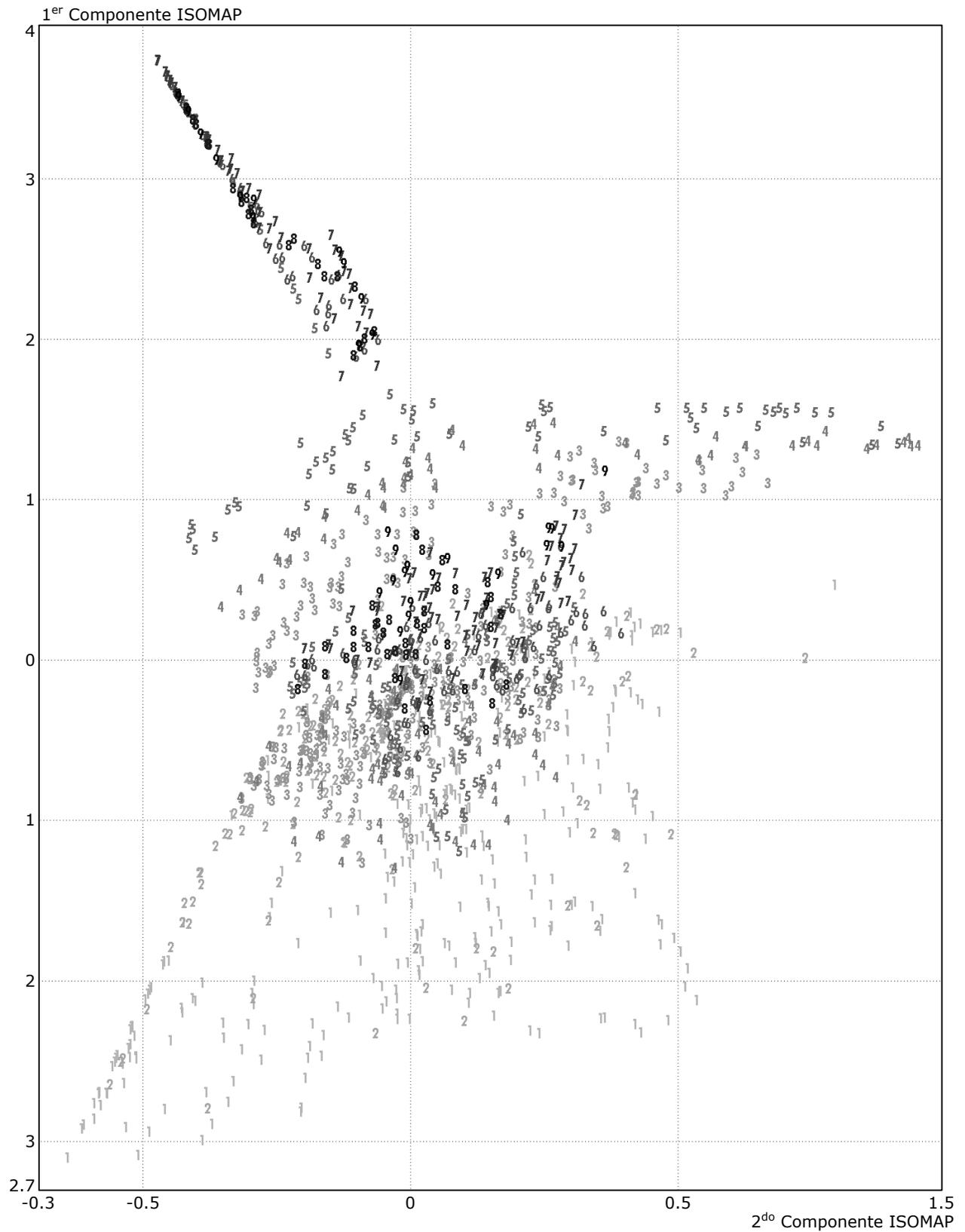


Figura 4.50. Resultado del análisis mediante el algoritmo ISOMAP agrupado por porcentaje de nitrógeno. Existen 9 conjuntos: 1) 0%, 2) 10%, 3) 20%, 4) 30%, 5) 40%, 6) 50%, 7) 60%, 8) 70% y 9) 80%.

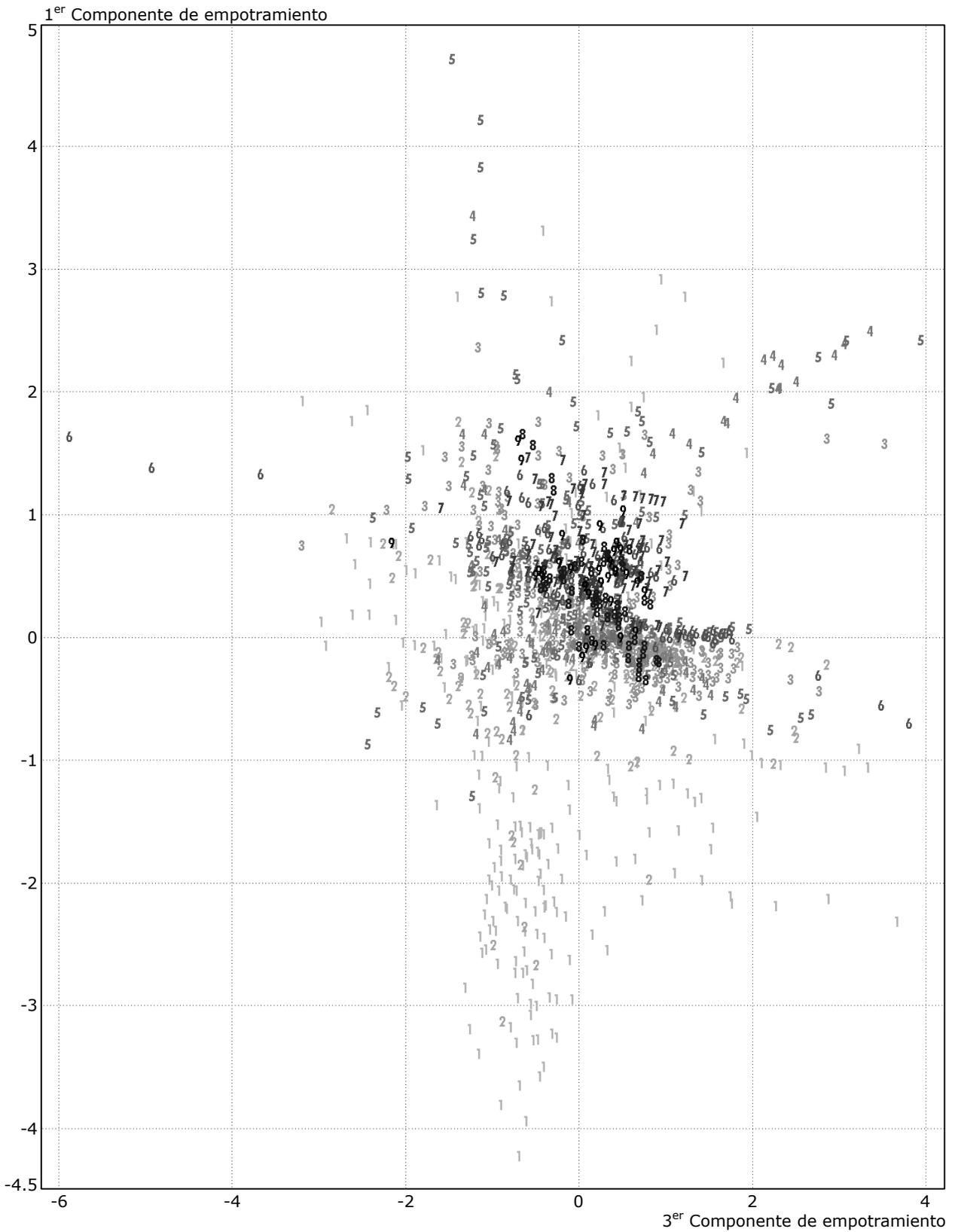


Figura 4.51. Resultado del análisis mediante el algoritmo de empotramiento localmente lineal (LLE) agrupado por porcentaje de nitrógeno. Existen 9 conjuntos: 1) 0%, 2) 10%, 3) 20%, 4) 30%, 5) 40%, 6) 50%, 7) 60%, 8) 70% y 9) 80%.

4.1.2.4 Redes neuronales para la identificación y cuantificación

Utilizando PCA como pre-procesamiento de los datos, se empleó el método de prueba y error al examinar un gran número de redes neuronales con diferentes estructuras, componentes principales de entrada, número de neuronas y sub-grupos difusos de clasificación para determinar el conjunto de parámetros de cada red neuronal que produce la mejor identificación/cuantificación de gases y agentes. La salida de redes previas se utiliza en la mayoría de los casos en cascada como alimentación de redes posteriores para mejorar su desempeño. El primer conjunto de redes neuronales que se presenta es aquel para el cual suponemos que no tenemos otros aparatos de medición disponibles en el quirófano para conocer de antemano la cantidad de oxígeno o bióxido de carbono en la mezcla. El sistema completo consta de 6 etapas o sub-sistemas de redes neuronales y los resultados se exponen a continuación, en el orden de identificación decreciente que tendrían si no se alimentaran las salidas en cascada.

1) Porcentaje de nitrógeno: Por prueba y error se determinó que debían emplearse únicamente los primeros 12 componentes principales. Se separó la salida en 9 conjuntos correspondientes a los 9 porcentajes de N₂ medidos en la base de datos. Aunque se utilizaron conjuntos discretos, la capa de salida de la red neuronal es lineal, por lo que pueden reconocerse porcentajes intermedios, aunque esto no se contempló en este trabajo. Los 9 conjuntos se descompusieron en 3 sub-grupos mediante un clasificador no supervisado utilizando agrupamiento fuzzy-C. La red se construyó entonces con 12 neuronas de entrada, 60 neuronas en la capa oculta y 27 neuronas en la de salida, dadas por 9 clases con 3 sub-grupos cada una (todos estos números también determinados mediante prueba y error). Después de entrenar la red se juntaron de nuevo los sub-grupos para obtener las 9 clases originales, efectivamente añadiéndole una capa extra a la red. Así, durante el entrenamiento se logró disminuir el error normalizado hasta 0.0163 y se obtuvo el 100% de reconocimiento de los patrones de aprendizaje. Durante la fase de prueba se logró la identificación del 94.9821% de los patrones reservados para probar la capacidad de generalización de la red. En la tabla 4.2 se muestra la matriz de confusión correspondiente.

Concentración	0 a 9.99%	10 a 19.99%	20 a 29.99%	30 a 39.99%	40 a 49.99%	50 a 59.99%	60 a 69.99%	70 a 79.99%	80 a 90%
0 a 9.99%	305	3	1	1	0	0	0	0	0
10 a 19.99%	2	170	6	1	0	0	0	0	2
20 a 29.99%	2	8	238	10	2	0	1	0	1
30 a 39.99%	1	2	1	108	3	0	0	0	0
40 a 49.99%	0	0	1	2	179	4	2	1	0
50 a 59.99%	0	1	1	2	0	118	1	0	0
60 a 69.99%	0	2	0	0	1	2	119	0	0
70 a 79.99%	0	0	0	0	0	0	1	60	0
80 a 90%	0	0	0	0	1	0	0	1	28
Total	310	186	248	124	186	124	124	62	31
% Acierto	98.3871	91.3978	95.9677	87.0968	96.2366	95.1613	95.9677	96.7742	90.3226

Tabla 4.2. Matriz de confusión para la identificación del porcentaje de N₂.

2) Tipo de agente anestésico: Se emplearon los 15 primeros componentes principales. Existen 6 clases, correspondientes a cada uno de los 5 agentes medidos en la base de datos y la ausencia de anestésico. Se separó cada clase en 6 sub-grupos. Se utilizó además como entrada adicional la información proporcionada por la red anterior sobre el porcentaje de N₂. La estructura de la red cuenta así con 16 neuronas de entrada, 60 en la capa oculta y 36 de salida, antes del reagrupamiento. El error normalizado de aprendizaje fue de 0.0210, logrando el 100% de identificación de los patrones de aprendizaje y el 91.0394% de los de prueba. La matriz de confusión correspondiente se muestra en la tabla 4.3.

Concentración	Sin Agente	Desfluorano	Enfluorano	Halotano	Isofluorano	Sevofluorano
Sin Agente	37	2	8	2	0	0
Desfluorano	2	244	23	2	16	5
Enfluorano	4	9	230	2	1	1
Halotano	1	3	5	259	2	6
Isofluorano	0	10	2	2	244	2
Sevofluorano	1	2	2	3	7	256
Total	45	270	270	270	270	270
% Acierto	82.2222	90.3704	85.1852	95.9259	90.3704	94.8148

Tabla 4.3. Matriz de confusión para la identificación del tipo de agente anestésico.

3) Porcentaje de óxido nitroso: Se utilizaron los 16 primeros componentes principales. Existen 6 clases, correspondientes a cada porcentaje de N_2O medido en la base de datos. Se separó cada clase en 10 sub-grupos. Se tomó además como entrada adicional la información proporcionada por las redes anteriores sobre el porcentaje de N_2 y el tipo de agente anestésico utilizado. La estructura de la red entonces cuenta con 18 neuronas de entrada, 60 en la capa oculta y 60 de salida, antes del reagrupamiento. El error normalizado de aprendizaje fue de 0.0144, logrando el 100% de identificación de los patrones de aprendizaje y el 88.9606% de los de prueba (tabla 4.4).

Concentración	0 a 9.99%	10 a 19.99%	20 a 39.99%	40 a 59.99%	60 a 79.99%	80 a 100%
0 a 9.99%	367	22	10	5	6	1
10 a 19.99%	16	296	19	2	1	1
20 a 39.99%	13	15	276	2	3	0
40 a 59.99%	3	5	3	167	3	3
60 a 79.99%	3	3	1	7	109	0
80 a 100%	1	0	1	3	2	26
Total	403	341	310	186	124	31
% Acierto	91.0670	86.8035	89.0323	89.7849	87.9032	83.8710

Tabla 4.4. Matriz de confusión para la identificación del porcentaje de N_2O .

4) Porcentaje de oxígeno: Se tomaron los 18 primeros componentes principales. Existen 5 clases, correspondientes a cada porcentaje de O_2 medido en la base de datos. Se separó cada clase en 8 sub-grupos. Se empleó además como entrada adicional la información proporcionada por las redes anteriores sobre el porcentaje de N_2 y el tipo de agente anestésico utilizado. Para esta red se descartó la información sobre el porcentaje de N_2O , ya que degradaba el resultado obtenido. La estructura de la red cuenta entonces con 20 neuronas de entrada, 60 en la capa oculta y 40 de salida, antes del reagrupamiento. El error normalizado de aprendizaje fue de 0.0165, logrando el 100% de identificación de los patrones de aprendizaje y el 90.3943% de los de prueba. La matriz de confusión correspondiente a esta red neuronal se muestra en la tabla 4.5.

Concentración	0 a 19.99%	20 a 39.99%	40 a 59.99%	60 a 79.99%	80 a 100%
0 a 19.99%	423	21	10	3	0
20 a 39.99%	29	363	15	4	0
40 a 59.99%	9	13	280	11	1
60 a 79.99%	4	6	5	167	2
80 a 100%	0	0	0	1	28
Total	465	403	310	186	31
% Acierto	90.9677	90.0744	90.3226	89.7849	90.3226

Tabla 4.5. Matriz de confusión para la identificación del porcentaje de O_2 .

5) Porcentaje de bióxido de carbono: Se emplearon los 18 primeros componentes principales. Existen solo 3 clases, correspondientes a cada porcentaje de CO₂ medido en la base de datos. Se separó cada clase en 20 sub-grupos. Se empleó además como entrada adicional la información proporcionada por las redes anteriores sobre los porcentajes de N₂ y N₂O, así como el tipo de agente anestésico utilizado. Para esta red se descartó la información sobre el porcentaje de O₂, ya que degradaba el resultado. La estructura de la red cuenta así con 21 neuronas de entrada, 60 en la capa oculta y 60 de salida, antes del reagrupamiento. El error normalizado de aprendizaje fue de 0.0122, logrando el 100% de identificación durante el aprendizaje y el 86.595% en la prueba. La matriz de confusión correspondiente se muestra en la tabla 4.6.

Concentración	0 a 9.99%	10 a 19.99%	20 a 100%
0 a 9.99%	511	28	35
10 a 19.99%	37	357	28
20 a 100%	41	18	340
Total	589	403	403
% Acierto	86.7572	88.5856	84.3672

Tabla 4.6. Matriz de confusión para la identificación del porcentaje de CO₂.

6) Porcentaje de agente anestésico: Se utilizaron los primeros 17 componentes principales. Existen 10 clases, correspondientes a cada porcentaje de anestésico medido en la base de datos. Se separó cada clase en 17 sub-grupos. Se empleó además como entrada adicional la información proporcionada por las redes anteriores sobre los porcentajes de N₂, N₂O y O₂, así como el tipo de agente anestésico utilizado. Se descartó para esta red la información sobre el porcentaje de CO₂, ya que degradaba el resultado. La estructura de la red cuenta entonces con 21 neuronas de entrada, 60 en la capa oculta y 170 de salida, antes del reagrupamiento, formando así la red más grande del sistema. El error normalizado de aprendizaje fue de 0.0073, logrando el 100% de identificación de los patrones de aprendizaje y solo el 74.1219% de los de prueba (tabla 4.7).

Concentración	0 a 0.49%	0.5 a 0.99%	1 a 1.49%	1.5 a 1.99%	2 a 3.49%	3.5 a 4.99%	5 a 6.99%	7 a 12.49	12.5 a 17.99%	18 o más
0 a 0.49%	36	3	0	4	1	1	1	0	0	0
0.5 a 0.99%	2	152	9	11	7	5	4	0	0	0
1 a 1.49%	2	2	90	10	10	3	2	1	0	0
1.5 a 1.99%	2	8	18	160	24	12	4	1	0	0
2 a 3.49%	1	4	8	15	122	11	8	0	0	0
3.5 a 4.99%	2	4	6	13	8	161	25	6	1	0
5 a 6.99%	0	6	5	9	5	25	169	9	2	4
7 a 12.49	0	1	0	1	1	5	9	71	7	0
12.5 a 17.99%	0	0	0	2	1	2	3	0	34	2
18 o más	0	0	0	0	1	0	0	1	1	39
Total	45	180	136	225	180	225	225	89	45	45
% Acierto	80.0000	84.4444	66.1765	71.1111	67.7778	71.5556	75.1111	79.7753	75.5556	86.6667

Tabla 4.7. Matriz de confusión para la identificación del porcentaje de agente anestésico.

	Identificación [%]
% N ₂	94.9821
AA	91.0394
% N ₂ O	88.9606
% O ₂	90.3943
% CO ₂	86.595
% AA	74.1219

Tabla 4.8. Desempeño del sistema sin contar con información adicional de los porcentajes de O₂ y CO₂.

El desempeño total de este sistema se resume en la tabla 4.8.

A continuación se describe el desempeño de un sistema tomando en cuenta lecturas adicionales de O₂ y CO₂ que pudieran ser proporcionadas por otros instrumentos encontrados en un quirófano:

1) Porcentaje de nitrógeno: Se emplearon únicamente los primeros 12 componentes principales. Existen 9 clases correspondientes a los porcentajes de N₂ medidos en la base de datos, los cuales se descompusieron en 3 sub-grupos. Se utilizó la información adicional de O₂ y CO₂ proporcionada por el monitor de referencia. La red se construyó con 14 neuronas de entrada, 60 neuronas en la capa oculta y 27 neuronas en la capa de salida, antes del reagrupamiento. Así, durante el entrenamiento se obtuvo un error normalizado de 0.0057 y se logró el 100% de reconocimiento de los patrones de aprendizaje, así como el 97.5627% de los de prueba. Véase la tabla 4.9.

Concentración	0 a 9.99%	10 a 19.99%	20 a 29.99%	30 a 39.99%	40 a 49.99%	50 a 59.99%	60 a 69.99%	70 a 79.99%	80 a 90%
0 a 9.99%	308	2	4	0	0	0	0	0	0
10 a 19.99%	0	180	1	0	0	1	0	0	0
20 a 29.99%	2	1	239	4	2	1	0	0	0
30 a 39.99%	0	3	3	120	1	0	0	0	0
40 a 49.99%	0	0	0	0	180	0	0	0	0
50 a 59.99%	0	0	1	0	1	121	2	0	0
60 a 69.99%	0	0	0	0	2	1	121	0	0
70 a 79.99%	0	0	0	0	0	0	1	62	1
80 a 90%	0	0	0	0	0	0	0	0	30
Total	310	186	248	124	186	124	124	62	31
% Acierto	99.3548	96.7742	96.3710	96.7742	96.7742	97.5806	97.5806	100	96.7742

Tabla 4.9. Matriz de confusión para la identificación del porcentaje de N₂ contando con información adicional.

2) Porcentaje de óxido nítrico: Se tomaron los primeros 16 componentes principales. Existen 6 clases correspondientes a los porcentajes de N₂O medidos en la base de datos, los cuales se descompusieron en 10 sub-grupos. Se utilizó la información adicional de O₂ y CO₂, así como el porcentaje de N₂ proporcionado por la red anterior. Se usaron entonces 19 neuronas de entrada, 60 neuronas en la capa oculta y 60 neuronas en la capa de salida, antes del reagrupamiento. Durante el entrenamiento se obtuvo un error normalizado de 0.0053 y se logró el 100% de reconocimiento de los patrones de aprendizaje, así como 97.9928% de los de prueba (tabla 4.10).

Concentración	0 a 9.99%	10 a 19.99%	20 a 39.99%	40 a 59.99%	60 a 79.99%	80 a 100%
0 a 9.99%	395	3	2	0	0	0
10 a 19.99%	4	333	2	1	0	0
20 a 39.99%	2	3	306	2	0	0
40 a 59.99%	2	2	0	183	2	0
60 a 79.99%	0	0	0	0	121	2
80 a 100%	0	0	0	0	1	29
Total	403	341	310	186	124	31
% Acierto	98.0149	97.6540	98.7097	98.3871	97.5806	93.5484

Tabla 4.10. Matriz de confusión para la identificación del porcentaje de N₂O contando con información adicional.

3) Tipo de agente anestésico: Se utilizaron los primeros 15 componentes principales. Existen 6 clases correspondientes a los tipos de agente medidos en la base de datos (incluyendo su ausencia), los

cuales se descompusieron en 6 sub-grupos. Se utilizó la información adicional de O₂ y CO₂, así como el tipo de agente y el porcentaje de N₂ proporcionados por las redes anteriores. Se emplearon entonces 19 neuronas de entrada, 60 neuronas en la capa oculta y 36 neuronas en la capa de salida, antes del reagrupamiento. Así, se obtuvo un error normalizado de 0.0116 y se logró el 100% de reconocimiento de los patrones de aprendizaje, así como el 94.1219% de los de prueba.

Concentración	Sin Agente	Desfluorano	Enfluorano	Halotano	Isofluorano	Sevofluorano
Sin Agente	39	1	3	2	0	0
Desfluorano	1	252	16	0	13	3
Enfluorano	3	7	246	3	1	2
Halotano	1	0	2	263	0	2
Isofluorano	1	7	2	0	254	4
Sevofluorano	0	3	1	2	2	259
Total	45	270	270	270	270	270
% Acierto	86.6667	93.3333	91.1111	97.4074	94.0741	95.9259

Tabla 4.11. Matriz de confusión para la identificación del tipo de agente anestésico usando información adicional.

4) Porcentaje de agente anestésico: Se utilizaron los primeros 17 componentes principales. Existen 10 clases correspondientes a los porcentajes de agente medidos en la base de datos, los cuales se descompusieron a su vez en 17 sub-grupos. Se utilizó la información adicional de O₂ y CO₂, además del tipo de agente y los porcentajes de N₂ y N₂O proporcionados por las redes anteriores. Se emplearon entonces 21 neuronas de entrada, 60 neuronas en la capa oculta y 170 neuronas en la capa de salida, antes del reagrupamiento. Se obtuvo un error normalizado de 0.0078 y se logró el 100% de reconocimiento de los patrones de aprendizaje, así como el 76.2724% de los de prueba.

Concentración	0 a 0.49%	0.5 a 0.99%	1 a 1.49%	1.5 a 1.99%	2 a 3.49%	3.5 a 4.99%	5 a 6.99%	7 a 12.49	12.5 a 17.99%	18 o más
0 a 0.49%	36	4	0	2	0	1	0	0	0	0
0.5 a 0.99%	5	156	11	8	13	3	1	1	0	0
1 a 1.49%	1	6	92	13	6	2	2	0	0	0
1.5 a 1.99%	2	10	19	166	27	10	3	0	0	0
2 a 3.49%	0	1	9	16	117	9	5	1	0	0
3.5 a 4.99%	0	1	4	12	10	168	24	1	0	0
5 a 6.99%	1	2	1	5	6	24	182	11	4	1
7 a 12.49	0	0	0	2	0	5	5	75	4	0
12.5 a 17.99%	0	0	0	0	1	2	3	0	31	3
18 o más	0	0	0	1	0	1	0	0	6	41
Total	45	180	136	225	180	225	225	89	45	45
% Acierto	80.0000	86.6667	67.6471	73.7778	65.0000	74.6667	80.8889	84.2697	68.8889	91.1111

Tabla 4.12. Matriz de confusión para la identificación del porcentaje de agente anestésico contando con información adicional de O₂ y CO₂.

El desempeño de este sistema se resume en la tabla 4.13.

	Identificación [%]
% N ₂	97.5627
% N ₂ O	97.9928
AA	94.1219
% AA	76.2724

Tabla 4.13. Desempeño del sistema de identificación y cuantificación usando información adicional proveniente de un instrumento externo acerca del O₂ y CO₂ presentes en la muestra.

V DISCUSIÓN DE LOS RESULTADOS

5.1 Sistema experimental

5.1.1 Sistema proveedor de mezclas gaseosas

5.1.1.1 Control de presión

La implementación neural de la superficie de control difuso en este sistema es tan solo una aproximación suavizada de la original, como se puede observar si se comparan las figuras 3.5 y 4.1. Esta simplificación, aunque no ideal, ha sido necesaria debido a las restricciones impuestas por el sistema en el que se ha implementado el controlador difuso, el cual no tiene ni la velocidad para realizar en tiempo real el cálculo difuso ni la memoria suficiente para almacenar una solución por tabla pre-calculada. En este caso, la aproximación neural es aceptablemente compacta y los cálculos matemáticos requeridos para encontrar una señal de control para condiciones de entrada dadas se realizan en un tiempo razonable dentro del lazo de control del software de la máquina mezcladora de gases y agentes anestésicos.

Como ya se ha mencionado, la implementación neural se fundamenta en una red con neuronas de base radial dado que ésta presenta una mejor aproximación a la superficie original de control que la de una red similar de retropropagación en casi todos los puntos, excepto en aquellos cercanos a las cuatro esquinas, en donde la superficie tiende a curvarse un poco. Sin embargo, esta situación no es crítica porque genera algunas oscilaciones solo en condiciones lejanas al punto de estabilización requerido, el cual se encuentra hacia el centro de la superficie.

La estabilización de la presión a la salida de la mezcla gaseosa no es especialmente rápida, ya que, basándonos en la tabla 4.1, podemos calcular un promedio de 17.425 segundos en llegar a la presión óptima de 10 psi a partir de la completa ausencia de presión. Esto podría parecer demasiado, pero para la aplicación que tiene esta máquina en nuestra investigación es aceptable, ya que durante el uso normal de la máquina, en el que se generan una serie de mezclas continuas, no se le pide a la máquina que realice mezclas a partir de un flujo previo nulo, sino a partir de una combinación anterior a presión estable, excepto en el caso de la primera combinación, cuando se genera la primera mezcla de la jornada de pruebas en el aparato. Esto reduce dramáticamente el tiempo de espera para la estabilización de las mezclas.

Algo similar sucede con la *forma* de la respuesta de la presión. En todos los casos en que se genera una mezcla gaseosa a partir de un flujo inicial de cero, el control presenta un sobre-tiro que rebasa la lectura máxima del sensor de presión, y que en promedio se estima que llega a 15.15 psi. Este fenómeno no se presenta durante la operación continua, y el tiempo de respuesta se reduce considerablemente.

Por otro lado, la presión de estabilización depende mucho de la composición de la muestra, lo cual puede apreciarse claramente en la figura 4.2, en donde se muestra esta característica para todas las mezclas de gases portadores utilizadas a lo largo de esta investigación (sin agente anestésico). Este efecto tiene que ver con la forma de la superficie de control, pero también con la respuesta de los flujómetros digitales utilizados, los cuales tienen ya una larga vida de uso (aproximadamente 15 años) y probablemente ya no están calibrados adecuadamente. Desafortunadamente la calibración y limpieza interna de estos dispositivos no puede ser realizada por el usuario, y probablemente sería más barato comprar controladores de flujo nuevos para investigaciones posteriores que tratar de arreglar los actuales.

A pesar del menos que óptimo desempeño de los controladores y la simplificación del control difuso, la presión de estabilización siempre se mantiene en un rango de 9.69 a 10.1 psi aproximadamente, muy cercana a la ideal de 10 psi para la que se diseñó el control. Si bien esto podría no ser adecuado para una máquina automática dosificadora de anestesia para uso clínico, ciertamente es suficiente para los propósitos de esta investigación.

5.1.1.2 Caracterización de las mezclas

El sistema mezclador presenta no-linealidades debido a la imprecisión en la calibración de sus controladores digitales de flujo (ver por ejemplo la figura 4.4a) y a su dependencia de la presión barométrica y la temperatura ambiental, lo que causa que, dependiendo de los componentes de una mezcla, ésta sea sub o sobre-aproximada. Esto puede comprobarse explícitamente para las mezclas utilizadas en la investigación al analizarlas mediante un monitor de gases como el Capnomac Ultima™, obteniendo un resultado como el de la figura 4.4b. En general se observa que las mezclas son bastante precisas excepto algunas que contienen nitrógeno en porcentajes que van desde 0 a 40%, para las cuales la concentración es en realidad un poco menor. Sin embargo, el porcentaje faltante no se reparte por igual en los demás gases, sino que se observa que en particular se le atribuye en la mayoría de los casos al óxido nitroso, el cual queda entonces sobre-estimado. Este fenómeno podría apuntar hacia una falla de los controladores de flujo, en la que un controlador estaría suministrando de menos y el otro de más, en la misma proporción. Pero parece más realista la hipótesis de que es el monitor de anestesia comercial el que confunde en algunos casos el nitrógeno puro con aquél contenido en el óxido nitroso. Es solo en contadas ocasiones que también existe esta misma imprecisión con el oxígeno no combinado, lo cual apoya esta hipótesis. En cualquier caso, este peculiar comportamiento se nos presenta como un dilema pequeño para la investigación, el cual cuestiona hasta cierto punto la confiabilidad de las lecturas a ser utilizadas como referencia. Para este trabajo se decidió - dado que los controladores son algo viejos y han sido bastante utilizados previamente, mientras que el monitor de referencia es nuevo y fue calibrado antes de ser entregado - confiar en los resultados del analizador de gases, y estos se reportan tal como se obtuvieron.

Un problema similar se presenta al analizar la respuesta de la máquina al agente anestésico y comparar la composición deseada con la que determina el monitor. En las figuras 4.5 a 4.9 se puede observar la relación entre el porcentaje de cada agente anestésico utilizado que se espera lograr mediante el sistema mezclador y lo que el monitor de referencia dice que contienen en realidad las diferentes mezclas de agente, oxígeno y óxido nitroso. En todos los casos se puede observar que la respuesta no es lineal y que el agente afecta de diversas formas la composición global de la mezcla. Es notorio que no existe una simple relación directa en la que al aumentar el anestésico disminuye el porcentaje de gas portador en la misma proporción para cada uno de sus componentes, sino que cada uno se ve afectado de diferente forma. Esto dificulta la calibración del sistema mezclador de una forma que va más allá del objetivo principal de esta investigación.

Este fenómeno, de igual manera que el descrito anteriormente, se compensa en este trabajo de forma manual para cada mezcla, aumentando o disminuyendo los niveles de cada gas y agente hasta que el monitor de referencia marca la composición exacta deseada para cada medición. En todo caso, en las mezclas se mantiene siempre una relación directa entre las proporciones de los gases y agentes medidos y esperados, aunque la lectura original antes de compensar difiera un poco, por lo cual no se afecta significativamente el análisis posterior.

5.1.2 Sistema de monitoreo y análisis

5.1.2.1 Respuesta del control de la temperatura del condensador

Como puede observarse en la figura 4.10, la respuesta del sistema implementado en hardware cuyo corazón es el sensor de temperatura LM35 difiere en menos de 1°C de la esperada. La diferencia se debe a la inexactitud de los componentes, incluyendo el mencionado sensor. El conocimiento de este hecho se ha incorporado al software de control de la temperatura para compensar esta pequeña desviación.

Por otro lado, el sistema actuador proporciona una corriente de entre 0 y 2A a través del transistor TIP36, el cual se calienta y transfiere su temperatura al bloque de cobre que contiene al condensador de aspiración. La corriente emisor-colector medida realmente en el transistor se muestra en la figura 4.11. En el software también se ha considerado la forma de la respuesta y se le

han suministrado únicamente voltajes de entrada en la porción lineal que va desde 1.1 hasta 8 volts. Empleando estos voltajes como señal de salida del control difuso, se muestra la temperatura del bloque para dos casos diferentes, mostrados en las figuras 4.12 y 4.13. En primera instancia se reporta la temperatura en ausencia de flujo, y en segunda bajo condiciones de trabajo normales, con un flujo de dos litros por minuto atravesando el condensador. En ambos casos la respuesta del control es óptimamente amortiguada, siendo la principal diferencia que cuando existe un flujo de aire o gas la temperatura tarda más en estabilizarse en el punto deseado, en este caso 40°C. Esto sucede debido a que el aire, aunque ayuda a uniformizar la temperatura en el bloque de cobre, también disipa algo del calor y lo transporta fuera del sensor. Otra diferencia que se presenta es que en presencia de un flujo, una vez lograda la temperatura de operación, el control trabaja con voltajes de salida cercanos a los 4V, la mitad de su rango. Cuando no existe un flujo de aire que ayude a disipar el calor, el voltaje de control se encuentra más cercano a cero, ya que la temperatura se mantiene por más tiempo con mayor facilidad. Por esta misma razón, otro fenómeno que sucede es que existe un mayor rizo cuando no hay flujo, ya que la temperatura tiende a acumularse con mayor facilidad, y tarda más tiempo su disipación.

El tiempo de estabilización de la temperatura deseada es de aproximadamente 7 minutos con 24 segundos para el caso en que existe un flujo, como se explica en la figura 4.13, lo cual puede ser demasiado para uso clínico, pero esto sucede únicamente al encenderse el aparato. Por otro lado, para los propósitos de esta investigación esta característica no tiene importancia.

Comparando el sistema difuso con un controlador simple ON/OFF con flujo de aire como el que se muestra en la figura 4.14, podemos observar que la respuesta de este último es sub-amortiguada y que por tanto tiene un sobre-tiro que dura algunos segundos. Esto causa que el tiempo de estabilización sea mayor. Fuera de esta desventaja, este control es una alternativa atractiva por su simplicidad y porque tiene una respuesta por demás buena y con poco rizo. Sin embargo, la desventaja de un control no inteligente es su poca capacidad para responder rápidamente bajo condiciones diferentes a las ideales (como por ejemplo un bajón o subida de temperatura repentinos, causados por un accidente externo) y para las pruebas realizadas en esta investigación se decidió utilizar el control difuso. En todos los casos, la temperatura no responde instantáneamente a las acciones de control, sino que presenta un retraso, simplemente por las características de esta propiedad física. En el caso del cuerpo de metal del condensador, este retraso puede observarse con mayor claridad debido a que el calentador y el medidor de temperatura se encuentran en diferentes extremos del bloque de cobre y existe por tanto un gradiente notable de temperatura entre ellos. De hecho, el calentador se encuentra además afuera del bloque, mientras que el sensor está adentro, para monitorear mejor la temperatura del gas en el interior. Es este gradiente el que causa un retraso en las señales y acciones del control y es la causa principal del rizo que presenta la señal de temperatura. En condiciones fluctuantes se espera que un control difuso pueda adaptarse mejor que un simple control ON/OFF.

5.1.2.2 Características de la base de datos

5.1.2.2.1 Distribución de las curvas de corriente iónica

La separación de las curvas de acuerdo a su cantidad de oxígeno es difícil de lograr, según se observa en la figura A.6. Existe un gran traslape de curvas de diversos porcentajes, y la forma de las diferentes respuestas es casi la misma. Sin embargo, se observa una cierta tendencia general a que aumente la amplitud de las curvas si aumenta el porcentaje de este gas, aunque esto depende también de los demás componentes de la mezcla gaseosa.

Un comportamiento similar tiene el óxido nitroso, descrito en la figura A.7. En este caso se presenta la misma tendencia general a que la amplitud crezca con la concentración del gas.

El bióxido de carbono, por otro lado, no presenta una tendencia claramente identificable en la figura A.8, tal vez porque no se ha medido más que en tres concentraciones diferentes pero las tres parecen estar distribuidas de forma similar. Se incluyeron solo estos tres porcentajes en la base de datos debido a que un paciente no puede sobrevivir respirando una concentración significativa

de este gas (mayor a 12%), por lo que detectar cantidades altas de CO₂ es más que suficiente para activar una alarma, sin importar su porcentaje específico.

El caso del nitrógeno, representado en la figura A.9, es mucho más claro. Las curvas con un menor porcentaje de este gas tienen en general una amplitud mayor que decrece conforme se aumenta la concentración de N₂ en la mezcla. De forma peculiar, a partir de una concentración del 30%, las curvas se separan visiblemente en dos grupos de amplitud similar, y esta diferencia se nota más en los iones positivos (a la derecha), medidos mediante voltajes positivos de deflexión. La explicación de este fenómeno recae en el tipo de agente anestésico presente en cada grupo. En uno tenemos exclusivamente curvas con desflurano, enflurano, isoflurano y sin anestésico, mientras que en el otro grupo se encuentran las curvas con halotano y sevoflurano. De esta forma, el N₂ se convierte en uno de los criterios más importantes para la posterior identificación de gases y agentes, ya que tiene una distribución marcadamente diferente a los demás gases.

Pasando a la distribución de las curvas por agente anestésico de la figura A.10, podemos de nuevo identificar dos grupos como en el caso de la distribución por N₂. Por un lado tenemos aquellas curvas que contienen desflurano, enflurano, isoflurano o ningún agente, y aquellas que contienen halotano y sevoflurano. El primer grupo se caracteriza por no tener curvas en una franja de la zona de menor amplitud, y pocas en una sección más delgada de la zona de mayor amplitud (de hecho, las curvas con enflurano, y en menor medida con desflurano, carecen de curvas en esta última zona, mientras que las que contienen isoflurano cubren un poco mejor el área). Las curvas de este grupo tienden a tener una amplitud media, efecto más notorio en las curvas que no tienen agente anestésico. Las curvas del segundo grupo se distribuyen mejor a lo largo del conjunto completo, aunque las que tienen halotano tienden a no tener curvas de mayor amplitud, mientras que las de sevoflurano tienen menos con amplitud menor.

Finalmente, la tendencia general de las curvas cuando observamos su distribución por porcentaje de agente anestésico es a ganar amplitud al aumentar la concentración. En las gráficas de la figura A.11 puede verse sin embargo que la diferencia entre distribuciones de curvas con porcentajes cercanos es bastante similar (hecho corroborado por la figura 4.20), lo que dificulta su separación. Esto significa que las curvas presentan una no muy buena respuesta a la concentración de agente anestésico.

5.1.2.2 Distribución de las inversas

En general puede observarse que la distribución total de las curvas para iones negativos se identifica por dos picos principales, siendo el de la derecha el dominante a concentraciones bajas de agente anestésico. Cuando se aumenta la concentración, el pico de la izquierda crece en amplitud mientras que el derecho decrece. Estos no son simples picos como podría detectar por ejemplo un espectrómetro de masas para un elemento o compuesto dado, sino que muestran una cierta varianza que refleja las diferentes agrupaciones iónicas similares formadas alrededor de una central más común. Los dos grupos dominantes en las distribuciones reflejan el hecho de que los iones producto tienen una movilidad mucho más parecida (menor dispersión) cuando presentan una sección transversal más grande (a menor movilidad), y van decreciendo en tamaño y diferenciándose gradualmente conforme se trasladan a movilidades mayores. Estos mismos hechos pueden apreciarse de forma similar en las gráficas para iones positivos, aunque los dos grupos se encuentran más separados y existe un tercero de menor amplitud a la derecha, y que no presenta una buena sensibilidad a cambios de concentración o tipo de agente. De esta forma, y gracias a que los iones que se forman en el condensador de aspiración son en su mayoría electronegativos, la distribución de los iones de carga negativa nos presenta casi siempre una más clara descripción de lo que sucede cuando se modifica la concentración de cada componente de la mezcla.

Examinando en particular la distribución de las curvas según la cantidad de oxígeno que contienen (figuras A.12 y A.13), se aprecia una ligera tendencia general de las curvas a trasladarse de movilidades mayores a menores conforme el porcentaje de O₂ aumenta. Esto significa que el oxígeno favorece en cierta medida la formación de moléculas iónicas más grandes, disminuyendo efectivamente la movilidad. Sin embargo, todas las distinciones entre diferentes porcentajes de este gas portador son sutiles y de acuerdo a él la distribución es relativamente difícil de separar.

En las figuras A.14 y A.15 se muestra la distribución de las curvas según el bióxido de carbono que presentan, y de la misma forma que en el caso de las curvas de corriente iónica, las diferentes concentraciones de este gas se distribuyen de forma muy parecida en el conjunto total de los datos. Esto indica con mayor fuerza que una separación de las curvas de acuerdo al nivel de CO₂ que contienen es por demás una tarea difícil ya que no presenta rasgos claramente definibles.

Pasando a la distribución de acuerdo a la concentración de óxido nitroso, la situación comienza a ser más clara. Al observar las figuras A.16 y A.17 nos damos cuenta inmediatamente que al aumentar el porcentaje de N₂O la movilidad de las curvas tiende a disminuir, lo mismo que la dispersión de las moléculas, causando que el pico principal izquierdo gane amplitud mientras que el derecho la pierde. Este resultado es similar al caso del oxígeno, aunque la tendencia a formar más iones producto de menor movilidad al aumentar la concentración de óxido nitroso está un poco mejor definida.

En contraste tenemos la situación de las figuras A.18 y A.19. El nivel de nitrógeno claramente, incluso mejor que el nivel de óxido nitroso, distingue la distribución de las curvas, ya que es más consistente para todas las distribuciones, sin importar el resto de los componentes de la mezcla gaseosa, aunque lo hace de manera contraria a los casos anteriores. Conforme aumenta la concentración de N₂ los iones producto presentan una mayor movilidad y dispersión, causando una disminución de amplitud en el pico izquierdo y un aumento en el derecho. Esto indica que al contrario del oxígeno, el óxido nitroso, y en una cierta medida el bióxido de carbono, el nivel de nitrógeno en la muestra tiende a desfavorecer la formación de grandes iones producto de baja movilidad, ya que no forma parte de estos conglomerados con facilidad al no ser tan reactivo, y desplaza a los demás gases que en menor concentración no pueden formar estas grandes y pesadas macromoléculas iónicas. En los iones positivos a concentraciones altas se aprecia un poco más la separación en dos grupos, ya discutida en el capítulo anterior, la cual tiene que ver con el tipo de anestésico presente en la mezcla. Es evidente que el N₂ es nuestro mejor parámetro de identificación ya que no solo es relativamente fácil de cuantificar por sí solo, sino que además sirve como un discriminante para el tipo de agente anestésico. Para poder explicar esta particularidad del nitrógeno a la hora de formar macromoléculas iónicas es por supuesto necesario tomar en cuenta su gran estabilidad y poca reactividad, además del hecho de que es este gas el que se utiliza como diluyente para poder aumentar el flujo de las muestras a un litro por minuto.

Refiriéndonos ahora a las figuras A.20 y A.21, la distribución de acuerdo al agente anestésico, encontramos de nuevo que, como revela claramente la separación por nitrógeno, hay dos grupos principales de agentes que se distinguen por su comportamiento, uno correspondiente al desflurano, enflurano, isoflurano y ausencia de agente, y otro al halotano y sevoflurano. En este caso, las inversas presentan diferencias ligeramente más notorias que las curvas de corriente iónica, las cuales ayudan en la distinción de los agentes involucrados, sobre todo si se observan los iones negativos, lo cual es lógico dado que los halógenos presentes en los agentes tienden a formar iones negativos. Los iones producto más grandes y de menor movilidad se generan en presencia de sevoflurano, seguido de cerca por el desflurano. Estos agentes tienen el peso molecular más grande y más pequeño respectivamente (tabla 2.2) de todos los anestésicos utilizados, indicando que no es de acuerdo a esta característica que podemos clasificar la movilidad resultante (aunque por supuesto influye de forma general, ya que las moléculas de anestésico son las de mayor peso y tamaño comparadas con las de los gases portadores). Sin embargo, si existe una característica común, y es que son los dos agentes que contienen flúor como su único halógeno, curiosamente el de menor potencial de ionización. Las distribuciones con mayor movilidad siguientes tienen isoflurano y después enflurano, ambas con flúor y cloro, éste último con potencial de ionización mayor que el flúor. El enflurano presenta macromoléculas de ligeramente mayor movilidad que el isoflurano a pesar de contar con los mismos átomos en su fórmula estructural, aunque el primero presenta su cloro en un extremo, donde puede ionizarse mejor y formar además estructuras iónicas diferentes. Finalmente, con mayor movilidad y una variedad más grande (mayor dispersión) de iones producto relativamente pequeños tenemos al halotano, el cual además de flúor y cloro contiene bromo, de mayor potencial de ionización.

Finalmente, la distribución de acuerdo a la concentración de agente anestésico de las figuras 4.31 y 4.32 nos evoca básicamente la misma conclusión que las curvas de corriente iónica.

Las macromoléculas iónicas formadas en torno a los agentes halogenados tienden a ser las más grandes en una muestra de gas (gracias precisamente a los halógenos que contienen), y al aumentar la concentración del anestésico existe una tendencia general a que estos iones producto se hagan todavía más grandes, aumentando su sección transversal y disminuyendo efectivamente su movilidad, efecto más notorio para la distribución de iones negativos. Sin embargo, para este diseño de condensador en particular, el cambio mostrado de una concentración a otra es ligero y esto inevitablemente causará confusión al intentar identificar los diferentes porcentajes de agente anestésico en una mezcla.

Por último es necesario mencionar que en todas las gráficas para iones negativos es posible identificar una curva solitaria que sobresale de la distribución global (en inglés, un *outlier*). Esta parece ser una curva mal medida, por lo que no debe incluirse en el análisis, y de las mismas gráficas de distribución podemos precisar su composición: 80% O₂, 20% CO₂, sin anestésico.

4.1.2.2.3 Sensibilidad de las curvas de corriente iónica

La repetibilidad de las curvas obtenidas mediante el condensador de aspiración tiene una distribución como la que se muestra en la figura 4.15 y se determinó utilizando la siguiente fórmula:

$$error = \sqrt{\sum_{i=1}^n [desv.est.(repetición.curvas - media.curvas)]^2}$$

En general la repetibilidad es muy buena, deteriorada un poco para un porcentaje muy pequeño de mezclas para las cuales el error de repetibilidad es mucho mayor que para el resto de las curvas. En la figura 4.16 se muestran las tres repeticiones de una misma mezcla que presentaron la mejor precisión, al ser obtenidas en diversos días, bajo diversas condiciones. Por otro lado, en la figura 4.17 se presentan las repeticiones que menos se lograron, hecho particularmente notorio en los iones negativos, en donde siempre es notoria una diferente formación de aglomeraciones iónicas. En este caso, la diferencia entre las curvas no solo es de amplitud, sino de forma también, lo cual nos indica que hubo un cambio de condiciones (temperatura, presión o flujo) mientras la curva en cuestión era obtenida. Esto tiene repercusiones principalmente en las inversas, dado que una pequeña variación en la curva original generará una gran diferencia en la curva de movilidad iónica, aún a pesar de utilizar alguna forma de regularización. Este hecho, junto con algunas pruebas preliminares, ha sido una causa de que en esta investigación no se hayan utilizado al final las inversas para la identificación y cuantificación de los gases y agentes anestésicos, (aunque se incluyen en el trabajo ya que revelan información acerca del proceso de ionización) dado que la cantidad de información que aportan se ve disminuida por el error que genera el nivel de repetibilidad que se logró para el condensador de aspiración, a pesar de que esta precisión es mucho mayor que para versiones anteriores del sensor.

Como se observa en la figura 4.18, la separación de los diferentes porcentajes de agente anestésico tiene una distribución que, junto con los datos de las figuras 4.19 y 4.20, nos dice que en general la identificación de la concentración de un agente anestésico en la mezcla es cuando menos difícil. La fórmula utilizada para calcular la separación en cada grupo formado por curvas de las mismas características y que solo difieren en el porcentaje de agente anestésico es:

$$separación = \sum_{j=1}^m \sum_{i=1}^n |curva(j+1,1:n) - curva(j,1:n)|$$

donde n es el número de puntos de las m curvas. Es decir, es la suma de las áreas entre curvas con porcentajes crecientes adyacentes de agente anestésico. Podemos concluir del resultado que este es un aspecto en el que el diseño del condensador de aspiración propuesto en esta investigación es deficiente si se compara con modelos anteriores [96-99], que presentaban una mayor diferenciación. El problema resultó de haber diseñado el sensor basándonos únicamente en

un modelo de la celda de medición, no dándole suficiente importancia al diseño de la cámara de ionización y las vías de comunicación entre las cámaras, lugares donde se llevan a cabo los procesos de ionización y posterior formación de macromoléculas iónicas.

De forma similar, aunque en escala mucho menor, las figuras 4.21 a 4.23 nos indican que la separación de las curvas de acuerdo al tipo de agente anestésico presente no es ideal, sobre todo para agentes similares, pero que es identificable para un buen número de curvas, y es mejor que la del prototipo anterior. La fórmula utilizada para calcular la separación entre las curvas con diferente agente es la misma que para el porcentaje de anestésico, solo que los grupos están integrados por curvas que presentan las mismas características exceptuando el tipo de agente anestésico que contienen. Así, determinar el tipo de anestésico no parece ser tan difícil, de acuerdo a estas imágenes, como clasificar las mezclas por su porcentaje de agente. Además, recordando la discusión de la sección anterior, sabemos que existen características que facilitan el reconocimiento del agente anestésico (por ejemplo, el nitrógeno ayuda a discriminarlos).

5.1.2.2.4 Sensibilidad de las inversas

Utilizando las mismas fórmulas que para las curvas de corriente iónica, se han determinado algunas características de sensibilidad de las inversas. La repetibilidad, representada en las figuras 4.24 a 4.29, es bastante buena como ya se mencionaba antes, pero las inversas revelan una exagerada sensibilidad a las pequeñas diferencias entre repeticiones. En el caso de la peor repetibilidad para iones positivos vemos que básicamente el error se refleja en la magnitud de los picos, mientras que en el peor caso correspondiente de los iones negativos existen diferencias de forma que causarían sin duda la confusión de una curva con otra de características muy diferentes. Esto es inaceptable, por lo que reiteramos que las inversas no pueden ser usadas aún para la identificación de gases, sino hasta un momento en el futuro cuando se hayan mejorado la repetibilidad de las mediciones del sistema y el modelo usado para calcular la inversa.

Esto es una lástima, ya que bajo mejores condiciones de repetibilidad podríamos obtener una mejor separación de las características. Esto se ilustra claramente en las figuras 4.30 a 4.41, en donde observamos que las diferencias de separación mínimas por tipo y porcentaje de agente anestésico se amplifican, haciendo más sencilla la tarea del reconocimiento de patrones que presentan baja separación en las mediciones sin transformar, eso sin mencionar el caso en el que ya existe una buena separación, en donde no hay duda que estas características podrían identificarse sin problema.

Por otro lado, en estas curvas se observa también que la distribución de las mezclas por el tipo de agente anestésico que contienen no siempre es igual, y la posición relativa de las curvas cambia con la concentración y el portador (los agentes no siempre presentan el mismo orden cuando se grafican los resultados de cada agente en una mezcla del mismo portador).

Por lo que respecta a la distribución por concentración se aprecia que en los iones negativos la movilidad decrece al aumentar el porcentaje de agente, aumentando también el número de iones de cada clase y disminuyendo su dispersión (figura 4.38), como ya comentábamos más atrás. Esto cambia un poco con los iones positivos, en que aunque aumenta la cantidad de iones de cada tipo, es poco notoria la disminución de la movilidad o de la dispersión, y las curvas son similares en forma, aun cuando se separan en amplitud notablemente en una sección (figura 4.41).

5.1.2.3 Aplicación de la reducción dimensional a la base de datos

La manera en que se representan los datos obtenidos mediante el condensador de aspiración influencia la forma en que se disciernen los patrones que se forman y la información que se puede extraer de ellos. Con esto en mente, se aplicaron diferentes métodos de reducción dimensional a los datos obtenidos por el sensor para intentar descubrir una relación más compacta entre las diferentes características de las mezclas que facilitara la tarea del reconocimiento de patrones en una etapa posterior. En versiones anteriores del sistema se había reducido la cantidad de datos primero restándole una línea de base a todos los datos para resaltar sus diferencias y

tomando 12 puntos representativos [96-99] de las nuevas curvas que reflejaran la mayor variación de los datos. Sin embargo, la base de datos en aquella ocasión era muy pequeña y no incluía todos los gases portadores en toda la gama de concentraciones, por lo que en esta ocasión mediante una reducción semejante se perdería demasiada información relevante.

En la figura 4.42 se muestra el resultado de la aplicación del análisis de componentes principales a una de las repeticiones de la base de datos. En esta lámina se grafican los dos mejores componentes que separan los datos de acuerdo a su concentración de nitrógeno, y cada punto representa a una curva. Sin embargo, la separación no tiene porque limitarse a un plano y puede realizarse con mayor eficiencia en un hiperplano de mayor dimensión. Aún así, nos percatamos que utilizando solo dos dimensiones los diferentes porcentajes de N_2 se diferencian de forma espacial, si bien existe un grupo de puntos que se aglomeran al centro del plano, en donde además se encuentran porcentajes de nitrógeno que ya pueden hallarse en otra parte de la gráfica. Es decir, hay por lo menos dos grupos con diferente localización espacial para algunos porcentajes de gas. Esto se debe, como discutíamos previamente, a que cuando se separan las curvas por su concentración de nitrógeno éstas tienden a reflejar la característica de la base de datos de la existencia de dos grupos de agente anestésico con diferentes características, uno que incluye desflorano, enflorano, isoflorano y ausencia de agente, y otro con halotano y sevoflorano.

Lo que hemos hecho con el análisis de componentes principales ha sido realmente transformar linealmente (rotar, escalar, trasladar) el espacio de datos obtenidos mediante el condensador de aspiración al proyectarlos sobre un sistema ortogonal de coordenadas, basándonos en la información de varianza de la distribución, obteniendo la reducción de la redundancia existente en los puntos de las curvas originales y efectivamente recuperando en un compacto espacio de características únicamente la información básica contenida en las muestras. Basándose en la matriz de correlación, mediante PCA se alinean por su varianza los componentes centrados en la media con las direcciones principales que descorrelacionan los datos. Cada componente recuperado de la distribución original es responsable de representar de forma compacta parte del el espacio abarcado por los datos originales, aunque no necesariamente corresponde directamente a una de sus características de composición, sino que puede responder a varias de estas características a la vez, y cada componente ortogonal subsecuente captura la información no presente ya en componentes anteriores, por lo que no se requieren mas que algunos componentes para separar cada gas o agente de la mezcla, efectivamente reduciendo la dimensionalidad de las muestras.

Como se discutirá más adelante, y como se presumía en el capítulo 3, el análisis de componentes principales resulta ser el método de reducción dimensional que mejor permite la identificación de características para los datos del condensador de aspiración. Esto significa que la distribución intrínseca de las características subyacentes es en gran medida lineal y que podemos realmente asumir que esta distribución es aproximadamente normal o Gaussiana, ya que puede ser descrita en términos de sus dos primeros momentos estadísticos (media y varianza), y además que la mayor cantidad de información reside en la varianza de los datos. Esto resulta ser una ventaja ya que el algoritmo de PCA no iterativo (por operaciones matriciales), a comparación de otros métodos de reducción dimensional o extracción de características, es bastante simple y rápido para ser implementado en un prototipo clínico del condensador, y tiene una solución algebraica exacta. Otra ventaja que presenta el utilizar PCA es que el ruido presente en las curvas puede eliminarse en muchos casos ya que al aplicar la reducción dimensional el ruido suele ser relegado a componentes principales de poca información, los cuales se descartan.

En este punto es interesante darle un vistazo a las características de varianza de la transformación PCA resultante. En la figura 5.1 se grafica el porcentaje de la varianza total que retiene cada componente (relacionado con los eigenvalores de la matriz de covarianza de los datos). El primer componente conserva el 94.1% de toda la varianza de los datos, y los siguientes nueve tienen 2.9751%, 2.4127%, 0.1536%, 0.1224%, 0.0864%, 0.0330%, 0.0123%, 0.0060% y 0.0053%, respectivamente. Como se puede observar, después del tercer componente la varianza reflejada por cada nuevo eje ortogonal decae rápidamente. Lo ideal sería tener un componente principal por cada característica observada en el conjunto de datos, pero eso no sucede cuando se utiliza

PCA, a menos que la distribución de trabajo sea *estrictamente* Gaussiana. Es decir, nuestros datos tienen una distribución semejante a una Gaussiana, conclusión apoyada por el hecho de que en análisis de componentes principales funciona tan bien como lo hace comparado con otros métodos, pero no es estrictamente Gaussiana, pues entonces los componentes serían además independientes. En nuestra investigación, cada componente refleja en parte características de cada variable involucrada. Para comprobarlo, en la tabla 5.1 se muestran las mejores correlaciones que tiene cada característica de concentración con los componentes principales. Con esto queda claro que cada componente describe de diferente forma la información correspondiente a varias variables, y que la mayor cantidad de información se resume notablemente en los primeros componentes.

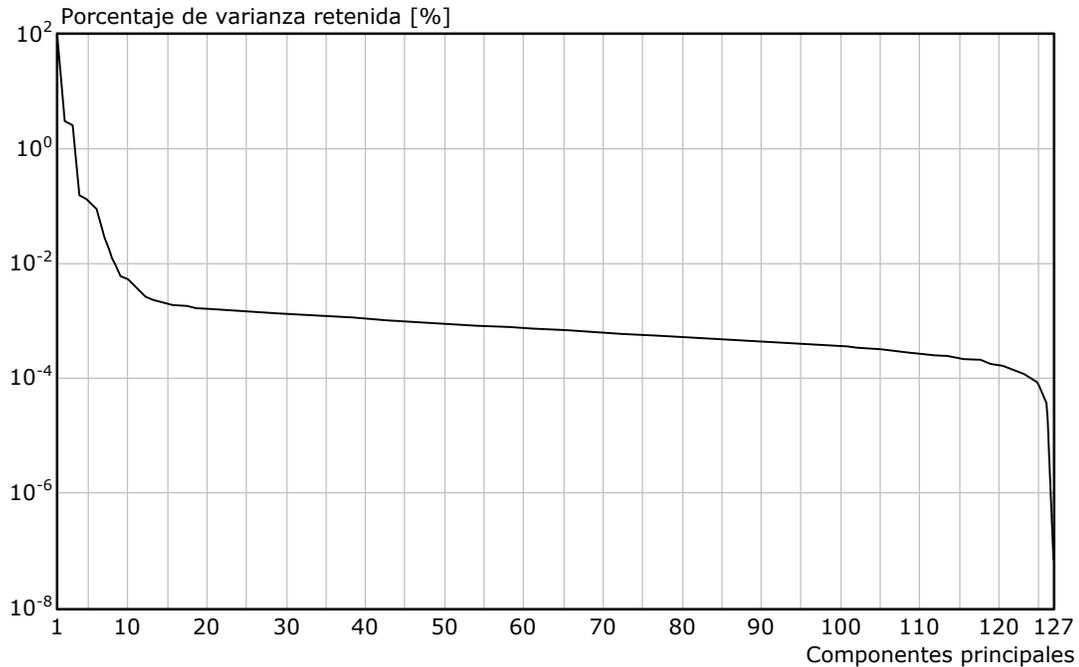


Figura 5.1. *Porcentaje retenido de varianza para cada componente principal al transformar las curvas de la base de datos por medio de PCA, obteniendo un componente para cada uno de los 127 puntos originales de cada curva.*

%N₂	1	0.6525	7	0.3306	3	-0.3235	5	0.1525	9	-0.1483
%N₂O	7	-0.3496	1	-0.3110	2	0.1826	3	-0.1271	6	-0.0990
%O₂	3	0.4657	1	-0.3639	2	-0.2382	4	-0.1754	5	-0.0753
%CO₂	7	-0.1509	5	-0.0924	16	0.0843	9	0.0843	11	-0.0742
AA	2	-0.5363	3	-0.3340	1	-0.1890	7	0.1220	11	-0.1044
%AA	3	-0.5270	1	-0.2844	7	-0.1828	11	0.1500	5	-0.1497

Tabla 5.1. *Correlación que presentan las diferentes características de composición de las mezclas de la base de datos con los componentes principales calculados mediante PCA. Se muestran los cinco componentes (números en negritas) que presentan la mejor correlación con cada una de las características, en orden descendiente. El signo positivo o negativo tan solo indica si la relación es directa o inversa, respectivamente.*

Por ejemplo, en la figura 4.42 se observa que los grupos de nitrógeno van desde baja concentración en la parte inferior de la gráfica hasta concentraciones altas en la parte superior. Este hecho se refleja en la relativamente alta correlación (0.6525) que presenta la concentración de N₂ con el primer componente principal en la tabla 5.1. Sin embargo, debe quedar claro el hecho de que la correlación únicamente indica qué tan similar es el comportamiento de un

componente principal al de una variable o característica, y no sirve para identificar los componentes que mejor sirven para separar los diferentes grupos de acuerdo a una variable o para determinar qué variables se pueden identificar y cuantificar mejor.

Pasando a la figura 4.43, podemos observar que al graficar otro par de componentes principales la separación por tipo de agente anestésico es bastante buena para ser descrita en solo dos dimensiones, y proporciona información adicional para discriminar sobre la información ya contenida en la gráfica anterior. Así, podemos asegurar que la concentración de nitrógeno en una mezcla y el tipo de agente anestésico son características relativamente fáciles de identificar por medio de un sistema de reconocimiento de patrones dado que existe una buena separación a simple vista. En este caso no nos interesa la correlación que puedan tener los datos con el tipo de agente, pues no existe un orden progresivo particular para esta característica, y en realidad lo que importa es la forma de los grupos formados por cada anestésico y su mutua separación, la cual es relativamente buena, sobre todo para halotano y sevofluorano, distribuidos en la periferia de la gráfica. Al centro existe una aglomeración que se separa mejor si se utilizan otros componentes. Nótese también que en esta gráfica es fácil identificar un dato mal colocado (un *outlier*, como señalábamos más atrás, correspondiente a 80% O₂, 20% CO₂, sin anestésico), el único dato marcado como 1 en la parte derecha. Revisando la gráfica para nitrógeno se nota también un poco, pero es de la misma categoría que los datos más cercanos, así es que parecería estar en un lugar no erróneo. En otras componentes este dato es un poco más difícil de identificar.

Si ahora examinamos la distribución de acuerdo al porcentaje de óxido nítrico para otros dos componentes como en la figura 4.44, observamos que las curvas se separan bastante bien, aunque tal vez un poco menos que para las características ya discutidas, pero igual que en todos los casos otros componentes añaden información que puede utilizarse en la discriminación de cada grupo. La concentración parece crecer en esta gráfica en forma casi diagonal, de derecha a izquierda y de arriba hacia abajo, hecho que se refleja en la similar correlación de la tabla 5.1 para los componentes 1 y 7.

La distribución del oxígeno, mostrada en la figura 4.45, claramente muestra cómo con solo dos componentes es posible obtener una clara separación entre grupos de concentración para este gas. También presenta una distribución de la concentración en diagonal, desde arriba a la izquierda hacia abajo a la derecha, de acuerdo a la correlación de la tabla 5.1.

El caso del bióxido de carbono (figura 4.46) es un poco más crítico, porque los 3 porcentajes de concentración se distribuyen casi de forma uniforme en toda la gráfica, lo que sin duda dificultará su separación. Adicionalmente, en la tabla 5.1 se puede apreciar que en realidad no hay ningún componente principal que presente una buena correlación con la distribución de CO₂.

Finalmente, la distribución de los diferentes porcentajes de agente anestésico presentan algo de separación en la figura 4.47, así como una tendencia a tener porcentajes mayores del lado izquierdo de la gráfica, y menores a la derecha (hecho que se ve reflejado en el relativamente alto valor de correlación con el tercer componente mostrado en la tabla 5.1), pero sobre todo para porcentajes medianos de anestésico la distribución es un poco más caótica en el centro.

Partiendo del hecho de que la característica que se identifica con mayor facilidad en los datos es la concentración de nitrógeno, con reducción dimensional por PCA o sin ella, utilizaremos esta para describir brevemente el desempeño de otras técnicas de reducción dimensional con que se experimentó a lo largo de esta investigación. En primer lugar se muestra en la figura 4.48 el resultado de la aplicación del análisis de componentes independientes a la base de datos. Puede apreciarse claramente cómo este algoritmo separa los diferentes porcentajes a lo largo de una recta en donde se aísla cada grupo. El problema es que aunque separa las medias intragrupalas (aumentando la varianza entre grupos), al mismo tiempo reduce la varianza dentro de cada grupo. ICA no logra identificar características independientes en los datos que correspondan directamente a las características de composición de la base de datos. Casi todas las componentes se separan principalmente por N₂ y de manera gradualmente más difícil por las demás características. De los 127 componentes independientes totales, 113 de ellos tienen una correlación con el nitrógeno mayor a 0.5 en valor absoluto, y ésta llega a tener una magnitud de 0.7273. Algo similar sucede para las demás características. Queda claro que el problema es que nuestras variables son estadísticamente dependientes y no separables como si provinieran de

fuentes independientes (al aumentar la concentración de una, otra debe disminuir), lo que causa que la reducción dimensional no sea tan eficaz para estos datos como la realizada mediante PCA.

El resultado del análisis por discriminante lineal se muestra en la figura 4.49. Este resultado obtenido para nitrógeno es muy similar al obtenido mediante PCA (figura 4.42). Uno de los problemas de LDA es que requiere un gran número de operaciones de mayor complejidad que PCA y se necesita almacenar una matriz de transformación por cada una de las características a identificar. Esto redundaría en mayores requerimientos de procesamiento y memoria para el sistema de identificación y cuantificación. Además, el resultado obtenido para las demás variables no supera aquel obtenido mediante PCA. El principal problema de LDA es en este caso que asume que la mayoría de la información acerca de las diferentes clases está contenida en el primer momento estadístico de cada clase. Si la media de diferentes clases es similar, cosa que al parecer sucede en los datos del condensador de aspiración para algunas variables, entonces LDA produce un resultado pobre.

Estudiando otras transformaciones no-lineales para realizar la reducción dimensional, encontramos una de las más recientes e interesantes, ISOMAP, cuyo resultado se muestra en la figura 4.50. Este algoritmo promete preservar la topología espacial de los datos bajo ciertas condiciones de los datos, difíciles de asegurar en cualquier caso. La peculiar distribución de los datos en la gráfica es bastante interesante ya que muestra estructuras que concuerdan con las diferentes concentraciones de nitrógeno. Sin embargo, ISOMAP, al igual que diversos algoritmos similares basados en el escalado multidimensional, tiene varios inconvenientes. Los cálculos son lentos, complicados y requieren de mucha memoria para los datos, y por si fuera poco, se necesita proporcionar el tamaño de la dimensión subyacente que se desea encontrar. Esto no es sencillo, y como veremos más adelante, varía de acuerdo a la característica bajo estudio. Además con el algoritmo ISOMAP clásico, una vez hecho el análisis no se puede encontrar la transformada de datos nuevos (esencial para nuestra investigación). Nuevos desarrollos atacan este problema, pero requieren mayores cálculos. En todos estos aspectos PCA es mucho más conveniente y funciona mucho mejor que esta técnica.

Finalmente, en la figura 4.51 se muestra el resultado obtenido de aplicar el algoritmo de empotramiento localmente lineal a nuestra base de datos. Esta técnica promete también conservar la estructura espacial de los datos para casos en que no se cumplan algunos requerimientos de ISOMAP, pero el desempeño es para nuestra investigación mucho más pobre que el de aquel, con el cual comparte varias desventajas. Por si fuera poco, salvo en un número pequeño de datos, existe una muy confusa aglomeración de la mayoría de las muestras al centro de la gráfica que no es fácil de separar bajo ninguna circunstancia, siendo que el nitrógeno es fácilmente separable usando otras técnicas.

5.1.2.4 Redes neuronales para la identificación y cuantificación

Un concepto que ha mejorado notablemente el desempeño de las redes neuronales utilizadas en esta investigación ha sido la introducción del concepto de *subclasificación no supervisada intragrupal*. El agrupamiento mediante un algoritmo de clasificación, en este caso fuzzy-C means, particiona el espacio de cada característica para adaptarse a la distribución que presenta cada una. Esto es útil e incluso necesario cuando se trata de los datos obtenidos mediante el condensador de aspiración, en donde varias clases que se desean identificar presentan por lo menos dos clusters o agrupamientos en diferentes lugares del espacio de componentes principales. El dividir el aprendizaje de cada grupo en subgrupos ayuda a que la red neuronal pueda generar hipersuperficies de decisión que permitan identificar mejor cada característica de las mezclas. Además, la posterior integración de cada decisión tomada para los subgrupos acerca del grupo en cuestión disminuye la probabilidad de cometer errores al identificar una característica como no perteneciente a él a pesar de serlo. El número de subclusters en los que debe dividirse cada característica para su correcta identificación es, sin embargo, un parámetro que debe ajustarse a través de la prueba y el error o a través de algún heurístico [127], ya que es imposible concebir la distribución multidimensional en que se forman los grupos de datos.

Los resultados obtenidos para la red diseñada sin información adicional de la cantidad de O₂ y CO₂ presentes en la mezcla demuestra lo que se ha observado en los ya discutidos análisis de dispersión de curvas de corriente iónica, inversas y datos procesados mediante el análisis de componentes principales. La concentración de nitrógeno es la característica que se puede identificar con mayor precisión mediante un sistema de redes neuronales, y el 94.9821% de los datos de prueba pudieron identificarse correctamente después de haber entrenado la red con la porción de las mezclas escogidas para el entrenamiento. Para esta primera red se emplearon solo 9 componentes principales (una reducción dimensional bastante importante si consideramos que las curvas originales tienen 127 puntos) y cada clase se dividió en solo 3 subgrupos. Esto significa que existe un subgrupo más de los que pueden apreciarse a primera vista en la figura 4.42, y que esta separación es más notoria en algún otro componente principal no graficado (aunque puede notarse un poco a concentraciones medianas en la gráfica). Esta red neuronal resulta ser entonces bastante compacta y efectiva. En la matriz de confusión de la tabla 4.2 se puede observar como generalmente los errores de cuantificación suceden en porcentajes vecinados a los identificados, pero llama la atención el hecho de que en algunos casos existen confusiones entre porcentajes alejados entre sí, como por ejemplo en la última columna, donde 2 mezclas han sido identificadas como conteniendo el 10% de nitrógeno cuando en realidad contenían el 80%. Refiriéndonos a la figura 4.42, podemos observar que la aglomeración de miembros de todas las concentraciones al centro de la gráfica hace difícil la identificación de cada una, y sin embargo el total de errores es pequeño a comparación del total de los datos apelmazados. Esto significa que existe separación suficiente de cada grupo en otras dimensiones (componentes independientes) para su correcta clasificación, pero que existen datos muy cercanos a las fronteras de decisión y éstos son los que causan problemas. Además, significa que estas fronteras no siempre ocurren entre porcentajes contiguos, sino que lo hacen en ocasiones con cualquier otra concentración posible.

El tipo de agente anestésico es la siguiente característica que se puede identificar con cierta facilidad (91.0394%). La red utilizada para este propósito es un poco más complicada que la red anterior ya que requiere de 15 componentes principales, lo cual significa que la información para la discriminación del anestésico se encuentra más dispersa o es menos clara, y se emplea como información adicional el resultado de la concentración de nitrógeno, la cual, a pesar de contar con algunos errores (ya que el porcentaje de reconocimiento en la prueba es del 94.9821%) añade suficiente información como para ignorar ese pequeño error que introduce, logrando una mejor identificación del tipo de agente anestésico que si estos datos no se emplearan. Además cada clase se separó en 6 subgrupos, lo que quiere decir que en este hiperespacio de 15 dimensiones existe una distribución mucho más complicada de los datos para distinguir por tipo de anestésico.

Al igual que se discutió en el caso del nitrógeno, esta complejidad recae principalmente en aquellas mezclas cercanas al centro de la nube de datos, donde existe una gran aglomeración. En este caso los agentes que han sido identificados con mayor precisión han sido el halotano (95.9259%) y el sevoflurano (94.8148%), lo cual se espera con solo observar la figura 4.43, donde las mezclas de estos agentes se registran bastante bien separadas alrededor de la nube de datos central, ya que como comentábamos antes, estos anestésicos tienen estructuras moleculares muy diferentes a los otros tres (tabla 2.2). El halotano es el único anestésico que es un etano halogenado y contiene bromo, halógeno que ningún otro agente posee, mientras que los otros son éteres halogenados. De entre estos, el sevoflurano posee la molécula más compleja. El otro agente que se observa de forma importante en la periferia es el isoflurano (reconocido al 90.3704%), pero éste presenta una zona considerable de contacto con la confusión central. Aunque desflurano, enflurano e isoflurano tienen una fórmula estructural similar y son éteres compuestos de radicales metilo y etilo halogenados unidos por un átomo de oxígeno, el isoflurano es el que presenta diferencias más significativas, a pesar de que tiene el mismo peso molecular que el enflurano, y esto se debe a que el carbono exterior de su radical etilo tiene flúor en sus tres enlaces (igual que el desflurano) y átomos de cloro e hidrógeno unidos al carbono que se une al enlace central de oxígeno de la molécula, a diferencia del enflurano, que tiene estos últimos en el carbono exterior. Así, el desflurano presenta una similitud con el isoflurano (los tres átomos de flúor), pero la gran diferencia es que el único halógeno que contiene el primero es el flúor, con el más bajo potencial de ionización de los halógenos en los anestésicos empleados, mientras que el

enflurano y el isoflurano tienen además cloro, de mayor potencial. De esta forma el desflurano se identifica mejor que el enflurano (90.3704% contra 85.1852%), lo cual resalta la importancia de la presencia de los 3 átomos de flúor conectados al extremo del radical etilo. Todo esto refleja el hecho de que no es tanto el peso molecular lo que afecta a las mediciones realizadas con el condensador de aspiración, sino la estructura, la naturaleza de los enlaces y el potencial de ionización, así como la manera en que se forman las macromoléculas iónicas.

Observando la matriz de confusión de la tabla 4.3 para determinar con qué gases suceden los pocos errores existentes, nos encontramos que una muestra con sevoflurano se identifica erróneamente como si tuviera halotano o desflurano más que cualquier otro agente. Una con isoflurano se confunde en ocasiones como conteniendo desflurano (como se esperaba). Una mezcla con halotano se confunde de igual manera con todos los anestésicos o su ausencia. El contenido de desflurano se confunde a veces con el de isoflurano y el de enflurano. La ausencia de agente se confunde con el contenido de enflurano principalmente. Finalmente, es definitivamente el contener enflurano y confundirlo con desflurano el caso más común de error. Así, el agente más identificado erróneamente como componente en una mezcla es el desflurano con 48 casos, le siguen el enflurano y el halotano (17 casos), el isoflurano (16 casos), el sevoflurano (15 casos) y la inexistencia de agente anestésico (12 casos).

La red neuronal para óxido nitroso, a pesar de que este gas se identifica con una precisión solo menor a la de la concentración de nitrógeno y al tipo de anestésico cuando no se utiliza una estructura del sistema en cascada, resulta ser menos efectiva que la del oxígeno al utilizar salidas de redes anteriores como entrada a comparación de cuando se intenta la identificación independiente. El número de componentes principales utilizado en este caso es de 16, mientras que se divide cada uno de los seis grupos de concentración a identificar en 10 subclases. El reconocimiento de los patrones de prueba logrado al emplear como entrada adicional la salida de las redes para el nitrógeno y el tipo de agente (los cuales tienen suficiente información como para ignorar los errores en cascada que se generan) es menor al 90% (88.9606%), lo cual se debe nuevamente a la aglomeración de mezclas al centro de la distribución.

El porcentaje de oxígeno se ve beneficiado más por las salidas de las redes anteriores que el óxido nitroso, y aunque para redes no conectadas en cascada (independientes) el óxido nitroso es más fácil de cuantificar, al usar datos de redes previas (N_2 , N_2O y tipo de agente) mejora notablemente el desempeño para el primero. Utilizando 18 componentes principales y 6 subgrupos para cada una de las 5 clases en que se dividió el porcentaje de oxígeno, así como la información en cascada, se logra un porcentaje de identificación para los datos de prueba de 90.3943%. En este caso, la matriz de confusión de la tabla 4.5 muestra una mayor coherencia en los errores en el sentido de que es más probable la confusión de un porcentaje de concentración con otro cercano que con uno lejano. Lo mismo sucede en general para los demás gases, pero como ya se mencionó, existen casos aislados para nitrógeno y óxido nitroso donde eso no siempre se cumple.

El bióxido de carbono, como se esperaba, es de los gases portadores el más difícil de identificar correctamente, aunque a pesar de ello la red neuronal logra generar hipersuperficies no lineales de decisión que producen una identificación de los datos de prueba del 86.595%. Esto es sorprendente porque a simple ojo no se encuentra forma alguna de separar estos datos. Sin embargo son necesarios 18 componentes principales para que la red logre esto, y cada uno de los tres grupos de porcentajes de CO_2 deben dividirse en 20 subclases, por lo que podemos concluir que en 18 dimensiones se identifican pequeños y numerosos grupos en torno a los cuales se agrupan los datos de acuerdo a este gas.

La última red en cascada de este primer sistema de identificación es para el porcentaje de agente anestésico de la muestra, y es aquí donde las cosas se ponen extremadamente difíciles, de acuerdo a lo que ya hemos discutido en secciones anteriores: este prototipo del condensador de aspiración no tiene una buena separación entre curvas con diferente porcentaje de agente. Esto se ve reflejado en un pobre desempeño de la cuantificación del anestésico, el cual es de solo 74.1219%, muy por debajo del obtenido para las demás características. Inclusive la información adicional a la salida de las demás redes no es suficiente para mejorar este resultado, y es que algunos resultados contienen en este punto suficientes errores en cascada como para aportar poca información extra. Aún cuando hubiera mejor información, las curvas simplemente no se

separan lo suficiente como para identificar su porcentaje de agente, y en muchos casos están tan pegadas que se confunden entre sí. Sin embargo, el resultado está muy lejos de ser un simple resultado aleatorio (con 10 clases diferentes, se esperaría un resultado aleatorio del 10% de identificación correcta).

Por otro lado, si se tienen equipos de medición de oxígeno o bióxido de carbono de cualquier tipo en un laboratorio o quirófano, se puede contribuir con esta información adicional para el mejor desempeño del prototipo actual del condensador de aspiración. Con estos datos se puede aumentar la identificación del nitrógeno hasta un 97.5627% (una mejoría de 2.5806%), la de óxido nitroso hasta 97.9928% (logrando una mejoría de 9.0322% y superando la identificación de N_2 , posiblemente por la relación directa que el O_2 y el N_2O tienen con la concentración y que el conocer de antemano la concentración de oxígeno aporta), y la de tipo de agente anestésico hasta 94.1219% (ganando 3.0825%). El reconocimiento del porcentaje de agente anestésico sigue bajo, lo cual no nos sorprende, dado lo que ya se ha comprendido acerca de este prototipo, aunque existe una mejoría notable de 2.1505%, llegando hasta 76.2724%. Es claro entonces que el conocimiento de la concentración de dos de los gases con estructuras moleculares que contienen oxígeno (O_2 y CO_2) ayuda de forma dramática a la cuantificación correcta del gas restante (N_2O), la cual es con mucho la más beneficiada. En el apéndice A.2 se dan algunos detalles más específicos de cómo se realizó la implementación de estas redes en la práctica.

VI CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES

A lo largo de esta investigación se ha diseñado, construido y evaluado el nuevo prototipo de un condensador de aspiración, así como los sistemas de soporte necesarios para cumplir con este objetivo. El sistema es de construcción relativamente sencilla y económica, por lo que se espera poder generar en el futuro un prototipo con características de uso clínico para que el monitoreo de anestesia se convierta en una práctica de rutina aún en aquellos centros de salud donde, por los elevados costos de los sistemas utilizados para este fin, esto ha sido prohibitivo hasta ahora.

En particular se cubrieron varias tareas para cubrir las necesidades de esta investigación. Se diseñó y construyó un sistema automático mezclador de gases y agentes anestésicos para generar muestras gaseosas que contuvieran diferentes concentraciones de gases (N_2 , N_2O , O_2 , CO_2) y agentes anestésicos (desflurano, enflurano, halotano, isoflurano, sevoflurano) a fin de evaluar el comportamiento del sensor propuesto para cada una de ellas. Este sistema cuenta con un control de presión realizado con lógica difusa, el cual ha sido implementado en la forma de una red neuronal, lo cual permite ahorrar espacio y reducir el tiempo de cada ciclo en el lazo de control de la máquina.

Este sistema tiene un buen desempeño a nivel experimental, pero debe mejorarse aún para convertirse en una máquina automática dosificadora de anestesia para uso clínico, ya que en esta investigación solo se desarrolló hasta el punto necesario para la consecución del objetivo principal. Concretamente se requiere trasladar el software del sistema a un equipo con mayor capacidad de memoria, ya que se presentaron limitantes al implementar el control de lógica difusa para la presión compartiendo el mismo espacio de 64 Kbytes que las variables y el software de control del proceso de mezclado y dosificación. Esto permitirá mantener un flujo de salida con menores fluctuaciones y más constante de mezcla a mezcla.

En el futuro se requiere además la implementación de sensores de temperatura y presión ambientales que suministren información al sistema sobre estas variables para que sea capaz de auto-calibrarse y compensar mediante sus flujómetros los cambios de densidad en los gases que se manejan, a fin de mejorar la precisión en la composición de las mezclas que se requieran. En esta investigación la compensación se hizo a mano, basada en las lecturas proporcionadas por un monitor clínico de anestesia utilizado como referencia para este fin, por lo que el sistema no es aún completamente automático.

Es necesario además el reemplazo de algunos componentes (flujómetros, vaporizadores) porque además de no contar con una calibración óptima, ya han tenido un largo tiempo de vida útil (superior a los 12 años) que ha degradado su desempeño.

El nuevo prototipo del condensador de aspiración se diseñó desde cero basado en el modelo matemático de la celda de medición desarrollado en una investigación previa [104,111]. Se diseñó el cuerpo del sensor y se construyó en cobre, mientras que la celda de medición y toda la electrónica se implementaron sobre tarjetas impresas. También se creó software para el control del sensor, el cual se implementó en LabView 4 para Windows. Todas las herramientas de manipulación de la base de datos, visualización y reconocimiento de patrones se implementaron en varias versiones de MATLAB, con apoyo de NeuralWorks Pro II para el entrenamiento de las redes neuronales.

Se diseñó y construyó además un control difuso de temperatura para el bloque de cobre del sensor, a fin de mantener constante la temperatura en el interior, donde se lleva a cabo el proceso de ionización y agrupamiento de moléculas. Una temperatura elevada, en este caso de 40° , permite que estos procesos se lleven a cabo de forma más eficiente. El control diseñado no es muy rápido para el calentamiento inicial, pero mantiene adecuadamente la temperatura durante la operación del sensor, y es una de los factores que ha influido para mejorar la repetibilidad de las mediciones. Sin embargo, en el futuro este control podría optimizarse haciéndolo completamente independiente del software del sistema, tal vez implementándolo en un circuito dedicado.

Mediante el condensador de aspiración y el sistema mezclador de gases se obtuvo una base de datos con 1395 muestras diferentes, cada uno realizada en 3 ocasiones bajo diferentes condiciones para caracterizar la repetibilidad del aparato, la cual resulta ser mejor que para prototipos anteriores [99], pero aún requiere trabajo. Para mejorar la repetibilidad se requiere la implementación de un control de presión que regule mejor el flujo de entrada al condensador, el cual no es completamente uniforme en este momento, debido a fluctuaciones en la bomba de aire utilizada, la cual también tiene años de uso y debe ser reemplazada. Una mayor repetibilidad permitirá en el futuro la utilización de las inversas de cada curva, obtenidas mediante el modelo matemático de la celda de medición, para determinar las características de las mezclas en el dominio de la movilidad iónica y mejorar su identificación y cuantificación.

El modelo matemático en sí presenta ciertas simplificaciones en el comportamiento de los iones y su interacción dentro de la celda, y algunos procesos de segundo orden deben ser tomados en cuenta para mejorarlo. El análisis de los datos obtenidos ha permitido describir el comportamiento del sensor ante una gran variedad de mezclas que pueden ocurrir bajo condiciones clínicas. Gracias a este estudio se ha puesto de manifiesto la necesidad de modelar no solo la celda de medición, sino también la cámara de ionización y los pasajes que los comunican entre sí, ya que los procesos de ionización y formación de macromoléculas iónicas también dependen del tiempo de duración de cada uno y de las dimensiones del espacio en que ocurren, así como de la temperatura y el flujo del gas, y el efecto de todas estas variables ha afectado los resultados de forma inesperada. Los datos obtenidos al analizar las mediciones del condensador de aspiración diseñado muestran una disminución en la resolución del porcentaje de agente anestésico medido en cada mezcla, a comparación del prototipo anterior [99], el cual diferenciaba claramente esta concentración en la mayoría de los casos observados. Por otro lado, otras características dependientes del modelo, en particular aquellas que dependen de las características de la función G , como la resolución para el tipo de anestésico, han sido mejoradas en este nuevo prototipo, permitiendo discernir mejor el agente halogenado en uso en un momento determinado. Otra consecuencia de mejorar el modelo es que las inversas reflejarán mejor lo que sucede en el dominio de la movilidad iónica.

Por lo que respecta a los gases portadores, se ha comprobado que el condensador de aspiración es sensible a la concentración de oxígeno, nitrógeno, óxido nítrico y, en menor medida, de dióxido de carbono, únicos gases analizados en este estudio. En casi la totalidad de los casos se ha demostrado que los espectros son reproducibles, únicos y característicos para cada mezcla gaseosa. Como se menciona, existen problemas de resolución para la concentración de agente anestésico, pero ese problema es particular a este condensador, ya que se demostró en un prototipo anterior que las curvas con diferente porcentaje de estos químicos se diferencian con relativa facilidad.

Por lo que respecta al análisis de los datos, se utilizó un procedimiento alterno para encontrar las inversas de las mediciones – la descomposición en valores singulares truncada (TSVD) – un método de regularización e inversión que nos permite obtener mejores resultados y disminuir la rigidez de las condiciones que deben cumplirse para la existencia de la inversa. Aunque este método funciona bien, todavía nos falta información para saber qué partes de la inversa son genuinas y cuáles son datos espurios resultado del proceso de regularización.

Además, se aplicó por primera vez la reducción dimensional analítica – en la forma de un análisis de componentes principales (PCA) – a los datos obtenidos mediante un condensador de aspiración. Este procedimiento ha demostrado poner de manifiesto la información esencial contenida en las curvas generadas para cada mezcla de gases y agentes anestésicos, de forma que su posterior identificación y cuantificación sea más simple y efectiva. Otros métodos de reducción dimensional y extracción de características fueron probados, pero no se obtuvo un mejor resultado. Las suaves curvas de corriente que proporciona el sensor, resultado de la transformación de Tammet a través del Kernel suavizante de la función G , resultan tener una distribución aproximada a la Gaussiana, en donde son de importancia relevante los dos primeros momentos estadísticos, en particular la varianza. Estas características hacen que la extracción de características por el método de componentes principales sea el más adecuado.

Este preprocesamiento ha puesto de manifiesto que el nitrógeno es el parámetro más importante para el reconocimiento de los datos, ya que se comporta de forma diferente a los demás gases al desfavorecer la creación de macromoléculas iónicas demasiado grandes conforme aumenta la concentración de agente anestésico. Sin embargo, es probable que como efecto no deseado, el nitrógeno es el causante de la disminuida resolución del sensor en cuanto a porcentaje de agente anestésico. Este efecto puede investigarse utilizando otro gas de arrastre en lugar de nitrógeno. En todo caso, se espera que el nitrógeno existente en la muestra siga siendo un factor importante de discriminación.

El procesamiento previo de los datos mediante PCA también permitió la creación de un sistema de redes neuronales en cascada que resulta ser relativamente compacto (se utilizan como máximo 18 componentes principales, en lugar de los 127 puntos de cada curva) y que tiene un resultado bastante aceptable, el cual indica de forma inequívoca que el condensador de aspiración es sensible a diferentes concentraciones de los gases portadores y agentes anestésicos, aunque este aparato en particular tiene menor sensibilidad al porcentaje de agente que prototipos anteriores.

Un fenómeno interesante que se observa en las curvas de corriente iónica, y que PCA remarca, es que existen dos grandes grupos en los que se separan los datos y que tiene que ver con el agente anestésico en uso en la muestra. Por un lado se tiene un grupo de curvas con desflurano, enflurano, isoflurano o sin anestésico, y por otro un grupo de curvas con halotano y sevoflurano. Es particularmente relevante que el halotano y el sevoflurano tienen estructuras moleculares diferentes a los otros 3 agentes y entre sí. Esto ha permitido que el tipo de agente anestésico presente en la muestra sea la segunda característica en facilidad de identificación.

El sistema de redes neuronales de retropropagación clásica ha sido modificado para incluir un esquema de *subagrupamiento intracalse no supervisado*, el cual ha permitido mejorar el desempeño al tomar en cuenta que las diferentes características a identificar para este sensor no forman grupos únicos, sino que existen grupos que presentan dos o más secciones en diferentes partes del hiperespacio en que coexisten.

Es necesario recalcar que como tarea principal en el futuro será necesario, mejorar el modelo del sensor al incluir una descripción de los procesos de ionización y formación de macromoléculas iónicas y su influencia en las mediciones, a fin de mejorar la resolución para todas y cada una de las variables a identificar y cuantificar. Para ello sería ideal el diseño de un prototipo con cámaras intercambiables, mediante el cual se pudieran comparar diferentes diseños sin tener que construir para cada uno de ellos un condensador completo. Las celdas de medición podrían construirse de una sola pieza en cerámica, para que los electrodos siempre estén en la misma posición y a la misma distancia (en este momento existe la posibilidad de que no sea así por la forma en que se construye, y por el Teflón, material comprimible que se utiliza para separar las placas). Este análisis debe hacerse además a diferentes temperaturas y flujos para determinar el rol de estas variables en el proceso de enlace de iones. De la misma manera, debe probarse el desempeño de otro gas como diluyente, como ya se ha propuesto. En este prototipo se utilizó nitrógeno debido a sus propiedades de no-reactividad, pero es necesario conocer el papel que podría jugar el oxígeno, ya que este gas se encuentra disponible de forma rutinaria en un quirófano, y el nitrógeno no. Además, es posible que el nitrógeno sea el responsable de la falta de resolución en cuanto al porcentaje de anestésico.

Para terminar, se menciona que existe la posibilidad de que al aumentar la sensibilidad a la concentración de agente del sensor cambiando su geometría o el gas portador disminuya a su vez la sensibilidad del condensador a otra característica, y se tenga que llegar a un compromiso de diseño. En este caso se propone la creación de un prototipo con dos o más celdas de medición en paralelo, a diferentes distancias de una cámara de ionización común y diseñadas para tener una sensibilidad particular a diferentes atributos del gas. De esta forma se obtendrán mediciones que pueden compararse entre sí, y la información combinada y diferencial ayudará a caracterizar mejor los gases analizados.

APÉNDICE

A.1 Sensibilidad del condensador de aspiración al flujo del gas diluyente

En la investigación se realizó una serie de mediciones de un conjunto de mezclas de gases y agentes anestésicos utilizando una dilución de nitrógeno a un litro por minuto. Para determinar la variabilidad de la respuesta cuando este flujo cambia se ha propuesto la medición adicional de algunas curvas a diferentes flujos de portador. Para ello se utilizó una mezcla de óxido nítrico al 75% y oxígeno al 25% a la cual se le añadió un 2% de enflurano. Usando un medidor de flujo electrónico como referencia, se fijó el flujo del nitrógeno diluyente a cinco valores diferentes (800, 850, 900, 950 y 1000 mili-litros por minuto) y en cada caso se tomó una lectura con el condensador de aspiración. Los resultados obtenidos para este pequeño estudio se presentan en la figura A.1.

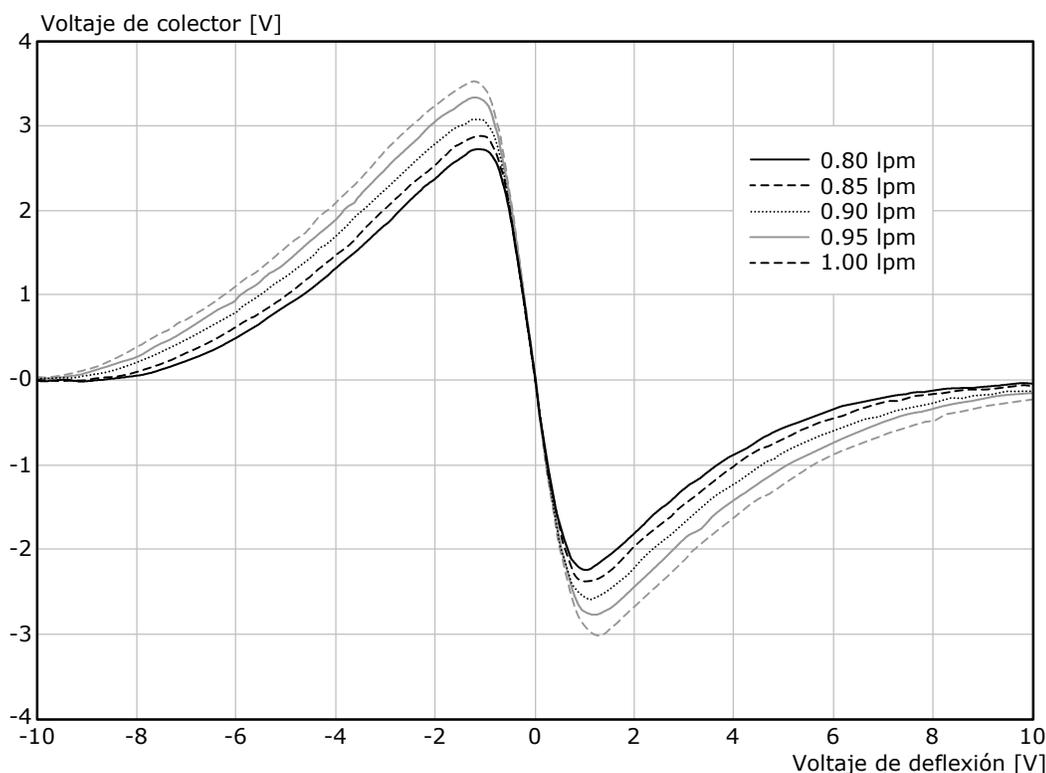


Figura A.1. Estudio de sensibilidad al flujo del gas diluyente. Las curvas obtenidas corresponden a una mezcla de 75% N_2O y 25% O_2 , con un 2% de enflurano. Se utilizaron cinco diferentes flujos desde 800 mlpm hasta 1 lpm de nitrógeno como diluyente.

Este resultado demuestra una variación que concuerda con la descrita en la investigación en la cual se desarrolló el modelo matemático de la celda de medición del condensador de aspiración [104,111], lo cual ayuda a validarlo. La sensibilidad en amplitud de las curvas corresponde a un crecimiento pico a pico promedio de 7.2207% aproximadamente por cada 50 mili-litros por minuto. Haciendo una estimación, esto significa que para mantener una curva dentro de un rango de amplitud que no varíe en más de uno por ciento pico a pico, el flujo diluyente debe mantenerse dentro de una variación máxima de aproximadamente +/- 6.9245 mili-litros por minuto. En el futuro, este flujo debe ser mantenido mediante un regulador de flujo digital

controlado por el sistema de control del condensador, con el cual no se contó en esta investigación. En este caso el flujo se mantuvo mediante un regulador manual que formaba parte del sistema mezclador de gases, ya que solo se disponía de esa facilidad.

Si utilizamos la misma matriz de transformación calculada para el análisis de componentes principales mediante el cual se obtuvieron los resultados de la sección 4.1.2.3, podremos conocer como se distribuyen en este espacio los datos de acuerdo a su flujo. Sin embargo, hay que tener en cuenta que en el cálculo de esta matriz no se tomaron en cuenta datos con flujos diferentes, por lo que los componentes principales no contienen información que refleje en principio esta variable.

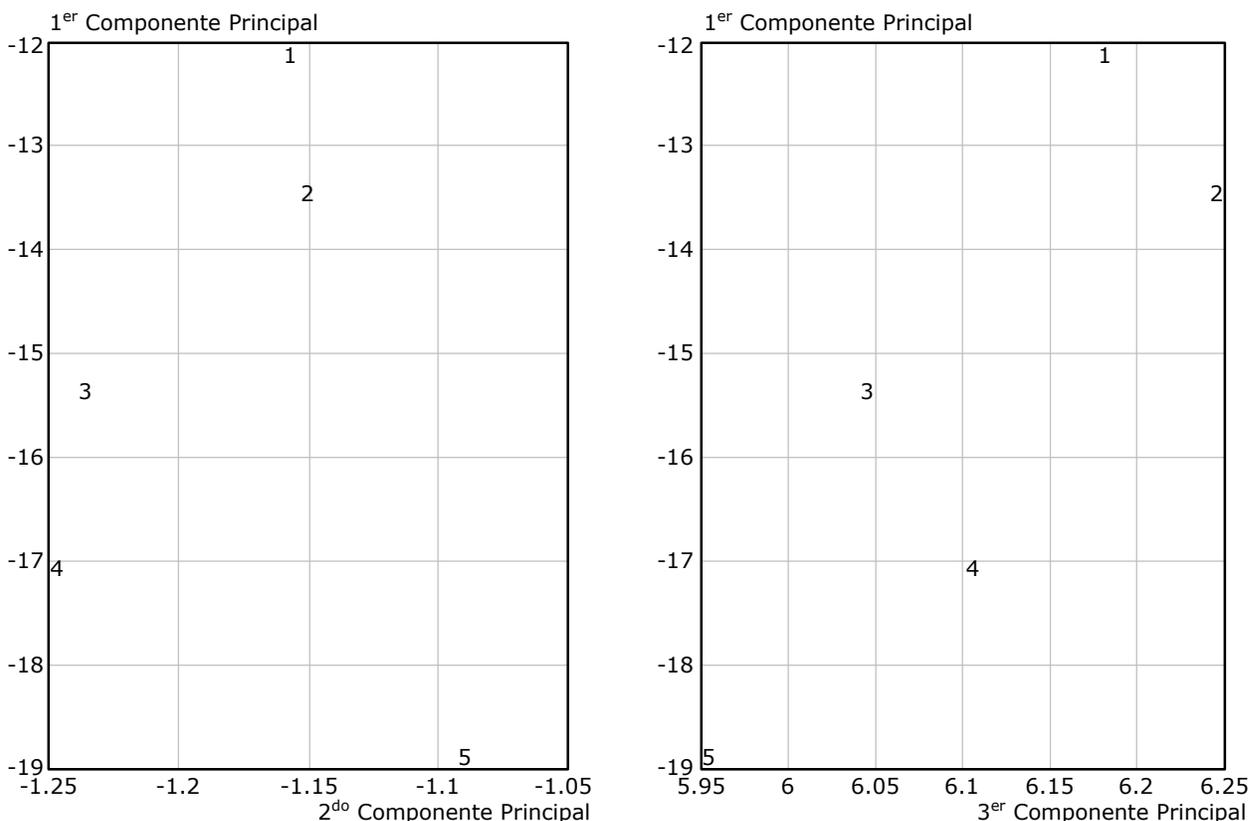


Figura A.2. Componentes principales para el estudio de sensibilidad al flujo del gas diluyente. Los datos corresponden a una mezcla de 75% N_2O y 25% O_2 , con un 2% de enflorano. Se utilizaron cinco diferentes flujos de nitrógeno como diluyente: 1) 0.8, 2) 0.85, 3) 0.9, 4) 0.95 y 5) 1 lpm. A la izquierda se muestra el segundo componente graficado contra el primero, y a la derecha se muestra el tercero contra el primero.

En la figura A.2 se muestra el resultado de aplicar a las curvas con diferente flujo de la figura A.1 el mismo análisis de componentes principales empleado en los datos de las figuras 4.60 a 4.65. En este caso se aprecia que el primer componente principal presenta un 100% de anti-correlación con el flujo (conforme disminuye el valor del componente aumenta el flujo), pero este resultado debe tomarse con reserva, ya que solo se cuenta con cinco mediciones.

Comparando la distribución de estos datos con la nube de mediciones correspondiente a la base de datos mostrada en las figuras 4.60 y 4.61, en donde se grafican los mismos componentes, observamos que mientras los datos de la investigación se distribuyen desde -13.3 hasta -27 unidades aproximadamente a lo largo del primer componente, en este pequeño estudio de sensibilidad al flujo lo hacen desde -12 hasta -19 unidades aproximadamente. Es decir, con estas variaciones de flujo se ha logrado distribuir datos a lo largo de aproximadamente la mitad del rango (51.095%) ocupado por todas las instancias de la base de datos. Al parecer el primer

componente refleja un gran porcentaje de la variación debido al cambio de flujo. En promedio un aumento de 50 mlpm causa un desplazamiento sobre el primer componente principal de -1.3 unidades. Esto equivale a -0.026 unidades (o 0.37% de la escala) por cada mililitro por minuto adicional. La situación es menos crítica para los otros dos componentes principales (y los que siguen), ya que los datos de sensibilidad al flujo se dispersan menos al compararlos con los datos usados en la investigación. Así, se tiene un rango aproximado de [-1.26,-1.08] contra [-26.7,2] para el segundo componente (0.627%) y [5.95,6.25] contra [5.8,8.7] para el tercer componente (10.345%).

De acuerdo a esta información se estima que si mediante un buen regulador se mantiene el flujo en 900 +/- 2.7 mlpm la variación de los datos no será mayor al 1% de la escala de cada componente. Este requerimiento es más severo para efectos de la reducción dimensional que observando únicamente la amplitud de las curvas, como se hizo anteriormente.

A.2 Redes neuronales desarrolladas en NeuralWorks Professional II Plus

Como se menciona en la investigación, se utilizó la herramienta de software para creación y manipulación de redes neuronales *NeuralWorks Professional II Plus* de *NeuralWare, Inc.* Este programa permite entrenar una variedad de arquitecturas de redes neuronales y manipular sus diferentes parámetros con facilidad. Gracias a esta herramienta pudieron utilizarse diferentes paradigmas empleados comúnmente para el reconocimiento de patrones (LVQ, RBFN, retropropagación, etc.) antes de escoger el que mejor desempeño presentaba en nuestra aplicación. A continuación se resumen algunos parámetros [83] utilizados en el entrenamiento de las redes de retropropagación empleadas finalmente en el sistema de reconocimiento, para la cual se utilizó una arquitectura como la que se muestra en la figura 3.25 y se reproduce por conveniencia en la figura A.3 (la capa de sub-clases es la capa de salida de la red entrenada por NeuralWorks, y la capa de clases se añade posteriormente):

Tabla MinMax: Antes del entrenamiento todos los datos de entrada y salida son escalados de forma que cada característica de entrada se encuentre dentro del rango [-1,1] y cada salida dentro de [-0.8,0.8] (*escalamiento bipolar*). Durante el entrenamiento de una red neuronal pueden presentarse problemas de saturación si se presentan los datos tal y como vienen y sin ser escalados para adecuarse a las funciones que se utilizan en el proceso, como la función de transferencia (tangente hiperbólica en nuestro caso). El aprendizaje se detiene para cada elemento de procesamiento de la red neuronal cuando éste se satura.

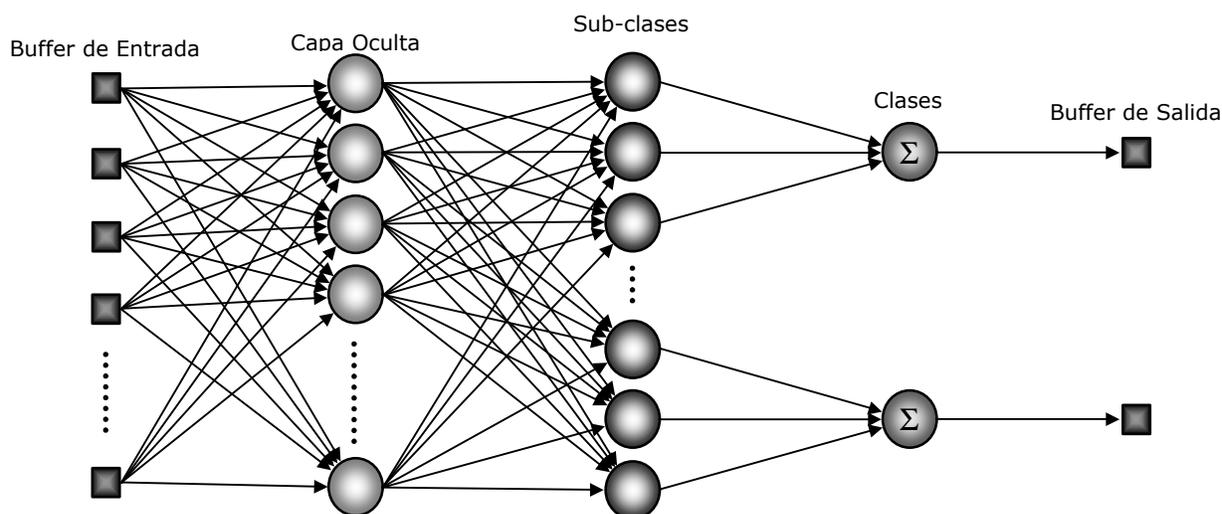


Figura A.3. Estructura de la red neuronal clasificadora propuesta.

Regla de aprendizaje: Se utiliza la regla delta, también conocida como aprendizaje de Widrow-Hoff. Dado un estímulo (\mathbf{x}, \mathbf{y}) , es decir, un par entrada-salida, esta regla actualiza una matriz de pesos como sigue:

$$\Delta \mathbf{W} = \text{LCoef} \times \mathbf{e} \times \mathbf{x}^T$$

donde \mathbf{W} es la matriz de pesos de la red neuronal, LCoef es un coeficiente de aprendizaje y

$$\mathbf{e} = \mathbf{y} - \mathbf{W}\mathbf{x}$$

es el error entre la salida deseada y la obtenida. La regla delta es efectivamente un algoritmo de descenso por gradiente en el espacio de error. Generalmente el coeficiente de aprendizaje es pequeño y los estímulos de ejemplo se presentan un gran número de veces. Aunque se pueden ajustar los pesos después de cada ejemplo, en nuestro caso hemos presentado la base de datos completa y después se han ajustado los pesos. Esto se denomina *ajuste acumulativo* o por épocas. En total se entrenó cada red neuronal por 20,000 épocas o presentaciones completas.

Función de transferencia: Hemos aplicado una función de tangente hiperbólica en todas las capas excepto en la capa de salida de las redes antes de reincorporar los diferentes sub-grupos presentes, es decir, la capa de salida al ser entrenadas mediante NeuralWorks. La función de tangente hiperbólica tiene un rango de salida bipolar a diferencia de otras funciones como la sigmoideal:

$$T(x) = (e^x - e^{-x}) / (e^x + e^{-x})$$

Un rango no bipolar, [0,1] por ejemplo, implica una tendencia o bias hacia el aprendizaje de salidas cercanas a 1, desfavoreciendo el aprendizaje de salidas cercanas a cero. La utilización de la tangente hiperbólica ayuda a corregir este desbalance.

Por otro lado, la función de transferencia lineal a la salida permite en nuestro caso tener un valor de pertenencia a un sub-conjunto (y posteriormente a un conjunto) de clasificación, más que una tajante decisión de cierto o falso.

Función de activación SoftMax: Para problemas de clasificación, las salidas de una red neuronal generalmente se representan como un código 1 de N. Es decir, solo una clase se activa y las demás se encuentran desactivadas. El problema es que una red neuronal no tiene restricciones que le permitan mantener esta relación. La función de activación SoftMax es una versión continua y suave de una función competitiva 1 de N que se puede implementar fácilmente en el algoritmo de retropropagación, y que, junto con la función de transferencia lineal a la salida, causa que la suma de los valores de pertenencia a los sub-conjuntos de salida sea la unidad. Es decir, el resultado para cada sub-conjunto puede interpretarse como un grado de membresía de 0 a 100%.

Momento: Uno de los problemas que tiene cualquier algoritmo de descenso por gradiente es el establecimiento de un coeficiente de aprendizaje adecuado. Cambiar los pesos como una función linealmente dependiente del gradiente implica suponer que la superficie de error es localmente lineal, donde el tamaño de la localidad depende del coeficiente de aprendizaje. En puntos de gran curvatura, esta linealidad local no existe y puede darse una divergencia. Un coeficiente de aprendizaje más

pequeño podría corregir este problema, pero por otro lado también repercute en el tiempo de aprendizaje, el cual se alarga entre más pequeño sea LCoef.

Para resolver este problema se introdujo el concepto de momento, mediante el cual se modifica la regla delta de aprendizaje para incluir un término extra (el momento), el cual actúa como un filtro pasa-bajas sobre los pesos delta, y mediante el cual el comportamiento oscilatorio tiende a ser cancelado. Esto permite disminuir el coeficiente de aprendizaje manteniendo una buena velocidad de entrenamiento. El momento utilizado en nuestras redes es de 0.4.

F' Offset: Una técnica simple que incrementa la velocidad de aprendizaje en una red neuronal de retropropagación es el añadir un pequeño offset positivo a la derivada de la función de transferencia antes de escalar el error total en el algoritmo de aprendizaje. Cuando los pesos de un elemento de procesamiento crecen demasiado la función de transferencia se satura y la derivada tiende a cero. Esto causa que el error también tienda a cero en un elemento de procesamiento, y el aprendizaje de esa neurona se detiene. Al añadirle un pequeño offset a la derivada se corrige este problema potencial. En nuestro caso estamos utilizando un offset pequeño de 0.1 (para la función tangente hiperbólica este offset puede llegar hasta 0.3).

Tran. Pt. y LCoef Ratio: Estos dos parámetros se utilizan para crear un coeficiente de aprendizaje dinámico durante el proceso de aprendizaje. El valor de LCoef Ratio indica el valor por el que se irá multiplicando el coeficiente de aprendizaje cada vez que se modifique (en nuestro caso 0.5), y Trans. Pt. Indica el punto de transición para que este evento ocurra, y en nuestras redes se fijó para 10000 iteraciones. NeuralWorks automáticamente modifica el coeficiente cuando hayan pasado 1, 3, 7 y 15 veces el número de iteraciones indicado, multiplicándolo entonces por LCoef Ratio.

LCoef: El tan mencionado coeficiente de aprendizaje. Puede indicarse un valor diferente para cada capa de la red. En nuestro caso, el valor inicial del coeficiente de aprendizaje para cada capa es de 0.3 para la capa oculta y de 0.15 para la capa de salida (la capa de entrada no aprende).

Todas las redes entrenadas en esta investigación poseen la misma arquitectura básica y emplean los mismos parámetros. Una vez entrenadas mediante NeuralWorks, la capa de salida se considera entonces la capa de sub-clases, ya que ha aprendido a clasificar datos de entrada agrupados previamente de forma no supervisada por un algoritmo fuzzy c-means. Estas sub-clases se reintegran entonces en las clases originales de clasificación. Para este efecto, dado que la capa de salida es lineal y utiliza el algoritmo modificado SoftMax, entonces se puede considerar esta operación como una reconstrucción difusa de las clases (salida continua), o puede realizarse de forma tan sencilla como la simple búsqueda de un ganador entre las sub-clases, considerando que la clase ganadora es aquella en la que se encuentra la sub-clase ganadora (salida discreta). Puesto que en esta investigación no se ha experimentado con datos intermedios a cada clase (13.5% de nitrógeno, por ejemplo), el resultado será el mismo para cualquier procedimiento.

Aunque todas las redes son similares en cuanto a estructura, cada una tiene un número diferente de entradas y salidas, pero todas cuentan con 60 neuronas en la capa oculta. Este resultó ser el número ideal de elementos de procesamiento ocultos en todos los casos. En la figura A.4 se resumen los parámetros de cada red y el orden de operación (pueden entrenarse en cualquier orden) que debe llevar cada una al ser colocada en cascada cuando no existe conocimiento previo acerca de las características de la mezcla, y en la figura A.5 se resume esta información para cuando existen lecturas adicionales de la cantidad de oxígeno y bióxido de carbono realizadas mediante un instrumento externo.

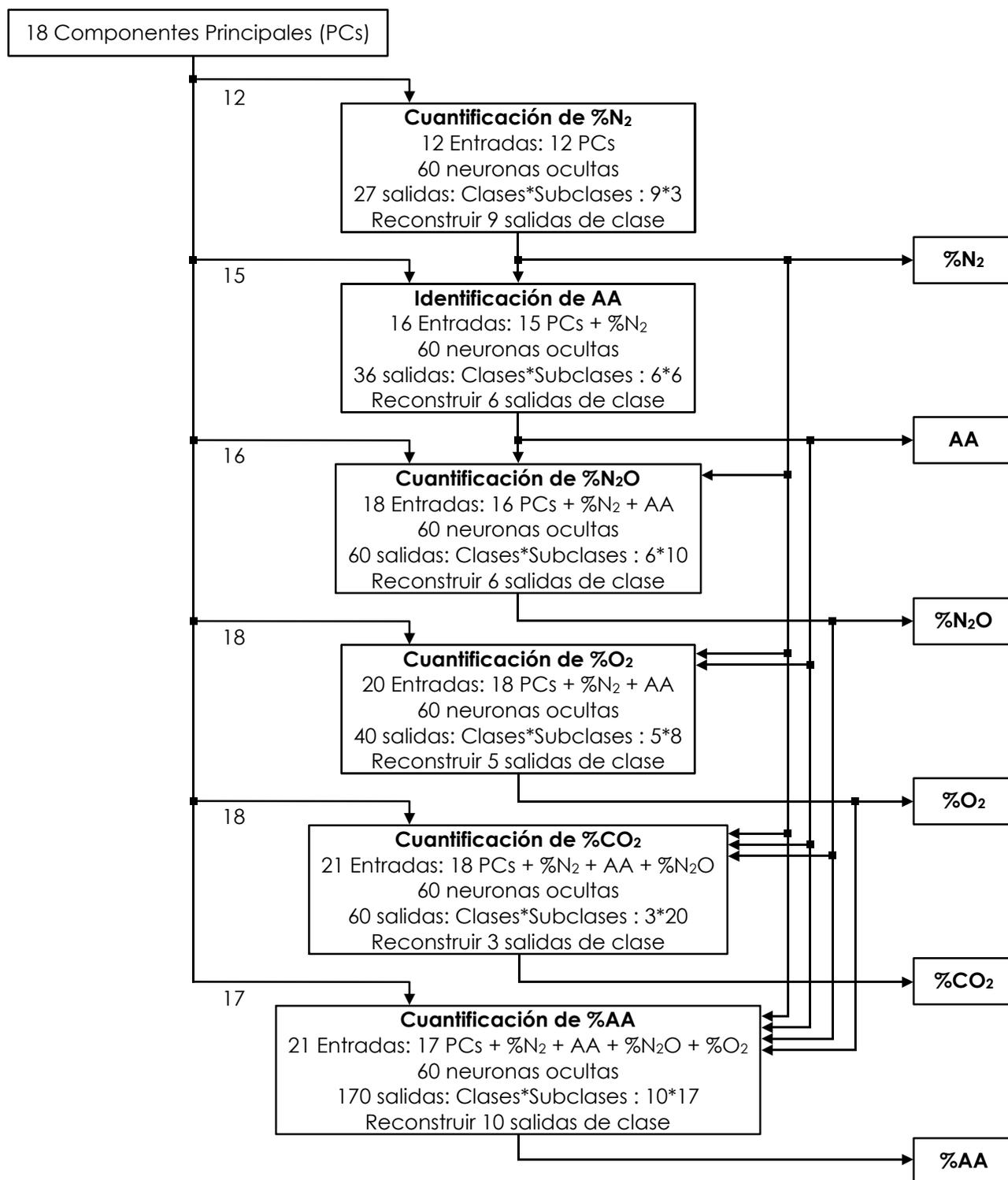


Figura A.4. Diagrama del orden de procesamiento de las redes neuronales creadas en NeuralWorks II Professional Plus cuando no se utiliza información externa alguna acerca de las mezclas.

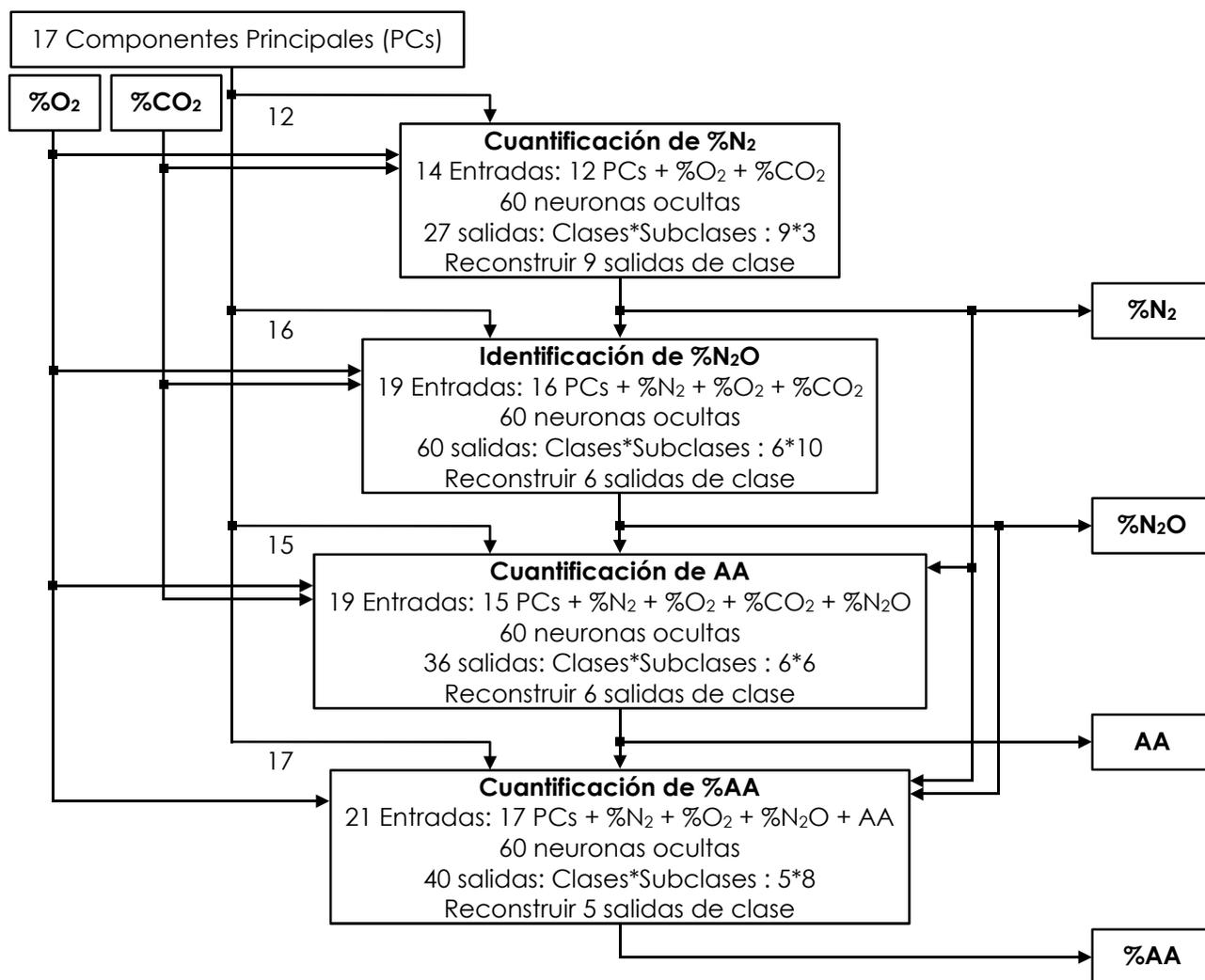


Figura A.5. Diagrama del orden de procesamiento de las redes neuronales creadas en NeuralWorks II Professional Plus cuando se cuenta con información externa provista por otros instrumentos acerca de la concentración de oxígeno y bióxido de carbono.

A.3 Distribución de las curvas de movilidad iónica

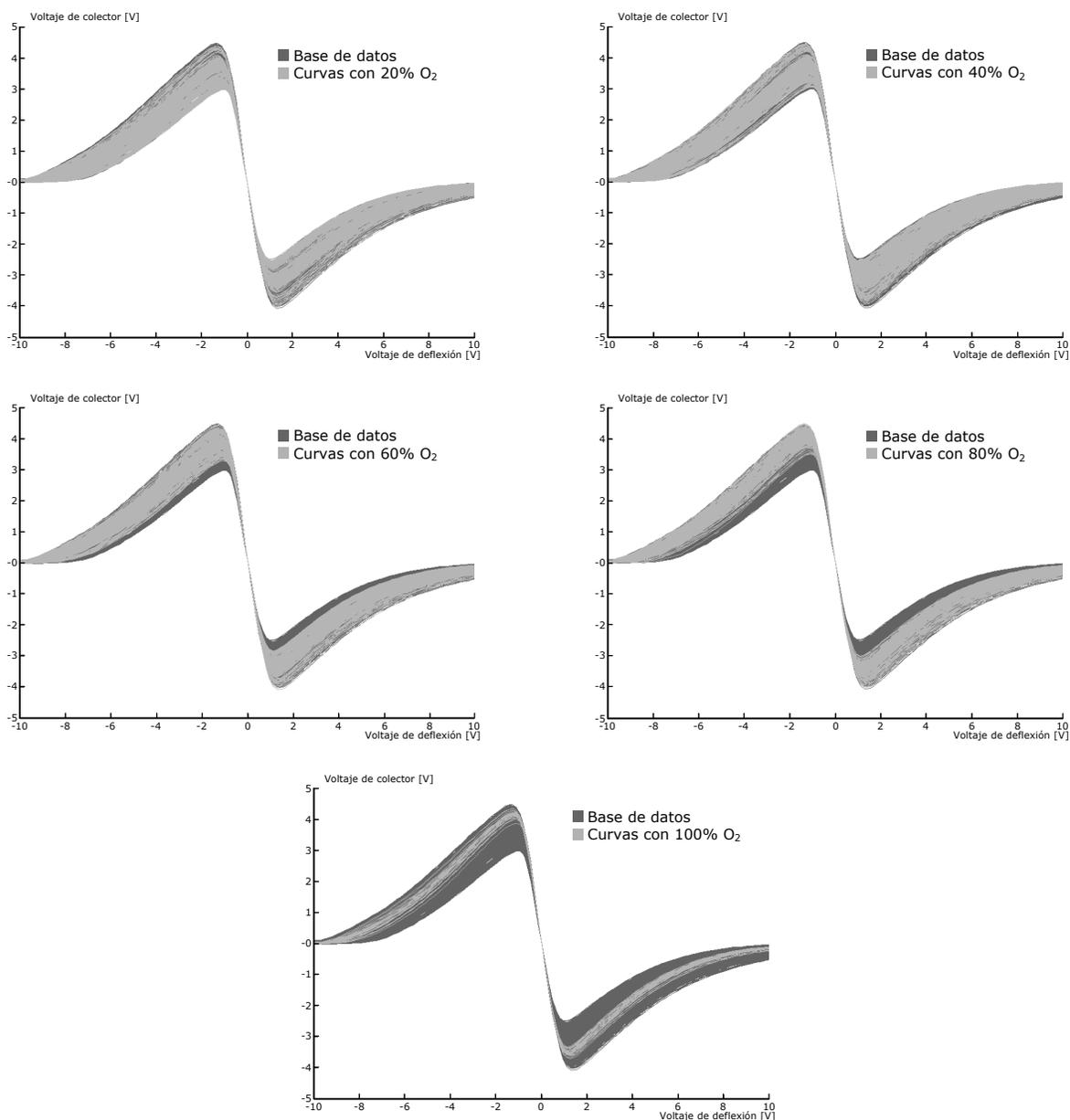


Figura A.6. Distribución de las curvas de la base de datos de acuerdo a la cantidad de oxígeno que poseen. Las repeticiones de cada curva de la base de datos han sido promediadas para obtener un total de 1395 curvas diferentes, mostradas en color oscuro, mientras que en color claro se indican únicamente las curvas que contienen un porcentaje dado de O_2 : a) 20% - 465 curvas, b) 40% - 403 curvas, c) 60% - 310 curvas, d) 80% - 186 curvas y e) 100% - 31 curvas.

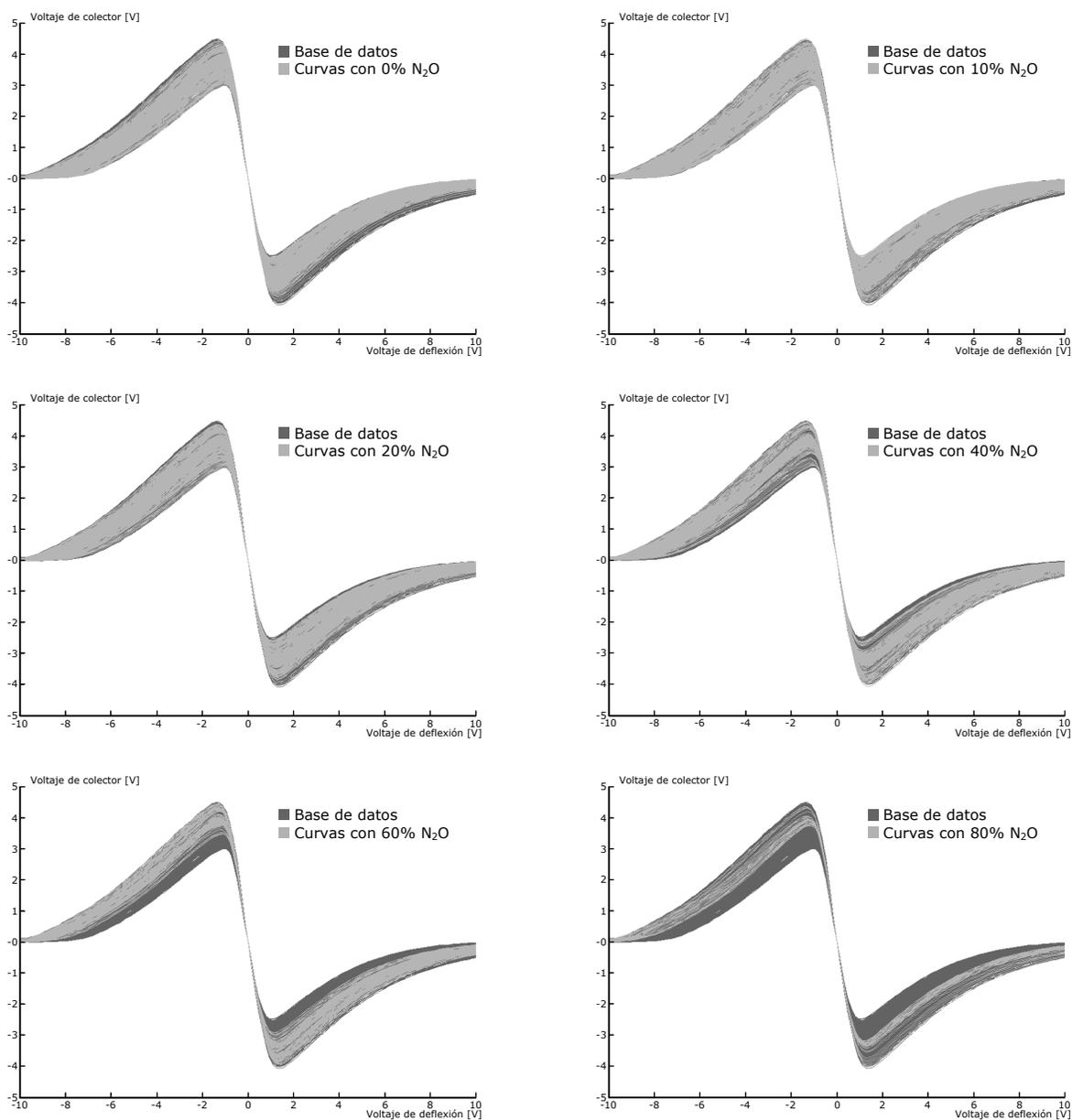


Figura A.7. Distribución de las curvas de la base de datos de acuerdo a la cantidad de óxido nitroso que poseen. Las repeticiones de cada curva de la base de datos han sido promediadas para obtener un total de 1395 curvas diferentes, mostradas en color oscuro, mientras que en color claro se indican únicamente las curvas que contienen un porcentaje dado de N_2O : a) 0% - 403 curvas, b) 10% - 341 curvas, c) 20% - 310 curvas, d) 40% - 186 curvas, e) 60% - 124 curvas y f) 80% - 31 curvas.

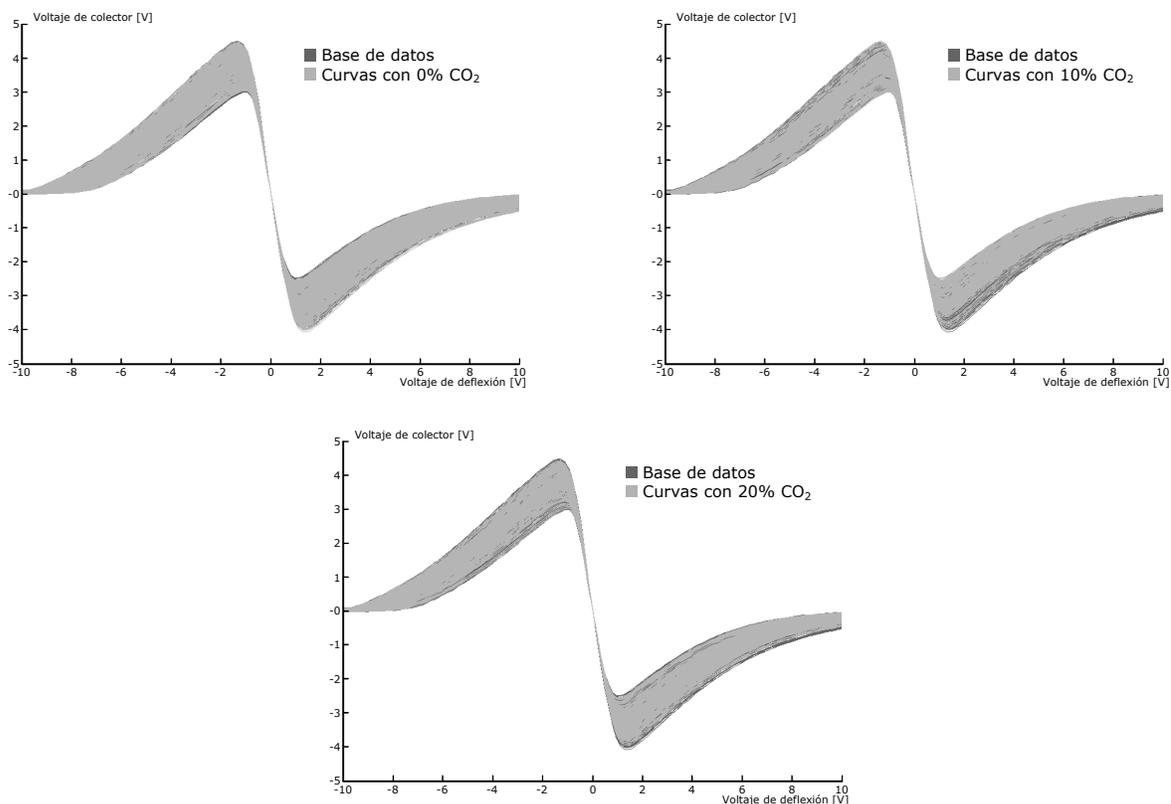


Figura A.8. Distribución de las curvas de la base de datos de acuerdo a la cantidad de bióxido de carbono que poseen. Las repeticiones de cada curva de la base de datos han sido promediadas para obtener un total de 1395 curvas diferentes, mostradas en color oscuro, mientras que en color claro se indican únicamente las curvas que contienen un porcentaje dado de CO_2 : a) 0% - 589 curvas, b) 10% - 403 curvas, c) 20% - 403 curvas.

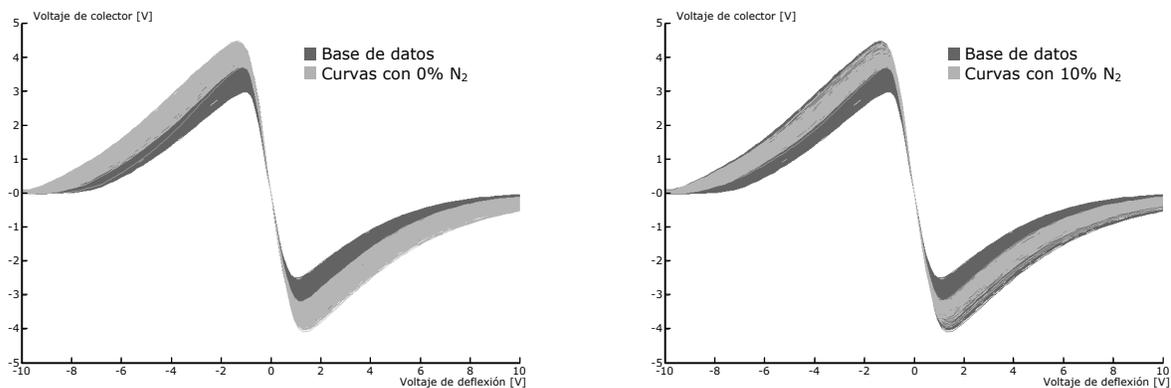


Figura A.9a. Distribución de las curvas de la base de datos de acuerdo a la cantidad de nitrógeno que poseen. Las repeticiones de cada curva de la base de datos han sido promediadas para obtener un total de 1395 curvas diferentes, mostradas en color oscuro, mientras que en color claro se indican únicamente las curvas que contienen un porcentaje dado de N_2 : a) 0% - 310 curvas, b) 10% - 186 curvas, c) 20% - 248 curvas, d) 30% - 124 curvas, e) 40% - 186 curvas, f) 50% - 124 curvas, g) 60% - 124 curvas, h) 70% - 62 curvas, i) 80% - 31 curvas.

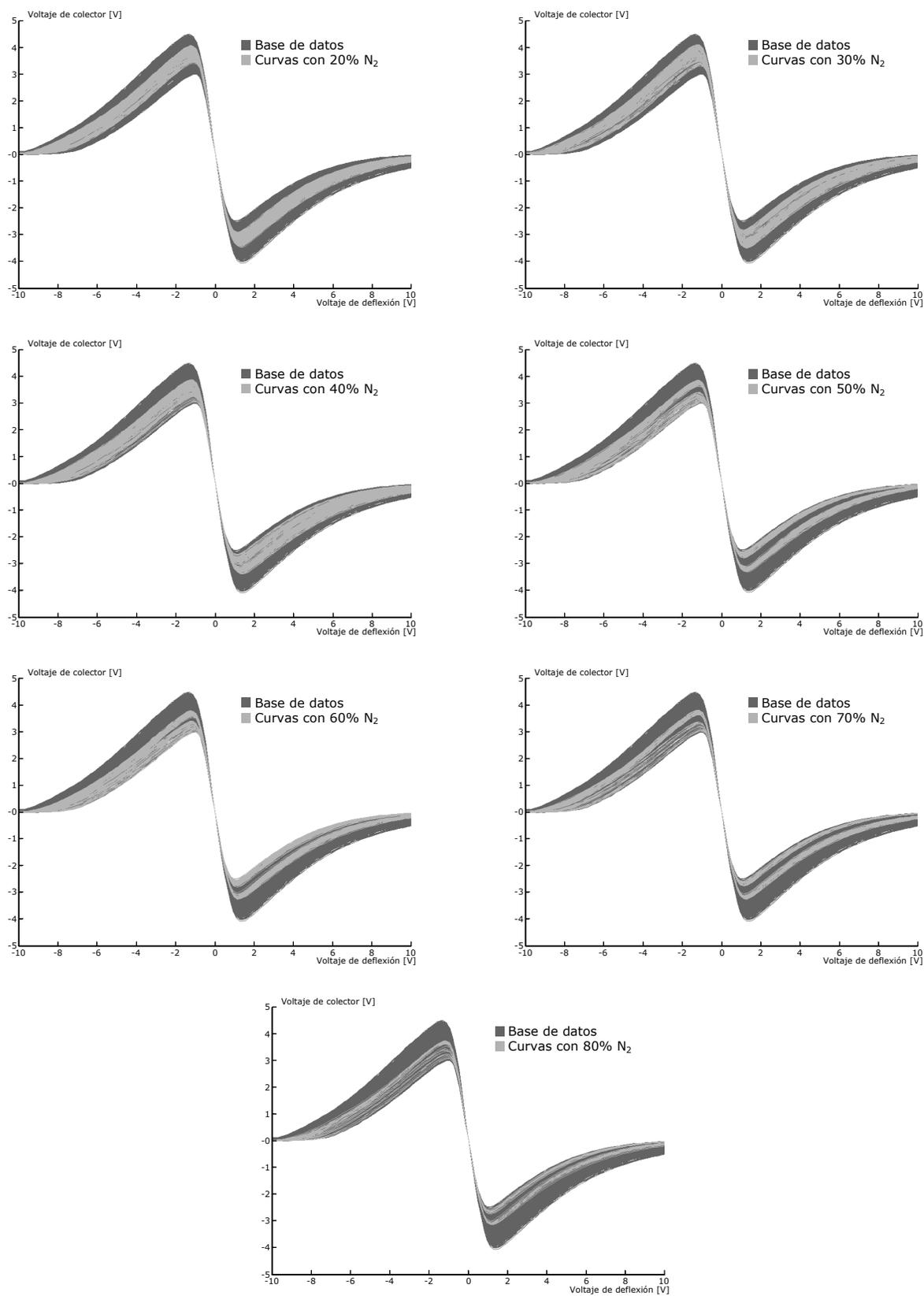


Figura A.9b. Distribución de las curvas de la base de datos de acuerdo a la cantidad de nitrógeno que poseen (continuación).

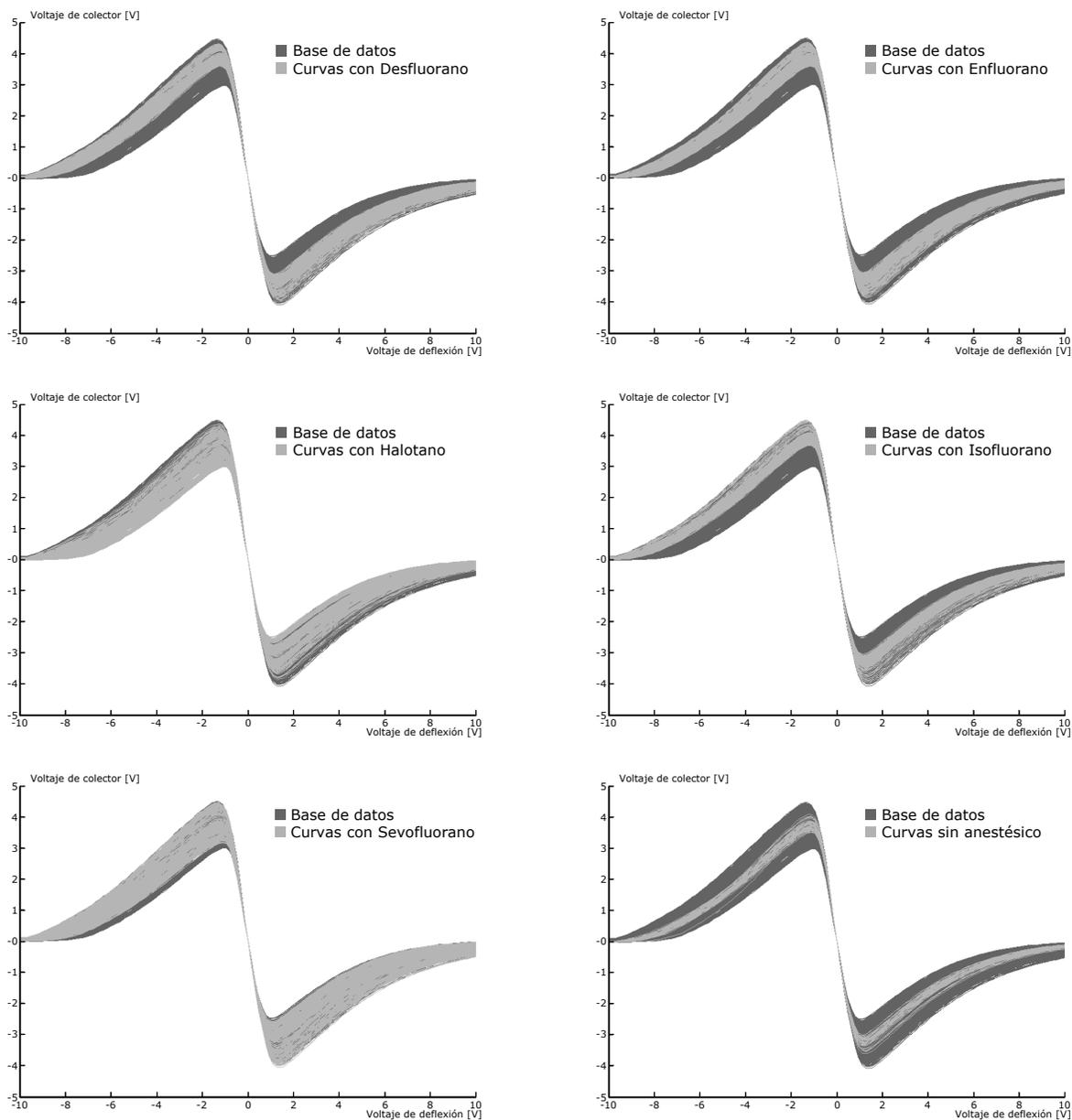


Figura A.10 Distribución de las curvas de la base de datos de acuerdo al anestésico que poseen. Las repeticiones de cada curva de la base de datos han sido promediadas para obtener un total de 1395 curvas diferentes, mostradas en color oscuro, mientras que en color claro se indican únicamente las curvas que contienen un anestésico dado: a) Desflurano - 270 curvas, b) Enflurano - 270 curvas, c) Halotano - 270 curvas, d) Isoflurano - 270 curvas, e) Sevoflurano - 270 curvas, f) Ningún anestésico - 45 curvas.

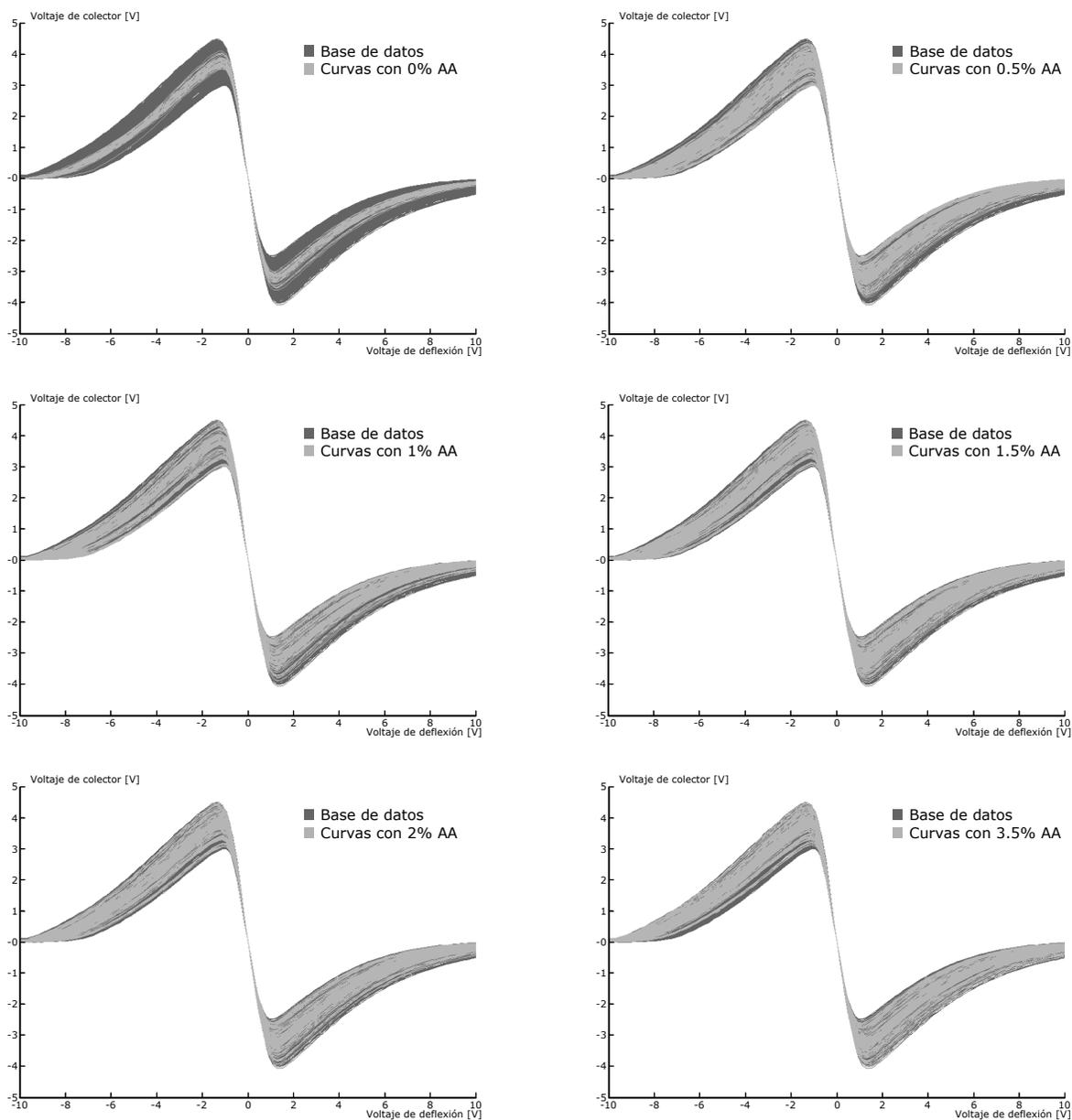


Figura A.11a. Distribución de las curvas de la base de datos de acuerdo al porcentaje de anestésico que poseen. Las repeticiones de cada curva de la base de datos han sido promediadas para obtener un total de 1395 curvas diferentes, mostradas en color oscuro, mientras que en color claro se indican únicamente las curvas que contienen un porcentaje dado AA: a) 0% - 45 curvas, b) 0.5% - 180 curvas, c) 1% - 135 curvas, d) 1.5% - 225 curvas, e) 2% - 180 curvas, f) 3.5% - 225 curvas, g) 5% - 225 curvas, h) 7% - 90 curvas, i) 12.5% - 45 curvas, j) 18% - 45 curvas.

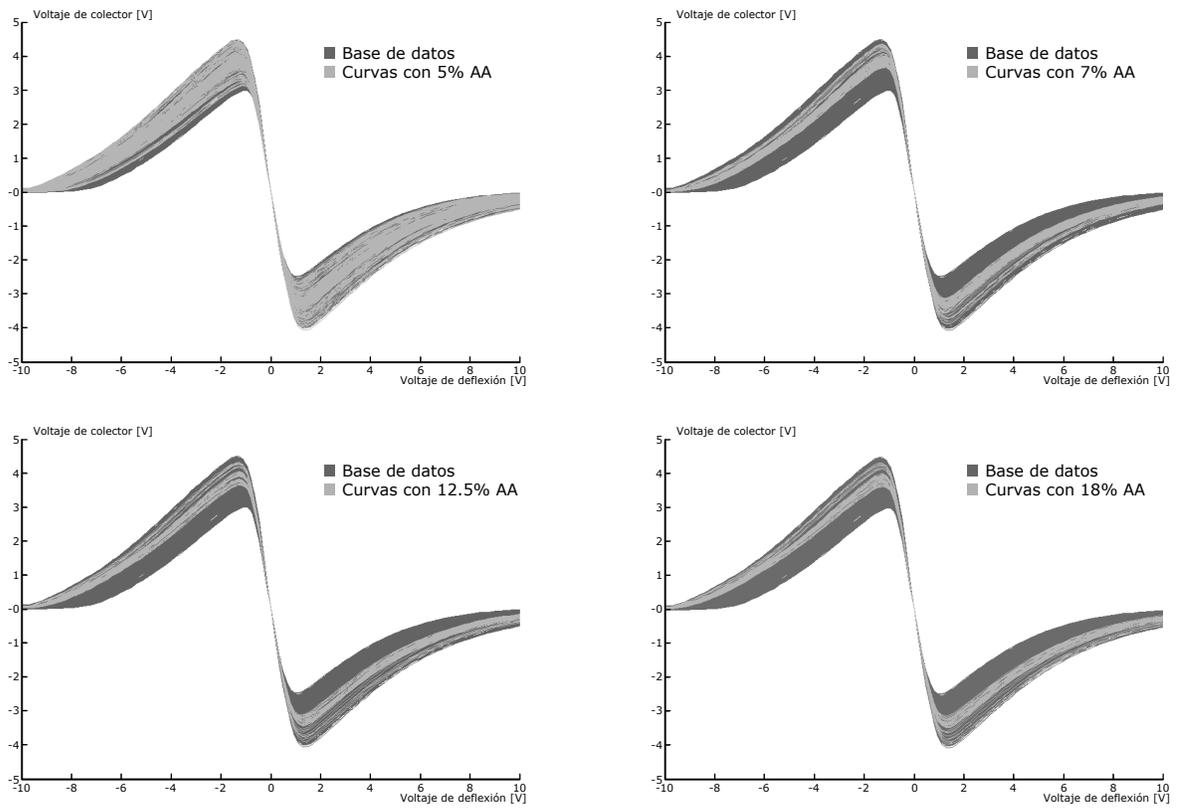


Figura A.11b. Distribución de las curvas de la base de datos de acuerdo al porcentaje de agente anestésico que contienen (continuación).

A.4 Distribución de las inversas

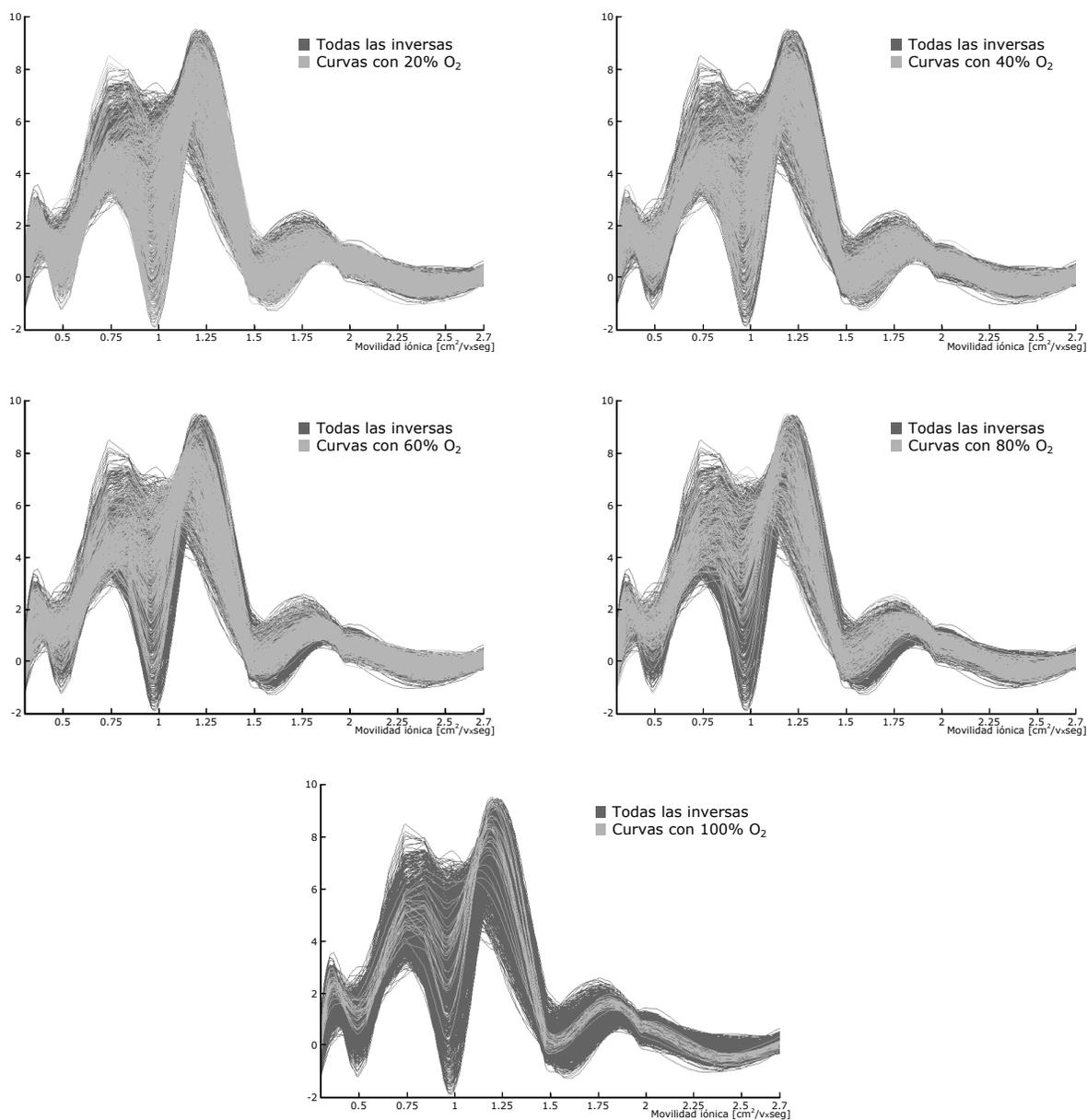


Figura A.12. Distribución de las inversas para iones negativos de acuerdo a la cantidad de oxígeno que poseen. Para calcular las inversas se ha utilizado la base de datos promediada a fin de obtener un total de 1395 curvas diferentes, las cuales se muestran en color oscuro, mientras que en color claro se indican únicamente las curvas que contienen un porcentaje dado de O₂: a) 20% - 465 curvas, b) 40% - 403 curvas, c) 60% - 310 curvas, d) 80% - 186 curvas y e) 100% - 31 curvas.

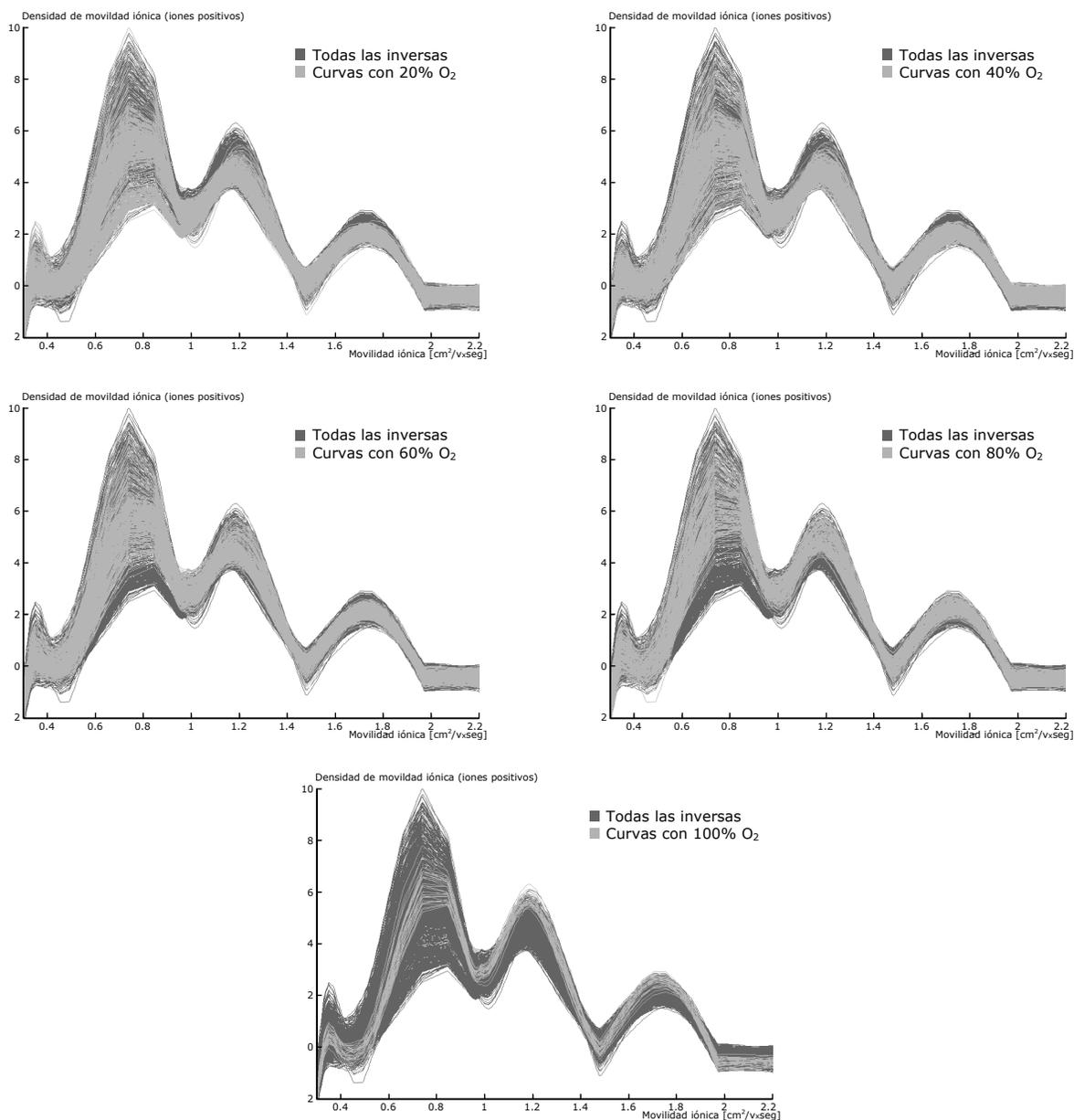


Figura A.13. Distribución de las inversas para iones positivos de acuerdo a la cantidad de oxígeno que poseen. Para calcular las inversas se ha utilizado la base de datos promediada a fin de obtener un total de 1395 curvas diferentes, las cuales se muestran en color oscuro, mientras que en color claro se indican únicamente las curvas que contienen un porcentaje dado de O₂: a) 20% - 465 curvas, b) 40% - 403 curvas, c) 60% - 310 curvas, d) 80% - 186 curvas y e) 100% - 31 curvas.

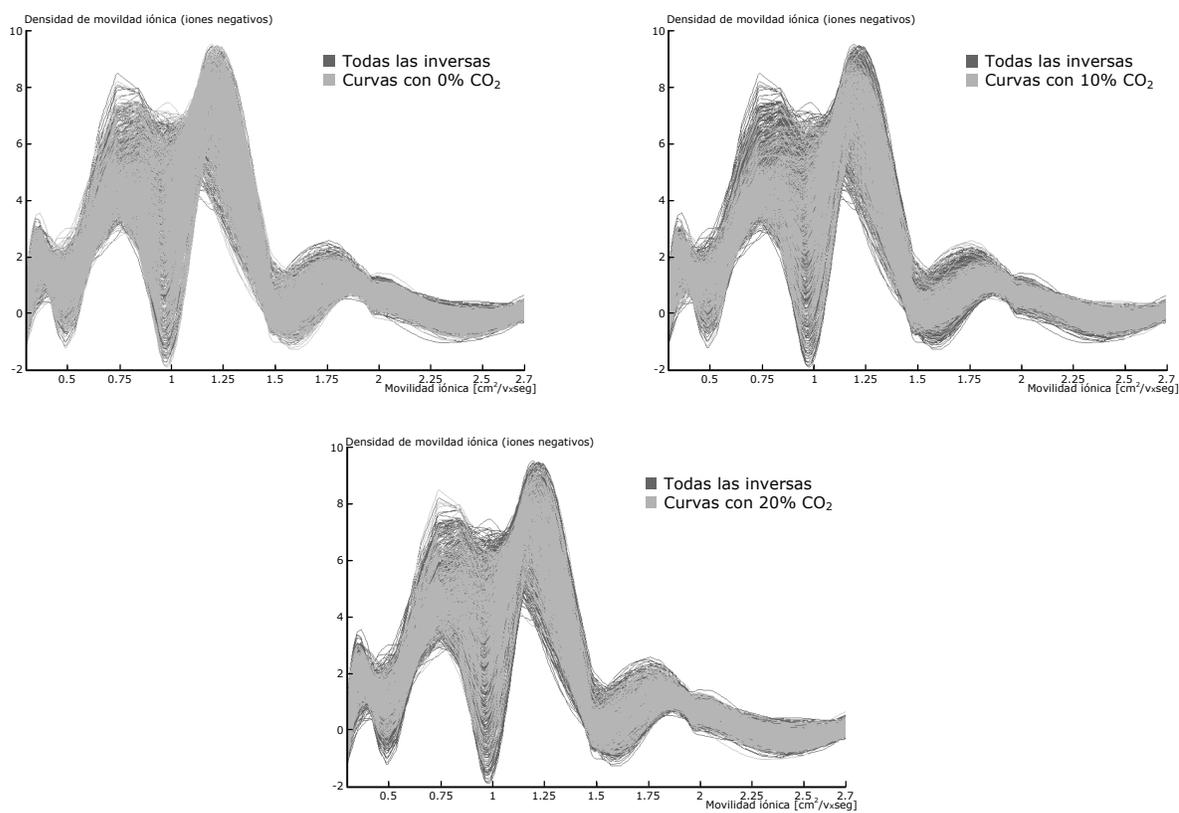


Figura A.14. Distribución de las inversas para iones negativos de acuerdo a la cantidad de bióxido de carbono que poseen. Para calcular las inversas se ha utilizado la base de datos promediada a fin de obtener un total de 1395 curvas diferentes, las cuales se muestran en color oscuro, mientras que en color claro se indican únicamente las curvas que contienen un porcentaje dado de CO₂: a) 0% - 589 curvas, b) 10% - 403 curvas, c) 20% - 403 curvas.

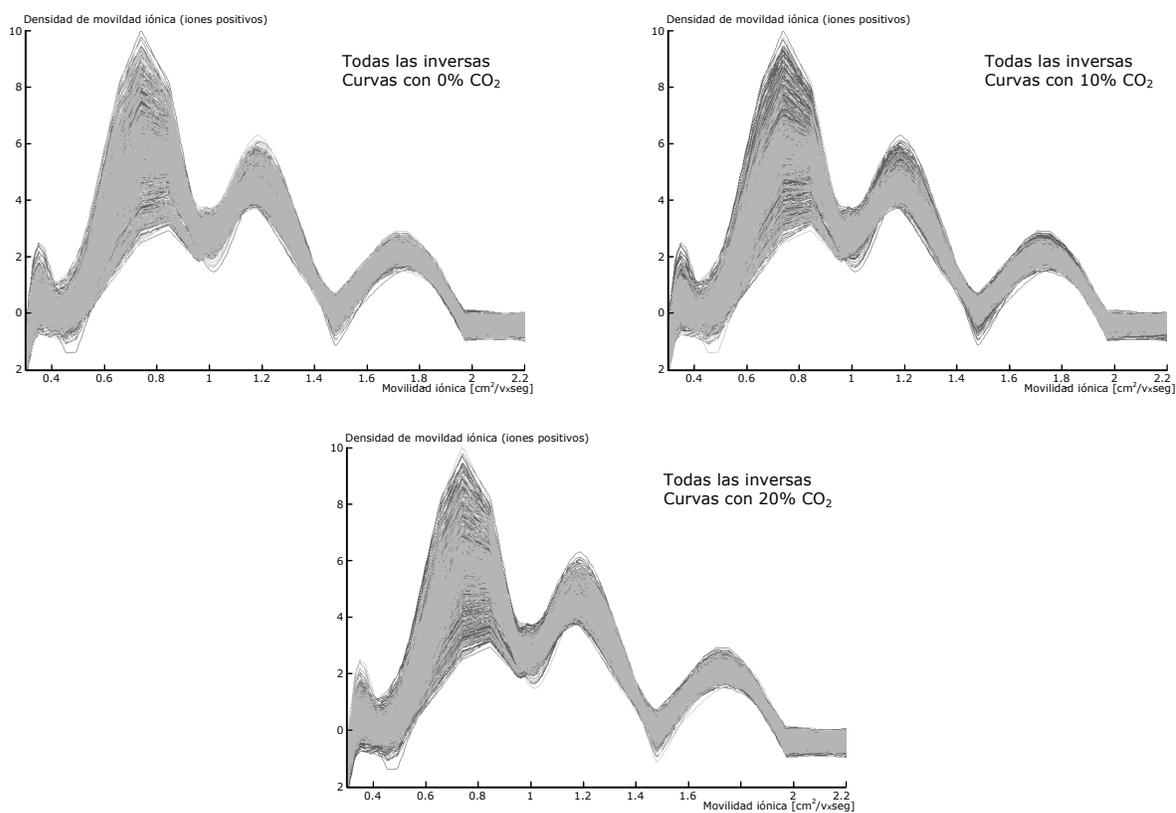


Figura A.15. Distribución de las inversas para iones positivos de acuerdo a la cantidad de bióxido de carbono que poseen. Para calcular las inversas se ha utilizado la base de datos promediada a fin de obtener un total de 1395 curvas diferentes, las cuales se muestran en color oscuro, mientras que en color claro se indican únicamente las curvas que contienen un porcentaje dado de CO₂: a) 0% - 589 curvas, b) 10% - 403 curvas, c) 20% - 403 curvas.

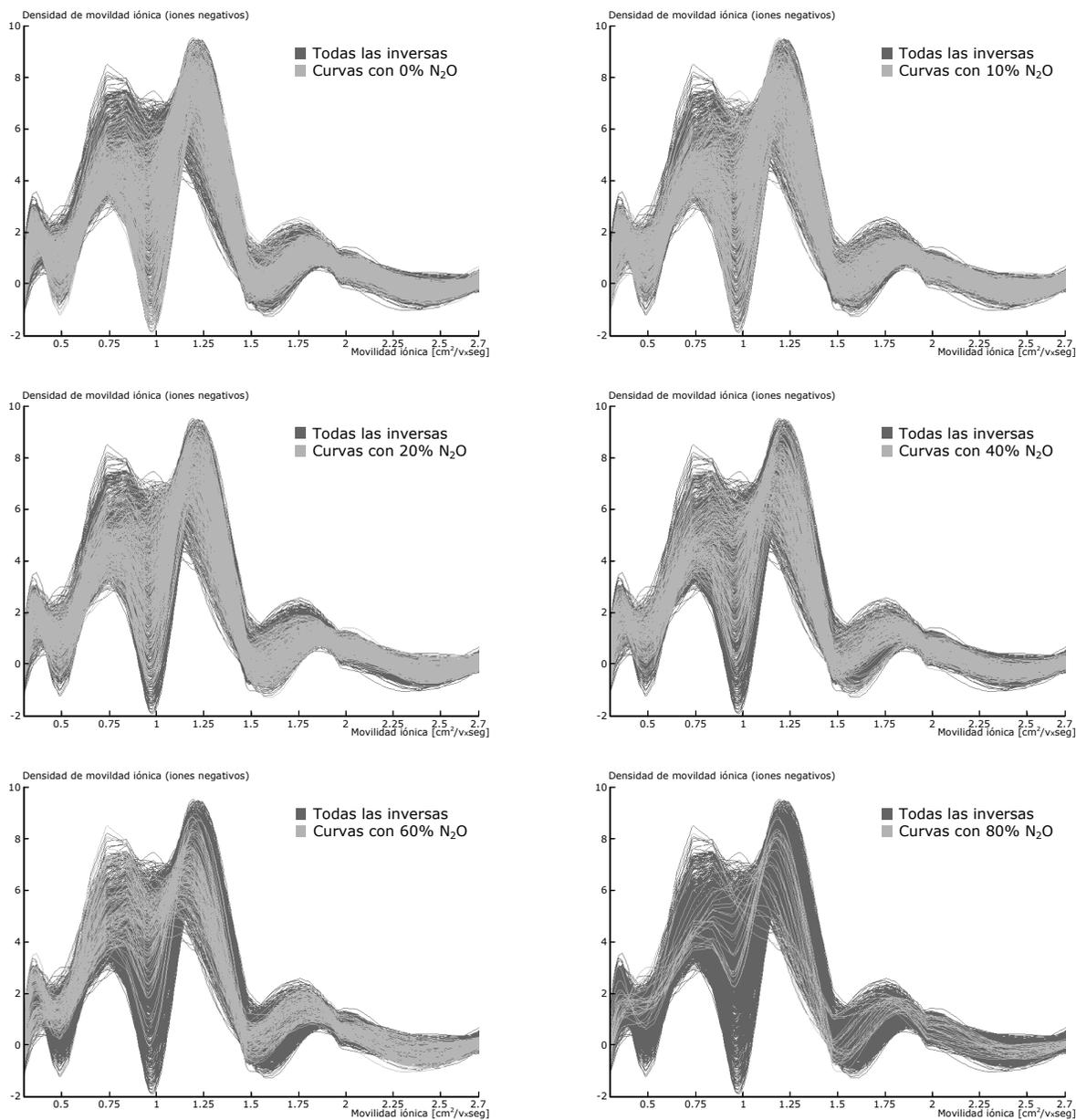


Figura A.16. Distribución de las inversas para iones negativos de acuerdo a la cantidad de óxido nítrico que poseen. Para calcular las inversas se ha utilizado la base de datos promediada a fin de obtener un total de 1395 curvas diferentes, las cuales se muestran en color oscuro, mientras que en color claro se indican únicamente las curvas que contienen un porcentaje dado de N_2O : a) 0% - 403 curvas, b) 10% - 341 curvas, c) 20% - 310 curvas, d) 40% - 186 curvas, e) 60% - 124 curvas y f) 80% - 31 curvas.

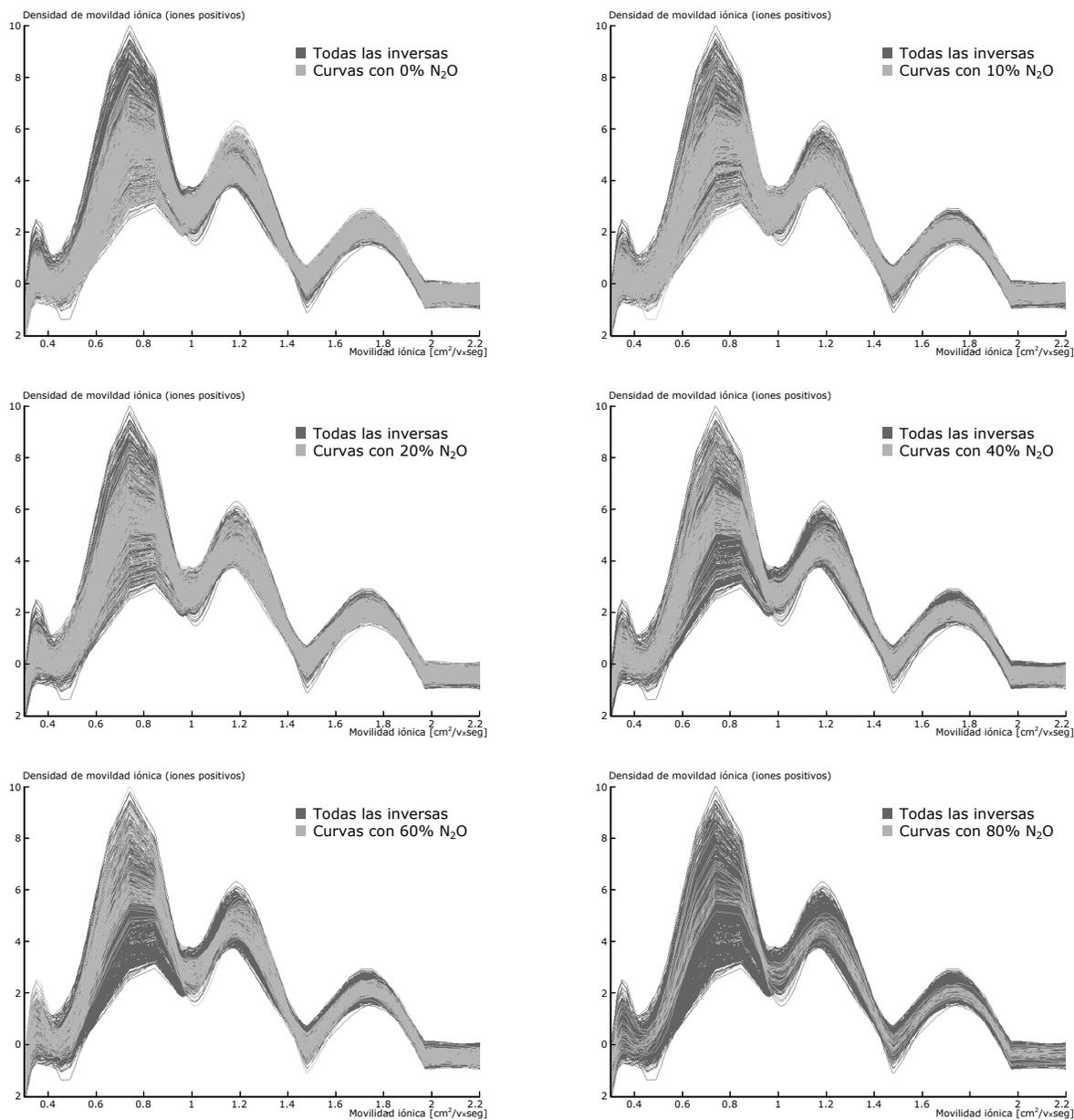


Figura A.17. Distribución de las inversas para iones positivos de acuerdo a la cantidad de óxido nítrico que poseen. Para calcular las inversas se ha utilizado la base de datos promediada a fin de obtener un total de 1395 curvas diferentes, las cuales se muestran en color oscuro, mientras que en color claro se indican únicamente las curvas que contienen un porcentaje dado de N₂O: a) 0% - 403 curvas, b) 10% - 341 curvas, c) 20% - 310 curvas, d) 40% - 186 curvas, e) 60% - 124 curvas y f) 80% - 31 curvas.

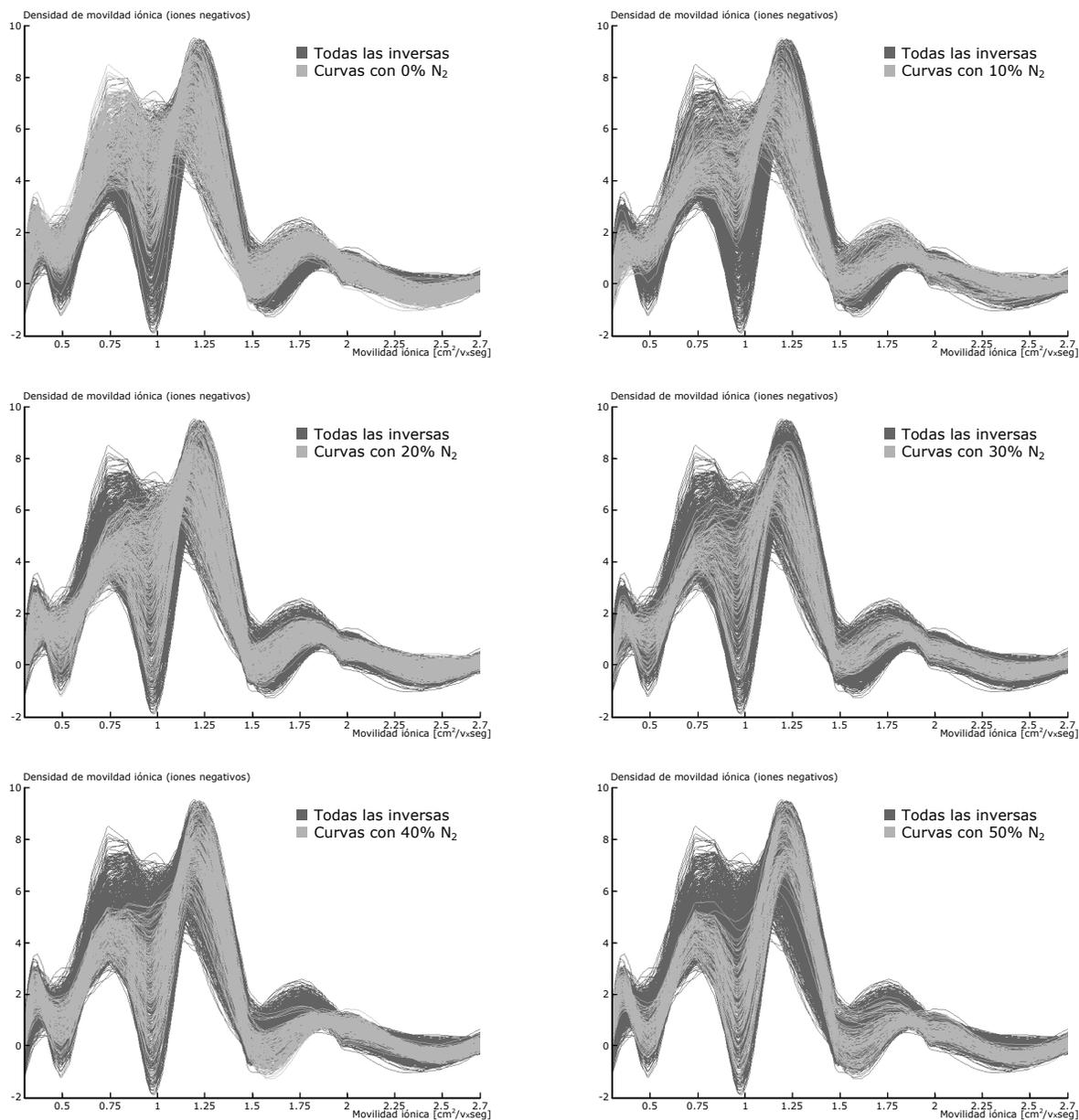


Figura A.18a. Distribución de las inversas para iones negativos de acuerdo a la cantidad de nitrógeno que poseen. Para calcular las inversas se ha utilizado la base de datos promediada a fin de obtener un total de 1395 curvas diferentes, las cuales se muestran en color oscuro, mientras que en color claro se indican únicamente las curvas que contienen un porcentaje dado de N₂: a) 0% - 310 curvas, b) 10% - 186 curvas, c) 20% - 248 curvas, d) 30% - 124 curvas, e) 40% - 186 curvas, f) 50% - 124 curvas, g) 60% - 124 curvas, h) 70% - 62 curvas, i) 80% - 31 curvas.

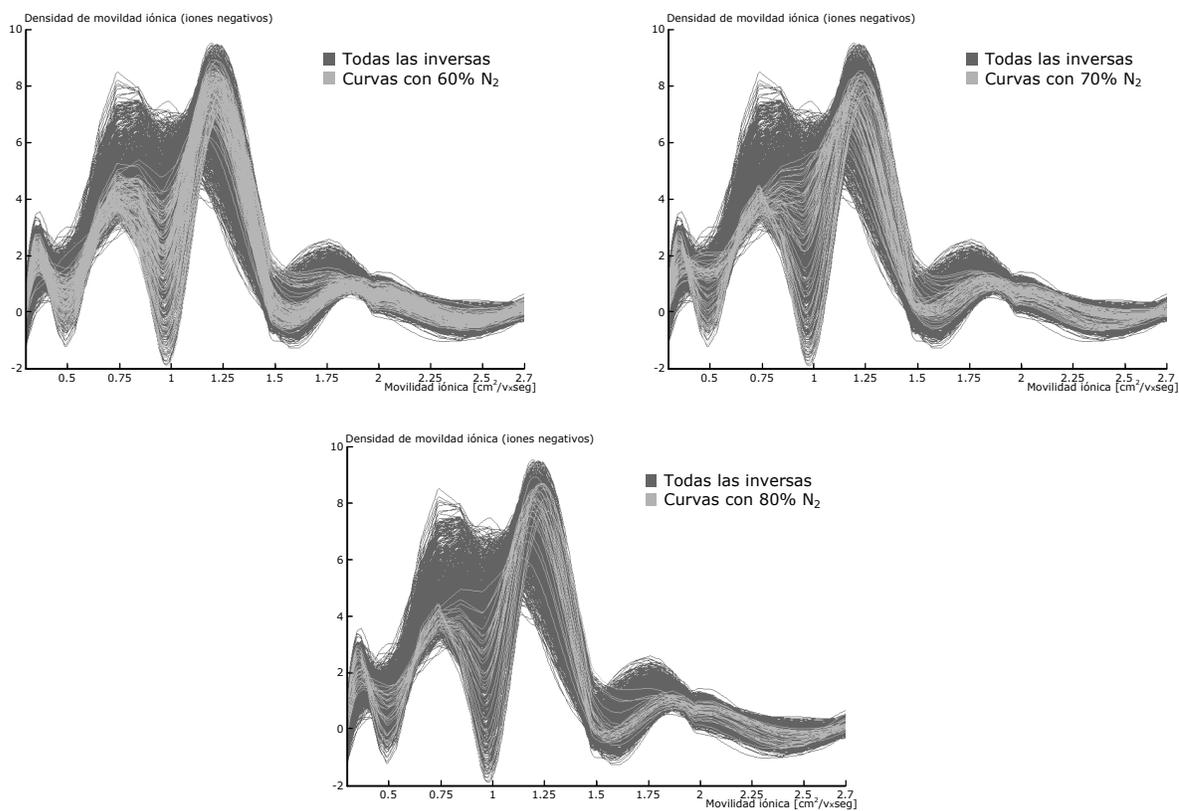


Figura A.18b. Distribución de las inversas para iones negativos de acuerdo a la cantidad de nitrógeno que poseen (continuación).

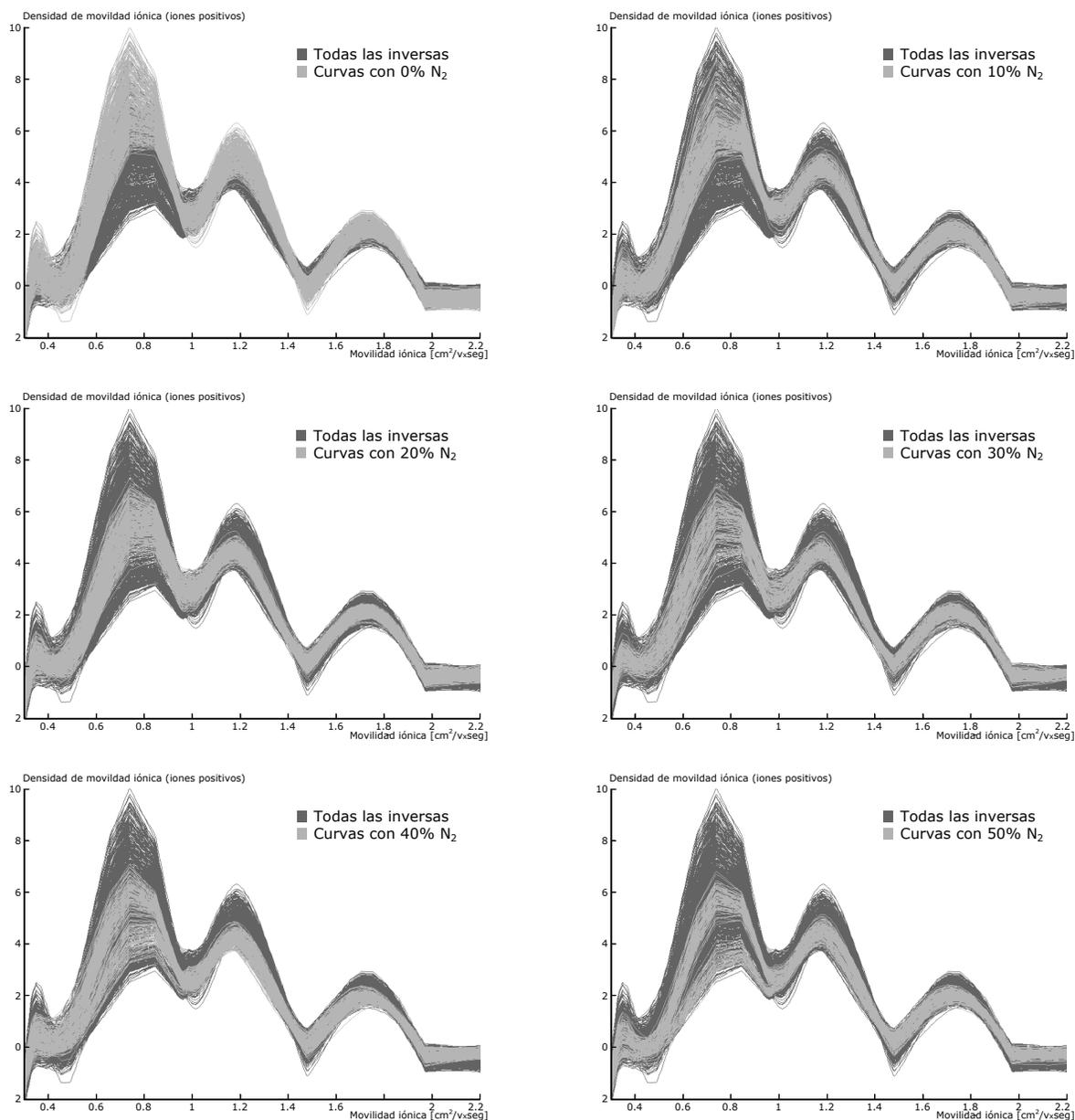


Figura A.19a. Distribución de las inversas para iones positivos de acuerdo a la cantidad de nitrógeno que poseen. Para calcular las inversas se ha utilizado la base de datos promediada a fin de obtener un total de 1395 curvas diferentes, las cuales se muestran en color oscuro, mientras que en color claro se indican únicamente las curvas que contienen un porcentaje dado de N₂: a) 0% - 310 curvas, b) 10% - 186 curvas, c) 20% - 248 curvas, d) 30% - 124 curvas, e) 40% - 186 curvas, f) 50% - 124 curvas, g) 60% - 124 curvas, h) 70% - 62 curvas, i) 80% - 31 curvas.

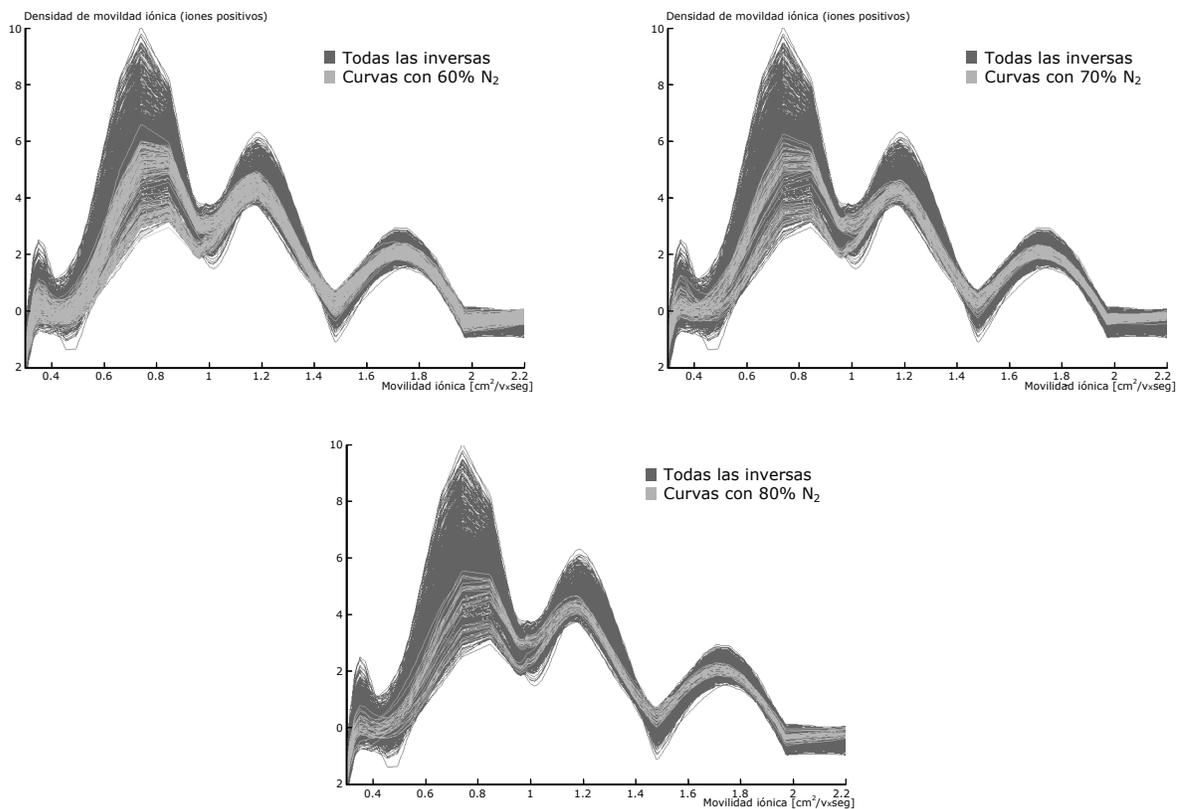


Figura A.19b. Distribución de las inversas para iones positivos de acuerdo a la cantidad de nitrógeno que poseen (continuación).

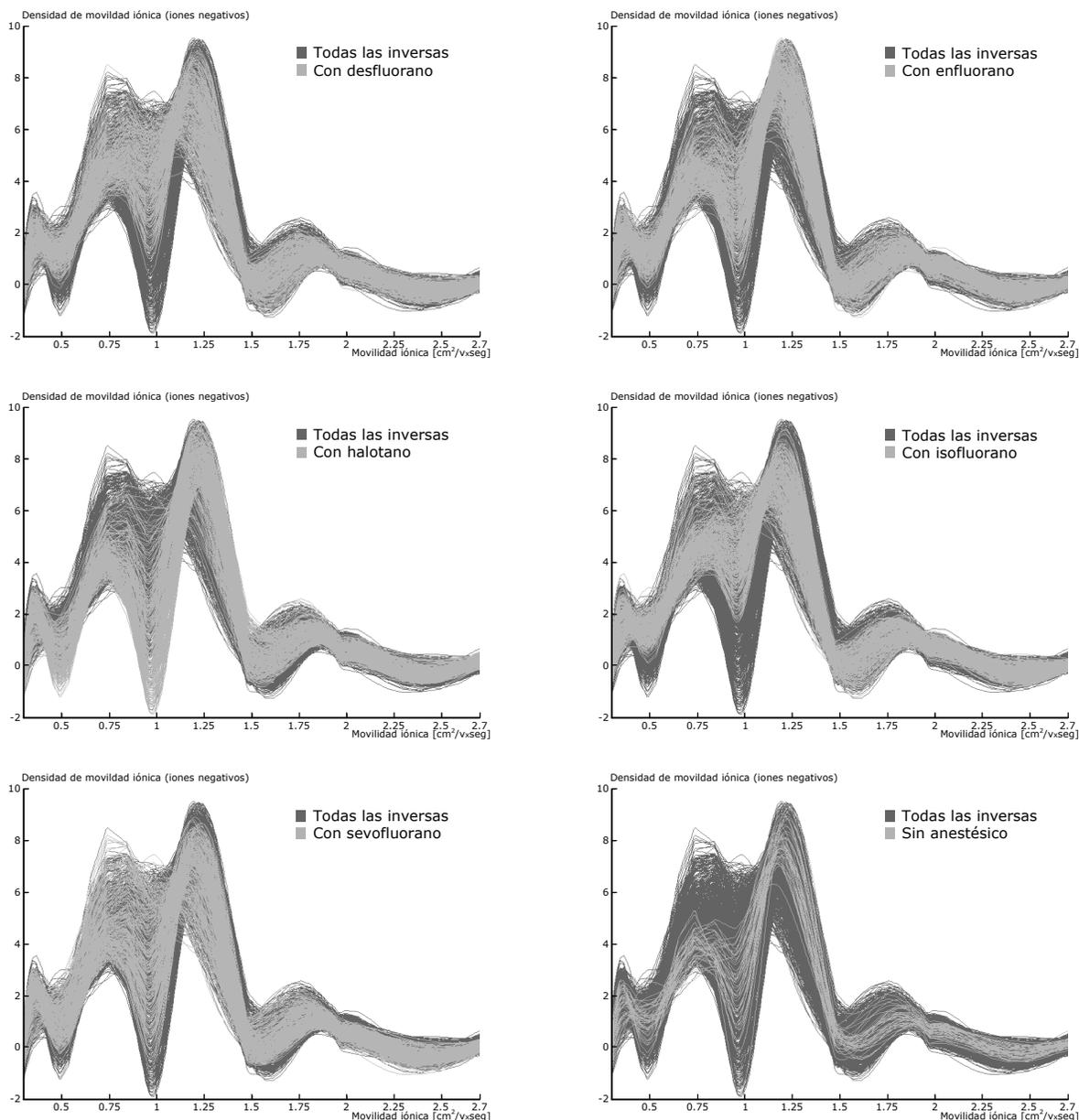


Figura A.20. Distribución de las inversas para iones negativos de acuerdo al tipo de agente anestésico que poseen. Para calcular las inversas se ha utilizado la base de datos promediada a fin de obtener un total de 1395 curvas diferentes, las cuales se muestran en color oscuro, mientras que en color claro se indican únicamente las curvas que contienen un anestésico dado: a) Desflurano - 270 curvas, b) Enflurano - 270 curvas, c) Halotano - 270 curvas, d) Isoflurano - 270 curvas, e) Sevoflurano - 270 curvas, f) Ningún anestésico - 45 curvas.

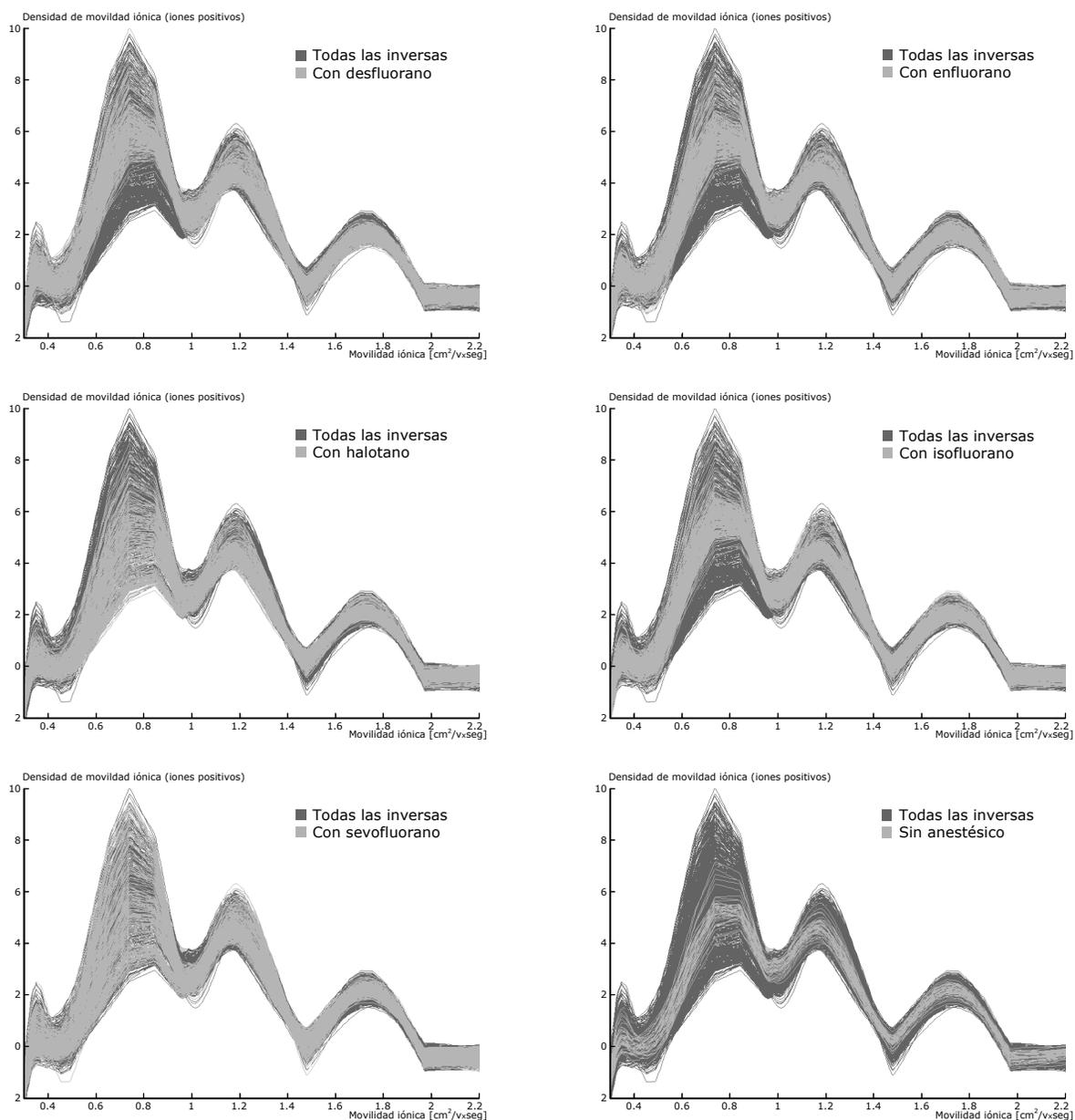


Figura A.21. Distribución de las inversas para iones positivos de acuerdo al tipo de agente anestésico que poseen. Para calcular las inversas se ha utilizado la base de datos promediada a fin de obtener un total de 1395 curvas diferentes, las cuales se muestran en color oscuro, mientras que en color claro se indican únicamente las curvas que contienen un anestésico dado: a) Desflurano - 270 curvas, b) Enflurano - 270 curvas, c) Halotano - 270 curvas, d) Isoflurano - 270 curvas, e) Sevoflurano - 270 curvas, f) Ningún anestésico - 45 curvas.

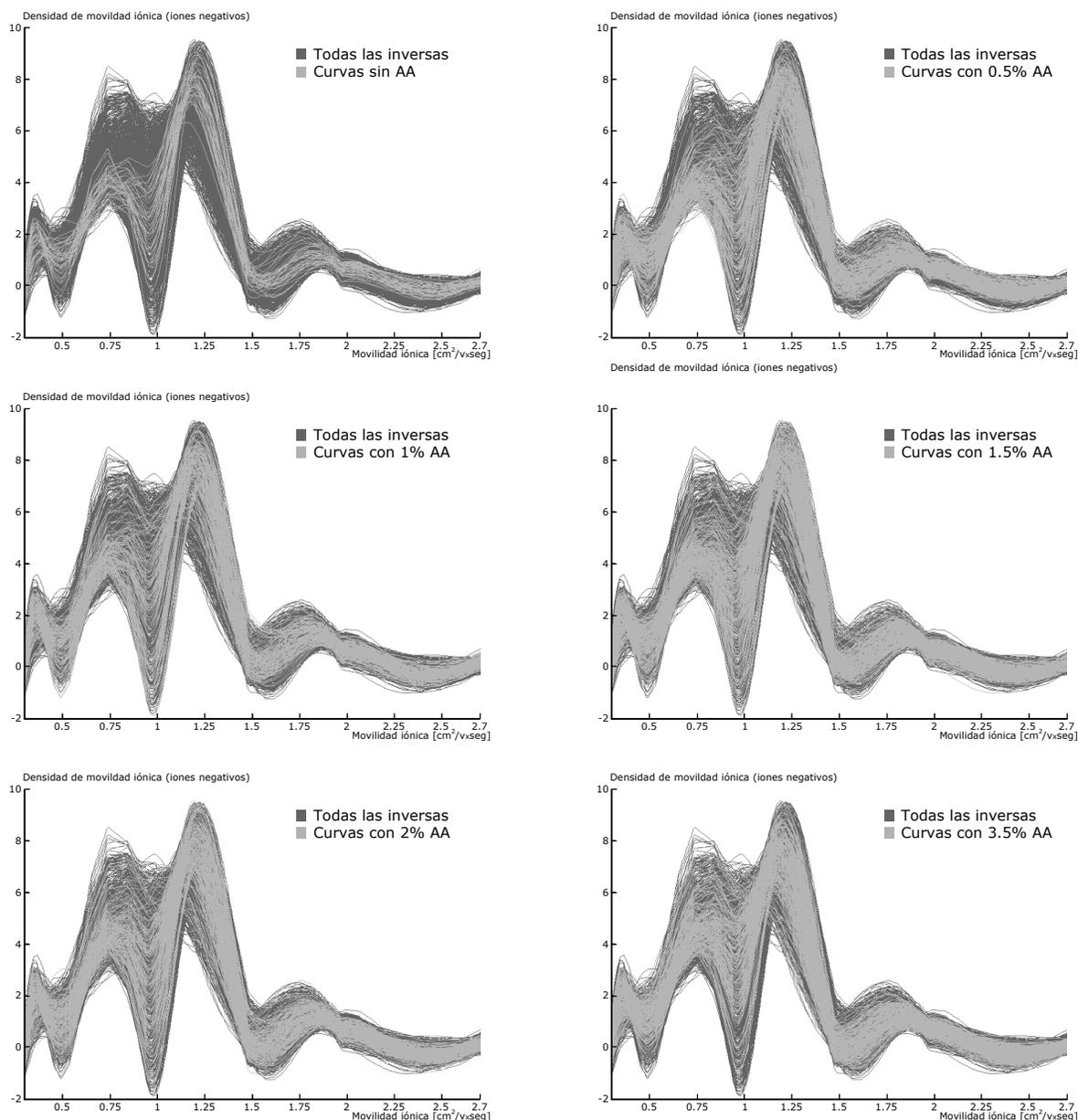


Figura A.22a. Distribución de las inversas para iones negativos de acuerdo al porcentaje de agente anestésico que poseen. Para calcular las inversas se ha utilizado la base de datos promediada a fin de obtener un total de 1395 curvas diferentes, las cuales se muestran en color oscuro, mientras que en color claro se indican únicamente las curvas que contienen un porcentaje dado de AA: a) 0% - 45 curvas, b) 0.5% - 180 curvas, c) 1% - 135 curvas, d) 1.5% - 225 curvas, e) 2% - 180 curvas, f) 3.5% - 225 curvas, g) 5% - 225 curvas, h) 7% - 90 curvas, i) 12.5% - 45 curvas, i) 18% - 45 curvas.

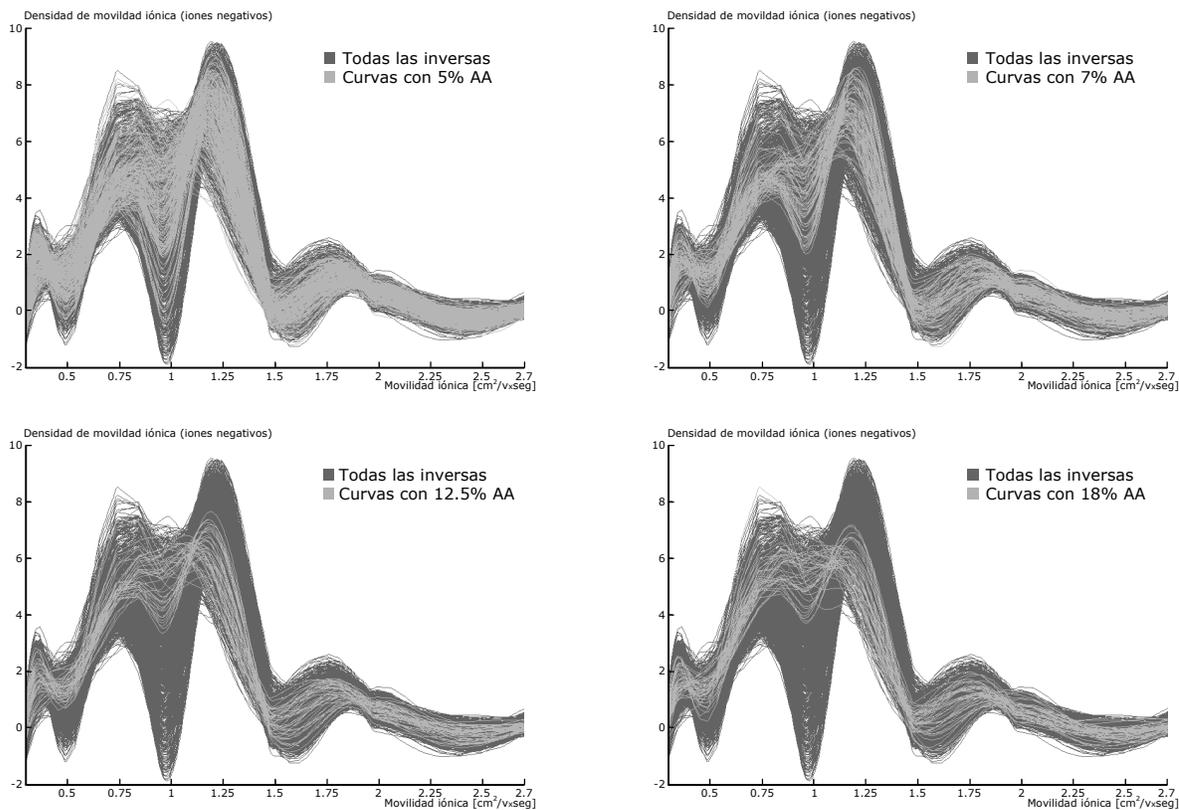


Figura A.22b. Distribución de las inversas para iones negativos de acuerdo al porcentaje de anestésico que poseen (continuación).

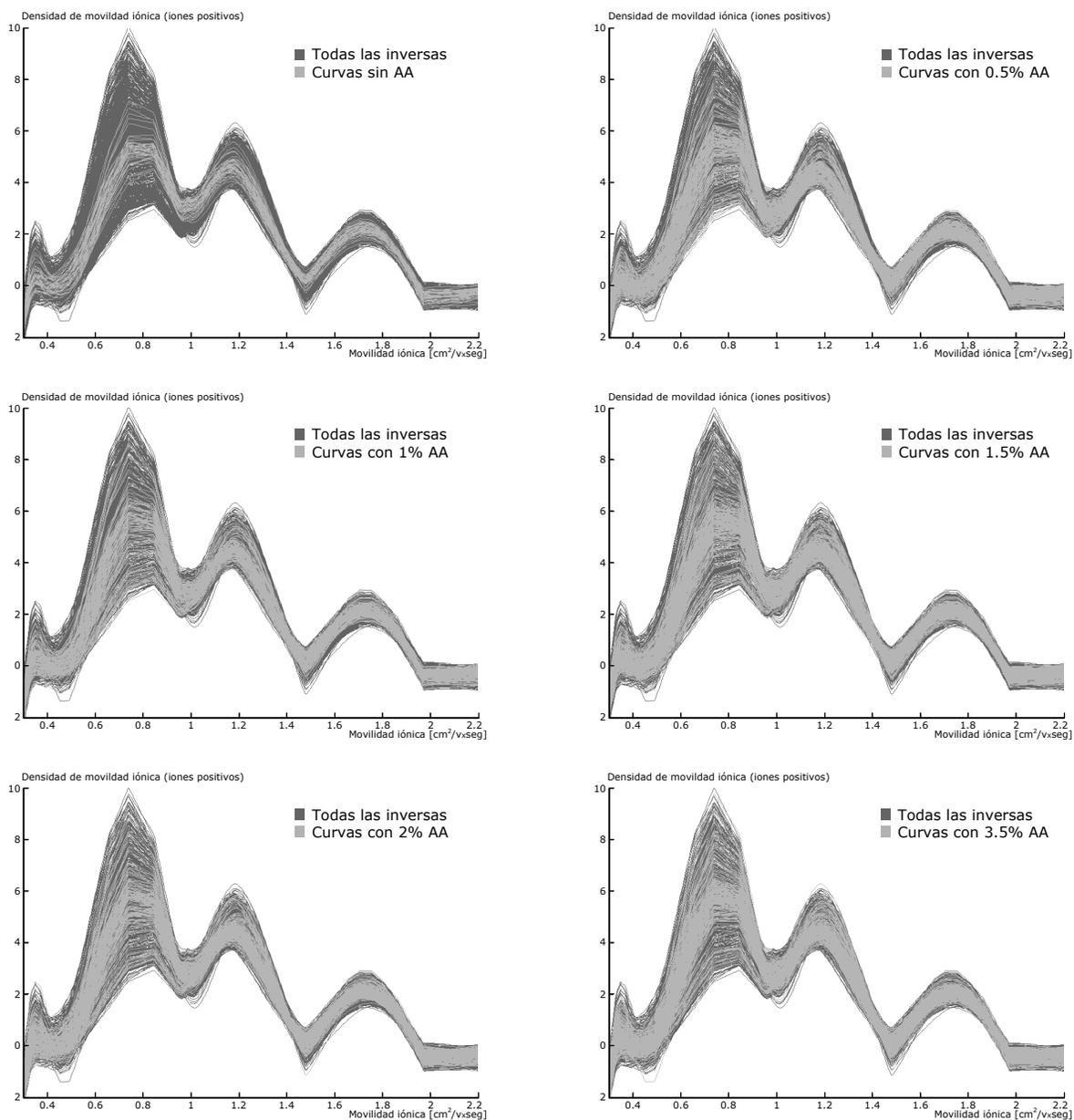


Figura A.23a. Distribución de las inversas para iones positivos de acuerdo al porcentaje de agente anestésico que poseen. Para calcular las inversas se ha utilizado la base de datos promediada a fin de obtener un total de 1395 curvas diferentes, las cuales se muestran en color oscuro, mientras que en color claro se indican únicamente las curvas que contienen un porcentaje dado de AA: a) 0% - 45 curvas, b) 0.5% - 180 curvas, c) 1% - 135 curvas, d) 1.5% - 225 curvas, e) 2% - 180 curvas, f) 3.5% - 225 curvas, g) 5% - 225 curvas, h) 7% - 90 curvas, i) 12.5% - 45 curvas, i) 18% - 45 curvas.

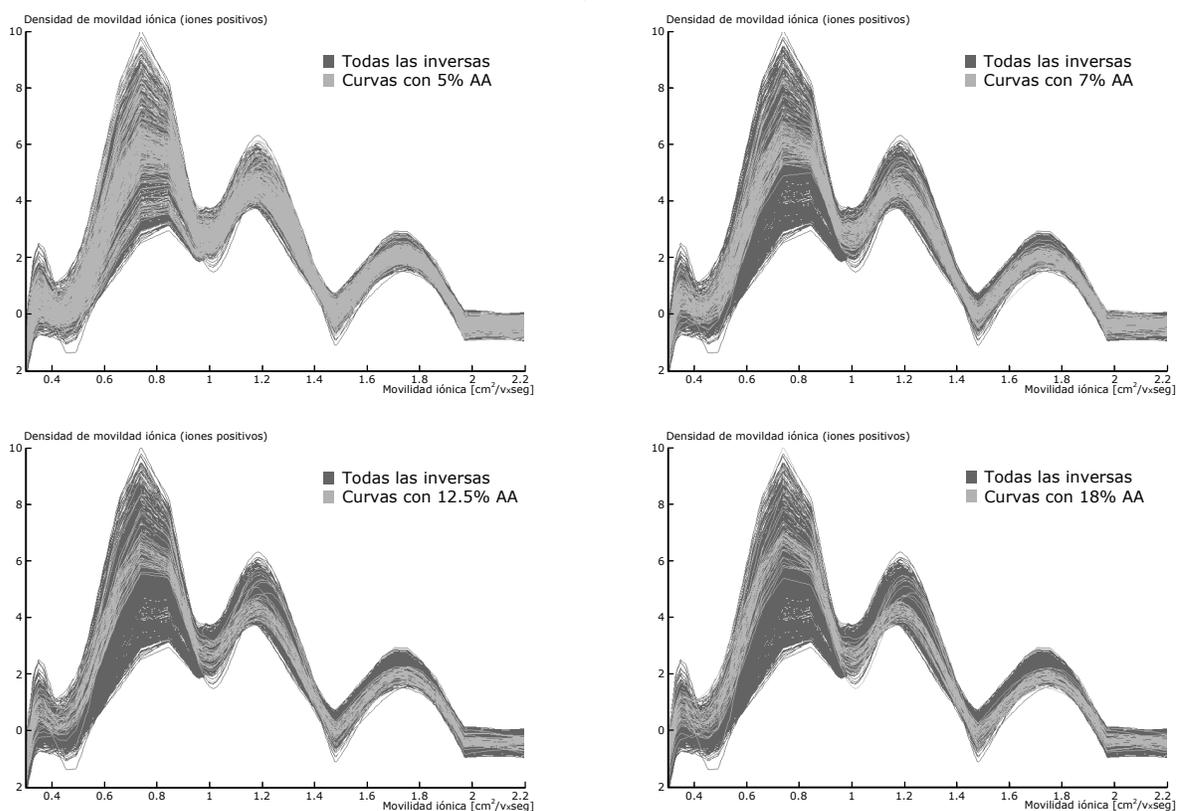


Figura A.23b. Distribución de las inversas para iones positivos de acuerdo al porcentaje de anestésico que poseen (continuación).

REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [1] Adriani J (1972) *The Chemistry and Physics of Anesthesia*, 2nd ed, Charles C. Thomas, Springfield IL
- [2] Aleksander, Morton (1990) *An Introduction to Neural Computing*, Chapman & Hall, London
- [3] Al-Kandari NM, Jolliffe IT (2005) Variable Selection and Interpretation in Correlation Principal Components, *Environmetrics*, v16 (659-672)
- [4] Allman SL, Chen C, Chen F (1993) Charged Particle Mobility Refrigerant Analyzer, US Patent #5,184,015
- [5] Baker J, Gribb M, Hill H, Jessing J, Moll A, Prouty W, Russell D, Hartman J (2003 Aug) A Miniaturized Ion-Mobility Spectrometer (IMS) Sensor for Wireless Operation, FAME (Frontiers in Assessment Methods for the Environment) Symposium, Minneapolis, MN
- [6] Bell AJ, Sejnowski TJ (1995) An Information Maximization Approach to Blind Separation and Blind Deconvolution, *Neural Computation*, v7 (1129-1159)
- [7] Bernstein M, de Silva V, Langford JC, Tenenbaum JB (2000 Dec) Graph Approximations to Geodesics on Embedded Manifolds, Technical Report, Stanford University, Stanford (<http://citeseer.ist.psu.edu/bernstein00graph.html>)
- [8] Bezdek JC (1974) Cluster Validity With Fuzzy Sets, *Journal of Cybernetics*, v3 n3 (58-73)
- [9] Black M (1990) Vagueness: An Exercise in Logical Analysis, *Journal of General Systems*, v17 n2 & 3, Reprinted from (1937) *Philosophy of Science*, v4, n4 (427-455)
- [10] Blitt CD, Editor (1985) *Monitoring in Anesthesia and Critical Care Medicine*, Churchill-Livingstone NY
- [11] Blyth DA (1983) Detection of Polar Vapors, US Patent #4,368,388
- [12] Bridle JS (1968) Probabilistic Interpretation of Feedforward Classification Networks Outputs with Relationships to Statistical Pattern Recognition, NATO ASI Series F67: NeuroComputing, Springer-Verlag
- [13] Brokenshire J, Pay N (1989) Ion-Mobility Spectrometry: A Promising Technology For Environmental Measurement, International Laboratory
- [14] Choudrey RA (2002) Variational Methods for Bayesian Independent Component Analysis, PhD Thesis, Pattern Analysis and Machine Learning, Robotics Research Group, University of Oxford
- [15] Comon P (1994) Independent Component Analysis: A New Concept?, *Signal Processing*, v35 (287-314)
- [16] Considine GD, Editor (2002) *Van Nostrand's Scientific Encyclopedia*, ninth edition, VNRC
- [17] CONTRAVES (1991), Internal Report on Gas-Sensor Apparatus, Environics Oy, Finland
- [18] Cover T, Van Campenhout J (1977 Sep) On the Possible Orderings in the Measurement Selection Problem, *IEEE Transactions on Systems, Man and Cybernetics*, SMC-7 (657-661)
- [19] Defence Staff (1990 Jul) Finland's M90 Detector, *Defence*, n46
- [20] DeHoog FR (1980) Review of Fredholm Equations of the First Kind, The Application and Numerical Solution of Integral Equations, Sijthoff & Noordhoff (119-134)
- [21] Dijkstra EW (1959) A Note on Two Problems in Connection with Graphs, *Numerische Mathematik*, n1 (269-271)
- [22] Dluzewski, Halsey, Simmonds (1983) Membrane Interaction with General and Local Anesthetics: A Review of Molecular Hypotheses of Anesthesia, *Molecular Aspects of Medicine*, n6 (459-573)
- [23] Dorsch JA, Dorsch SE (1994) *Understanding Anesthesia Equipment: Construction, Care and Complications*, 3rd ed, Williams & Wilkins (Chapter 16: Gas Monitoring)
- [24] Duda RO, Hart PE, Stork D (2001) *Pattern Classification*, 2nd Ed, Wiley-Interscience, NY
- [25] Eiceman GA, *Advances in Ion-Mobility Spectrometry: 1980-1990*, in *Critical Reviews in Analytical Chemistry*, CRC Press Inc (17-36)
- [26] Eiceman GA, Karpas Z (2006) *Ion-Mobility Spectrometry*, 2nd ed, CRC Press Inc, Boca Raton FL
- [27] Eiceman GA, Nazarov EG, Stone JA (2003) Chemical Standards in Ion-Mobility Spectrometry, *Analytica Chimica Acta*, n493 (185-194)
- [28] Eiceman GA, Nazarov, EG, Miller RA (2001) A Micro-Machined Ion-Mobility Spectrometer-Mass Spectrometer, *International Journal of Ion-Mobility Spectrometry*, v62 n3 (15-27)
- [29] Eiceman GA, Nazarov, EG, Miller RA, Krylov EV, Zapata AM (2002) A Micro-Machined Planar Field Asymmetric Ion Mobility Spectrometer as a Gas Chromatographic Detector, *The Analyst*, n127 (466-471)

- [30] Eiceman GA, Shoff DB, Harden CS, Snyder AP (1989 May) Ion Mobility Spectrometry of Halothane, Enflurane & Isoflurane Anesthetics in Air and Respired Gases, *Analytic Chemistry*, v61 n10 (1093-1099)
- [31] Estéves-Valencia P (1999 Dec) Selección de Características para Clasificadores Neuronales, *Anales del Instituto de Ingenieros de Chile* (65-74)
- [32] Ewing RE, Ewing GJ, Atkinson DA, Eiceman GA (2001) A Critical Review of Ion-Mobility Spectrometry for the Detection of Explosives and Explosive-Related Compounds, *Talanta*, v 54 n3 (515-529)
- [33] Feng X, Wang HL, Guan YF (2005) Progress in Ion-Mobility Spectrometry, *Progress in Chemistry*, v3 n17 (514-522)
- [34] Fisher RA (1936) The Use of Multiple Measurements in Taxonomic Problems, *Annals of Eugenics*, v7 (179-188)
- [35] Floyd R (1962) Algorithm 97 (Shortest Path), *Communications of the ACM*, v7 n345
- [36] Friedman JH (1987 Mar) Exploratory Projection Pursuit, *Journal of the American Statistical Association*, v82 n397 (249-266)
- [37] Fukunaga K (1990) Introduction to Statistical Pattern Recognition, 2nd ed, Academic Press
- [38] Gauyacq JP (1987) Dynamics of Negative Ions, World Scientific
- [39] Giese W (1882) Experimentelle Beiträge zur Kenntnis von Elektrischen Leitungsvermögen der Flammengase, *Annalytik Physik*, n17 (1-41, 236-257, 519-550)
- [40] Girolami M, Fyfe C (1996) Negentropy and Kurtosis as Projection Pursuit Indices Provide Generalised ICA Algorithms, *Advances in Neural Information Processing Systems*, Cichoki A & Back A, Editors
- [41] Graham WG, Fritsch W, Hahn Y, Tanis JA (1992) Recombination of Atomic Ions, NATO ASI Series, Plenum Press
- [42] Gregory, PC (2005) Bayesian Logical Data Analysis for the Physical Sciences: A Comparative Approach with Mathematica™ Support, Cambridge Press (Appendix A: Singular Value Decomposition)
- [43] Groetsch CW (1984) The Theory of Tikhonov Regularization for Fredholm Integral Equations of the First Kind, Pitman, Boston
- [44] Hansen PC (1992 Dec) Analysis of Discrete Ill-Posed Problems by Means of the L-Curve, *SIAM Review*, v34 n4 (561-580)
- [45] Hansen PC (1987) The Truncated SVD as a Method of Regularization, *BIT*, n27 (534-553)
- [46] Hansen PC (1990 May) Truncated Singular Value Decomposition Solutions to Discrete Ill-Posed Problems With Ill-Determined Numerical Rank, *SIAM Journal of Science & Statistical Computing*, v2 n3 (501-518)
- [47] Hansen PC (1992 Jan) Numerical Tools for Analysis and Solution of Fredholm Integral Equations of the First Kind, *Inverse Problems*, n8 (849-872)
- [48] Haykin S (1990) Modern Filters, Chapter 11: Eigenvalues and Eigenvectors, Macmillan Publishing Company NY
- [49] Haykin S (1998) Neural Networks: A Comprehensive Foundation, 2nd ed, Prentice Hall
- [50] Herault J, Jutten C (1986) Space or Time Adaptive Signal Processing by Neural Models, *Proceedings of the American Institute of Physics Conference: Neural Networks for Computing*, Denker JS, Editor, v151 (206-211)
- [51] Herschcovitch A, Editor (1990) Production and Neutralization of Negative Ions and Beams, *Proceedings of the 5th International Symposium of the American Institute of Physics*, Brookhaven, NY
- [52] Hill HH, Siems WF, St Louis RH, McMinn DG (1990) Ion-Mobility Spectrometry, *Analytical Chemistry*, v62 n23 (1201A-09A)
- [53] Hill HH (2003 Mar) Ion-Mobility Comes of Age, *Pittsburg Conference on Analytical Chemistry and Applied Spectroscopy*
- [54] Hill HH (2003 Oct) Recent Developments in Ion-Mobility Spectrometry as a Chemical Sensor, *NATO-Russia Workshop on Ecological Risks Associated with the Destruction of Chemical Weapons*, Luneburg, Germany
- [55] Hill HH, Simpson G (1997) Capabilities and Limitations of Ion-Mobility Spectrometry for Field Screening Applications, *Field Analytical Chemistry and Technology*, v1 n3 (119-134)
- [56] Hotelling H (1933) Analysis of a Complex of Statistical Variables into Principal Components, *Journal of Educational Psychology*, n24 (441)
- [57] Huber PJ (1985) Projection Pursuit, *The Annals of Statistics*, v13 n2 (435-475)
- [58] Hyvärinen A, Oja E (1997) A Fast Fixed-Point Algorithm for Independent Component Analysis, *Neural Computation*, v9 n7 (1483-1492)
- [59] Jain AK, Zongker D (1997 Feb) Feature Selection, Evaluation, Application and Sample Performance, *IEEE Transactions in Pattern Analysis and Machine Intelligence*, v 19 n2 (153-158)
- [60] Jenkins A (1989) Ion Drift Detector, US Patent #4,831,254
- [61] Jolliffe IT (2002) Principal Component Analysis, 2nd ed, Springer NY
- [62] Jones MC, Sibson R (1987) What is Projection Pursuit?, *Journal of the Royal Statistical Society, Series A*, v150 (1-36)
- [63] Jung A (2002 Mar) An Introduction to a New Data Analysis Tool: Independent Component Analysis, Regensburg
- [64] Karasek FW (1974) Plasma Chromatography, *Analytical Chemistry*, v46 n2 (710-720)
- [65] Karhapaa T, Katto T, Paakanen H (1992 Jun) Detection of CWA by Means of Aspiration Condenser Type IMS: Technical Report, Environics Oy, Mikkeli, Finland
- [66] Klir GJ, Yuan B (1995) Fuzzy Sets and Fuzzy Logic: Theories and Applications, Prentice Hall, New Jersey NY

- [67] Kolehmainen M, Ruuskanen J, Rissanen E, Raatikainen O (2001) Monitoring Odorous Sulfur Emissions Using Self-Organizing Maps for Handling Ion-Mobility Spectrometry Data, *Journal of the Air and Waste Management Association*, n51 (966-971)
- [68] Kruskal JB (1964) Multidimensional Scaling by Optimizing Goodness of Fit to a Non-Metric Hypothesis, *Psychometrika*, n29 (1-27)
- [69] Kruskal JB (1964) Non-Metric Multidimensional Scaling: A Numerical Method, *Psychometrika*, Num. 29 (115-129)
- [70] Larose DT (2005) *Discovering Knowledge in Data: An Introduction to Data Mining*, John Wiley & Sons Inc
- [71] Leithold L (1986) *Calculus with Analytic Geometry*, 5th ed, Harper & Row NY
- [72] Leonard JA, Kramer MA, Ungar LH, Using Radial Basis Functions to Approximate a Function and its Error Bounds, *IEEE Transactions on Neural Networks*, v3 n4 (624-627)
- [73] Lindinger W, Märk TD, Howorka F, Editors (1984) *Swarms of Ions and Electrons in Gases*, Springer-Verlag
- [74] Longwitz RG (2004), *Study of Gas Ionization in a Glow Discharge and Development of a Micro Gas Ionizer for Gas Detection and Analysis*, Doctor in Science Thesis n. 2919, Faculty of Engineering Sciences and Techniques, Microelectronics and Microsystems Institute, Federal Polytechnic School, Lausanne, France
- [75] MacQueen J (1967) Some Methods for Classification of Multivariate Observations, *Proceedings of the 5th Berkeley Symposium on Mathematical Statistics and Probability*, Volume I: Statistics, University of California Press
- [76] Maier-Borst M (1997 May), *Structure Determination of Small Clusters by means of Gas-Phase Ion Chromatography*, Doctor in Science Dissertation, Konstanz Univeristy, Germany
- [77] Marotta E, Bosa E, Scorrano G, Paradisi C (2005) Positive and Negative Ion Chemistry of the Anesthetic Halothane in Air Plasma at Atmospheric Pressure, *Rapid Communications in Mass Spectrometry*, v19 n3 (391-396)
- [78] Massey HSW (1976) *Negative Ions*, 3d ed, Cambridge University Press
- [79] McDaniel EW, Mason EA, Editors (1973) *The Mobility and Diffusion of Ions in Gases*, John Wiley & Sons
- [80] McDaniel EW, Mason EA, Editors (1988) *Transport Properties of Ions in Gases*, John Wiley & Sons
- [81] Moody J, Darken CJ (1989) Fast Learning In Networks of Locally Tuned Processing Units, *Neural Computation*, n1 (281-294)
- [82] NASA (1990) *Field-Domain Ion-Mobility Spectrometry*, NASA Technical Support Package, KSC-11465
- [83] NeuralWare Inc. (1995) *Neural Computing*, NeuralWare Technical Publications Group
- [84] Ong KY, Longworth TL, Barnhouse JL (2000 Dec) *Domestic Preparedness Program: Testing of M90-D1-C Chemical Warfare Agent Detector Against Chemical Warfare Agents*, US Army Chemical Research and Engineering Center, Aberdeen MD Proving Ground (Summary Report, ECBC-TR-###, UNCLASSIFIED)
- [85] Paakkanen H, Huttunen J (1994) Gas Detector Based on Ion-Mobility, *Finnish Air Pollution Prevention News*, v5 n6, (20-24)
- [86] Parker DB (1985) *Learning Logic*, Center for Computational Research in Economics & Management Science Report TR47, Massachusetts Institute of Technology, Cambridge MA
- [87] Pearson K (1901) On Lines and Planes of Closest Fit to Systems of Points in Space, *The London, Edinburgh and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science*, n2 (572)
- [88] Piché R (2004 Jul) *Regularization Operators for Multidimensional Inverse Problems with Kronecker Product Structure*, European Congress on Computational Methods in Applied Sciences and Engineering, ECCOMAS 2004, Jyväskylä
- [89] Press WH, et al (2002) *Numerical Recipes in C: The Art of Scientific Computing*, Revised 2nd ed, Cambridge University Press
- [90] *Product Information for Anesthetic Agents (2000)* Abbot Laboratories, Maruishi Pharmaceutical, Bristol-Myers Squibb, Zeneca Pharmaceuticals
- [91] Puulmalainen P (1991 Sep) *Method for Detection of Foreign Matter Contents in Gases*, US Patent 5,047,723
- [92] Ramón y Cajal S (1955) *Histologie du Système Nerveux de L'Homme et des Vertébrés*, Française Revue: Tome I (1952) & Tome II (1955), Maloine, Paris
- [93] Rao CNR (1964) *Chemical Applications of Infrared Spectroscopy*, Academic, NY
- [94] Raudys SJ, Jain AK (1991) Small Sample Size Effects in Statistical Pattern Recognition: Recommendations for Practitioners, *IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence*, v13 n3 (252-264)
- [95] Roboz J (1968) *Introduction to Mass Spectrometry*, Interscience NY
- [96] Rosenblatt R, Sacristán E, et al (1985 May) *Application of Ion Mobility Analysis Method to Surgical Anesthetic Gas Monitoring*, Proceedings of the IEEE 21st Annual Northeast Bioengineering Conference, Bar Harbor ME
- [97] Rosenblatt R, Sacristán E, et al (1986 Mar) *Application of Ion Mobility Analysis Method to Surgical Anesthetic Gas Monitoring*, Proceedings of the IEEE 22nd Annual Northeast Bioengineering Conference (48-50)
- [98] Rosenblatt R, Sacristán E, et al (1986 Mar) *Preliminary Feasibility Study of Anesthetic Agent Identification from Ion Mobility Spectra Using a Neural Network*, Proceedings of the IEEE 21st Annual Northeast Bioengineering Conference
- [99] Rosenblatt R (1997 May) *Ion Mobility Spectroscopy Analysis of Anesthetic Gases*, Degree of Master in Science Thesis, Biomedical Engineering, Worcester Polytechnic Institute, Boston MA

- [100] Roweis ST, Saul LK (2000) Nonlinear dimensionality reduction by locally linear embedding, *Science*, n290 (2323-2326)
- [101] Rumelhart DE, McClelland JL, Editors (1986) *Parallel Distributed Processing: Explorations in the Microstructure of Cognition Volume I: Foundations*, MIT Press
- [102] Sacristán E (1993) *Ion-Mobility Method for Inhalation Anesthesia Monitoring*, Ph.D. Dissertation, Worcester Polytechnic Institute, Worcester MA
- [103] Sacristán E (1995) *Ion-Mobility Method and Device for Gas Analysis*, US Patent #5,455,417
- [104] Sacristán E, Solis A (1998 Jun) A Swept-Field Aspiration Condenser as an Ion Mobility Spectrometer, *IEEE Transactions on Instrumentation and Measurement*, v47 n3 (769-775)
- [105] Sammon JW (1969) A nonlinear Mapping for Data Structure Analysis, *IEEE Transactions on Computers*, n18 (401-409)
- [106] Schmidt H (2004 Dec) *Detection of Fluorinated and Chlorinated Bonds with the Help of Ion Mobility Spectrometry*, Doctor in Science Dissertation, Faculty of Chemistry, Dortmund University, Germany
- [107] Shepard RN (1962) Analysis of Proximities: Multidimensional Scaling with an Unknown Distance Function I & II, *Psychometrika*, n27 (125-140 & 219-246)
- [108] Shepherd GM, Koch C (1990) *Introduction to Synaptic Circuits*, in *The Synaptic Organization of the Brain*, Oxford University Press NY (3-31)
- [109] Siler W, Buckley JJ (2005) *Fuzzy Expert Systems and Fuzzy Reasoning*, John Wiley & Sons Inc, Hoboken, New Jersey
- [110] Snyder AP, Harden CS, Brittain AH, Kim MG, Arnold NS, Meuzelaar HLC (1993) *Portable, Handheld Instrumentation: Gas Chromatography / Ion-Mobility Spectrometer*, Proceedings of the International Symposium on Field Screening Methods for Hazardous Waste and Toxic Chemicals, Las Vegas NV (831-841)
- [111] Solis A (1999 Mar) *Condensador de Aspiración Barrido para el Monitoreo de Gases Anestésicos*, Tesis de Maestría en Ciencias, Ingeniería Biomédica, UAM Iztapalapa, México
- [112] Solis A, Sacristán E (2006 Aug) Designing the measurement cell of a swept-field differential aspiration condenser, *Revista Mexicana de Física*, v52 (322-328)
- [113] Sugiyama Y, Sagamihara Y (1987) *Gas Sensor and Gas Detecting Method*, US Patent #4,704,536
- [114] Tammet HF (1970) *The Aspiration Method for the Determination of Atmospheric-Ion Spectra*, Translated from Russian by the Israel Program for Scientific Translations, Jerusalem, taken from (1967) *Scientific Notes of Tartu State University: Transactions on Air Ionization and Electroaerosols*, n195, Tartu, Estonia
- [115] Tenenbaum JB, de Silva V, Langford JC (2000) A global geometric Framework for Nonlinear Dimensionality Reduction, *Science*, n290 (2319-2323)
- [116] Thekkadath G (1993) *Simple Compact Ion-Mobility Spectrometer Having a Focusing Electrode Which Defines a Non-Uniform Field for the Drift Region*, US Patent #5,189,301
- [117] Thomson JJ, Rutherford E (1896) On the Passage of Electricity through Gases Exposed to Roentgen Rays, *Philosophy Magazine*, v72 (392-407)
- [118] Tikhonov AN (1963) Solution of Incorrectly Formulated Problems and the Regularization Method, *Soviet Math. Dok.*, n4 (1035-1038)
- [119] Torgerson WS (1952) Multidimensional scaling: Theory and method, *Psychometrika*, n17 (401-419)
- [120] Trunk GV (1979 Jul) A problem of Dimensionality: A Simple Example, *IEEE Transactions in Pattern Analysis and Machine Intelligence*, v PAMI-1 (306-307)
- [121] Tuovinen K, Paakkanen H, Haanninen O, Ruuskanen J (2001) Ion-Mobility Spectrometric Monitoring of Phosdrin from Foliage in Greenhouse, *AIHA Journal*, v62 n1 (80-86)
- [122] Utriainen M (2004 Jul) *Surveillance and Detection Of C- and B-Agents by Aspiration Ion-Mobility Spectrometry-Based Chemical Detectors*, Invited Lecture for the International Conference on Toxicology ICTX 2004, Tampere, Finland
- [123] Wang J, Editor (2006) *Encyclopedia of Data Warehousing and Mining*, IDEA Group Reference
- [124] Wang L, Fu X (2005) *Data Mining with Computational Intelligence*, Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg
- [125] White FA (1968) *Mass Spectrometry in Science and Technology*, Wiley NY
- [126] Whitten, Elmore, Latson (1993 Feb) Desflurane: A Review, *Progress in Anesthesiology*
- [127] Windham, MP (1981) Cluster Validity for Fuzzy Clustering Algorithms, *Fuzzy Sets and Systems*, v 5 (177-185)
- [128] Witten IH, Frank E (2005) *Data Mining: Practical Machine Learning Tools and Techniques*, 2nd ed, Elsevier-Morgan Kaufmann, San Francisco CA
- [129] Youngson R (1991 Feb) Why Anesthesia Can Still Kill, *New Scientist* (53-56)
- [130] Zadeh LA (1965) Fuzzy Sets, *Information and Control*, v8 n3 (338-353)
- [131] Zlatkis A, Pretorius V (1971) *Preparative Gas Chromatography*, Wiley NY

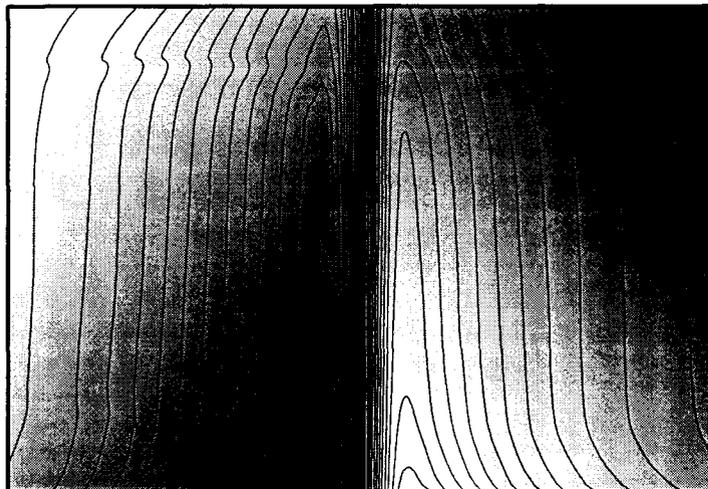


Universidad Autónoma Metropolitana
División de Ciencias Básicas e Ingeniería

Doctorado en Ciencias
Especialización en Ingeniería Biomédica

Sistema de procesamiento para
identificación y cuantificación
de agentes anestésicos

M. en C. Andro Antonio Solis Marcheff



Asesor:

Dr. Emilio Sacristán Rock

Sinodales:

Dr. Angel Kuri Morales

Dr. Antonio Muñoz Flores

Dr. Boris Escalante Ramírez

Dr. Emilio Sacristán Rock

Dra. Sonia Charleston Villalobos

Sala Cuicacalli
UAM Iztapalapa
16 Abril 2007
México D.F.