

Tartu Ülikool

Loodus- ja täppisteaduste valdkond

Tehnoloogiainstituut

Juhan Raedov

**Kapillaarelektroforeesil põhineva narkootiliste ainete
tuvastusseadme DrugHunteri püsivara arendus**

Magistritöö (30 EAP)

Arvutitehnika ja robotika eriala

Juhendajad:

Artur Abels, BSc

Jekaterina Mazina-Šinkar, PhD

Tartu 2020

Kapillaarelektroforeesil põhineva narkootiliste ainete tuvastusseadme DrugHunteri püsivara arendus

Kohapeal kasutatavad narkojoobe testid ei tuvasta täpseid narkootilisi ühendeid ning nende kogust süljeproovist. Neist puudustest üle saamiseks arendati portatiivne kapillaarelektroforeesil põhinev mõõteseade DrugHunter. Teiste kapillaarelektroforeesi seadmetega võrreldes on valminud seade kompaktsem ja spetsialiseeritud narkootikumide tuvastamiseks. DrugHunter on kõrgelt automatiseeritud – pärast vajalike kemikaalide ja süljeproovi sisestamist töötab seade iseseisvalt ja kuvab mõõtetulemuse.

Magistritöö raames valmis suur osa DrugHunteri püsivarast ja tarkvarast ning kontrolliti seadme elektroonika toimimist. Püsivara arendati seadme mahtuvuslikele vedelikunivoo anduritele, vialide karussellile ja termostabiliseerimise alamsüsteemile. Loodi seadme alamsüsteemidevaheline suhtlusprotokoll ja seadme pardaarvuti tarkvarale riistvara abstraktsioonikiht. Kontrollalgoritmid loodi näiteks Peltier' elemendi, harjavaba alalisvoolumootori ning samm-mootoriga peristaltilise pumba jaoks.

CERCS: T120 süsteemitehnoloogia, arvutitehnoloogia; T125 Automatiseerimine, robotika, T170 Elektroonika, T350 Keemiatehnoloogia ja -masinaehitus

Märksõnad: automatiseeritud testimine, kapillaarelektroforees, Peltier' element, termostabiliseerimine, mahtuvuslik andur, siinuskommuteerimine, harjavaba alalisvoolumootor, samm-mootor

Firmware development for DrugHunter – a narcotic substance detection device based on capillary electrophoresis

Currently available on-the-spot means to test drug consumption lack the capability to identify the exact narcotic substances and amounts in a sample of saliva. DrugHunter, a portable device using capillary electrophoresis, was developed to remedy these shortcomings. Contrary to other capillary electrophoresis devices, DrugHunter is more compact and is specialized for narcotic substance measurements. This device is highly automated – after inserting the necessary chemicals and a sample of saliva, it autonomously conducts measurements and displays the analysis' result.

During this master's thesis, large parts of DrugHunter's firmware and software were developed, including testing of the device's electronics. Firmware was developed for capacitive liquid level sensors, vial carousel and thermal stabilization subsystem. Communication protocols and a hardware abstraction layer for the onboard computer software were developed. A non-exclusive list of devices which's control algorithms are discussed in the thesis include a Peltier element, a brushless DC electric motor and a peristaltic pump driven by a stepper motor.

CERCS: T120 Systems engineering, computer technology; T125 Automation, robotics, control engineering; T170 Electronics, T350 Chemical technology and engineering

Keywords: automated testing, capillary electrophoresis, Peltier element, thermal stabilization, capacitive sensor, sinusoidal commutation, brushless DC motor, stepper motor

Sisukord

Lühendid ja mõisted	6
Sissejuhatus	7
1 Ülevaade.....	9
1.1 Narkojoobe tuvastamise võimalused välitöödel	9
1.2 Seadme arenduse eesmärk	10
1.3 DrugHunteri arendusele eelnenud teadustöö	11
1.4 Kapillaarelektroforeesi kirjeldus	12
1.4.1 Kapillaarelektroforeesi tööpõhimõte ja aparatuur	13
1.4.2 Elektroferogramm	16
1.5 Püsivara ja tarkvara arenduse ülevaade	17
2 DrugHunter.....	19
2.1 Seadme tüüpkasutus	19
2.2 Seadme ülesehitus.....	21
2.3 Viaalide valimise süsteem	22
2.3.1 Karussell.....	24
2.3.2 Tõstuk.....	30
2.4 Kiibi pesuvedelike ja jääkanuma nivooandurid.....	31
2.5 Kapillaari termostabiliseerija.....	34
2.6 Peaplaat ja selle alamsüsteemid.....	42
2.6.1 Peaplaadi kontrollitavad alamsüsteemid	42
2.6.2 Protseduurid	45
2.7 Proovi alarõhuga sisestamise koguse uurimine	47
2.8 Suhtlusprotokoll.....	50
2.9 Pardaarvuti tarkvara riistvara abstraktsioonikiht.....	52
3 Arutlus ja tuleviku tööd.....	55
Kokkuvõte	56

Viidatud kirjandus	57
Lisad	64
Lisa 1. Ioonide liikumise kiirus kapillaaris	64
Lisa 2. Detektor	65
Lisa 3. Siinuskommuteerimise magnetvoogude selgitus	66
Lisa 4. Nivooandurite trükkplaatide disain	67
Lisa 5. Peltier' elemendi LC filtri analüüs	68
Lisa 6. Peltier' elemendi mudeli kasutusnäited.....	70
Lisa 7. Proovi alarõhuga sisestamise katsed	71
Tänuavaldused.....	77
Lihtlitsents lõputöö reprodutseerimiseks ja üldsusele kättesaadavaks tegemiseks.....	78

Lühendid ja mõisted

ADC	- analoog-digitaalmuundur, ingl <i>analog-digital converter</i>
API	- programmiliides, ingl <i>application programming interface</i>
DAC	- digitaal-analoogmuundur, ingl <i>digital-analog converter</i>
EEPROM	- püsimälu liik, ingl <i>electrically erasable programmable read-only memory</i>
Elektroforees	- elektriliselt laetud osakeste liikumine vedelikus elektrivälja mõjul
IC	- integraallülitus, ingl <i>integrated circuit</i>
Kapillaar	- kapillaarelektroforeesi aparatuuri osa; enamasti peenike kvartstoru, kus toimub ainete elektroforeetiline lahutamine
Kapillaar- elektroforees	- elektroforees, mille puhul elektroforeetiline lahutamine toimub kapillaaris
Kiip	- kapillaarelektroforeesi aparatuuri osa, millesse on kapillaari ots sisestatud ja võimaldab kapillaarile kõrgepinget rakendada
MCU	- mikrokontroller, ingl <i>microcontroller unit</i>
PI-kontroller	- proportsionaal-integraalregulaator, ingl <i>proportional–integraal controller</i>
Puhver	- ehk puhverlahus on elektrolüüt, milles elektrivälja mõjul proovi laetud osakesed liiguvad
PWM	- pulsilaiusmodulatsioon, ingl <i>pulse width modulation</i>
SPI	- sünkroonse järjestiksuhtluse liidese standard, ingl <i>serial peripheral interface</i>
UART	- mikrokontrolleri asünkroonse jadasuhtluse perifeeriaseade, sageli kasutatakse lühendit ka suhtlusliidese tähistamisel, ingl <i>universal asynchronous receiver-transmitter</i>
Viaal	- väike (sageli korgiga) anum kemikaalide jms hoidmiseks

Sissejuhatus

Narkootiliste ja psühhotroopsete ainete tarvitamine on ülemaailmne kasvav probleem. Neid tarvitatakse sageli retseptiravimitena, kuid väärkasutamine liigkõrgetes doosides võib põhjustada terviseprobleeme. Lisaks võib narkootilisi aineid tarvitanu põhjustada ohtlikke olukordi, näiteks sõidukit juhtides või põhjustades ametikohal vigu tehes tööõnnetusi. Narkootilised ja psühhotroopsed ained võivad esile tuua ka hulljulget ja vägivaldset käitumist.

ÜRO Uimastite ja Kuritegevuse Büroo 2019. aasta uimastiaruandes [1] hinnati, et 2017. aastal oli uimastite tarvitajaid 271 miljonit inimest, st 5% maailma 15-64 aastasest elanikkonnast ning 35 miljonil esines tarvitamisest tulenevaid terviseprobleeme. 2017. aastal hukkus uimastite tarvitamise tõttu hinnanguliselt 585000 inimest. Süstivatest uimastite manustajatest, keda on hinnanguliselt 11 miljonit, on kaheksandik nakatanud HIVi. Kõrge oht on nakatuda ka C- ja B-hepatiiti [2]. Narkootiliste ainete laialdase leviku ja tarvitamise on võimaldanud moodne infrastruktuur – interneti vahendusel on tõusnud narkootikumide kohta informatsiooni kättesaadavus ja soetamisvõimalused [1].

Inimeste turvalisuse ja tervise huvides on vaja narkojoovet tuvastada. Seejuures võib tuvastamise vajadus tekkida välitöödel, näiteks politseitöös sündmuskohal või reidil, piiripunktis või lennujaamas. Välitöö puhul on oluline, et proovi võtmine oleks lihtne ja ühtlasi on olukorra kiireks lahendamiseks vaja tulemus saada kohapeal, ilma laborisse transpordi ja pika analüüsimisajata. Hetkel kasutatakse sündmuskohal testimiseks enamasti immunoloogilisi testeid, kuid need tuvastavad tavaliselt vaid narkootiliste ainete rühmi, mitte konkreetset narkootilist ainet, ei hinda ühendite kogust proovis ja annavad sageli valepositiivseid tulemusi. Seetõttu tekib vajadus täiendavateks analüüsideks ja seeläbi suureneb aja- ning rahakulu [3].

Eelnimetatud puuduste lahendamiseks töötati välja kapillaarelektroforeesil põhinev narkootiliste ainete tuvastamise seade DrugHunter. DrugHunter suudab määrata lisaks narkootiliste ainete rühmadele ka konkreetseid ained ning nende kontsentratsioone süljeproovis. Valminud seadet iseloomustab mõõteprotsessi kõrge automatiseerituse tase koos intuiitvise puuetundliku ekraaniga kasutajaliidesega. Seadme disainil on rõhku lisatud portatiivsusele, eesmärgiga võimaldada kasutada seda välitöödel.

Magistritöö raames arendati suur osa DrugHunteri püsivarast, tegeldi elektroonika silumisega ja programmeeriti pardaarvuti seadet kontrolliv tarkvara osa. Neist suurima mahuga oli

püsivara arendamine. See hõlmas erinevate mikrokontrolleritega trükkplaatidele kontrollprogrammi programmeerimist, erinevate andurite kasutamist, aktuaatoritele ja mootoritele kontrollerite arendamist ning seadme erinevate alamsüsteemide integreerimist tervikseadmeks suhtlusprotokollide abil.

Käesolevas töös antakse esiteks ülevaade DrugHunteri arendusele eelnenud teadustööst. Varasema teadustöö [3] raames töötati välja narkootiliste ühendite tuvastusmeetodid kapillaarelektroforeesi abil ja valmis prototüüp, millega tuvastati edukalt narkootilisi ühendeid süljeproovidest. Seejärel antakse ülevaade kapillaarelektroforeesi tööpõhimõttest ning tuuakse välja DrugHunteri ainulaadsed omadused. Viimasena kirjeldatakse valminud seadme arendustööd. Selleks kirjeldatakse seadme toimimisest üldpildi saamiseks lühidalt seadme kõiki aspekte – mehaanilist ülesehitust, kasutajaliidest ning elektroonikat. Põhjalikult keskendutakse aspektidele, millesse panustas töö autor: püsivara arendusele ja elektroonika silumisele.

Käesolev projekt on rahastatud Euroopa Liidu Sisejulgeolekufondi ja Eesti Vabariigi Siseministeeriumi vahenditest. Projekti tunnus: ISFP-26 Teadus- ja arendustöö tõendusliku narkotestri prototüübi II väljatöötamiseks (LEP18060).

1 Ülevaade

Antud peatükk annab ülevaate erinevatest narkootikumide tuvastamise võimalustest ning toob välja põhjused, miks arendati kapillaarelektroforeesil põhinev narkootikumide tuvastamise seade DrugHunter. Lisaks antakse ülevaade kapillaarelektroforeesi tööpõhimõttest ning selle teostamiseks vajalikust aparatuurist.

1.1 Narkojoobe tuvastamise võimalused välitöödel

Narkojoobe tuvastamisel välitöödel on oluline proovi lihtne võtmine ja kohapealne tuvastustulemuse saamine. Sellistele tingimustele vastavaid testimise viise ja seadmeid on vähe ja neil on omad puudused.

Sündmuskohal kasutatavatest testidest on hetkel kõige laialdasemalt kasutatavad immunoloogilised testseadmed, sest need on odavad, lihtsasti kasutatavad ja annavad kiiresti kvalitatiivse tulemuse, andes eristatava värviga teada ühendite olemasolust proovis. Kuigi leidub vereprooviga toimivaid kvantitatiivseid immunotestreid [4], siis süljeprooviga töötavad kvantitatiivsed testrid pole kättesaadavad [3]. Immunoanalüüsi tööpõhimõte näeb ette, et testri antikehad reageerivad teatud tüüpi molekulide grupiga. Antud molekulide gruppi ei pruugi kuuluda vaid narkootilised ained, mistõttu võib tester reageerida ka mittenarkootilisele ainele. Lisaks on immunotestrite puhul probleemiks defektsed testseadmed (kuni üks neljast), kõrge varieeruvus testri tundlikkuses ning kõrge valepositiivsete ja valenegatiivsete tulemuste arv (kuni 32%) [5] [6] [7] [8]. Eelnimetatud immunotestrite puuduste tõttu kasutatakse seda esmase testi tegemiseks ning positiivse vastuse korral tehakse hiljem kinnitav analüüs laboris.

Teine välitöödel kasutatav narkojoobe tuvastamise võimalus on inimese joobeseisundile viitavate tunnuste hindamine. Eestis hinnatakse joobeseisundit järgnevate tunnuste põhjal: aeglustunud reaktsioon; häirunud kõne; aja, isiku ja koha tajumise häired; teadvuse seisund; mäluhäired; koordinatsioonihäired; käitumishäired; isiku välimus; hälbed silmade välimuses ja silmavaates [9]. USAs kasutatakse esmaseks joobe tuvastamise viisiks standardiseeritud teste (Standardized Field Sobriety Test), mis on tõhusad alkoholihoobe puhul [10], kuid ei sobi kõikide narkootikumide põhjustatud joobe hindamiseks [11]. Inimeste joobetunnuste visuaalse hindamise puudusteks on usaldusväärsus [12] ja vajadus teostada hilisem mõõtmine laboris.

1.2 Seadme arenduse eesmärk

Narkotestide tegemiseks saab kasutada laboriseadmeid, millel ei ole immunotestrite ja visuaalsete testide mõõtmise kvantitatiivsuse ja tundlikkuse probleeme, kuid laboriseadmed siiski ei sobi välitöödel kasutamiseks. Välitöödel kasutamist piiravad esiteks seadmete suured mõõtmed, need on rasked ja seetõttu ei ole kaasaskantavad. Teiseks ei ole need spetsialiseeritud narkootikumide tuvastamiseks, vaid annavad mõõtetulemuse, millelt ainete olemasolu tuvastamine vajab kõrgelt kvalifitseeritud operaatorit, mis piiraks seadme kasutusele võtmist politsei ja piirivalve välitööl.

Eelnevast lähtuvalt seati uue mõõteseadme arendamisel nõueteks:

- portatiivsus – seadme mass ja mõõtmed peavad olema seadme käsitsi tõstmist võimaldavad;
- intuiitiivsus ja kasutamise lihtsus – seadme kasutajaliides peab tekstidega ja piltidega seadme operaatorit juhendama ja võimaldama seadet kasutada eelneva teadusliku taustata inimesel pärast kiiret väljaõpet;
- automatiseeritud mõõtetulemuste analüüs – seade tuvastab iseseisvalt mõõtetulemuste põhjal proovis sisalduvate narkootikumide olemasolu ja kogust;
- spetsialiseeritus narkootikumide tuvastamisele – spetsialiseeritus võimaldab seadmest üleliigne funktsionaalsus eemaldada ja sellega seadme keerukust vähendada ning kasutamist lihtsustada;
- kiirus – piisavalt kiire mõõteprotsess, umbes 15 minutit.

Nimetatud nõuetele ei vasta ükski turul olev seade, kuid suurt potentsiaali näitavad kapillaarelektroforeesil põhinevad mõõteseadmed. Kapillaarelektroforees on lahutusmeetod, mille teostamiseks vajalik aparatuur (loe pikemalt peatükis 1.4.1) on lihtsasti miniaturiseeritav.

Turul olemasolevad kapillaarelektroforeesi seadmed on suured, rasked ning vajavad enamasti eraldiseisvat kontrollarvutit. Tabelis 1 on võrreldud käesolevas töös kirjeldatud DrugHunteri mõõtmed kahe turul oleva seadmega Agilent 7100 CE ja Lumex CAPEL-205. Nii Agilenti kui Lumexi tarkvara ei ole suunitletud narkootikumide tuvastamiseks – tarkvaraga saab käivitada erinevate parameetritega mõõtmisi ning mõõteprotsessi viib seade läbi iseseisvalt, kuid mõõtetulemuste analüüsi peab teostama spetsialist. Ühtlasi eeldab nende seadmete tarkvara kasutamine laborispetsialisti teadmisi.

Tabel 1. Kapillaarelektroforeesi seadmete mõõtmete võrdlus

	Agilent 7100 CE [13]	Lumex CAPEL-205 [14]	DrugHunter
Mõõtmed			
- laius	35 cm	47 cm	40 cm
- sügavus	51 cm	53 cm	35 cm
- kõrgus	59 cm	41 cm	40 cm
Mass	35 kg	30 kg	18 kg
Seadme kontrollimiseks PC vajadus	Jah	Jah	Ei
Spetsialiseeritud tarkvara narkootikumide tuvastamiseks	Ei	Ei	Jah

Teadustöid ja prototüüpe on tehtud ka portatiivsetest kapillaarelektroforeesi seadmetest [15] [16] [17] [18], millest mõne tööprotsess kemikaalide sisestamisest kuni mõõtetulemuse saamiseni on võrdlemisi automatiseeritud, kuid automatiseerimata on mõõtetulemuse analüüs. Nimetatud seadmete puhul pole uuritud narkootiliste ühendite tuvastamise võimekust ning need ei ole ka turul kättesaadavad.

1.3 DrugHunteri arendusele eelnenud teadustöö

Välitöödeks mõeldud narkootikumide tuvastamise seadme puhul on oluline, et inimeselt proovi võtmine oleks lihtne. Narkootikumide on võimalik tuvastada näiteks süljeproovist, vereproovist, uriinist või väljahingatavast õhust. Süljeproovi eeliseks on asjaolu, et vereproovi võtmine vajab põhjalikku väljaõpet ning uriiniproov ei pruugi tuvastada inimese hetkelist narkojoovet, vaid hindab varasemalt manustatud aineid [3]. Väljahingatavast õhust narkootiliste ühendite tuvastamine vajab ühendite madala kontsentratsiooni tõttu proovi töötlemist ning väga tundlikke labori mõõteseadmeid [19] [20]. Lisaks otsustati süljeproovi kasutada, sest selles on narkootiliste ühendite kontsentratsioon kõrge, ületades mõnel juhul kontsentratsiooni vereproovis [21] [22] [23] [24].

Tallinna Tehnikaülikooli keemia ja biotehnoloogia instituudis uuriti kapillaarelektroforeesil põhineva süljeproovist narkootikumide tuvastamise seadme [25] [26] teostatavust. Lisaks edukatele narkootiliste ainete tuvastamisele hinnati kapillaarelektroforeesi eeliseks lihtsasti miniaturiseeritavat aparatuuri [3]. Seadme eri osade ja seeläbi terve seadme mõõtmete vähendamine võimaldab välja töötada portatiivse ja välitöödeks sobiliku seadme.

Teadustöö käigus valminud prototüübiga testiti erinevate narkootiliste ühendite tuvastamise võimekust ja töötati välja narkootikumide tuvastamiseks mõõteprotsessid. Prototüüpi testiti ka välitöödel ning tuvastusvõimekust hinnati kõrge rõhu vedelikkromatograafia-massispektromeetria mõõteseadme vastu. Välitöödel võeti narkootikumide tarvitamises kahtlustatud inimestelt 110 proovi. Proovide analüüsitulemuste võrdlemisel hinnati prototüübi tuvastusvõimekus väga heaks: üldine determinatsioonikordaja võrdlusseadmega ühendite kvantitatiivsete andmete puhul $r^2 = 0,998$. [3]

Eelmainitud prototüüp oli automatiseerimata, koosnedes põhilistest kapillaarelektroforeesi teostamiseks vajalikest komponentidest ja vajab kasutamiseks põhjalikku seadme ehituse tundmist ning mitme arvutitarkvara kasutamisoskust, millega teostati andmete kogumine ja andmeanalüüs [3] [27]. Eduka narkootiliste ainete tuvastaja prototüübi arendamisel leiti seadme erinevad parameetrid, mis ainete tuvastamist võimaldasid ning tuli ette vajadusi, mille rahuldamiseks oli tarvis disainida seadmele uusi komponente. Neid teadmisi on rakendatud DrugHunteri mehaanika, optika ja elektroonika arendustöös. DrugHunterile lisatud kõrge automatiseeritus ja kasutajasõbralikkus võimaldavad seadme lühikese väljaõppega kasutusele võtta.

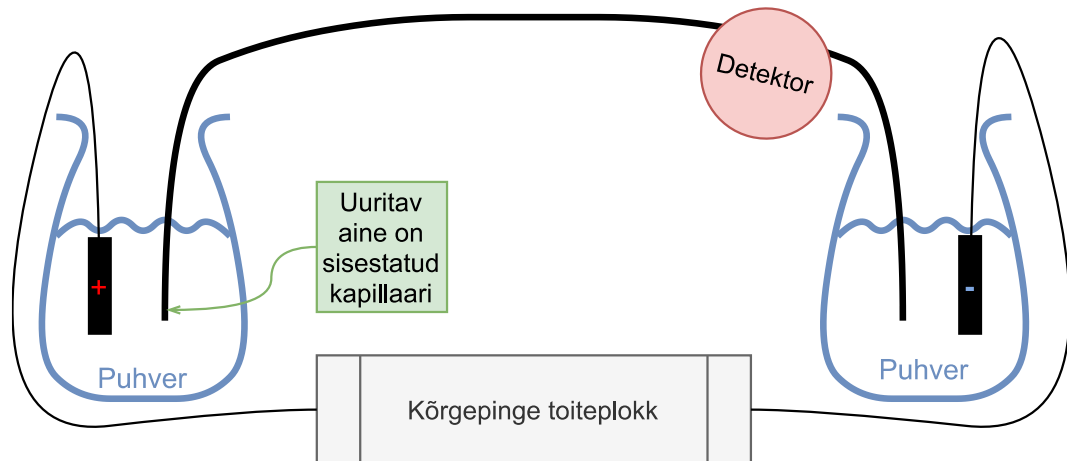
1.4 Kapillaarelektroforeesi kirjeldus

Elektroforees on laetud osakeste lahutamine elektrivälja mõjul. Uuritav proov sisestatakse elektrolüüti, mida nimetatakse puhverlahuseks või puhvriks. Puhvriga proov asetatakse elektrivälja, mille mõjul hakkavad proovis olevad ained puhvri sees erinevate kiirustega liikuma – toimub ainete elektroforeetiline lahutamine. Puhver on üldjuhul elektrit juhtiv vesilahus. [28, lk 10]

Kapillaarelektroforeesi puhul toimub elektroforeetiline lahutamine kapillaartorus. Kapillaarelektroforeesi on kohandatud eri viisidel ja saadud sedasi kapillaarelektroforeesi erinevad variandid ehk erimenetlused. Neist levinuim on kapillaartsoonelektroforees, mida kasutatakse ka DrugHunteril. Järgnevalt kirjeldatakse DrugHunteril kasutatud kapillaartsoonelektroforeesi tööd.

1.4.1 Kapillaarelektroforeesi tööpõhimõte ja aparatuur

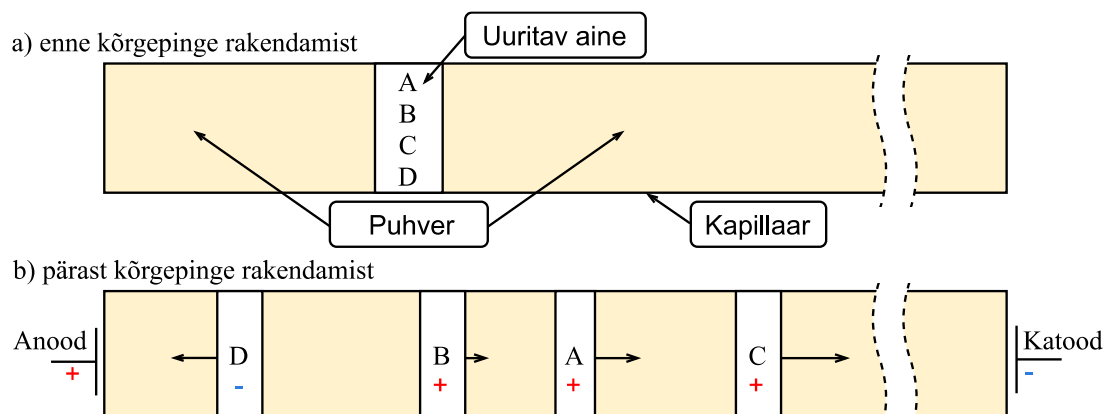
Kapillaarelektroforeesi teostamiseks vajalik aparatuur koosneb põhiliselt joonisel 1 näidatud osadest. Nendeks on kõrgepinge toiteplokk, elektroodid (anood ja katood), puhverlahusega täidetud anumad, kapillaar ja detektor.



Joonis 1. Kapillaarelektroforeesi põhiline aparatuur

Enne mõõtmise algust peab kapillaar olema puhvriga täidetud ja kapillaari otsad paigutatud puhvriga täidetud anumatesse. Proov sisestatakse kapillaari anoodipoolsesse otsa. Kõrgepinge rakendamisel hakkavad kapillaaris olevad ained liikuma. Katoodipoolse otsa poole liikuvad ained tuvastatakse detektori abil nende ainete detektori ette jõudmise aja järgi.

All oleval joonisel 2 (alamosas a) näidatakse puhvriga täidetud kapillaari enne kõrgepinge rakendamist. Lisaks puhvrile on kapillaaris ka uuritav aine, kus A, B, C ja D tähistavad selle erinevate laengutega ionide kogumikku aines.



Joonis 2. Ioonide liikumine kapillaaris elektrivälja mõjul

Kõrgepinge rakendamisel hakkavad uuritava aine ioonid sõltuvalt enda laengust liikuma

vastavalt kõrgepingeallika anoodi või katoodi poole, joonisel (alamosa b) [28, lk 6-8]. Ioonide erinev liikumiskiirus on tingitud eelkõige ionide erinevatest laengutest ja mõõtmetest; üldist ionide liikumiskiirust mõjutab elektrivälja tugevus ning puhvri viskoossus, loe täpsemalt Lisa 1. Tänu ionide erinevatele liikumiskiirustele jõuavad ionide kogumikud detektori ette erinevatel ajahetkedel, mida nimetatakse migreerumisaegadeks. Erinevate ionide migreerumisaegade abil tuvastatakse erinevate ionide olemasolu proovis, sellest näide peatükis 1.4.2.

Kirjeldatud kapillaartsoonelektroforeesil tuvastatakse üldjuhul vaid katoodi poole liikuvaid ioone, sest vaid need mööduvad detektorist. Anoodi poole liikuvaid ioone saab tuvastada, kui elektroosmootse voo kiirus ületab nimetatud ionide kiirust. Elektroosmoos on nähtus, mille puhul liigub kõrgepinge rakendamisel kogu kapillaaris olev puhver katoodi suunas ja nähtus on tingitud puhvri pH-st [29]. Piisava elektroosmootse voo kiiruse puhul kantakse puhviga ka anoodi poole liikuda üritavad ioonid detektori eest läbi.

Kõrgepinge toiteplokk, puhverlahuse anumad, kapillaar ja detektor moodustavad kõige lihtsama kapillaarelektroforeesi aparatuuri. Tegelikus seadmes on lisaks veel muid süsteeme, näiteks ainete kapillaari sisestamise ning seadme pesemise süsteemid.

Detektor

Levinumad kapillaarelektroforeesi detektorid on fluorestsentsdetektorid, millega saab tuvastada fluorestseeruvaid aineid. Fluorestsentsdetektor koosneb ergastuslambist, mille abil pannakse kapillaaris olevad ioonid fluorestseeruma ning mõõtmiselemendist, mis mõõdab fluorestsentsi tugevust. Detektor paikneb enamasti kapillaari anoodipoolsest otsast kaugemal ja katoodipoolsele otsale lähemal, et ioonidel oleks rohkem migreerumisaega. [28, lk 10-11]

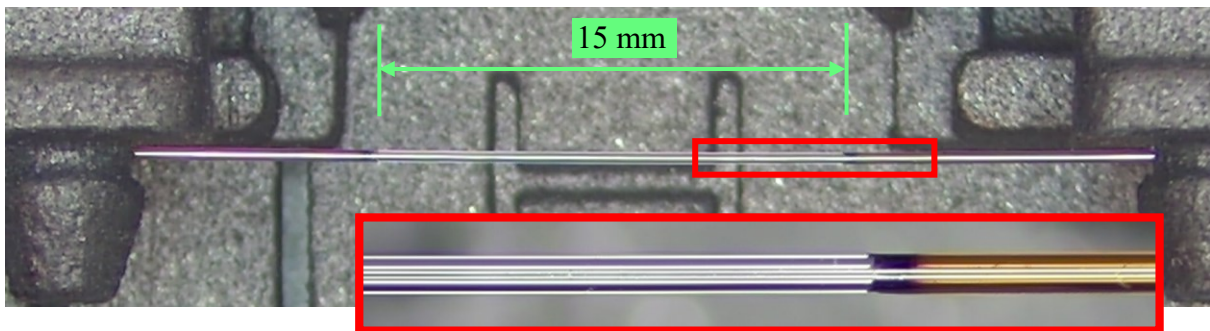
Detektori ergastuslambi võimsus ja lainepikkus mõjutavad, millised ained kui tugevasti fluorestseeruvad. Teisalt on olulised ka detektori mõõtmiselemendi tundlikkus ja mõõdetav lainepikkuste vahemik, sest erinevad ained kiirgavad ergastamisel erineva lainepikkusega valgust. Seega on detektor üks olulisemaid komponente tervest aparatuurist, sest see määrab, milliseid aineid seadmega tuvastada saab. DrugHunteri detektori lihtsustatud ülesehitus on peatükis Lisa 2.

Kõrgepinge toiteplokk

Aine elektroforeetiliseks lahutamiseks rakendatakse kapillaari otstele kõrgepinge. Enamasti piisab elektroforeetilise lahutamise teostamiseks kõrgepingest kuni 30 kV ja voolust kuni 200 μA [29]. Kuna rakendatava pinge suurus sõltub paljudest asjaoludest, sealhulgas mõõtmisel kasutatavatest ainetest, kapillaarist ning keskkonna temperatuurist, siis seadme lihtsamaks ümberseadistamiseks saab kasutada reguleeritavat kõrgepingetoiteplokki.

Kapillaar

Kapillaarina kasutatakse enamasti polümiidiga kaetud sulatatud kvartsist toru. Kvartstoru laialdane kasutamine on tingitud heast valgusläbitavusest väikestel lainepikkustel (190 nm juures [28]). Polümiidkate annab kapillaarile mehaanilise tugevuse, aga halvendab kapillaari optilisi omadusi [30]. Seetõttu tekitatakse kapillaarile detektori mõõtmiskohta mõõtmisaken, eemaldades polümiidkatte. Katte eemaldamiseks on mitu võimalust, näiteks mehaaniline eemaldamine, söövitamine või katte ära põletamine. Viimase meetodiga tehtud 15 mm mõõteaken on näidatud joonisel 3.



Joonis 3. DrugHunteri kapillaari põletatud mõõteaken

Kapillaari sise- ja välisdiameeter (vastavalt suurusjärgudes 10...100 μm ja 350 μm) on valitud nii, et kapillaari jahutusvõime ja detektori detekteerimisvõime oleksid tasakaalus. Kuna kapillaaris olevatel ainetel tekib Joule' soojenemine, siis jahutuse puudumisel läheksid ained kapillaaris keema [29], mis rikuks mõõtmiskatse. Kapillaari jahutatakse läbi kapillaari seinte, kusjuures jahutusvõimsus on võrdeline kapillaari välispindalaga. Joule' soojenemist vähendaks kapillaari sisediameetri vähendamine, sest koos sellega väheneb puhvri ristlõikepindala ja seda läbiva voolu hulk. Väiksem sisediameeter tähendaks aga väiksemat ainekogust detektori ees, mis vähendaks mõõteseadme tundlikkust. [28]

Kapillaari läbivat voolu saaks vähendada ka pinge langetamisega, kuid see ei ole enamasti soovitatav lahendus. Pinge vähendamine pikendaks mõõtmisaega, kuna väheneks elektrivälja tugevus kapillaaris ja sellega langeks ioonide üldine liikumiskiirus.

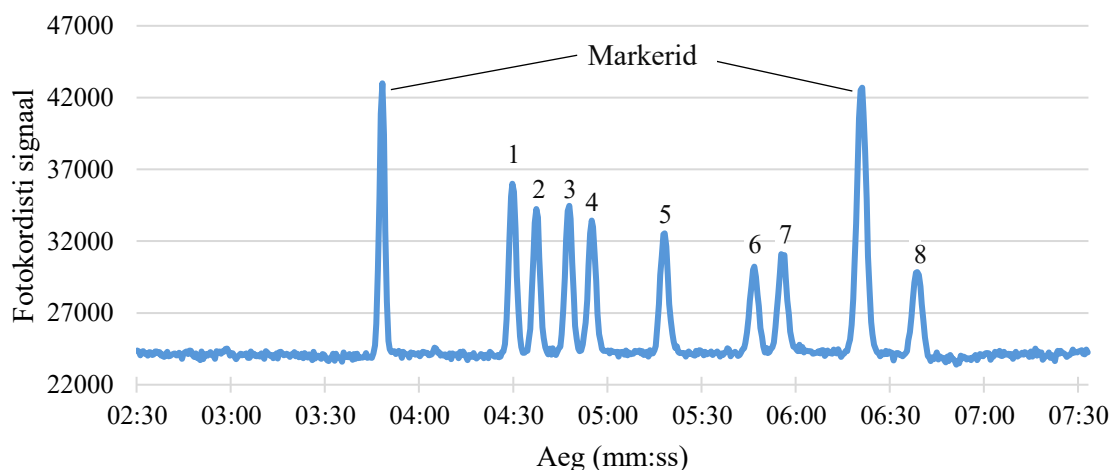
Kapillaari ainete sisestamine

Ainete kapillaari sisestamise süsteem peab tagama korrektse ainekoguse kapillaaris. Korratav ainekogus on oluline, sest enamasti on proovi ja puhverlahuse elektrijuhtivus erinev, mistõttu mõjutab koguste varieeruvus kapillaari läbiva voolu suurust kõrgepinge rakendamisel. Aine sisestamiseks kapillaari pannakse kapillaari anoodipoolne ots prooviga täidetud anumasse ja kasutatakse:

- kapillaari sifoontoruna, tekitades kapillaari otse vahel kõrguse erinevuse;
 - pneumaatilist sisestamist, tekitades anumates rõhkude erinevuse või
 - elektrokineetilist sisestamist, mille puhul voolab proov kapillaari elektrivälja toimel.
- [29]

1.4.2 Elektroferogramm

Kapillaarelektroforeesi tulemusena saadakse elektroferogramm, mille piigid (kõrge signaaliga punktid) graafikul tähistavad erinevate ionide migreerumisaegu. Piigid tekivad, kui ioonid mööduvad kapillaaris elektrivälja mõjul detektorist, sest ioonid on puhverlahusega võrreldes rohkem fluorestseeruvad. Erinevate ainete ionide migreerumisaeg on teada (seadmega eelnevalt mõõdetud), tänu millele on võimalik öelda, et teatud piikide olemasolul esinevad proovis konkreetsed ained, milleks võivad sealhulgas olla ka narkootikumid. Piikide laiust ning pindala uurides saab hinnata aine kontsentratsiooni proovis.



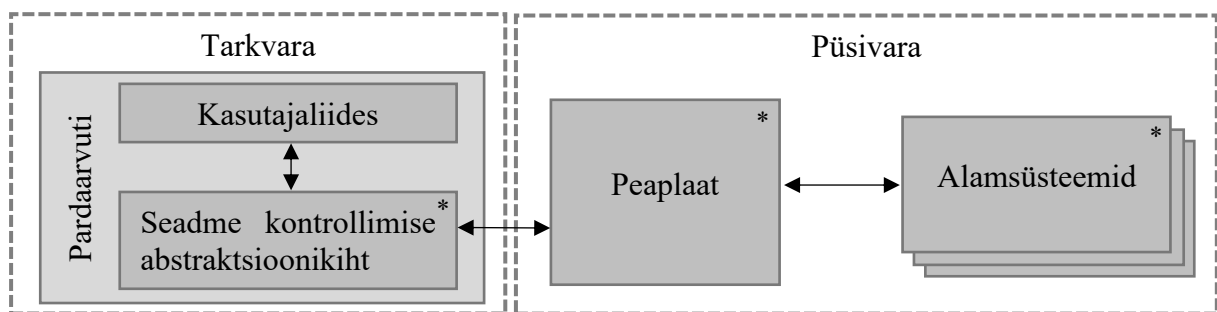
Joonis 4. DrugHunteri elektroferogramm. Proovis sisaldunud ained: 1 amfetamiin, 2 metamfetamiin, 3 MDA, 4 MDMA, 5 MDEA, 6 kokaiin, 7 kokaetüleen, 8 fentaniül

Joonisel 4 on DrugHunteriga narkootilisi aineid sisaldanud proovi analüüsimisel saadud elektroferogramm. Proovile lisati markerid, mis tekitasid graafikule kaks kontrollpiiki. Markerite migreerumisaegade suhtes arvestatakse teiste ainete migreerumisaegad, võimaldades

välja arvestada väliste tegurite mõju ioonide migreerumisaegadele. Väline tegur on näiteks temperatuur, mis mõjutab puhvri viskoossust [28, lk 15].

1.5 Püsivara ja tarkvara arenduse ülevaade

Seadme toimimiseks loodi mitu erinevat programmi, mis asuvad erinevates seadme alamsüsteemides ning kontrollivad nende tööd. Programmid võib jaotada paiknemise järgi tarkvaraks, mida käitatakse pardaarvutis ja püsivaraks, mille programme käitatakse erinevate seadme alamsüsteemide mikrokontrolleritel (edaspidi MCU). Tarkvara eesmärk on kasutajaliidese abil juhendada operaatorit mõõtmisprotsessi osas ja võimalda seadme juhtimist. Iga alamsüsteemi MCU püsivaraga kontrollitakse süsteemispetsiifiliste ülesannete täitmist. Joonis 5 kirjeldab loodud programmide lähtekoodi jaotumist tark- ja püsivara vahel ning näitab alamsüsteemidevahelisi suhtluskanaleid.



Joonis 5. DrugHunteri lihtsustatud ülesehitus tarkvara ja püsivara aspektist.

* töö autori arendatud tark- ja püsivara komponendid, mida käsitletakse käesolevas töös

Käesoleva töö raames arendati suur osa DrugHunteri püsivarast ja pardaarvuti tarkvarale seadme kontrollimist võimaldav abstraktsioonikiht. Abstraktsioonikihi abil algatab kasutajaliides seadmes erinevaid protseduure ning saab abstraktsioonikihilt tagasisidet protseduuride toimumisest.

Valminud seadme püsi- ja tarkvara arendamise üldised probleemid seisnesid:

- aktuaatorite ja mootorite sujuva töötamise tagamises – sujuvalt töötav aktuaator on vaikssem, tõstes kasutajamugavust ning vähendab aktuaatori kulumist;
- kiiruse tagamises – kontrollalgoritmid peavad jõudma stabiilse tulemuseni mõistliku kiirusega; aja säästmiseks peab võimalusel aeganõudvaid protseduure (näiteks termostabiliseerimine ja erinevad pesemise protseduurid) täitma samaaegselt;
- täpsuse tagamises – näiteks peab ainete süstimine kapillaari toimuma kontrollitult; ajakriitilistes kohtades peab seade tagama protsessidevahelise ajalise korratavuse;

- seadme alamosade koostöö tagamises – seadme alamosad peavad töötama omavahel kooskõlas, osates ülesandeid delegeerida ja ülesannete tulemustele reageerida;
- veaolukordade lahendamist – vea tekkimisel tuleb seadme töö katkestada ja veakood kasutajaliidesele propageerida, et operaator saaks vea põhjuse ohutult lahendada.

Püsivara arenduskeskkonnana kasutati Atmel Studio 7 ja MCUde lähtekood kirjutati programmeerimiskeeles C++. Püsivara arendati kolmele erinevale MCUle (kokku viiele MCUle), mis valiti elektroonika arendamise etapis sobilike elektriliste omaduste (näiteks väljaviigu mahtuvus), arvutusvõimsuse ja kontrollierisestest perifeeriaseadmete põhjal. Iga MCUle programmeeriti oma riistvara abstraktsiooni kiht (ingl *hardware abstraction layer*, edaspidi HAL), millega hoiduti võimalikest MCU tootja HALi konfigureerimispiirangutest.

Püsivara protsesside paralleliseerimiseks kasutati lihtsat kooperatiivset multitegumitööd. Perioodilist täitmist vajavad tööd jaotati ära programmi funktsioonide vahel. Funktsiooni väljakutsumise aja saabudes võetakse see täitmisele ning funktsioon ise vastutab, et selle täitmise aeg ei oleks liiga pikk, vältides teiste funktsioonide väljakutsete ajalisi nihkumisi.

DrugHunteri pardaarvuti tarkvara programmeeriti Microsoft Visual Studio 2019 programmeerimiskeskonnas programmeerimiskeeles C#. Käesoleva töö raames programmeeriti arvutitarkvarale seadme kontrollimise abstraktsioonikiht. Nimetatud abstraktsioonikiht loob riistvaraga suhtluse ja võimaldab kasutajaliidisel riistvaras erinevaid protseduure algatada, nende hetkeolekust tagasisidet saada ning mõõtetulemusi koguda.

2 DrugHunter

Siinses peatükis käsitletakse esmalt DrugHunteri seadet operaatori seisukohast. Vaadatakse tüüpilisi kasutamise samme ja operaatori käsitletavaid seadme osi. Järgnevad alampeatükid käsitlevad põhjalikumalt seadme ülesehitust alamsüsteemide kaupa, kus iga alamosa kohta tuuakse välja püsivara seisukohast olulised mehaanika ja elektroonika ülesehituse aspektid ning käsitletakse põhjalikult püsivara arendamist.

2.1 Seadme tüüpkasutus

Operaatori roll seadme kasutamises seisneb mõõteprotsessi jaoks vajalike kemikaalide sisestamises ning seejärel uuritavalt inimeselt süljeproovi võtmises ja selle seadmesse sisestamises. Seejuures juhendatakse kõikide sammude juures operaatrit seadme puuetundlikul ekraanil kuvatavate tekstide ja piltide abil. Seadme osad, mida operaatror käsitseb on näidatud joonisel 6.



Joonis 6. Tüüpilised seadme kasutamisel manipuleeritavad osad, seade suletud (vasakul) ja avatud luukidega (paremal). (1) puuetundlik ekraan kasutajaliidesega, (2) kapillaari pesuvedelike ja proovi lisamise karussell, (3) kapillaari hoidik, (4) kiibi pesuvedelike anumad, (5) jääkainete kogumisanum

Tüüpilisel seadme kasutamisel avab operaatror seadmes uue menüüluse ja sisestab sinna vajalikud andmed, kasutades puuetundlikku ekraani, vaata joonisel (1). Seejärel kuvatakse

ekraanil samm-sammult mõõtmist ettevalmistavate etappide juhendid. Kuna seadme komplekti võivad kuuluda erinevad hoidikutesse sisestatud kapillaarid, siis palutakse operaatoril esiteks kontrollida, et seadmesse oleks sisestatud õige kapillaari hoidik (3). Järgmisena kontrollib operaator jäätmeanumat. Anum tühjendatakse, kui see on eelnevate mõõtmis- ja pesuprotseduuridega täis saanud. (5).

Seejärel täidab operaator vajadusel kiibi pesuvedelike anumad (4). Kiip on sisuliselt kapillaarelektroforeesi aparatuuri katoodipoolne puhvri anum. See on kapillaari anoodipoolses otsas paiknev metallist õõnes keha, mis on ühendatud kõrgepinge toiteplokiaga. Tänu kiibi võrdlemisi väikesele ruumalale, on seda võimalik kiiresti läbi pesta ja uuesti puhvriga täita.

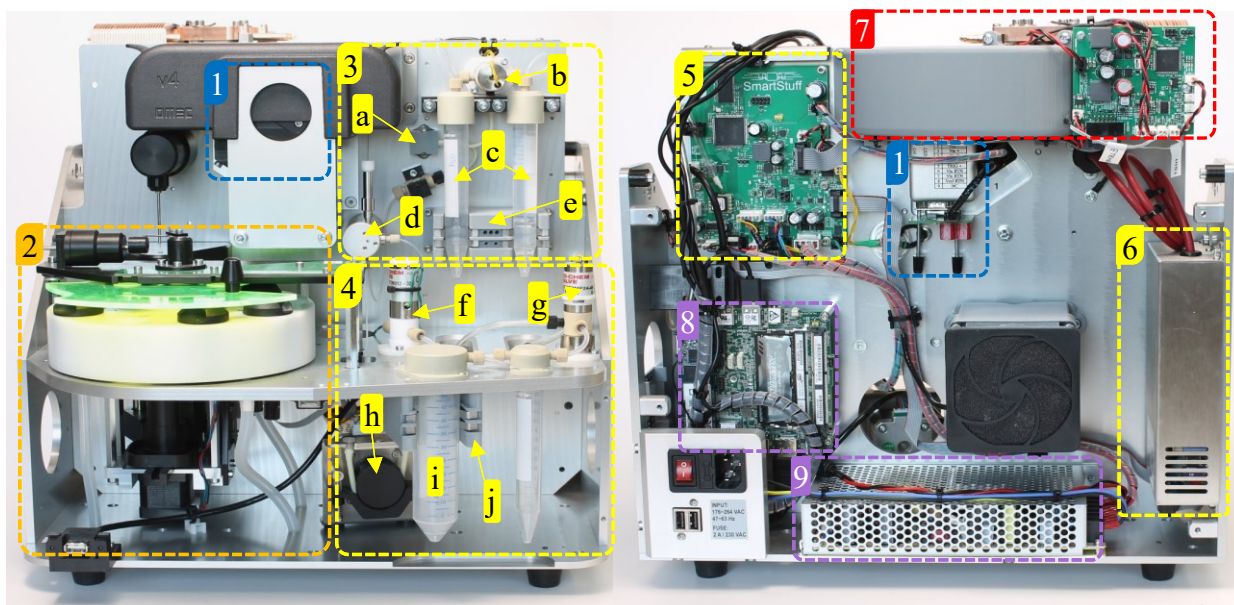
Viimasena sisestab operaator mõõtmisprotseduuri jaoks seadmesse kapillaari pesemiseks mõeldud kemikaalide ning kapillaari tõmmatava puhverlahuse viaalid. Nende sisestamiseks on DrugHunteril üheksapositioniline karussell (2). Iga viaali sisestamisel kuvatakse operaatorile ekraanil aine, mida seade eeldab ning pöörab operaatorile õige karusselli positsiooni ette.

Kui seadmesse on kõik vajalikud kemikaalid sisestatud, teeb DrugHunter mõõteprotseduuriks ettevalmistusi. Esmalt peseb seade karusselli sisestatud ainetega kapillaari ning pärast selle pesu täidab kapillaari puhverlahusega. Seejärel loputatakse kiip ning täidetakse ka see puhverlahusega.

Pärast pesu juhendatakse operaatorile süljeproovi võtmist ning palutakse prooviga viaal karusselli sisestada. Kui proov on karussellis, tõmbab seade korrektse koguse proovi kapillaari ja seejärel sisestab kapillaari proovipoolse otsa karussellis olevasse puhverlahuse viaali. Lõpetuseks rakendab DrugHunter kapillaarile kõrgepinge ja käivitab detektori, algatades sellega mõõteprotsessi. Mõõteprotsessi vältel saadud elektroferogrammi analüüsitakse ning seade tuvastab selle järgi narkootiliste ainete olemasolu. Tulemused salvestatakse seadmesse, kuvatakse operaatorile ja võimaldatakse ka välja printida.

2.2 Seadme ülesehitus

Peatükk annab ülevaate seadme ülesehitusest ja seadme alamosadest, millest järgnevate peatükkide jooksul räägitakse põhjalikumalt. Esmamainitud alamosadest tehakse lühike ülevaade. Lühidalt kirjeldatakse ka alamosade omavahelist sidusust seadme üldises töös.



Joonis 7. Seadme põhilised osad. Eestvaade vasakul, tagantvaade paremal

Joonisel 7 on pilt korpuseta DrugHunterist ja tähistatud on erinevad alamsüsteemid. Iga alamsüsteemi tähistamisel on kasutatud erinevat värvi ning numbrit. Lisaks on mõne alamsüsteemi puhul tähtedega tähistatud seadme töös olulisemad komponendid:

- Sinine (1) tähistab detektorit. Detektorit on osaliselt näha mõlemal pool seadet ja see paikneb kapillaari (ja kapillaari hoidiku) vahetus läheduses.
- Oranž (2) tähistab viaalide valimise süsteemi, mis võimaldab seadme operaatoril sisestada kemikaalid kapillaari pesemiseks, puhverlahuse ja proovi ning viib need kapillaari otsani, et erinevates tööetappides saaks need ained kapillaari tõmmata.
- Kollane tähistab peaplaadiga (5) seonduvaid alamsüsteeme. Peaplaat on DrugHunteri keskne komponent, mis suhtleb seadme kõigi alamsüsteemidega ja otseselt kontrollib:
 - kiibi pesemise süsteemi (3), kus on tähistatud kiibi läbipesu pump (a), kiip (d), kiibi pesuvedelike anumad (c) ning klapp pesuvedelike vahel valimiseks (b);
 - kapillaari ainete sisestamise süsteemi (4), mille olulisimad osad on jäätmeanum (i), kuhu tekitatakse pumbaga (h) ainete kapillaari tõmbamiseks alarõhk; klapiga (f) saab enne ainete tõmbama hakkamist alarõhku tekitada ja hoida ning klapiga (g) rõhku kiiresti süsteemist välja lasta;
 - kõrgepinge toiteploki (6).

Peaplaadile annab kiibi pesuvedelike anumate tühjusest teada nivooandur (e) ja jäätmeanuma täis saamisest vedeliku nivooandur (j).

- Punasega (7) on tähistatud kapillaari termostabiliseerijat, mis võimaldab kontrollida kapillaari hoidikus ringleva õhu temperatuuri.
- Violetsega on tähistatud seadme pardaarvuti (8) ja seadme üldtoiteplokk (9). Pardaarvuti käitab pardaarvuti kasutajaliidese programmi, mis suhtleb peaplaadiga. Pardaarvuti kasutajaliides algatab peaplaadi vahendusel seadmes erinevaid protseduure.

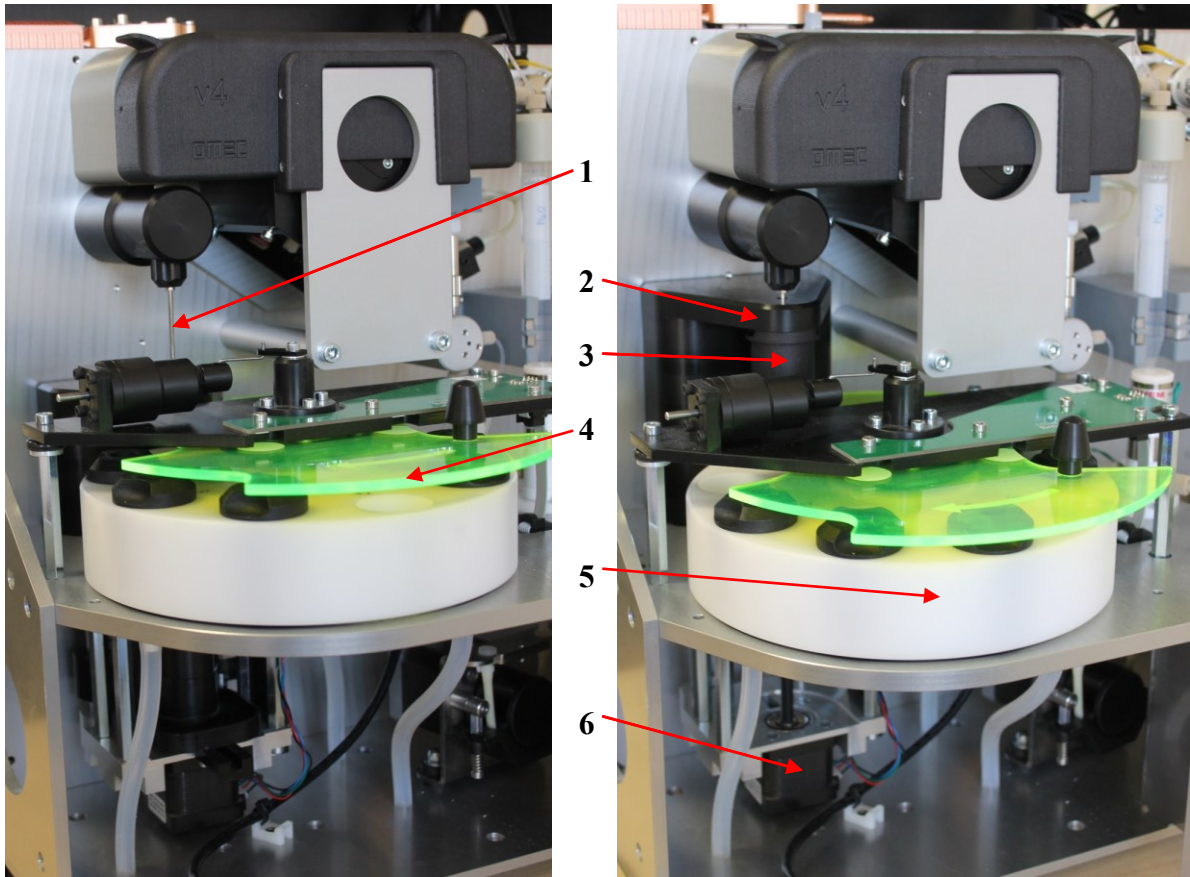
Järgnevate peatükkide jooksul kirjeldatakse igat alamsüsteemi täpsemalt, seejuures keskendutakse neile püsivara arenduse ja elektroonika silumise aspektidele, millega tegeles töö autor.

Tähtis on mõista, et arendatud püsivara on väga tihedalt seotud riistvara ülesehitusega ning igale alamsüsteemile, mille riistvaralist ülesehitust on kirjeldatud, programmeeris töö autor ka alamsüsteemi kontrolliva püsivara. Mõne alamsüsteemi puhul pidas autor asjakohaseks kirjeldada püsivara tööd riistvara ülesehituse põhjal, välja toomata kõiki püsivara implementatsiooni üksikasju ning valis välja vaid tähtsamad ja huvitavamad detailid.

2.3 Viaalide valimise süsteem

Viaalide valimise süsteem koosneb karussellist ja viaali tõstukist. Viaalide valimise süsteemi eesmärk on võimaldada operaatoril korraga sisestada edaspidiseks tööks vajalikud viaalid ja seejärel vastavalt vajadusele tõsta neid kapillaari anoodipoolsesse otsa.

Operaator sisestab karusselli kuni üheksa viaali, milles on kemikaalid kapillaari pesuks, puhver ja analüüsitav süljeproov. Viaalide sisestamisel pöörab karussell operaatorile ette õige viaali pesa. Pärast kõigi vajalike ainete sisestamist karusselli saab DrugHunter autonoomselt töötada. Erinevates töötappides pöörab karussell sobiva viaali tõstukile ning see tõstab viaali kapillaari otsa. Nii viisi tagatakse kapillaarile õigete kemikaalide ja proovi olemasolu erinevate pesu- ning mõõtmisprotseduuride ajal.



Joonis 8. Viaalide valimise süsteem. Tõstuk all (vasak pilt) ja üleval (parem pilt). (1) kapillaari nõel, (2) tõstuk, (3) viaali hoidik, (4) karusselli katik, (5) karussell, (6) tõstuki samm-mootor

Joonisel 8 näidatakse tõstukit (2) ülemises ja alumises asendis. Tõstukit liigutab samm-mootor (6). Kapillaari ots on kapillaari nõela (1) sees, nõela abil saab kaanega viaali kaanest läbi torgata. Karusselli (5) sees paiknevad viaalide hoidikud. Tõstuk saab viaali koos hoidikuga (3) üles tõsta. Erinevad viaalide hoidikud võimaldavad kasutada erikujulisi viaale.

Kollakas-rohelise pleksiklaasist katiku (4) abil hindab püsivara, kas karusselli on ohutu liigutada – viaali sisestamiseks peab operaator katiku eest ära liigutama ning kui viaal ei ole korralikult sisestatud, jääb katik viaali taha kinni. Kui katik on kinni jäänud, siis karusselli ei liigutata, vaid antakse operaatorile probleemist teada ning lastakse tal see lahendada. Katiku kinnijäämist tuvastatakse peegeldusanduriga.

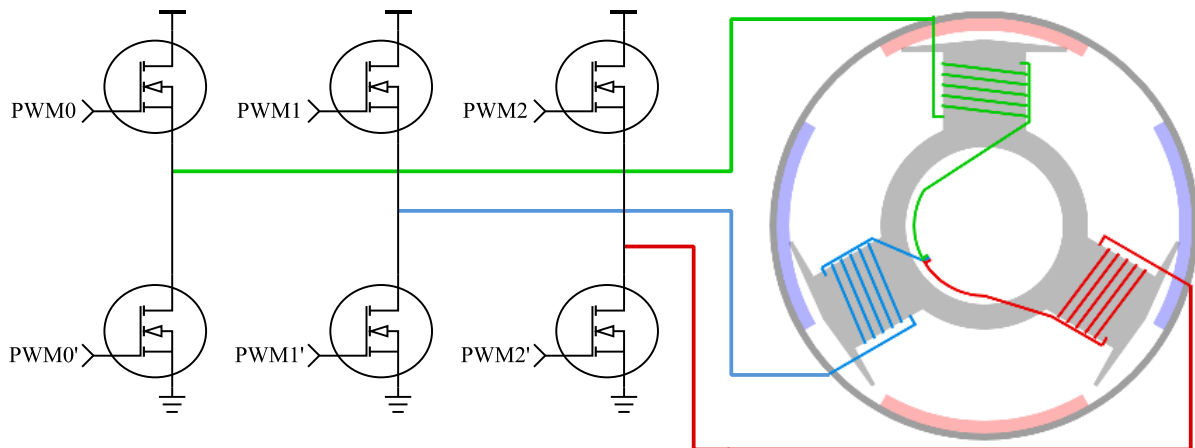
Karusselli mootori kommuteerimiseks on kasutatud Artur Abelsi lähtekoodi, mida täiendati ja kohandati selle töö raames kasutatud mootori jaoks. Ülejäänud püsivara, mis kalibreerib kasutatud andureid ja leiab viaalide nurkkoordinaadid, arendati täielikult selle töö raames. Töö raames loodi ka karusselli pööramise ning tõstuki liigutamise kontrollkoodid.

2.3.1 Karussell

Karusselli liigutamiseks kasutatakse harjavaba 36n42p alalisvoolumootorit (36 staatoripooli ja 42 rootori magnetpoolust) GM9008D [31]. Selle mootori kuju ja muud karakteristikud (kiirus ja pöördemoment) võimaldavad mootori ilma ülekandeta karusselli sisse integreerida. Mootori suur pooluste arv võimaldab saavutada piisavalt täpset karusselli hoidmisasendid.

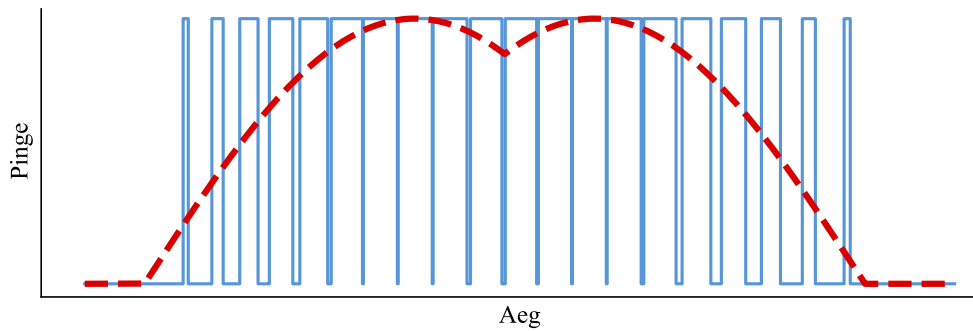
Karusselli mootori elektroonika ja mootori kommuteerimine

Kasutatud harjavaba mootoril on kolm klemmi, iga klemmi juhitakse oma transistori paariga. Transistoride paari abil saab mootori klemmi ühendada toitepingega, maandada või lahti ühendatuks jätta. Joonis 9 näitab mootori kontrollimise skeemi. Transistore kontrollitakse MCU püsivaraga.



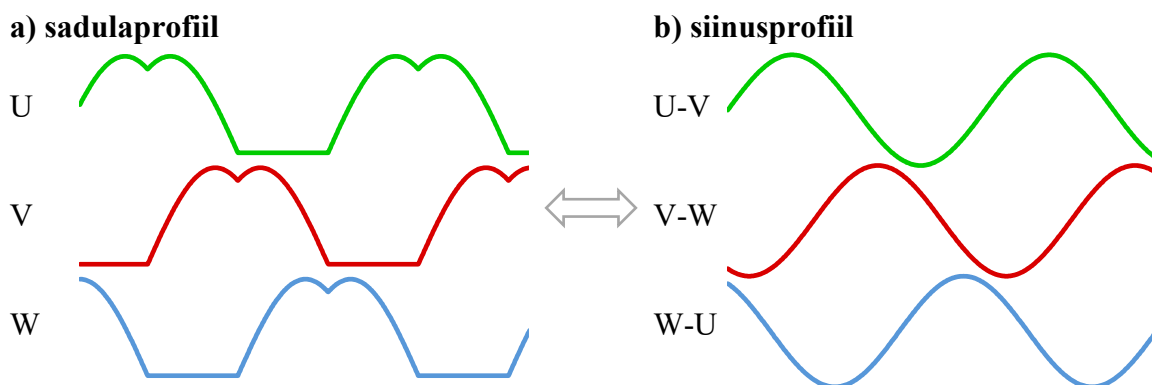
Joonis 9. Harjavaba alalisvoolumootori lihtsustatud kontrollskeem. PWM signaalid on genereeritud MCUga ja võimendatud H-silla kontrolliga. Mootori pildi viide: [54]

Eelneval joonisel on lihtsuse mõttes näidatud 3n4p konfiguratsiooniga mootorit, kuid selle kommuteerimine toimub samal põhimõttel, mis kasutatud 36n42p mootoril. Pulsilaiuse modulatsiooni (ingl *pulse width modulation*, edaspidi PWM) signaaliga seadistatakse mootori klemmidele rakendatud keskmist kontrollpinget, näide joonisel 10. Mootori keskmise kontrollpinge seadistamine võimaldab kasutada mootorit siinuskommuteerimisega.



Joonis 10. Näide mootori klemmi ajas muutuvast kontrollpingest: sinine PWM, punane keskmine pinge

Mootori siinuskommuterimisel tekitatakse mootori kolmele mähisele siinusekujulised pinged, mis on teineteisest 120 kraadi võrra nihkes. Mootori klemmide vahel (mootori mähistel) saavutatakse siinusekujuline kontrollpinge rakendades mootori klemmidele modifitseeritud siinussignaali – nn sadulaprofiili. Joonisel 11 alamosas a) U, V, W tähistavad mootori klemmidele rakendatud kontrollpingeid maa suhtes ning alamosas b) mootori klemmidevahelisi ehk mähiste pingeid. Seejuures on näha, et mähiste pinged (U-W, V-W ja W-U) on siinused.



Joonis 11. Sadulaprofiil (rakendatakse mootori klemmidele) ja siinusprofiil (pinge mootori mähistel)

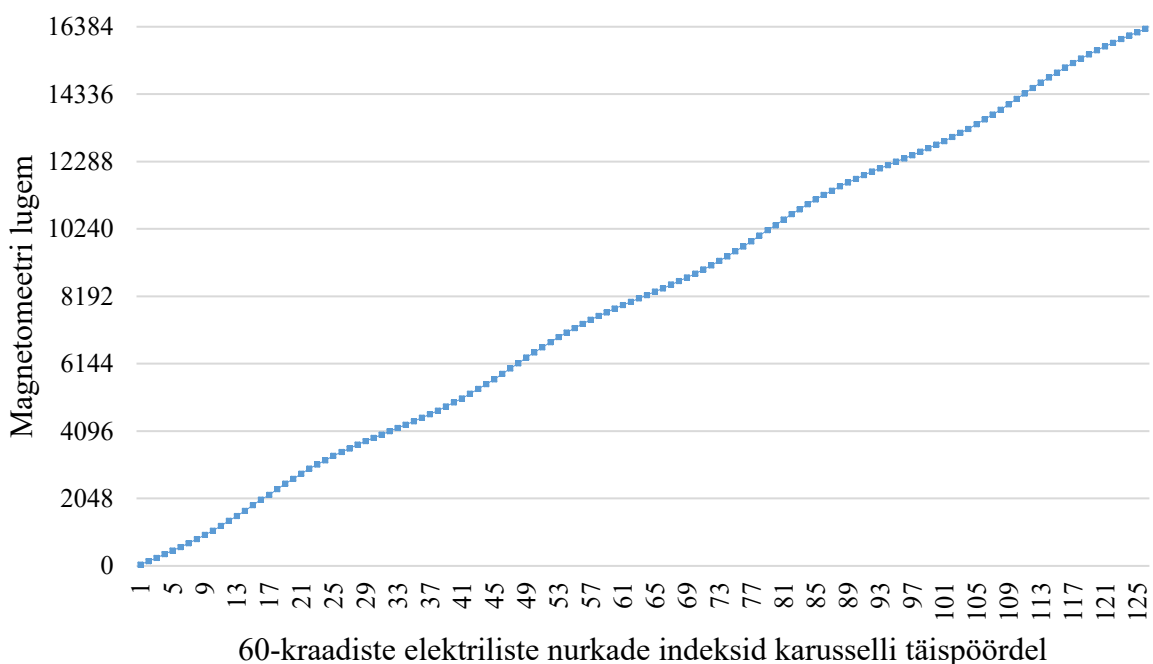
Siinuskommuterimine võimaldab täpset mootori asendi juhtimist, sest sellega saab staatoris tekitada täpselt suunatud magnetvoo, mis mootori rootori soovitud asendisse liigutaks. Mootori siinuskommuterimisega juhtimiseks kasutatakse mootori elektrilist nurka. Hetkelise elektrilise nurga ja soovitud liikumissuuna järgi seatakse järgmisele elektrilisele nurgale vastavad pinged sadulaprofiilis, mis tekitavad mootorit edasi liigutava magnetvoo. Näited siinuskommuterimisel mootori magnetvoogudest erinevate elektriliste nurkade korral on peatükis Lisa 3. Mootori elektriline nurk on seotud mehaanilise nurgaga: iga elektrilise täispöördega liigutatakse rootorit staatori suhtes kahe rootori magneti võrra edasi.

Karusselli mehaanilise nurga ja mootori elektrilise nurga mõõtmine

Karusselli mootori kommuteerimiseks on vaja igal ajahetkel teada selle elektrilist nurka. Selle hindamiseks on erinevaid meetodeid. DrugHunteris kasutatakse mootori mehaanilise nurga otsesest mõõtmist ja teisendatakse see elektriliseks nurgaks. Selleks on karusselli võlli otsas magnet, mille asendit mõõdab magnetomeeter.

Kasutatud MLX90363 magnetomeetri näit ei ole lineaarne [32]. Kalibreerimata magnetomeetri näidu kasutamine ei andnud mootori kommuteerimisel rahuldavaid tulemusi – mootor töötas kuuldavalt ja nähtavalt ebaühtlaselt. Seetõttu oli vaja magnetomeeter kalibreerida.

Magnetomeetri kalibreerimiseks liigutati karusselli 60° elektriliste nurkade kaupa, peatudes iga elektrilise nurga juures ning jäädvustades magnetomeetri näit. Elektrilisi nurki läbiti seni, kuni karussell tegi ühe täispöörde. Karusselli täispöördel teeb mootor 21 (võrdselt mootori pooluste paaride arvuga) elektrilist täispööret. Kuna ühes elektrilises täispöördes on kuus 60° elektrilist nurka, siis kokku jäädvustati 126 magnetomeetri näitu. Kalibreerimisandmed 60° elektriliste nurkade kaupa tagasid kasutamiseks piisava täpsuse mõistliku andmehulga juures. Kogutud kalibreerimisandmed on joonisel 12.



Joonis 12. MLX90363 magnetomeetri kalibreerimata näit karusselli täispöördel

Kalibreerimispunktide põhjal saab magnetomeetri otsese näidu teisendada kalibreeritud näiduks, kasutades kalibreerimispunktidel lineaarinterpolatsiooni. Ka mootori kommuteerimiseks vajalik elektriline nurk arvutatakse otsese magnetomeetri näidu põhjal

analoogselt magnetomeetri kalibreeritud näidu arvutamise. Nimetatud nurga arvutamise aluseks on teadmine, et magnetomeetri näidud koguti 60° elektriliste nurkade kaupa ja seega on teada, millist elektrilist nurka mootor igas kalibreerimispunktis hoidis.

Iga magnetomeeter on erinev ning seetõttu vajab eraldi kalibreerimist [33] ja tõenäoliselt erineb ka erinevatel DrugHunteri seadmetel karusselli võlli otsa paigutatud magneti pooluste paigutus. Seetõttu loodi kalibreerimise lihtsustamiseks püsivarasse protseduur, mis kogub kalibreerimispunktid ning salvestab need EEPROMi.

Lisaks magnetomeetri näidu põhjal arvutatavale karusselli nurgale on vaja teada, millistes konkreetsetes nurkades karusselli peatada, sest ainult teatud üheksale nurgale vastavad viaalide positsioonid karussellis.

Viaalide keskkohdade kalibreerimine

Püsivara esmakordsel käivitamisel ei ole püsivaras informatsiooni viaalide keskkohdade nurkkoordinaatide kohta ja seetõttu ei ole võimalik viaale operaatorile ega tõstukile ette pöörata. Viaalide keskkohdade leidmiseks on püsivaras protseduur, mille tulemusena salvestatakse viaalide keskkohdade info EEPROMi.

Viaalide keskkohdade otsimiseks kasutatakse optokatkestit. Selleks pannakse karussell pöörlema ning jäädvustatakse magnetomeetri näidud kohtades, mida optokatkesti loeb avade algus- ja lõppnurkkoordinaatideks. Ava keskkohd on vastava ava algus- ja lõppkoordinaadi keskmine. Pärast keskkohdade leidmist pööratakse üks ava operaatori ette ning püsivara küsib selle ava indeksit, mille põhjal arvutakse ülejäänud avade indeksid. Ava indeks on number ühest üheksani, mis on graveeritud karusselli viali ava juurde. Viimaks järjestab püsivara koordinaadid vastavalt avade indeksite kasvavale järjekorrale ja salvestab keskkohdade koordinaadid EEPROMi.

Karusselli asendikontroller

Kalibreeritud magnetomeetri näitu, viaalide keskkohdade nurkkoordinaate ja mootori siinuskommuteerimist kasutab karusselli asendikontroller. Karusselli asendikontrolleri eesmärk on kiiresti ja sujuvalt karussellis ette pöörata nõutud viaal ning kontrollida karusselli liikumisel selle kinni jäämist.

Liigutamiseks testiti kaht asendikontrollerit: proportsionaal-integraalregulaatorit (edaspidi PI-kontroller) ja tagasisideta trajektoori järgimise kontrollerit (edaspidi TTJ-kontroller). Mõlemat

kontrollerit kasutati karusselli püsiva kiirendusega liigutamiseks – karussell kiirendas ja aeglustas sama kiirendusega. Kiirendamine kestis nii kaua, kui nähti, et soovitud karusselli nurga saavutamiseks on vaja aeglustama hakata. Kirjeldatud kiirendusega liikumise jaoks arvutati igale ajahetkele vastav nurkkiirus ja nurkpositsioon, neid nimetatakse edaspidi vastavalt arvutuslik kiirus ja arvutuslik nurk.

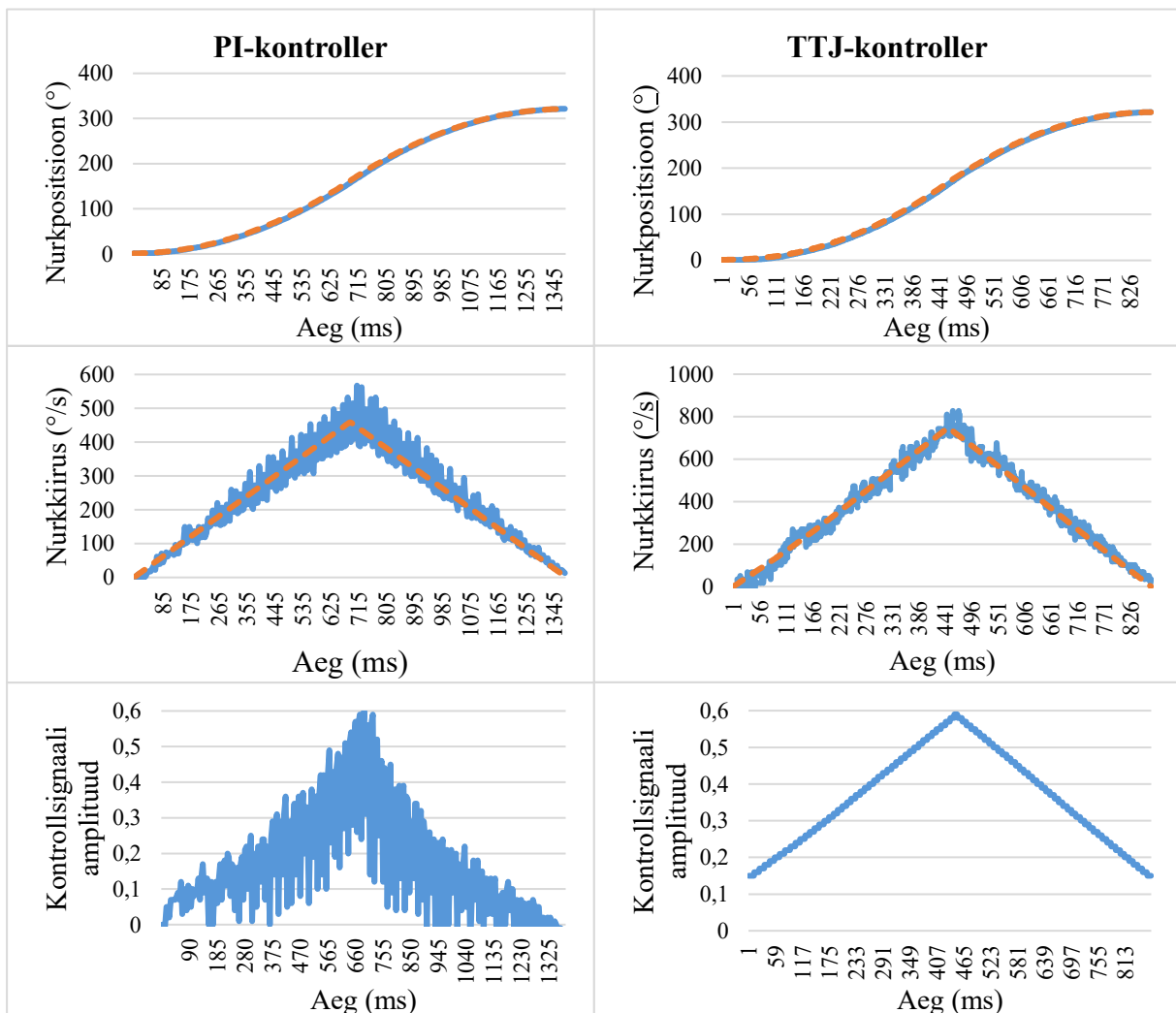
PI-kontrolleri jaoks arvutati magnetomeetri näidust karusselli tegelik nurk ning nurkkiirus. Arvutusliku nurga ja nurkkiiruse ning tegeliku nurga ja nurkkiiruse vastavaid vahesid kasutati PI-kontrolleri sisenditena ja selle põhjal tagastas PI-kontroller mootori kontrollsignaali amplituudi. Amplituud ja elektriline nurk määravad siinuskommuterimise PWMide täituvust, seades mootori efektiivse toitepinge ja tekitatava väände. Siinuskommuterimisel mootorile seatav elektriline nurk arvutati magnetomeetri näidu põhjal ning sellele liideti 105° ennistav nurk (ingl *lead angle*). Antud nurk on lihtsustus mootori eri kiirustele sobivatele ennistavatele nurkadele [34].

PI-kontroller suutis edukalt järgida etteantud positsiooni ja nurkkiirust. Kontrolleriga kaasnes mootori kuuldavalt mürarikas töö, mis olid põhjustatud esiteks sellest, et mootori kommuterimisel kasutatud elektriline nurk ja kontrollsignaali amplituud arvutati magnetomeetri näidu põhjal, mis sisaldas anduri mõõtemüra. Kuuldavat müra põhjustas veel asjaolu, et mootori kommuterimissagedust piiras magnetomeetri mõõteperiood (1,5 ms). Piiratud kommuterimissagedus vähendas ka karusselli maksimaalset pöörlemiskiirust. Nimetatud puudusi saaks leevendada anduri näitu filtreerides ja ekstrapoleerides, kuid siis peaks lahendama ka filtreerimisest tulenevat faasinihke probleemi. Lihtsa ja paremini toimiva lahendusena sobis TTJ-kontroller.

TTJ-kontroller kasutab samuti püsiva kiirendusega liikumise arvutuslikku kiirust ja soovitud nurka. Arvutuslikust kiirusest leitakse kontrollsignaali amplituud ning soovitud nurk teisendatakse mootori elektriliseks nurgaks, millele vastavad sadulaprofiili pinged rakendatakse mootorile. Seega on TTJ-kontrolleri puhul kõik mootori kommuterimise sisendid saadud arvutuslikul teel ja ei sisalda andurite mõõtemürasid. Ühtlasi ei sõltu mootori kommuterimise sagedus enam anduri mõõtesagedusest. TTJ-kontroller on sisuliselt tagasisideta juhtimine ja eeldab, et mootor jõuab genereeritud juhtsignaalidele järgi, sest mootorile rakendatakse piisavalt suur vool.

Olukorra vältimiseks, kus karussell ei jõua juhtsignaalidele järgi, otsiti maksimaalne kiirendus, millega karusselli tõrgeteta liigutada suudeti ja võeti kasutusele 30% võrra väiksem kiirendus. Liikumisel võrreldakse ka magnetomeetri järgi arvatud nurka soovitud arvutusliku nurgaga, kui need erinevad suurel määral, on karussell kinni jäänud. Kinni jäämise korral läheb programm veaseisundisse, mille veakood propageeritakse kasutajaliideseni.

Joonis 13 näitab asendikontrollerite toimimist 320° nurga läbimisel, mille puhul karusselli liigutati kaheksa viaali positsiooni võrra. Esimese rea graafikutelt on näha, et mõlemad kontrollerid järgisid väga hästi karusselli arvutuslikku nurka. Teise rea graafikutel on näha, et TTJ-kontroller saavutas suurema liikumiskiiruse, läbides nimetatud nurga ~1/2 sekundit kiiremini, sest PI-kontrolleri maksimaalset kiirust piiras magnetomeetri mõõtesagedus. Kolmanda rea graafikud näitavad kontrollerite kontrollsignaali amplituudi mürataset.



Joonis 13. Karusselli nurkpositsioon, nurkkiirus ja kontrollsignaali amplituud 320° nurga läbimisel PI-kontrolleriga (vasakul) ja TTJ-kontrolleriga (paremal). Oranž katkendjoon tähistab arvutuslikku sihtnurka/sihtkiirust, sinine mõõdetud tulemust

Tänu lihtsale seadistamisele, vaiksemale liikumisele ja suuremale liikumiskiirusele otsustati karusselli liigutamiseks kasutada TTJ-kontrollerit.

2.3.2 Tõstuk

Tõstuki eesmärk on viaalide, koos neis hoitud kemikaalidega, kapillaari otsa tõstmine. Tõstuki liigutamiseks kasutatakse samm-mootoriga lineaaraktuaatorit LE14HS3P4150-BR51A, millel on piisavalt jõudu, et kapillaari nõelaga korgiga viaalide korkidest läbi torgata. Samm-mootorit juhitakse püsivaras defineeritud püsiva kiirendusega kiirusprofiiliga. Kiirendusega liikumine võimaldas saavutada suurema liikumiskiiruse, võrreldes konstantse kiirusega liikumisega, kuna suure kiirusega startimine nõuab suurt hetkkiirendust, mida samm-mootoriga pole võimalik saavutada.

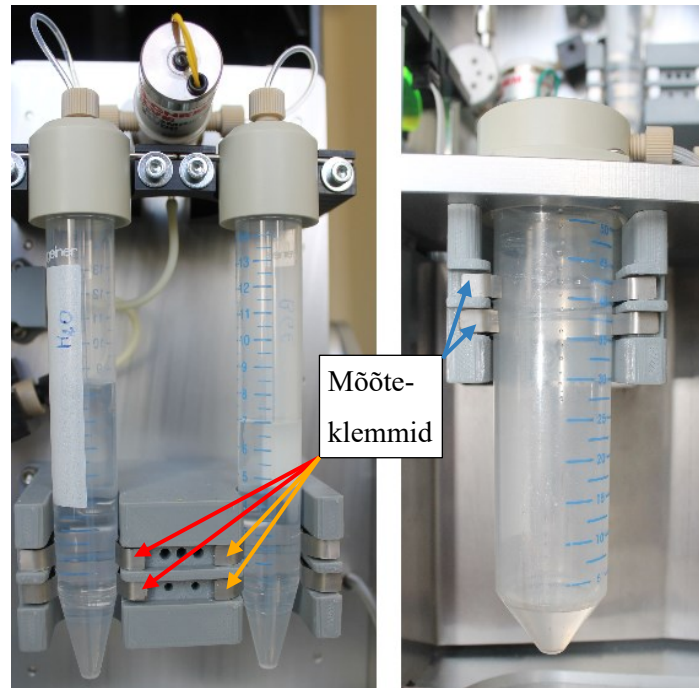
Samm-mootorit liigutatakse DRV8825 [35] integraalskeemi (edaspidi IC) abil. Nimetatud IC ühele sisendviigule pulsse genereerides liigutab IC mootorit sammu võrra edasi. Sammude pulsse genereeritakse MCU taimeri abil ja pulsi toimumise aeg seatakse taimeri katkestustes. Kiirendusega liikumine saavutatakse sammudevahelist aega vähendades, mille puhul sammud sagenevad ja liikumiskiirus kasvab. Kuna pulsside aegade arvutamine sisaldab ujukomaarvutusi ning kasutatud ATxmega128A1U MCUl ei ole riistvaralist ujukomaarvutuste tuge [36], siis taimeri katkestuses tehtava töö kiirendamiseks võetakse kiirendusega liikumisele vastavate pulsside ajad otsingutabelist (ingl *lookup table*).

Püsivara saab DRV8825 abil mootori voolu seadistada. Liikumiseks kasutatakse 1400 mA ja hoidmisel 80 mA voolu. Madal hoidmisvool tagab väikse voolutarbe ning vähendab mootori soojenemist. Liikumisel võimaldab suurem vool suuremat liikumiskiirust ja annab mootorile piisava jõu viaali korkidest läbi torkamiseks.

Lisaks on tõstukil optokatkestid, millega tuvastatakse tõstuki kõige alumist, ülemist ja nõela torkamise alguspositsiooni. Torkamist tuvastatakse, et vähendada torkamise ajal tõstuki üles liikumise kiirust ja vältida nõela vigastamist. Ühtlasi loeb püsivara tõstuki üles ja alla liikumisel tehtud sammude arvu ning tõstuk läheb veaseisundisse, kui see pole etteantud sammudega kindla andurini jõutud. Veaseisund annab teada, et tõstuk on kinni jäänud ja info selle juhtumisest propageeritakse kasutajaliideseni.

2.4 Kiibi pesuvedelike ja jääkanuma nivooandurid

Pesuvedelike ja jääkanuma nivooandurid on mahtuvuslikud andurid, mis tuvastavad anduri metallklemmide vahel olevas anumaskoos vedeliku olemasolu. Pesuvedelike andur kontrollib kahe 15 ml anuma täituvust ja jääkanuma andur ühe 50 ml anuma tühjust, vaata joonis 14.



Joonis 14. Pesuvedelike nivooandurid (vasakul) ja jääkanuma nivooandur (paremal)

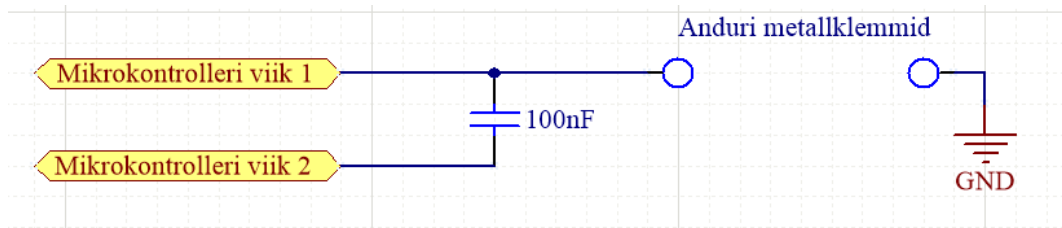
Pesuvedelike anumate täituvuse kontroll on oluline enne kiibi pesemist, sest tühja anuma korral pumbatakse kiipi õhku, mis nurjaks katse. Jääkanuma ületäitmine põhjustaks jääkainete voolamise mittedisainitud seadme osadesse. Nivooandurid võimaldavad operaatorile anumate täitmise või tühjendamise vajadusest aegsasti teada anda.

Töö autor disainis nivooandurite trükkplaadid, tegeles püsivara arendusega, andurite temperatuurikalibreerimisega ning nivooandurite vedeliku nivoo tuvastuse töökindluse uurimisega. Järgmistes peatükkides kirjutatakse loetletud tegevustest põhjalikumalt.

Anduri töö põhimõte

Andur toimib põhimõttel, et kui vedeliku nivoo jõuab mahtvusanduri klemmideni, siis klemmidevaheline mahtvus muutub. Selle mõõtmiseks kasutatud lihtsustatud skeem on joonisel 15. Mõõteprotsessi alguses on plaadipealne keraamiline referentskondensaator tühjaks laetud. Mõõteprotsess seisneb selles, et MCU laeb klemmidevahelist mahtuvust, seejärel laeb selle mahtuvusega referentskondensaatorit. Eelnimetatud samme korratakse, kuni

kondensaatori pinge ületab mikrokontrolleri viigu 1 digitaalset kõrget nivood. Seejärel jäädvustatakse kondensaatori laadimiseks vaja läinud tsüklite arv. Tsüklite arv (edaspidi anduri näit) kirjeldab klemmidevahelist mahtuvust. Suur anduri näit tähendab, et klemmidevaheline mahtuvus on väike.



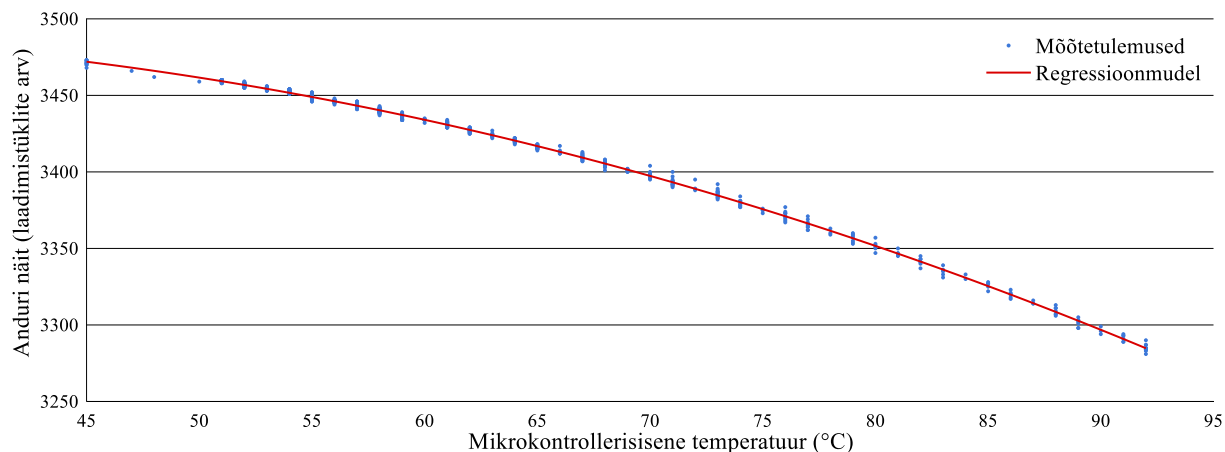
Joonis 15. Lihtsustatud mahtuvus mõõteskeem

Elektroonika disainil pöörati tähelepanu võimalike parasiitmahtuvuste vähendamisele. Selleks eraldati kõik trükkplaadil olevad mahtuvuse mõõtmise komponendid teistest trükkplaadi osadest (vaata Lisa 4). Kasutatud AtTiny816-MNR MCUl on väljaviikude mahtuvused erinevad, neist kasutati mõõtmiseks vähima (3 pF) mahtuvusega viikusid [36]. Lisaks on 100 nF referentskondensaator NP0 tüüpi, millel on EIA-RS-198 standardi kohaselt väike temperatuurisõltuvus.

Nivooanduritele lisati ka nupud, mille abil andurid kalibreeriti. Nivooandurid kalibreeriti destilleeritud vett täis ja tühja anumaga. MCU EEPROMi kirjutati eelnevate kahe näitude keskmine. Antud keskmist kasutakse lävendina, mille põhjal andur ütleb, kas klemmide vahel on täis või tühi anum ja annab sellest teada vastavalt üht väljaviiku kõrgeks või madalaks seades.

Temperatuuri mõju kompenseerimine

MCU soojendamise testide käigus oli näha, et selle viikude parasiitmahtuvus oli tugevas seoses temperatuuriga. Seetõttu kompenseeriti anduri näitu MCU seesmise temperatuuriga, mida mõõdeti MCU analoog-digitaal muunduriga (edaspidi ADC). Joonis 16 näitab eelkirjeldatud temperatuuri sõltuvust (sinisega) ja ka teise astme polünoomi (punane joon), mida anduri edasises töös näidu korrigeerimiseks kasutatakse.



Joonis 16. Mahtuvusanduri temperatuuri sõltuvus

Katse teostati kuumutades trükkplaati kuumaõhupuhuriga, jäädvustades mõõtepunktid nii anduri kuumenemisel kui jahtumisel. Katse vältel ei muudetud klemmidevahelist mahtuvust.

Vedeliku nivoo tuvastusvõimekus

Andurite eristusvõimet täis ja tühja anuma vahel hinnati seadmes kasutatavate vedelikega, kuna erinevad vedelikud võivad dielektrilise läbitavuse poolest suurel määral erineda [37]. Eristusvõimet hinnati destilleeritud veega, puhverlahusega ning jääkanuma nivooanduril ka mõõtmisprotsessil tekkinud jäämetega. Igal mõõtmisel koguti 500 näitu, tulemused on näidatud tabelis 2.

Tabel 2. Anduri näidud eri vedelike puhul. 500 mõõtmise keskmine, miinimum ja maksimum

Jääkainete andur		Destilleeritud vesi	Jäätmed	Puhverlahus	Tühi
	Miinimum	3752	3461	3566	4414
Maksimum	3754	3469	3567	4422	
Keskmine	3753,20	3467,09	3566,86	4419,39	
Eristusvõime	14,95%				
Vasakpoolne pesuvedeliku andur		Destilleeritud vesi		Puhverlahus	Tühi
	Miinimum	4368	-	4332	4813
	Maksimum	4370	-	4334	4815
	Keskmine	4368,82	-	4332,91	4813,87
Eristusvõime	9,20%				
Parempoolne pesuvedeliku andur		Destilleeritud vesi		Puhverlahus	Tühi
	Miinimum	4286	-	4260	4799
	Maksimum	4288	-	4262	4801
	Keskmine	4286,95	-	4260,84	4800,34
Eristusvõime	10,65%				

Tulemustest on näha, et vee puhul erines näit tühja anumaga võrreldes kõige vähem. Anduri eristusvõime arvutati halvimaid olusid arvestades: võrreldes destilleeritud vee maksimume (kollaseks värvitud) ning tühja anuma korral miinimumnäitu (roheliseks värvitud). On näha, et jääkanuma anduri eristusvõime on kõrgeim, mis tuleneb tõenäoliselt suurematest mõõteklemmidest ja anumast. Esineb ka eristusvõime erinevust pesuvedelike andurite vahel, mille põhjustas tõenäoliselt metallklemmide kuju varieeruvus, mistõttu kontakt anuma ja klemmide vahel erines. Ligikaudu 10% eristusvõime võimaldas kõikidele anduritele leida lävendi, mille põhjal andur hindab, kas anum on täis või tühi.

Hinnati ka niiskuse mõju anduri eristusvõimele, sest võib juhtuda, et operaator sisestab seadmesse niiskeid või märgunud anumaid või tekib seadmes välitingimustes kasutamisest veeauru kondensaat. Selleks teostati järgnevad katsed:

- 1) anduri metallklemmid tehti veega märjaks, aga anum jäeti kuivaks;
- 2) metallklemmidele ja anumale tekitati veeauru kondensaat;
- 3) anum kasteti vette nii, et anuma välispind oli ühtlaselt märgunud.

Loetelus esimesel katsel ei olnud anduri näidus muutust näha. Teine punkt põhjustas anduri näidu kuni 1,3% langemist, kuid see on oluliselt väiksem anduri eristusvõimest ja seega ei põhjusta vedeliku taseme tuvastamisel probleeme. Kolmanda punkti puhul ei õnnestunud mahtuvust korrektselt mõõta, kuna anuma märg pind hakkas juhtima ja seetõttu andis andur valesid tuvastamistulemusi. Juhtivuse mõõtmisvõimekuse lisamisega saaks seda probleemi lahendada, aga hinnati, et see pole vajalik ja on operaatori vastutada, et seadmesse ei sisestataks märjaks saanud anumaid.

2.5 Kapillaari termostabiliseerija

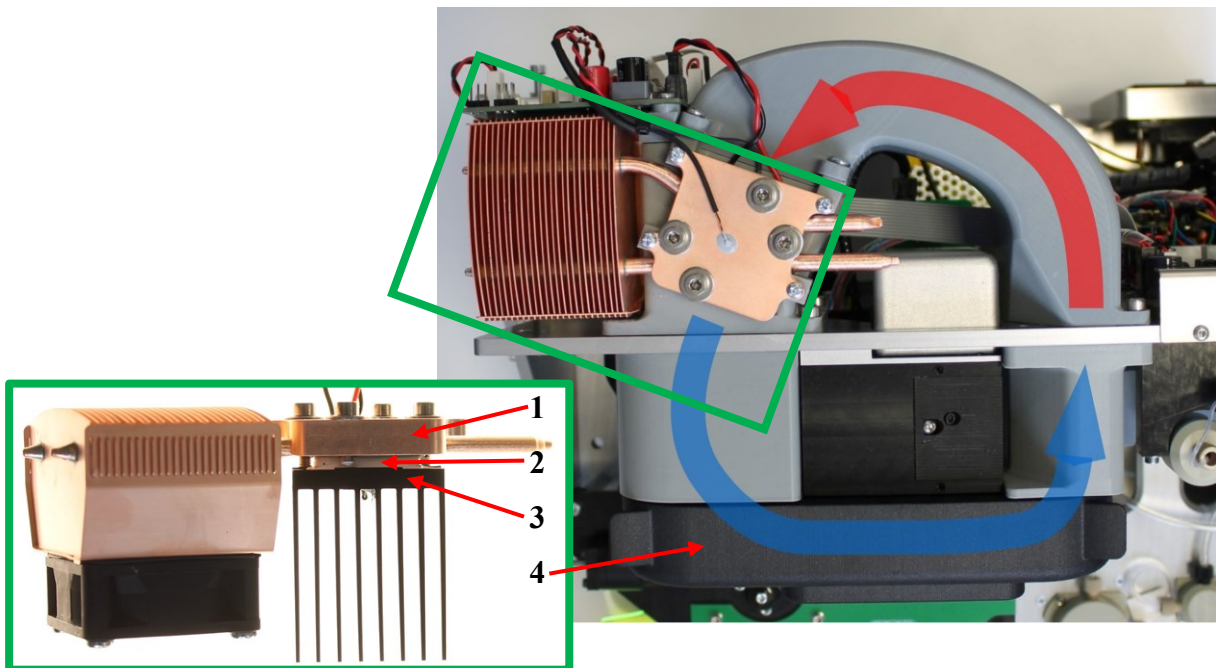
Kapillaari sees toimuvaid protsesse mõjutab temperatuur suurel määral. Temperatuuriga muutuvad puhverlahuse omadused, näiteks viskoossus,ioonjuhtivus ja fluorestseeruvus. Et saada korratavaid tulemusi peab kapillaari termostabiliseerima.

Kasutades kapillaari termostabiliseerijat kapillaari jahutamiseks, saab mõõteprotsessil kasutada kõrgemat pinget, mis vähendab üldist ionide migreerimisaega ja lühendab sellega mõõtmist. Suurema pingega paraneb ka elektroferogrammi piikide lahutuvus. Jahutamine on oluline, sest kõrgema pingega kaasneb puhvri soojenemine ja liiga kõrge puhvri temperatuuriga läheb puhver keema [29], mis nurjab mõõtmise.

Käesoleva töö raames programmeeriti kapillaari termostabiliseerija Peltier' elemendi kontrollkood ning seadistati ja testiti Peltier' elemendi kontrollelektronikat.

Termostabiliseerija tööpõhimõte

Kapillaar paikneb kapillaari hoidikus (joonisel 17 viide 4), mille otsad on ühendatud tunneliga. Hoidikus ja tunnelis pannakse õhk ringlema ventilaatori abil. Ringleva õhu temperatuuri kontrollitakse termostabiliseerimismooduliga ja sellega mõjutatakse kapillaari temperatuuri.



Joonis 17. Termostabiliseeritud õhu liikumine läbi kapillaari hoidiku. (1) väline soojusvaheti, (2) Peltier' element, (3) tunnelisisene radiaator, (4) kapillaari hoidik

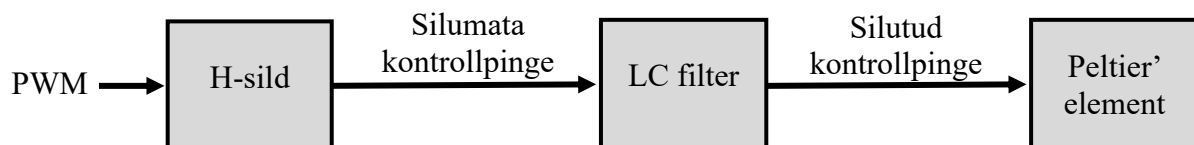
Termostabiliseerimismooduli tunnelisisest radiaatorit (3) soojendatakse või jahutatakse selle vastas oleva Peltier' elemendi (2) abil. Peltier' elemendi efektiivsemaks töötamiseks on tarvis ka elemendi välise poole temperatuuri reguleerida ja seetõttu on Peltier' elemendi teisel poolel tunnelist väljas soojusvaheti (1).

Termostabiliseerimise teostamiseks mõõdetakse termistoridega erinevaid temperatuure. Esiteks mõõdetakse tunnelis ringleva õhu temperatuuri, mille põhjal hinnatakse termostabiliseerimisel, kui lähedalt seadetemperatuurile ollakse. Veel mõõdetakse Peltier' elemendi mõlema poole temperatuure. Selleks on elemendi pinnale võimalikult lähedale paigaldatud üks termistor tunneli radiaatorisse ja teine välisesse soojusvahetisse. Peltier' elemendi mõlema poole temperatuure on vaja teada elemendi temperatuuri kontrolliks.

Peltier' efekt ja elemendi juhtelektroonika

Peltier' elementi üht pidi pingestamisel hakkab elemendi üks pool jahtuma ja teine soojenema – tekib soojuse ühelt poolt teisele kandmise efekt, mida nimetatakse Peltier' efektiks. Teist pidi pingestamisel muutub soojuse ülekandesuund vastupidiseks [38] ehk endine jahtunud pool hakkab soojenema ja soojenenud pool jahtuma. Seega saab Peltier' elementi päri- ja vastupingestades kasutada nii jahutamiseks kui soojendamiseks. Rakendatud pinge tekitab Peltier' elemendis voolu, mis määrab, kui suur soojushulk ühelt elemendi poolelt teisele kantakse.

Peltier' elemendi mõlemapidiseks pingestamiseks kasutatakse H-silda. H-silla abil saab Peltier' elemendile rakendatavat keskmist pinget määrata PWM signaali täituvusega. Peltier' elemendi eluea pikendamiseks silutakse H-silla väljundit LC filtriga. Otsene PWM kontrollpinge Peltier' elemendil põhjustab selles termilisi stresse, lühendades elemendi eluiga [39]. PWM signaali teisendamist Peltier' elemendi silutud kontrollpingeks kirjeldab joonis 18.



Joonis 18. Peltier' elemendi kontrollpinge skeem H-silla ja LC filtriga

H-silda juhitakse DRV8701E H-silla kontrolleriaga, mis võimaldab H-silla transistoride väratite juhtimisvoolu valida. Suurem juhtimisvool muudab transistoride ümberlülitamise kiiremaks, mis väljendub madalamas transistoride temperatuuris. Transistoride temperatuuri alanemise võrra tõsteti PWMi sagedust – suurem PWMi sagedus tähendab ühes ajahetkes rohkem transistoride ümberlülitusi ja seega rohkem soojuse teket. Kõrgem PWMi sagedus on kasulik, sest sagedusega kasvab LC filtri sumbumus (vaata Lisa 5), tänu millele silutakse Peltier' elemendi kontrollpinget paremini. Transistoride värativoolu ja PWMi sageduse mõju transistoride temperatuurile ja pinge ujuvusele (ingl *ripple*) kirjeldab tabel 3.

Tabel 3. Peltier' H-silla transistoride vrativoolude ja PWMi sageduse mju uurimine

Katse seadistus	PWMI sagedus (kHz)	60	80	100	120	120
	Vrati thjendusvool (mA)	100	100	100	100	150
	Vrati laadimisvool (mA)	200	200	200	200	300
Mte-tulemused	Transistoride temperatuur ¹ (°C)	64	65	70	74	66
	Pinge lainetus ² (ingl <i>ripple</i>) (mV)	33	28	24	21	21
	Filtri sumbumustegur ³ (dB)	-45,6	-47,0	-48,3	-49,5	-49,5

Tabelist on nha, et transistoride temperatuur tuseb PWMi sageduse kasvades ja langeb transistori vrativoolu tstmisega – niteks on vrreldavate transistoride temperatuuridega katsed, mille seadistused on vastavalt 120 kHz 150/300 mA ning 80 kHz 100/200 mA. Nha on ka filtri sumbumusteguri suurenemist sageduse suurenemisega. Kasutusele veti seadistus vrativooludega 150/300 mA (kasutatava kontrolleri maksimaalne vool) ja sagedus 120 kHz, siis oli transistori temperatuur ligikaudu 66 °C ja sumbumustegur -49,5 dB.

Vrativoolude tstmisel kontrolliti ka kiiremast mberllitusest tulenevat vimaliku krgesagedusliku lainetusefekti tekkimist (ingl *ringing*) H-silla vljundis enne LC filtrit. See efekt vib tekitada elektromagnetilisi hireid ja seetttu sooviti nende esinemist vltida. Kirjeldatud efekti ostsilloskoobiga mtmisel ei esinenud.

Kasutusele vetud PWMi sagedus andis mdetud filtri sumbumusteguriks -49,5 dB. See on antud sagedusel selle filtri simuleerimistulemustega sarnases suurusjrgus (-51,9 dB, peatkis Lisa 5). Sumbumus -49,5 dB on hea tulemus, letades oluliselt Peltier' elementide tootjate ldist soovituslikku 10% pinge lainetust (-20,0 dB) [39].

Peltier' elemendi vimsust karakteriseeriv mudel

Termostabiliseerimisel juhitakse Peltier' elementi PI-kontrolleriga. PI-kontroller seadistab Peltier' elemendi lekantavat soojushulka (edaspidi Q), marates elemendi kontrollpinget (edaspidi U). Peltier' elemendi lekantav soojushulk ei ole aga pinge suhtes konstantne, vaid sltub tugevalt elemendi poolte temperatuuride vahest (edaspidi ΔT). PI-kontroller ei tta sellise mittelineaarse ssteemiga hsti. Seega loodi PI-kontrollerile mudel, mis teisendaks

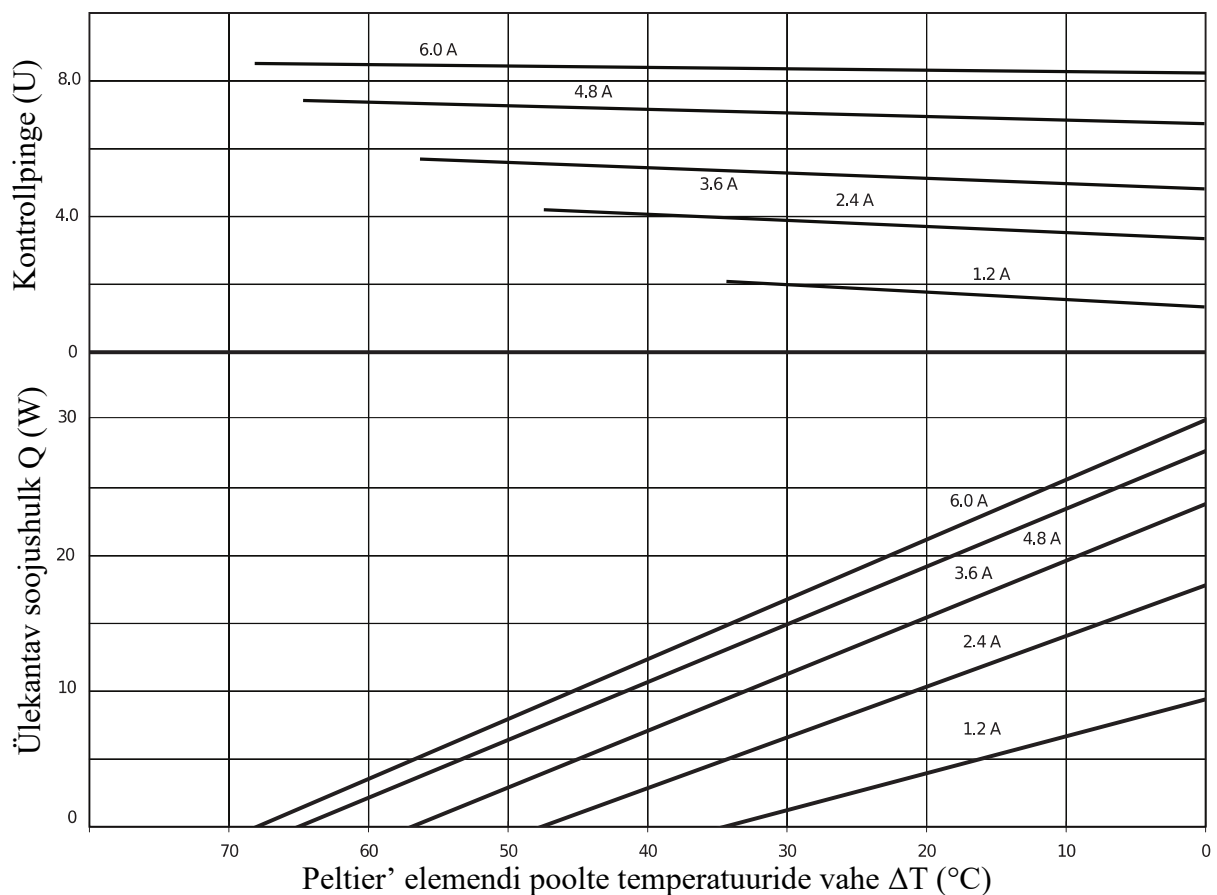
¹ Mdetud FLIR C2 termokaameraga

² Mdetud Agilent Technologies DSO-X 2004A ostsilloskoobiga

³ Peltier' elemendi kontrollpinge 6,27 V

kontrolleri määratud soojendus- või jahutusvõimsuse Q Peltier' elemendi ΔT järgi selliseks kontrollpingeks U , mille rakendades nimetatud võimsus saavutatakse.

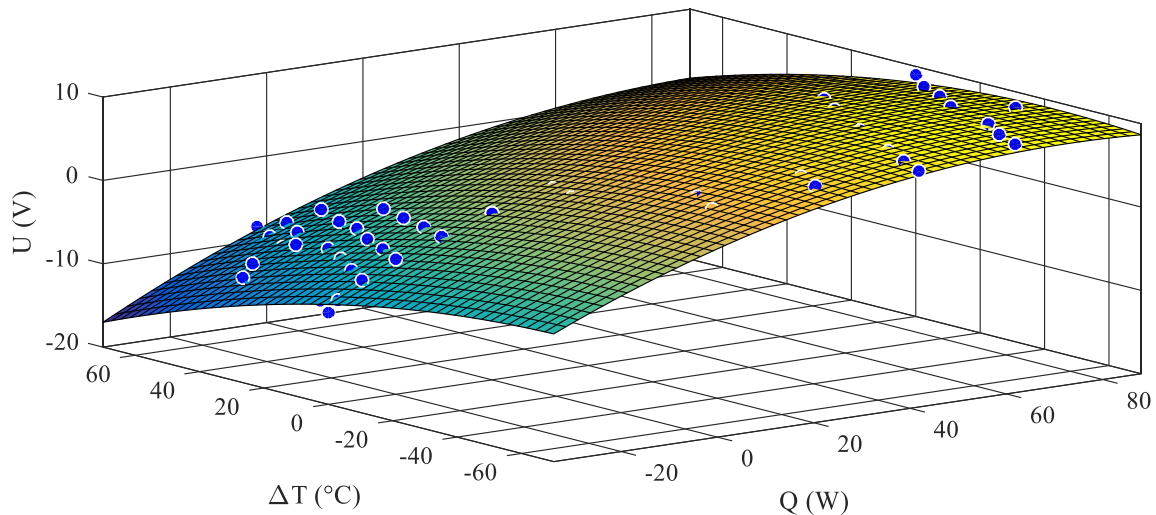
Joonis 19 näitab kasutatud Peltier' elemendi puhul eelkirjeldatud temperatuuri sõltuvust ja kirjeldab, kuidas pinge mõjutab üht elemendi poolt jahutatavat soojushulka. Joonise ülemine graafik näitab, kuidas pinge U mõjutab elementi läbiva voolu I suurust erinevate elemendi temperatuuri vahede ΔT korral. Alumine graafik näitab, kui suur ülekantav soojushulk Q saavutatakse teatud voolu I ja temperatuuri vahe ΔT puhul.



Joonis 19. CP60340 ($T_h = 27$ °C) andmelehe väljavõte [38]

Seega saab jooniselt saadava info põhjal leida funktsioonid $I = f(U, \Delta T)$ ning $Q = f(I, \Delta T)$, millest saab tuletada otsitava mudeli $U = f(Q, \Delta T)$. Peltier' elemendi andmeleht kirjeldab vaid elemendi jahutusvõimsust, kuid termostabiliseerimise rakenduse jaoks oli vaja teada ka soojendusvõimust. Soojendusvõimsus on ülekantava soojushulga Q ja Joule' soojenemise Q_J soojushulga summa [38]. Joule' soojenemine on $Q_J = I \cdot U$ ja seega soojenemisvõimsus on $Q + I \cdot U$.

Eelkirjeldatud info põhjal loodi lineaarregressiooni abil mudel $U = f(Q, \Delta T)$. Mudel on illustreeritud joonisel 20, kus sinised ringid tähistavad andmelehe graafikult leitud punkte, millest pooled on tuletatud Joule' soojenemist arvestades.



Joonis 20. Peltier' elemendi mudel $U = f(Q, \Delta T)$

Leitud mudel arvulisel kujul (arvutuslikke näiteid selle kasutamisest peatükis Lisa 6) on

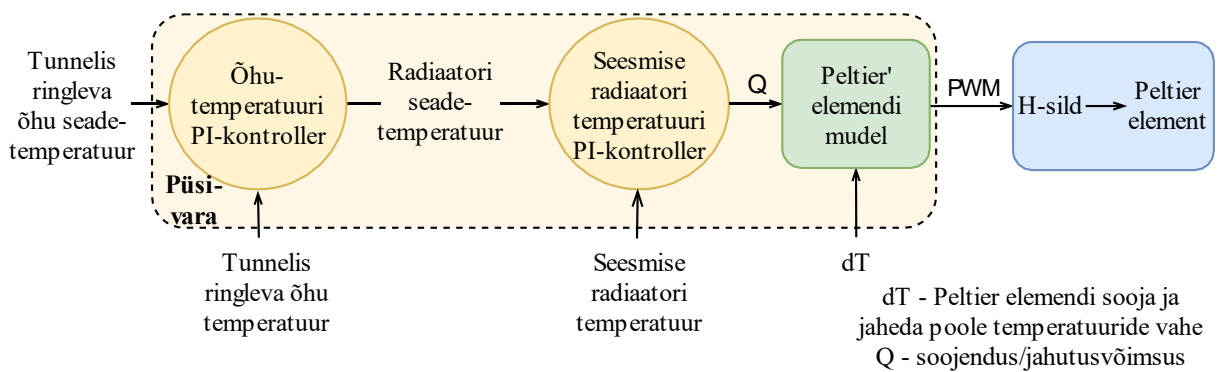
$$U = f(Q, \Delta T) = 0,1956 \cdot \Delta T - 0,07743 \cdot Q - 0,001186 \cdot \Delta T^2 + 0,0003166 \cdot \Delta T \cdot Q - 0,0005774 \cdot Q^2.$$

Kirjeldatud mudel on üks osa kaprillaari ümbritseva õhu temperatuuri kontrollierist. Järgnevalt kirjeldatakse ülejäänud õhu termostabiliseerimise kontrolleri komponente ja nende toimimist.

Tunneli temperatuuri kontrollid

Tunneli temperatuuri kontrolleri eesmärk on tunnelis ringleva õhu stabiliseerimine etteantud temperatuurile. Stabiliseerimiseks etteantav temperatuur saadetakse peaplaadist. Õhu stabiliseerimise töö on jaotatud alamülesanneteks erinevate alamkontrollerite vahel. Töö jaotamine mitme alamkontrolleri vahel võimaldas seadistada ja testida lihtsamaid kontrollereid. Sedasi välditi ühe keeruka kontrolleri loomist, mida oleks raskem optimeerida.

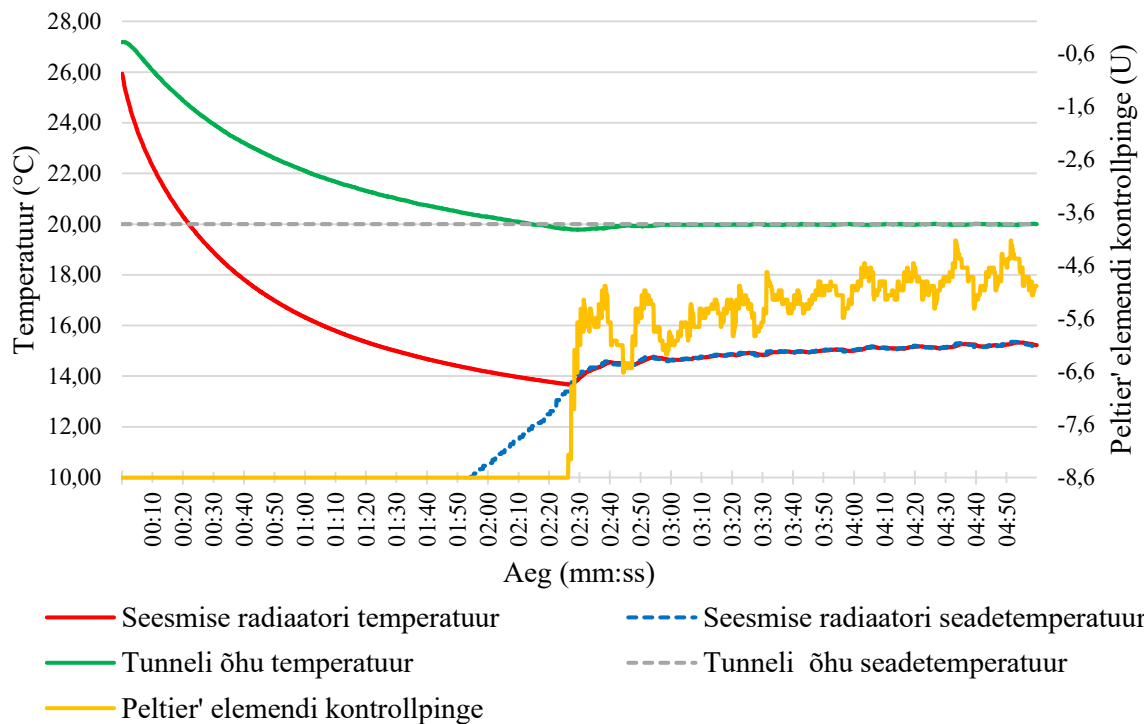
Joonis 21 kirjeldab termostabiliseerimise tööd täitvat kontrolleri alates peaplaadi saadestavast seadetemperatuurist kuni H-sillale saadestava PWM signaalini. Katkendjoonega on ümbritsetud püsivaras paiknevad alamkontrollerid ja eelnevalt kirjeldatud Peltier' elementi lineariseeriv mudel.



Joonis 21. Kapillaari ümbritseva õhu temperatuuri stabiliseerimise kontrollid

Joonisel olev vasakpoolseim PI-kontroller (edaspidi PI_0) reguleerib tunnelis ringleva õhu temperatuuri, määrates tunnelis paiknevale radiaatorile seadetemperatuuri. PI_0 kasutab tagasisidena tunnelis ringleva õhu temperatuuri. PI_0 radiaatori seadetemperatuuri kasutab seesmise radiaatori temperatuuri PI-kontroller (edaspidi PI_R). PI_R väljastab soovitud soojushulka Q , millega juhitakse radiaatori temperatuuri vajalikus suunas. PI_R kasutab tagasisidena seesmise radiaatori temperatuuri. PI_R tööperiood on PI_0 omast väiksem (vastavalt 100 ms ja 1000 ms), sest radiaatori temperatuuri suudetakse kiiremini muuta, kui õhu oma.

PI_R väljund Q läbib Peltier' elemendi mudeli, mis kasutades Peltier' elemendi poolte temperatuuride vahet ΔT , arvutab vajaliku elemendile rakendatava kontrollpinge. Kontrollpinge teisendatakse PWMi täituvuseks ja PWM signaaliga juhitakse H-silda, mis selle tulemusel vajaliku pinge Peltier' elemendile rakendab.



Joonis 22. Termostabiliseerija kontrollrite töö kapillaari ümbritseva õhu jahutamisel

Joonisel 22 on näidatud termostabiliseerimise kontrollrite tööd, kui tunnelis ringlevat õhku jahutatakse temperatuurilt 27,2 °C kuni 20,0 °C. MCU lugese temperatuuri stabiilseks ajahetkel 02:09, stabiilsuse kriteeriumiks loeti, et temperatuur on püsinud vahemikus $20,0 \pm 0,4$ °C 15 sekundit. Suurim õhutemperatuuri ülereguleerimine (ingl *peak overshoot*) oli 0,23 °C (ajahetkel 02:29, 19,77 °C). Õhutemperatuur oli pärast esmast ülereguleerimisest taastumist, alates ajahetkest 3:00, väga stabiilne: maksimaalne kõrvalekalle seadetemperatuurist oli 0,03 °C. Graafikul oranž joon näitab Peltier' elemendi kontrollpinget. Peltier' elemendi maksimaalne toitepinge on $\pm 8,6$ V [40].

Termostabiliseerimismooduli väline soojusvaheti (Peltier' elemendi lähedalt mõõtes) jõudis maksimaalse temperatuurini 39,7 °C. Kõrge temperatuuri tõttu langeb Peltier' elemendi jahutusvõimsus, kuid arvestades termostabiliseerimismooduli kompaktsust hinnati mooduli ja termostabiliseerimise kontrollkoodi tööd heaks.

Temperatuuri langetamine 7,2 °C õnnestus ligikaudu kahe minutiga. Kaks minutit moodustab DrugHunteri soovitud keskmisest mõõteprotsessist (15 minutist) küll arvestatava osa, kuid termostabiliseerimist saab alustada kohe pärast õige kapillaari hoidiku kinnitamist seadmesse. Seega saab termostabiliseerimine toimuda teiste aeganõudvate protseduuridega (näiteks erinevad pesemisprotseduurid kestvusega ligikaudu 5 minutit) samaaegselt ning ei pikenda üldist mõõtmisprotsessi.

2.6 Peaplaat ja selle alamsüsteemid

DrugHunteri peaplaat on seadme keskne komponent. Peaplaadi kontrollimisel täidab seade kompleksseid ülesandeid, millest mõned alamülesanded delegerib peaplaat teistele alamsüsteemidele ning mõned täidab ise. Seejuures jälgib peaplaat alamsüsteemide raporteeritud seisundit ja tekkinud vigu ning edastab need pardaarvutile, et sealsel tarkvaral oleks ülevaade hetkeseisust ja vajadusel saaks operaatorit juhendada tekkinud vea lahendamisel.

DrugHunterit saab ülesandeid tegema panna saates peaplaadile käske. Käske saab saata kahel viisil: kasutajaliidese vahendusel pardaarvutist või tekstilise (ASCII) protokolliga abil jadapordi terminalprogrammidega UART liidese vahendusel. Tänu viimasele käskude saatmise viisile saab seadet ilma kasutajaliidese kontrollida, mis oli eelkõige seadme arendustööl kasutatav funktsionaalsus.

Peaplaadil on ülejäänud DrugHunteri elektroonikaga võrreldes võimekaim MCU – ATSAMV71Q21B-AAB. MCU valiti tänu välise muutmälu toele, kuhu varundatakse detektori mõõteandmed ning vajadusel saab pardaarvuti neid uuesti pärida. MCU suurem arvutusvõimsus võimaldab peaplaadil kõiki alamsüsteeme ja nende suhtlusliideseid hallata – kasutatakse pea kõiki MCU UART liideseid. MCUl on ka riistvaraline ujukomaarvutuste tugi, mis võimaldaks teha detektori andmete esmast töötlust, kuid hetkel seda ei tehta, sest andmed suudetakse töötlemata kujul pardaarvutisse saata ning seejärel neid seal töödelda.

Peaplaadile arendati selle töö raames HAL, HALi kasutatavate aktuaatorite kontrollkoodid ning töötati välja enamus peaplaadi tööloogikast. Loetletust täpsemalt kirjutatakse järgnevates peatükkides.

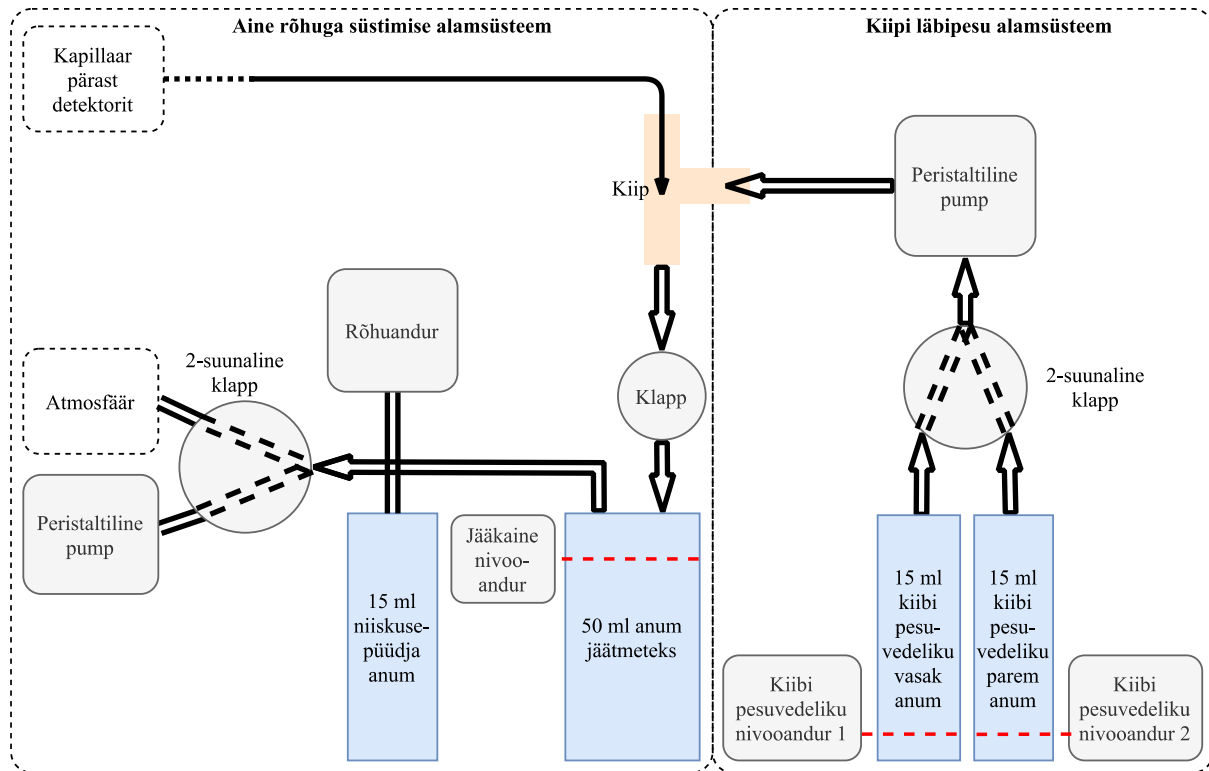
2.6.1 Peaplaadi kontrollitavad alamsüsteemid

Peaplaat kontrollib otseselt kolme alamsüsteemi: alarõhuga süstimise ja kiibi läbipesu alamsüsteeme ning kõrgepingetoiteplokki.

Kõrgepingetoiteplokki kasutatakse nii elektroforeetilise lahutamise teostamiseks kui ka vedelike elektrokineetiliseks sisestamiseks kapillaari. Elektrokineetilisel sisestamisel voolab vedelik kõrgepinge mõjul kapillaari. Teine viis kapillaari ainete tõmbamiseks toimub alarõhu süstimise süsteemiga. Kapillaari ühte otsa tekitatakse kontrollitud alarõhk, mille tulemusel

teisest otsast vedelikke kapillaari tõmmatakse. Kiibi pesemise süsteemi eesmärk on vältida kiibi reostumist, mis katkestaks elektroforeetilisel lahutamisel voolu ja rikuks katse. Kõik ained, mis kapillaari läbivad, jõuavad lõpuks kiipi, mistõttu peab kiipi aeg-ajalt pesema.

Alarõhuga süstimise ja kiibi läbipesu süsteemid



Joonis 23. Aine rõhuga süstimise ja kiibi läbipesu süsteemid

Joonisel 23 (vasakul) alarõhuga süstimise süsteemis tekitatakse niiskusepüüdja ja jäätmete anumasse alarõhk. Alarõhu abil tõmmatakse ained viaalist kapillaari, kasutades seda nii kapillaari pesu kui ka proovi täppissüstamiseks. Alarõhu suurus määrab, kui kiiresti ained kapillaari tõmmatakse. Rõhku mõõdetakse rõhuanduriga ja reguleeritakse peristaltilise pumbaga.

Kiibi all olevat klappi saab kasutada anumatesse kindla alarõhu tekitamiseks ning klappi avades aine süstimist alustada juba suure alarõhuga. Süsteemis on veel kahe-suunaline klapp, mille abil saab alarõhuga süstimise lõppedes anumate rõhud atmosfääri ventileerida. Jääkaine nivooandur kontrollib, et kapillaari ja kiibi pesemise protseduuridega ei oleks jääkaine anum täis saanud.

Enne mõõtmise algust peab kiip olema puhas ja täidetud puhverlahusega. Selle eest vastutab kiibi läbipesusüsteem. Pesemiseks on kaks pesuaine anumat. Ühes anumatest on alati puhverlahus ning teises anumats võib olla sõltuvalt vajadusest mõni pesuaine või loputamiseks

destilleeritud vesi. Kiibi läbipesusüsteemi kahesuunalise klapiga saab valida, millisest anumast võtab süsteemi peristaltiline pump pesuvedelikku, mida läbi kiibi jäätmeanumasse pumbata. Mõlemal pesuaine anumal on nivooandur, mille abil peaplaad edastab kasutajaliidesele info nende täitmisvajadusest.

Kõik klapid on solenoididega. Solenoididel on ümberlülitamiseks vaja kõrgemat voolu, kui asendi hoidmiseks. Solenoidide kiireks ümberlülituseks rakendatakse neile maksimaalne toitepinge sajaks millisekundiks. Seejärel minnakse solenoidide soojenemise vältimiseks üle PWM toitele, rakendades efektiivselt 50% toitepingest. Kuna solenoid on induktiivne komponent, väheneb eraldatav soojus sellise juhtimisega kuni neli korda.

Joonisel näidatud mõlema peristaltilise pumba kiirust reguleeritakse. Aine kapillaari süstimise alamsüsteemi samm-mootoriga peristaltilist pumba kontrollitakse analoogselt peatükis 2.3.2 kirjeldatud tõstuki samm-mootoriga, aga pulsi aegasid ei võeta otsingutabelist ja vajalikud ujukomaarvutused tehakse katkestuses. Kiibi läbipesu pumba alalisvoolumootori kiirust kontrollitakse, andes PWM sisendit DRV8801 mootorikontrollerile.

DLV-005D-E1BD-C-NI3F rõhuandur võimaldab mõõta kapillaari otsas rõhku kuni 344 mbar [41] ja seda kasutatakse mõõtesagedusega 600 Hz. Peaplaadi kontrollitud alarõhu tekitamise algoritm töötab rõhuanduri mõõtmisagedusega võrreldaval sagedusel ja kasutab rõhuanduri näitu. Näidu põhjal seadistatakse samm-mootoriga pumba kiirust. Selleks kasutatakse astmelist proportsionaalset kontrollerit – pumbal kasutatakse teatud arvu fikseeritud kiirusi ja kindel kiirus valitakse rõhuanduri näidu ja soovitud rõhu vahe põhjal. Seejuures kasutatakse suurema vahe korral suuremat pumpamiskiirust. Astmelise kiiruskontrolli eeliseks tavalise proportsionaalse kontrolleriga võrreldes oli, et fikseeritud kiirused sai valida sellised, mille puhul pumba samm-mootor toimis vaikselt.

Kõrgepinge toiteploki kontroll

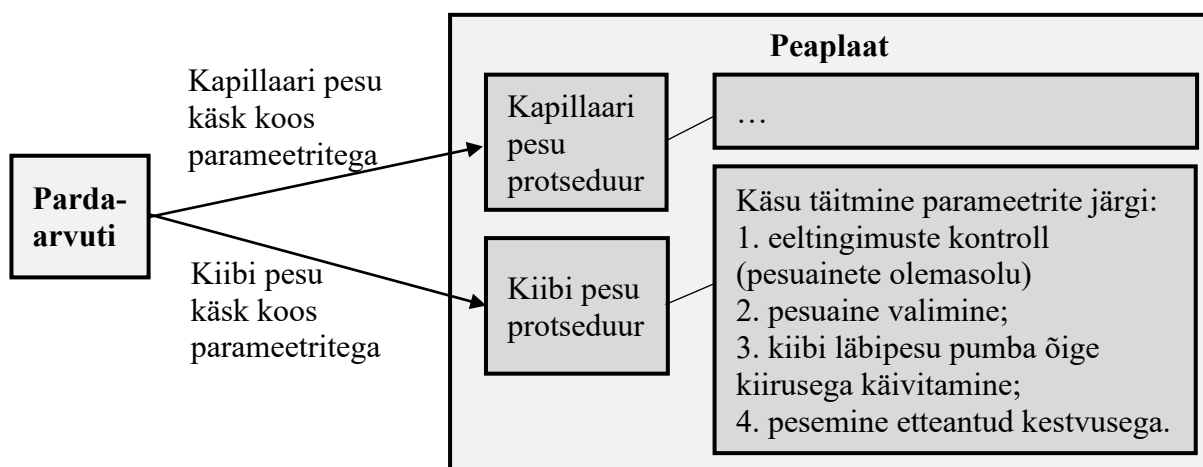
Peaplaad kontrollib seadme kõrgepinge toiteploki CPp30030424y, mis suudab tekitada kuni 30 kV pinget 300 μ A voolu juures. Kõrgepinge toiteploki kontrollitakse analoogliidese, millega määratakse toiteploki pinget ning voolupiiraja. Toiteploki analoogliidese saab välja lugeda hetkepinget ja voolu. [42] Kasutatava 5 V analoogliidese teiseks andmaks mõõdetav või seadistatav parameeter selle parameetri skaalasse, näiteks:

- kui toiteploki hetkepinge on 15 kV, siis pinget kirjeldaval väljundviigul on 2,5 V;
- 120 μ A voolupiiraja seadistamiseks rakendatakse voolupiiraja sisendviigule 2 V.

Püsivara kasutab kõrgepinge toiteploki voolu ja pinge mõõtmiseks ADS8331 [43] analoog-digitaalmuundurit (ADC) ning kontrollib toiteploki DAC8560 [44] digitaal-analoogmuunduritega (DAC). Mõlemad komponendid töötavad SPI-liidesega. Kapillaarile rakendatud voolu mõõdetakse kahel viisil: esiteks mõõdab ADC toiteploki analoogliidesest toiteploki raporteeritud voolu ja teiseks arvutatakse vool kapillaariga jadamisi oleva šunt-takisti pingelangu järgi. Kui nimetatud voolud on võrdsed, saab järeldada, et kogu kõrgepinge toiteploki vool läheb läbi kapillaari. Kui šunti vool on väiksem, siis järelikult toimub kuskil seadme korpuse ja kapillaari vahel läbilöök.

2.6.2 Protseduurid

DrugHunteri kontekstis on sõnal protseduur kindel tähendus. Protseduuriga käivitatakse DrugHunteri riistvaras kindlate parameetritega toimingud ning jälgitakse nende toimimist. Protseduure õiges järjestuses täites saavutatakse DrugHunteri eesmärgipärane töö ehk viiakse läbi kõik seadme hoolduseks ja mõõtmiseks vajalikud tegevused. Protseduuride täitmist kontrollib peaplaad ja protseduuride käivitamiseks saadetakse peaplaadile käsk. Joonis 24 kirjeldab DrugHunteri kapillaari ja kiibi hooldamiseks vajalike protseduuride täitmist.



Joonis 24. DrugHunteri hooldamiseks teostatavad protseduurid

Seadme funktsionaalsuse saavutamiseks loodi DrugHunterile järgnevad protseduurid:

- Karusselli liigutamine viaali sisestamiseks. Protseduuri abil liigutatakse operaatori ette õige karusselli positsioon, et operaator sisestaks vajaliku kemikaaliga või prooviga viaali.
- Aine rõhuga süstimine. Protseduuri kasutatakse kapillaari pesemiseks ja proovi süstimiseks kapillaari. Protseduuril spetsifitseeritakse süstimise alarõhk ja alarõhu hoidmise kestvus. Protseduur võimaldab ka detektorit sisse lülitada, et selle andmete

põhjal hinnata, kas kapillaar on puhas, vajab veel pesemist või on ummistunud. Sellest protseduurist räägitakse pikemalt peatükis 2.7.

- Aine süstimine integreeritud rõhuga. Võrreldes eelmise protseduuriga spetsifitseeritakse maksimaalne rõhk, millega ainet süstitakse ning süstimise rõhu integraal aja järgi (ühik millibaar korda sekund, edaspidi $\text{mbar}\cdot\text{s}$), mis määrab süstimisel aine koguse. Protseduur loodi proovi süstimiseks kapillaari. Sellest protseduurist räägitakse pikemalt peatükis 2.7.
- Kiibi pesemine. Protseduuril spetsifitseeritakse, millisest kiibi pesuaine anumast pesuainet võtta, määratakse pesu kestvus ning kiibi pumba kiirus.
- Aine kapillaari elektrokineetiline süstimine ja elektroforeetiline lahutamine. Tegu on kombineeritud protseduuriga, mida saab kasutada elektrokineetiliseks aine sisestamiseks kapillaari, aga ka mõõtmise protseduurina. Nende kahe erinevus seisneb selles, et viimase puhul käivitatakse detektor. Protseduuril määratakse kapillaarile rakendatav pinge ning jälgitakse, et kapillaari vool oleks määratud piirides. Vool kirjeldab elektroforeetilisel lahutamisel erinevaid protsesse, mistõttu on selle järgimine oluline. Lisaks saab käivitada kiibi pesemise pumpa ja valida pesuvedelikku. Kiibi pesemise vajalikkus ilmneb pikaajalisel mõõtmisel, sest kiip võib mõõtmise ajal reostuda ning põhjustada voolu katkemise ja mõõtmise ebaõnnestumise.
- Karussellis viaali valimine ja selle kapillaari otsa tõstmine. Protseduuri kasutatakse alamprotseduuridena kõigis eelnimetatud protseduurides, et tagada õige kemikaali olemasolu kapillaari otsas. Protseduuri kasutatakse ka nõela kiireks loputamiseks ja seadme seisma jätmisel kapillaari otsa ja nõela reostumise eest kaitsmiseks.
- Termostabiliseerimise sisse ja välja lülitamine. Termostabiliseerimise protseduur on ainus protseduur, mille tulemust peaplaad ootama ei jää. See võimaldab protseduuril toimuda paralleelselt teiste seadme aeganõudvate protseduuridega, näiteks erinevate pesuprotseduuridega. Kapillaari tunneli temperatuuri õnnestumist raporteeritakse pardaarvutile ning vajadusel jääb seda ootama arvutitarkvara.

DrugHunteri arenduse algfaasis tuli lahendada probleem, kui suur osa protseduuride loogikast ehk olekumasinatelt paigutada peaplaadi püsivarasse või pardaarvuti tarkvarasse. Kui protseduuride loogika paikneb püsivaras, siis saadetak püsivarale üks paljude parameetritega käsk. Seevastu protseduuri loogika paiknemisel pardaarvuti tarkvaras saadetak peaplaadile palju väheste parameetritega käske.

Protseduuri loogika paiknemisel püsivaras eeliseks on:

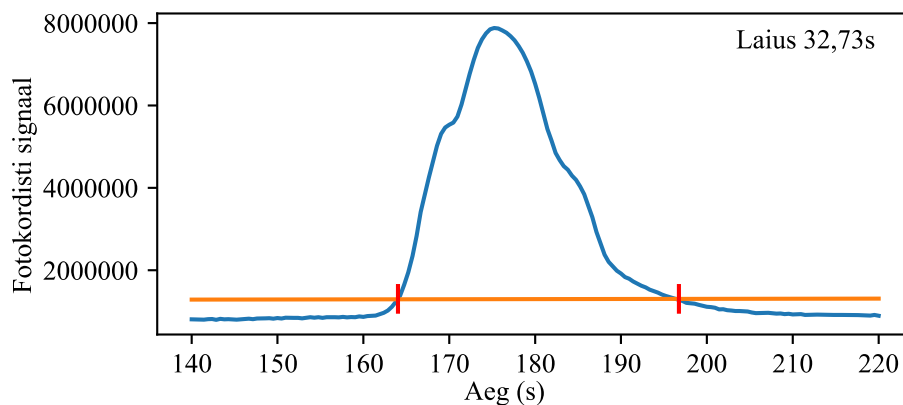
- lihtsamini tagatav alamprotseduuride ajastus – ei teki pardaarvuti ning peaplaadi vahelisest suhtlemisest lisaviivitusi;
- väiksem arv riistvarale saadetavaid käsked – eriti oluline, kui seadet kasutada ilma kasutajaliideseta, sest operaator peaks käsitsi palju erinevaid käsked saatma ja nende tulemusi jälgima, mis on tülikas ja operaatoril on lihtne vigu teha.

Protseduuride loogika püsivaras paiknemise puuduseks on asjaolu, et seadme funktsionaalsuse (protseduuride) muutmiseks tuleb muuta püsivara, kuivõrd teise lähenemise puhul tuleks muuta vaid pardaarvuti tarkvara. Sellegipoolest otsustati protseduuride loogika paigutada peaplaadi püsivarasse – oluliseks eeliseks peeti võimalust seadet hõlpsasti kasutajaliideseta kontrollida, et saaks seadet testida ja kasutajaliidest arendada samaaegselt.

2.7 Proovi alarõhuga sisestamise koguse uurimine

Proovi korratav süstimiskogus on oluline kapillaarelektroforeesi teostamisel. Esiteks, varieeruv proovi kogus mõjutab migreeruvate ionide kogust ja ionide tsoonide laiust. Teiseks, proovi elektrijuhtivus enamasti erineb puhverlahuse omast. Seetõttu võib varieeruvus proovi koguses mõjutada kõrgepinge rakendamisel voolu suurus, mõjutades puhvri temperatuuri ja viskoossust.

Süstimiskoguse korratavuse uurimiseks süstiti alarõhuga eelnevalt puhverlahusega täidetud kapillaari fluorestseeruvat ainet. Seejärel viidi kapillaari ots taas puhverlahusesse, lülitati detektor sisse ning proovi väljumiseni kapillaarist tõmmati konstantse alarõhuga (100 mbar) kapillaari sisu detektori eest läbi. Ühe katse mõõtetulemus on näidatud joonisel 25, kõikide katsete mõõtetulemused on peatükis Lisa 7.



Joonis 25. Alarõhuga detektori eest läbi liigutatud proovi fluorestsentsi piik

Iga katse puhul otsiti detektori signaali baasväärtus. Baasväärtusest 30% kõrgema väärtusega (joonisel oranž joon) otsiti lõikumispunktid piigi tõusva ja langeva frondiga. Lõikumispunktid loeti piigi algus- ja lõppaegadeks (joonisel punased jooned), nende aegade vahet piigi laiuseks. Eri katsete piikide laiuste põhjal hinnati süstitud aine koguse korratavust. Proovi süstimiskogust uuriti kahe erineva protseduuriga.

Esiteks katsetati klapiga süstimist, mille puhul eraldati kapillaar ja kapillaari all olev jäätmeanum teineteisest klapi sulgemisega. Seejärel tekitati jäätmeanumasse kindel alarõhk ja avati klapp teatud ajaks, misjärel kaotati alarõhk jäätmeanuma ventileerimisega atmosfääri. Kõik katsed teostati katsete võrreldavuse huvides viisil, et rõhu ja klapi lahtioleku aja korrutis oleks 1000 mbar sekundit. Uuriti ka erinevate rõhkudega süstimist ning jäätmeanuma täituvuse mõju piigi laiusele. Tabelis 4 on katsete tulemused.

Tabel 4. Klapiga süstimisprotseduuri katsetulemused

Süstimise parameetrid	Alarõhk (mbar)	40	40	40	40, 60, 80, 100
	Süstimise kestvus (s)	25	25	25	25, 16,7, 12,5, 10
	Jäätmeanum täis/tühi	Täis	Tühi	Täis ja tühi kombineeritud	Tühi
Katsed	1. piigi laius (s)	32,77	32,73	-	33,59
	2. piigi laius (s)	32,54	32,50	-	34,99
	3. piigi laius (s)	32,61	32,70	-	36,45
	4. piigi laius (s)	32,46	32,84	-	38,08
	5. piigi laius (s)	32,47	32,77	-	-
	Piigi keskmine laius (s)	32,57	32,71	32,64	35,78
	Standardhälve (s)	0,13	0,13	0,14	1,93
	Standardhälbe ja piigi keskmise laiuse suhe	0,39%	0,39%	0,43%	5,39%

Klapiga süstimisel tühja ja täis jäätmeanuma puhul on 40 mbar ja 25 sekundiga süstides katse korratavus väga hea, seda näitavad väike standardhälve 0,13 s ning väike standardhälbe ja piigi keskmise laiuse suhe 0,39%. Samas on näha jäätmeanuma täituvuse vähest mõju, sest täis ja tühja anuma piigi keskmised laiused erinevad 0,14 sekundit. Vaadates 40 mbar rõhuga süstimisi koos, tõuseb standardhälve 0,14 sekundini ning suhe keskmise laiusega 0,43 protsendini. Et erinevus on väike võib öelda, et jäätmeanuma täituvus mõjutab süstimiskogust vähe.

Süstitud ainekogust mõjutab klapiga süstimisel suuremal määral süstimise rõhu kasvatamine ja süstimisaja vähendamine (nende korrutist hoiti 1000 mbar·s). Katsetest on näha piigi laiuse

kasvamist rõhu suurendamisel. Katseseeria piigi laiuse standardhälve on 1,93 s ja selle suhe piigi keskmise laiusega 5,39%.

Süstitud ainekoguse kasv tuleneb alarõhu suurendamisel tõenäoliselt rõhusüsteemi voolikute ja anumate elastsusest ja asjaolust, et rõhu atmosfääri ventileerimine võtab suuremate rõhkude korral kauem aega. Kuna tegu on süsteemi omadustega, mis võivad aja jooksul muutuda, näiteks voolikud muutuvad ajaga jäigemaks, siis otsustati luua protseduur, mis sellistest süsteemi omadustest vähem sõltuks.

Selleks loodi klapita süstamise protseduur, mis süstamisel eelnevalt alarõhu tekitamiseks klappi ei kasuta, vaid kogu süstamise aja integreerib alarõhku, kuni saavutatakse teatud süstiskogus ühikuga mbar·sekund. Süstamisel pumbati ühtlase kiirusega etteantud maksimaalne alarõhk ja hoiti seda teatud aja sedasi, et jõutaks alarõhk ühtlase kiirusega ära pumbata.

Klapita süstimisprotseduuri puhul ei ole seega süsteemis järskede rõhumuutusi, mistõttu loodeti võrreldes klapiga süstimisega näha rõhu suurendamise katseseeriates paremaid tulemusi. Klapita süstimid teostati 1000 mbar·s süstiskoguse saavutamiseni, et kogus oleks võrreldav klapiga süstiskatsetega, kus kasutati alarõhku 40 mbar 25 sekundi jooksul. Tabel 5 näitab saadud katsetulemusi.

Tabel 5. Klapita süstimisprotseduuri katsetulemused

Süstamise parameetrid	Maksimaalne alarõhk (mbar)	40	40	40	40, 60, 80, 100
	Süstamise kestvus (mbar·s)	1000	1000	1000	1000
	Jäätmeanum täis/tühi	Täis	Tühi	Täis ja tühi kombineeritud	Tühi
Katsed	1. piigi laius (s)	31,97	32,30	-	32,09
	2. piigi laius (s)	32,10	31,51	-	33,48
	3. piigi laius (s)	31,92	31,57	-	34,35
	4. piigi laius (s)	31,48	31,72	-	34,41
	5. piigi laius (s)	31,71	32,02	-	-
	Piigi keskmine laius (s)	31,84	31,83	31,83	33,58
	Standardhälve (s)	0,24	0,33	0,27	1,08
	Standardhälbe ja piigi keskmise laiuse suhe	0,77%	1,04%	0,86%	3,22%

Tulemustest on näha, et piikide keskmine laius täis ja tühja anuma puhul oluliselt ei erine, kuid standardhälbed (0,24 ja 0,33 s) ning nende suhe keskmisesse piigi laiusesse (0,77% ja 1,04%) on võrreldes klapiga süstimisega suuremad. Ka tühja ja täis anuma katsetulemusi koos vaadates

on korratavus (standardhälve 0,27 s ning selle suhe keskmisega 0,86%) kehvem klapiga süstimise omast (klapiga süstimisel standardhälve 0,14 s ning selle suhe keskmisega 0,43%).

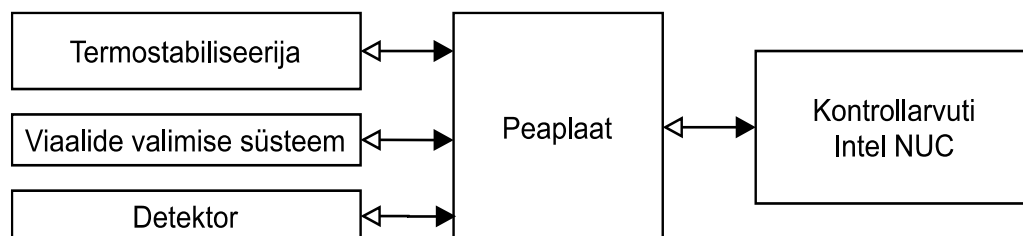
Võrreldes klapiga süstimisprotseduuriga, on klapita süstimise korratavus parem rõhkusid suurendavas katseseerias. Klapita süstimise puhul on standardhälve 1,08 s ja selle suhe keskmise piigi laiusega 3,22%, võrreldes klapiga süstimise vastavate tulemustega 1,93 s ja 5,39%, kuid ka siin on näha maksimaalse rõhu suurenedes piigi laiuse suurenemist.

Katsega nähti, et klapiga süstimistel 40 mbar rõhuga saavutati ligikaudu kaks korda väiksem ainekoguse standardhälve, võrreldes klapita süstimisega. Klapita süstimine saavutas seevastu ligikaudu kaks korda väiksema standardhälbe rõhu suurendamise ja vastavalt süstimisaja vähendamise katseseerias. Seega on mõlemal süstimisprotseduuril omad eelised ja süstimiskoguse uurimine vajab lisauurimist.

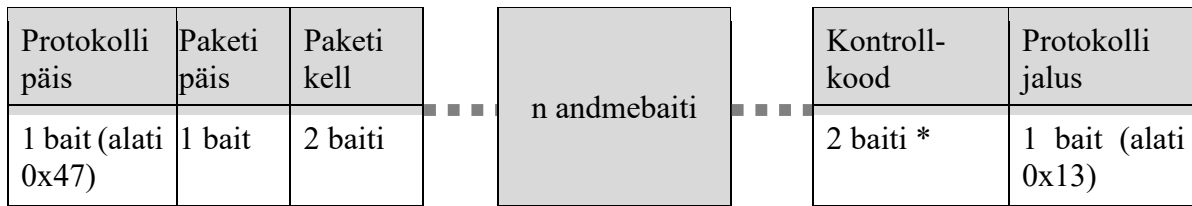
Esiteks peaks uurima, kas kapillaarelektroforeesi teostamiseks on klapita süstimisprotseduuri täpsus piisav. Piisava täpsuse puhul saaks DrugHunteri alarõhu süsteemi lihtsustada ja seadme klapp eemaldada. Teiseks tasub uurida, kuidas alarõhu süsteemi komponentide jäikus mõjutab süstimiskogust, näiteks viia läbi katsed erinevate voolikute ja anumatega.

2.8 Suhtlusprotokoll

Seadme alamsüsteemid suhtlevad üksteisega UART liideste abil. Erandiks on vaid nivooandurid, mis näitavad vedelikutaseme tuvastamist väljaviigu kõrge või madala olekuga. Seadme alamsüsteemide UART liidesed on näidatud joonisel 26. Suhtlusliideste täidetud nooleots tähistab liidese ülemapoolset otsa ning täitmata ots alluvapoolset otsa. Suhtlusprotokoll näeb ette, et ülem saadab alluvale käske ning alluv saadab ülemale perioodiliselt vastu olekupakette ning vajadusel muid andmepakette.



Joonis 26. Alamsüsteemidevahelised UART liidesed



* Arvutatud paketi protokolli päise ja kontrollkoodi vaheliste baitide põhjal

Joonis 27. Suhtluspakettide struktuur

Kõik süsteemidevahelised suhtlusprotokollid ja paketid on ühesuguse ülesehitusega. Käesolevas töös välja töötatud pakettide ülesehitus on näidatud joonisel 27. Paketi struktuuris on lisaks kasulikele andmetele (ingl *payload*) seitse baiti paketi päises ja jaluses:

- Protokolli päist ja jalust kasutatakse alamsüsteemides paketi otsimiseks UARTi puhvrist.
- Kontrollkoodi abil vaadatakse, et protokolli päise ja jaluse vahel olevad andmed oleks korrektsed. Paketi vastuvõtmisel võrreldakse paketist loetud kontrollkoodi ja arvutatakse paketi andmetega lokaalne kontrollkood, nende kahe kontrollkoodi erineisel paketti eiratakse. Selleks kasutatakse väikse arvutuskomplekssusega Fletcher16 kontrollkoodi, mis kontrollib andmete korrektsust ja baitide järjestust [45].
- Paketi päise põhjal määratakse, mis andmebaidid paketiga kaasas on ning kuidas neid interpreteerida ehk selle põhjal teisendatakse kindlatel positsioonidel olevad baidid, arvestades parameetrite andmetüüpe, õigeteks väärtuseks.
- Paketi kella määrab suhtluskanali ülem. Paketi kell on 16-bitine arv, mida ülemus suurendab iga kord enne alluvale paketi saatmist ühe võrra. Kui alluv saab paketi kätte, siis hakkab alluv ülemale vastu saatma pakette viimase ülemalt saadud kellaga. Sedasi saab ülem järgnevate alluva pakettide kellade põhjal teada, kas viimane ülema saadetud pakett jõudis edukalt alluvani.

Süsteemidevaheline suhtlusprotokoll näeb ette, et alluvad saadavad ülemale perioodiliselt olekupakette. Kui ülem pole teatud aja möödudes alluvalt olekupaketti saanud, järeltab ülem, et alluvaga on suhtlus katkenud. Olekupakettide esimene andmebait kirjeldab alati alamsüsteemi olekut. Olekubait ütleb, kas süsteem on vaikeolekus, täidab mingit käsku või millise käsu täitmise süsteem on lõpetanud. Kui paketi kella põhjal otsustati, kas pakett jõudis kohale, siis olekubaidi põhjal on näha, kas alamsüsteemile saadetud käsk läks täitmisele – kui alamsüsteem olekupakettide kell uuenes, aga olekubait ei muutunud käsule vastavaks, siis järelikult alamsüsteem eiras saadetud käsku.

Suhtlusliideste ülemad saadavad seevastu alluvatele käsupakette. Käsupakettides moodustavad andmebaidid käsu täitmiseks vajalikud parameetrid – andmebaitide interpreteerimisel lähtutakse paketi päisest.

Seadmele on loodud pea kõikidele pakettidele tekstiline vorm ning baitvorm, neist viimast kirjeldati joonisel 27. Baitvormis pakettidega suhtlevad seadme alamsüsteemid, sest selles vormis pakette on lihtne programselt kasutada. Tekstilise vormi puhul on pakettide sisu baitvormis paketi sama, kuid pakett on teisendatud inimloetavaks ASCII tekstiks – pakettide päis ja olekut kirjeldavad väärtused teisendatakse inimloetavateks lühenditeks ning arväärtused ASCII arvudeks.

Tekstilise pakettide abil sai alamsüsteeme eraldiseisvalt ja ka tervet seadet peaplaadi vahendusel arvuti jadasuhtluse terminaliga (näiteks HTermiga) kontrollida. See võimaldas alamsüsteemide ja hiljem terve seadme testimist ilma kasutajaliideseta.

2.9 Pardaarvuti tarkvara riistvara abstraktsioonikiht

DrugHunteri pardaarvuti tarkvaral on kasutajaliides, mille abil kontrollib operaator seadet ja saab infot seadme tööst. Kasutajaliides algatab operaatori eest varjatud tarkvara kihtides (ingl *backend*'is) toiminguid, mille tulemusena pannakse DrugHunteri riistvara mõõtetulemusi koguma, tulemusi analüüsima ning salvestama. Käesoleva töö raames loodi *backend*'i komponent, mis kontrollib DrugHunteri riistvara. Seda komponenti nimetatakse edaspidi riistvara abstraktsioonikihtiks. Arvuti tarkvara programmeeriti programmeerimiskeeles C#.

Riistvara abstraktsioonikihi ülesanneteks on:

- leida operatsioonisüsteemi jadaportidest DrugHunteri port, luua riistvaraga ühendus, anda kasutajaliidesele teada ühenduse loomisest ja katkemisest;
- võimaldada kasutajaliidesega käivitada seadmes protseduure, jälgida protseduuride läbiviimist ning vea tekkimisel edastada kasutajaliidesele veakood;
- koguda kapillaarelektroforeesi ajal mõõtetulemusi, puuduolevate mõõtepunktide korral peaplaadilt mõõtepunkt uuesti küsida; mõõtmise lõppemisel algatada elektroferogrammi analüüs ja selle tulemus kasutajaliidesele saata;
- katkestada riistvaras toimuvad protseduurid, kui operaator programmi sulgeb.

Riistvara abstraktsioonikiht on programmeeritud täitumudeli (ingl *actor model*) põhjal. Täitur on sisuliselt programmi lõim, millel on oma sõnumite (ingl *messages*) hoidmiseks järjekorra (ingl *queue*) andmestruktuur, millest lõim sõnumeid võtab ja täidab nende põhjal ülesandeid. Teised lõimed saavad sõnumeid järjekorda lisada, kuid sõnumeid võtab järjekorrast ainult järjekorra omanik. C#-s saab ülesande täitmise tulemusest teada anda sündmustega (ingl *event*). Sündmusele registreerunud saavad sündmuse tulemuse välja lugeda sellele kaasa antud parameetritest.

Kasutajaliides kontrollib seadet abstraktsioonikihi sisendfunktsioonide abil, mis lisavad abstraktsioonikihi põhitäituri järjekorda sõnumeid. Sõnumile kaasa antud parameetreid kasutab põhitäitur sõnumiga algatava ülesande täitmiseks. Põhitäituri olulisemad sisendfunktsioonid on:

- põhitäituri käivitamine, mille puhul käivitatakse riistvara suhtlust haldav suhtlustäitur; suhtlustäitur otsib operatsioonisüsteemi jadaportidest DrugHunteri porti – õige port on leitud, kui sealt loetud baitidest dekodeeritakse edukalt peaplaadi olekupakett;
- protseduuri käivitamine, mille puhul saadetakse peaplaadile protseduuri käivitamise käsu pakett koos protseduuri täitmiseks vajalike parameetritega;
- protseduuri katkestamine, mille puhul saadetakse peaplaadile katkestamise käsk vaid juhul, kui sel on protseduuri täitmine pooleli ning lastakse seejärel riistvaral peatuda;
- põhitäituri seiskamine, mille puhul kutsutakse vajadusel välja protseduuri katkestamine, seisatakse suhtlustäitur ja seejärel põhitäitur.

Riistvara abstraktsioonikihi põhitäitur annab enda tööst ja protseduuride tulemustest teada järgnevate sündmuste abil:

- oleku muutuse sündmus, mis kajastab riistvaraga suhtluse loomist/katkemist ning hetkel täitmisel olevat protseduuri või jõudeolekut;
- uute mõõtetulemuste saabumise sündmus, millega põhitäitur edastab mõõtmisprotseduuri ajal detektori mõõtetulemusi. Põhitäitur puhverdab mõõtetulemusi, kontrollib nende järjekorda ning kõikide mõõtepunktide olemasolu, puuduvate punktide korral küsib riistvaralt neid uuesti. Puhverdamisega vähendati sündmustele reageerimissagedust teistes lõimedes, vähendades sellega sündmustel põhinevast andmeedastusest tulenevaid protsessimiskulusid;

- protseduuri lõppemise sündmus, eduka protseduuri lõppemise puhul edastatakse õnnestumist teatav tulemus, vea korral vastav veakood; veakoodi põhjal juhendab kasutajaliides operaatorit vea lahendamisel.

Lisaks hindab abstraktsioonikiht protseduuri parameetrite põhjal protseduuri kestvust. Seda infot kasutatakse kasutajaliideses teha jäänud töö aja näitamiseks.

Loodud abstraktsioonikiht võimaldab DrugHunteri kasutajaliidesel riistvara kontrollida ja riistvara tööst tulemusi saada. Pardaarvuti tarkvara koos abstraktsioonikihiga on katsetatud – nende abil on saadud näiteks peatükis 1.4.2 näidatud elektroferogramm ja kogutud peatükis 2.7 kasutatud süstimiskoguse uurimise andmed.

3 Arutus ja tuleviku tööd

Käesoleva töö kirjutamise jooksul valmistati kaks DrugHunteri seadet. Mõlema seadme jaoks teostati vajalikud kalibreerimisprotseduurid ja testiti seadmete mehaanika, elektroonika ja tarkvara korrektset toimimist. Seadmetega teostati ka katseid narkootikume sisaldavate proovidega. Üks DrugHunteriga mõõdetud narkootiliste ainete sisaldumisi näitav elektroferogramm on peatükis 1.4.2.

DrugHunteri arendustöö jätkub. DrugHunter on võrreldes laboritöökäes mõeldud kapillaarelektroforeesi seadmetega kompaktne ja kerge, lisaks on DrugHunteril integreeritud pardaarvuti, mistõttu ei vajata eraldiseisvat kontrollarvutit. Edasise arendustöö käigus uuritakse tõenäoliselt veel võimalusi, kuidas DrugHunteri mehaanikat ja vajadusel ka elektroonikat väiksemaks teha.

Luuakse ka DrugHunteri metoodikalooja tarkvara. Metoodikalooja tarkvaraga hakkavad keemiaala spetsialistid tavatarkvarale mõõtmismeetodeid välja töötama. Metoodikalooja kasutajaliides kasutab tavatarkvara kasutajaliidesega võrreldes sama riistvara abstraktsioonikihti, kuid metoodikalooja kasutajaliidesel on lisafunktsionaalsusi. Näiteks saab sellega seadmes käivitada mistahes järjekorras üksikuid protseduure ning nende toimimist kuvatakse detailsemalt ja reaajas.

Tallinna Tehnikaülikooli keemia ja biotehnoloogia instituudis teostatakse seadme mõõtmisomaduste täpne karakteriseerimine. Edasi arendatakse ka seadme narkootiliste ainete tuvastusalgoritmi, mis on oluline komponent seadme kõrgelt automatiseeritud töös. DrugHunteri intuitiivset kasutajaliidest ja kasutusmugavust testitakse koostöös Eesti Politseiga, katsetades seadet välitöödel kohapealseks narkojoobe mõõtmiseks. Pärast akrediteerimist saab DrugHunteri mõõteseadmena kasutusele võtta.

Kokkuvõte

Hetkel on kohapeal kasutatavate narkojoobe tuvastusviiside, immunotestrite ja visuaalsete tunnuste põhjal joobe hindamise puudusteks valed tulemused, võimetus tuvastada täpselt narkootilist ainet ja kogust. DrugHunteri eesmärk on need puudused lahendada. DrugHunter on portatiivne kapillaarelektroforeesil põhinev narkootiliste ja psühhotroopsete ainete tuvastaja süljeproovist. Tänu automatiseeritusele ja intuiitivsele kasutajaliidesele on seda lihtne kasutada.

Magistritöö raames arendati DrugHunteri erinevate alamsüsteemide püsivara, testiti alamsüsteemide elektroonika toimimist ning arendati DrugHunteri pardaarvuti tarkvarale riistvara abstraktsioonikiht, millega kasutajaliides seadet kontrollib. Arendati järgnevate alamsüsteemide püsivara ja kontrolliti nende toimimist:

- mahtuvuslikud vedelikunivoo andurid, mille abil annab seade operaatorile teada jäätmeanuma tühjendus- või pesuveelike täitmisvajadusest. Saavutati kindel eristusvõime täis ja tühja anuma vahel;
- viaalide valimise süsteem, mille karussell pöörab operaatorile ette viaali pesa, kuhu seadme kasutajaliides juhendab operaatorit vastavat kemikaali või süljeproovi sisestama. Süsteemi karusselli ja tõstuki abil tõstetakse seadme erinevates töötappides õige kemikaal kapillaari otsa. Karusselli harjavaba alalisvoolumootori liigutamiseks töötati välja siinuskommuteerimist kasutav tagasisideta asendikontroller;
- termostabiliseerimise süsteem, mis reguleerib Peltier' elemendi abil kapillaari ümbritseva õhu temperatuuri. Temperatuuri kontrollimise jaoks loodi kaks PI-kontrollerit ning Peltier' elemendi karakteriseeriv mudel. Lisaks optimeeriti süsteemi H-silla tööd, et saavutada Peltier' elemendi paremini silutud kontrollpinge;
- peaplaat, mis kontrollib otseselt kiibi pesemise ja kapillaari ainete sisestamise alamsüsteeme ning kõrgepinge toiteplokki. Peaplaat delegeerib ülejäänud töö teistele alamsüsteemidele ja edastab seadme hetkeseisu info ja mõõtetulemused pardaarvutile.

Seadme kõikide alamsüsteemide omavaheliseks suhtluseks töötati välja suhtlusprotokoll, mis tuvastab kaduma läinud ja eiratud pakette. Pakettide sisu korrektsus tagatakse kontrollkoodiga.

DrugHunteri arendustöö jätkub. Loomisel on meetodikalooja tarkvara, mille abil saab tavatarkvarale mõõteprotsesse luua. Seadet testitakse välitöödel, vajadusel viiakse sisse täiendused. Pärast edukat akrediteerimist saab DrugHunterit mõõteseadmena kasutada.

Viidatud kirjandus

- [1] United Nations Office on Drugs, World Drug Report 2019, Vienna: United Nations publication, Sales No. E.19.XI.8, 2019.
- [2] European Monitoring Centre for Drugs and Drug Addiction, “Health and social responses to drug problems,” 16 October 2018. [Online]. Available: <https://op.europa.eu/s/n2Ix>. [Accessed 29 March 2020].
- [3] P. Saar-Reismaa, “Analysis of Psychoactive Compounds in Oral Fluid by Capillary Electrophoresis,” March 2020. [Online]. Available: <https://digikogu.taltech.ee/et/Item/b7a6fb1d-5df0-4250-afd4-8323e65f3b5c>. [Accessed 29 March 2020].
- [4] S. Schumacher, H. Seitz, “A novel immunoassay for quantitative drug abuse screening in serum,” *Journal of Immunological Methods*, September 2016. [Online]. Available: <https://doi.org/10.1016/j.jim.2016.06.004>. [Accessed 28 March 2020].
- [5] D. J. Crouch, J. M. Walsh, R. Flegel, L. Cangianelli, J. Baudys, R. Atkins, “An Evaluation of Selected Oral Fluid Point-of-Collection Drug-Testing Devices,” *Journal of Analytical Toxicology*, May 2005. [Online]. Available: <https://doi.org/10.1093/jat/29.4.244>. [Accessed 29 March 2020].
- [6] S. Gentili, R. Solimini, R. Tittarelli, G. Mannocchi, FP. Busardò, “A Study on the Reliability of an On-Site Oral Fluid Drug Test in a Recreational Context. *Journal of Analytical Methods in Chemistry.*,” *Journal of Analytical Methods in Chemistry*, 17 August 2016. [Online]. Available: [doi:10.1016/j.forsciint.2004.01.013](https://doi.org/10.1016/j.forsciint.2004.01.013). [Accessed 29 March 2020].
- [7] A. Z. DePriest, J. L. Knight, P. L. Doering, D. L. Black, “Pseudoephedrine and False-Positive Immunoassay Urine Drug Tests for Amphetamine,” *Pharmacotherapy* 2013, 12 October 2012. [Online]. Available: <https://doi.org/10.1002/phar.1216>. [Accessed 29 March 2020].

- [8] European Monitoring Centre for Drugs and Drug Addiction, “Driving Under the Influence of Drugs, Alcohol and Medicines in Europe — findings from the DRUID project,” 2012. [Online]. Available: doi:10.2810/74023. [Accessed 20 April 2020].
- [9] Riigi Teataja, „Joobeseisundile viitavate tunnuste loetelu ja nende tunnuste esinemise või mitteesinemise tuvastamise viisid,“ 24. august 2014. [Võrgumaterjal]. Available: <https://www.riigiteataja.ee/akt/127062014004#>. [Kasutatud 30. märts 2020].
- [10] S. J. Rubenzer, “The Standardized Field Sobriety Tests: a review of scientific and legal issues,” *Law and Human Behavior*, August 2008. [Online]. Available: doi:10.1007/s10979-007-9111-y. [Accessed 30 March 2020].
- [11] LA. Downey, R. King, K. Papafotiou, P. Swann, E. Ogden, C. Stough, “Examining the effect of dl-3,4-methylenedioxymethamphetamine (MDMA) and methamphetamine on the Standardized Field Sobriety Tests,” *Forensic Sci Int*, 10 July 2012. [Online]. Available: doi:10.1016/j.forsciint.2012.02.025. [Accessed 30 March 2020].
- [12] S. Cole, R. H. Nowaczyk, “Field sobriety tests: are they designed for failure?,” *Perceptual and motor skills*, 1994. [Online]. Available: <https://doi.org/10.2466/pms.1994.79.1.99>. [Accessed 30 March 2020].
- [13] Agilent, “7100 CE System,” *CE and CE/MS Systems*, [Online]. Available: <https://www.agilent.com/en/products/capillary-electrophoresis-ce-ms/ce-ce-ms-systems/7100-ce-system#specifications>. [Accessed 15 December 2019].
- [14] Lumex Instruments, “Capillary Electrophoresis System Capel-205,” [Online]. Available: <https://www.lumexinstruments.com/catalog/capillary-electrophoresis/capel-205.php#specification>. [Accessed 2 April 2020].
- [15] I. J. Koenka, N. Küng, P. Kubáň, T. Chwalek, G. Furrer, B. Wehrli, B. Müller, P. C. Hauser, “Thermostatted dual-channel portable capillary electrophoresis instrument,” *ELECTROPHORESIS*, 14 June 2016. [Online]. Available: <https://doi.org/10.1002/elps.201600235>. [Accessed 2 April 2020].

- [16] T. D. Mai, S. Schmid, B. Müller, P. C. Hauser, “Capillary electrophoresis with contactless conductivity detection coupled to a sequential injection analysis manifold for extended automated monitoring applications,” *Analytica Chimica Acta*, 14 April 2010. [Online]. Available: <https://doi.org/10.1016/j.aca.2010.03.014>. [Accessed 2 April 2020].
- [17] Y. Xu, W. Qin, S. F. Y. Li, “Portable capillary electrophoresis system with potential gradient detection for separation of DNA fragments,” *Electrophoresis*, 2 February 2005. [Online]. Available: <https://doi.org/10.1002/elps.200410293>. [Accessed 4 April 2020].
- [18] M. Greguš, F. Foret, P. Kubáň, “Portable capillary electrophoresis instrument with contactless conductivity detection for on-site analysis of small volumes of biological fluids,” *Journal of Chromatography A*, 4 January 2016. [Online]. Available: <https://doi.org/10.1016/j.chroma.2015.11.088>. [Accessed 2 April 2020].
- [19] N. Stephanson, S. Sandqvist, M. S. Lambert, O. Beck, “Method validation and application of a liquid chromatography–tandem mass spectrometry method for drugs of abuse testing in exhaled breath,” *Journal of Chromatography B*, 2 February 2015. [Online]. Available: <https://doi.org/10.1016/j.jchromb.2015.01.032>. [Accessed 29 March 2020].
- [20] M. Arvidsson, S. Ullah, J. Franck, M-L. Dahl, O. Beck, “Drug abuse screening with exhaled breath and oral fluid in adults with substance use disorder,” *Drug Test and Analysis*, 10 March 2018. [Online]. Available: <https://doi.org/10.1002/dta.2384>. [Accessed 29 March 2020].
- [21] N. Samyn, G. De Boeck, M. Wood, et al, “Plasma, oral fluid and sweat wipe ecstasy concentrations in controlled and real life conditions,” *Forensic Science International*, August 2002. [Online]. Available: [http://doi.org/10.1016/s0379-0738\(02\)00157-3](http://doi.org/10.1016/s0379-0738(02)00157-3). [Accessed 2 April 2020].
- [22] “Relationship Between Oral Fluid and Blood Concentrations of Drugs of Abuse in Drivers Suspected of Driving Under the Influence of Drugs,” *Therapeutic Drug Monitoring*, August 2009. [Online]. Available: <https://doi.org/10.1097/FTD.0b013e3181ae46ea>. [Accessed 2 April 2020].

- [23] F.P. Busardo, S. Pichini, M. Pellegrini, A. Montana, A.F. Lo Faro, S. Zaami, S. Graziano, "Correlation between Blood and Oral Fluid Psychoactive Drug Concentrations and Cognitive Impairment in Driving under the Influence of Drugs," *Curr Neuropharmacol*, January 2018. [Online]. Available: <https://doi.org/10.2174/1570159X15666170828162057>. [Accessed 2 April 2020].
- [24] R. Brenneisen, M. a Elsohly, T.P. Murphy, J. Passarelli, S. Russmann, S.J. Salamone, D.E. Watson, "Pharmacokinetics and Excretion of Gamma-Hydroxybutyrate (GHB) in Healthy Subjects," *Journal of Analytical Toxicology*, 1 November 2004. [Online]. Available: <https://doi.org/10.1093/jat/28.8.625>. [Accessed 2 April 2020].
- [25] Kasulik mudel: Meetod kohapealseks narkootikumide määramiseks süljes; Omanikud: Tallinna Tehnikaülikool; Autorid: J. Mazina-Šinkar, M. Kulp, M. Vaher, E. Erme, M. Kaljurand; Prioriteedi number: U201700032; Prioriteedi kuupäev: 30. juuni 2017.
- [26] Patentne leiutus: Apparatus and method for determination of illegal drugs, biomarkers, phytochemicals and other banned or regulated compounds (PARC); Omanikud: Tallinna Tehnikaülikool, Autorid: J. Mazina-Šinkar, J. Gorbatošova, E. Erme, A. Abels, J. Ježov, M. Vaher, M. Kaljurand; Prioriteedi number: US62/893,871; Prioriteedi kuupäev: 30. august 2019.
- [27] P. Saar-Reismaa, E. Erme, M. Vaher, M. Kulp, M. Kaljurand, J. Mazina-Šinkar, "In Situ Determination of Illegal Drugs in Oral Fluid by Portable Capillary Electrophoresis with Deep UV Excited Fluorescence Detection," *Analytical Chemistry*, 24 April 2018. [Online]. Available: <https://doi.org/10.1021/acs.analchem.8b00911>. [Accessed 2 April 2020].
- [28] R. Kuhn, S. Hoffstetter-Kuhn, *Capillary Electrophoresis: Principles and Practice*, Springer-Verlag Berlin Heidelberg: Springer Laboratory, 1993.
- [29] M. Kaljurand, „Elektroforees - Lahutusmeetodid,“ 2005. [Võrgumaterjal]. Available: http://www.chem.ttu.ee/files/yka/lahutusmeetodid_keemias/S2005/Elektroforees.ppt. [Kasutatud 2. veebruar 2020].

- [30] J. Macomber, K. Walker, "MOLEX LLC," MOLEX LLC, February 2016. [Online]. Available: <https://www.cmscientific.com/info-sheets/polyimide-removal-from-silica-fibers-or-tubes.pdf>. [Accessed 26 April 2020].
- [31] HobbyKing, "GM9008D Hollow Shaft 12.7mm Brushless Gimbal Motor," [Online]. Available: https://hobbyking.com/en_us/gm9008d-hollow-shaft-12-7mm-brushless-gimbal-motor.html?__store=en_us. [Accessed 1 May 2020].
- [32] Melexis, "MLX90363 Magnetometer IC with High Speed Serial Interface," December 2016. [Online]. Available: <https://www.melexis.com/-/media/files/documents/datasheets/mlx90363-datasheet-melexis.pdf>. [Accessed 4 April 2020].
- [33] H. Pang, D. Chen, M. Pan, S. Luo, Qi Zhang, Ji Li, F. Luo, "A New Calibration Method of Three Axis Magnetometer With," IEEE Transactions on Magnetics, September 2013. [Online]. Available: <https://doi.org/10.1109/TMAG.2013.2259842>. [Accessed 22 November 2019].
- [34] B-G. Gu, J. S. Park, J-H. Choi, S-H. Rhyu, I-S. Jung, "Optimal Lead Angle Calculation for," The 2010 International Power Electronics Conference, 9 August 2010. [Online]. Available: <https://doi.org/10.1109/IPEC.2010.5544494>. [Accessed 26 March 2020].
- [35] Texas Instruments, "DRV8825 Stepper Motor Controller IC," 24 July 2014. [Online]. Available: <https://www.ti.com/lit/gpn/drv8825>. [Accessed 5 March 2020].
- [36] Microchip, "ATxmega128A1U/ATxmega64A1U datasheet," 2018. [Online]. Available: <http://ww1.microchip.com/downloads/en/DeviceDoc/ATxmega128A1U-64A1U-Data-Sheet-DS40002058A.pdf>. [Accessed 2020 May 20].
- [37] Microchip, "ATtiny416/816 Data Sheet," 2019. [Online]. Available: <http://ww1.microchip.com/downloads/en/DeviceDoc/ATtiny416-816-DataSheet-DS40001913C.pdf>. [Accessed 5 March 2020].
- [38] P. A. Anaraki, "Study of Liquid Mixtures Electrical Properties as a Function of Electrical," Research Journal of Applied Sciences, Engineering and Technology, 14

- January 2014. [Online]. Available: <http://dx.doi.org/10.19026/rjaset.7.306>. [Accessed 22 December 2019].
- [39] Tellurex Corporation, “Thermoelectric Cooling FAQ,” 2006. [Online]. Available: <https://www.physics.utoronto.ca/ap1/xrf/APPENDIX%20E.pdf>. [Accessed 5 December 2019].
- [40] D. M. Alter, “Thermoelectric Cooler Control Using a TMS320F2812 DSP and a DRV592 Power Amplifier,” February 2003. [Online]. Available: <http://www.ti.com/lit/an/spra873/spra873.pdf>. [Accessed 5 December 2019].
- [41] CUI Devices, “CP60 Series Peltier Module,” 10 October 2018. [Online]. Available: <https://www.cuidevices.com/product/resource/cp60.pdf>. [Accessed 29 December 2019].
- [42] All Sensors - Amphenol, “DLV Series,” [Online]. Available: http://www.allsensors.com/datasheets/DS-0336_Rev_E.pdf. [Accessed 16 March 2020].
- [43] Iseg, “CPS series datasheet,” 5 August 2019. [Online]. Available: https://iseg-hv.com/files/media/iseg_datasheet_CPS_en_20191007110244.pdf. [Accessed 5 April 2020].
- [44] Texas Instruments, “ADS8331 datasheet,” August 2016. [Online]. Available: <http://www.ti.com/product/ADS8331?qgn=ads8331>. [Accessed 5 April 2020].
- [45] Texas Instruments, “DAC8560 datasheet,” January 2018. [Online]. Available: <http://www.ti.com/lit/ds/symlink/dac8560.pdf>. [Accessed 5 April 2020].
- [46] J. Fletcher, “An Arithmetic Checksum for Serial Transmissions,” IEEE, January 1982. [Online]. Available: <https://doi.org/10.1109/TCOM.1982.1095369>. [Accessed 5 April 2020].
- [47] M. Jones, “Power Supplies,” Valve Amplifiers (Fourth Edition), 2012. [Online]. Available: <https://www.sciencedirect.com/topics/engineering/series-inductance>. [Accessed 18 May 2020].

- [53] A. Baskys, V. Zlosnikas, "Asymmetric PID controller," IECON 2006 - 32nd Annual Conference on IEEE Industrial Electronics, 2006. [Online]. Available: <https://doi.org/10.1109/IECON.2006.347936>. [Accessed 12 March 2020].
- [54] Renesas Electronics Corporation, "Controlling BLDC Motors," [Online]. Available: <https://www.renesas.com/us/en/support/technical-resources/engineer-school/brushless-dc-motor-02-inverter-pmw.html>. [Accessed 20 March 2020].
- [55] European Medicine Agency, "Guideline on bioanalytical method validation," 21 July 2011. [Online]. Available: https://www.ema.europa.eu/en/documents/scientific-guideline/guideline-bioanalytical-method-validation_en.pdf. [Accessed 30 March 2020].
- [56] Microsoft, "What's a Universal Windows Platform (UWP) app?," 5 July 2018. [Online]. Available: <https://docs.microsoft.com/en-us/windows/uwp/get-started/universal-application-platform-guide>. [Accessed 5 April 2020].
- [57] H. Li, "Designing efficient, high-performing appliances with BLDC motors," 18 July 2018. [Online]. Available: https://base.imgix.net/files/base/ebm/electronicdesign/image/2018/02/www_electronicdesign_com_sites_electronicdesign.com_files_TI_BLDCcontrol_Fig3.png?auto=format&fit=max&w=1440. [Accessed 19 March 2020].
- [58] F. Niessen, „Winding Scheme Calculator,“ Homebuilt Electric Motors, 2013. [Võrgumaterjal]. Available: <http://www.bavaria-direct.co.za/scheme/calculator/>. [Kasutatud 9 May 2020].
- [59] Texas Instruments, "ADS8332IBPW datasheet," August 2016. [Online]. Available: <https://www.ti.com/lit/gpn/ADS8332>. [Accessed 11 May 2020].
- [60] Amphenol, "SC50F103VN specification," February 2018. [Online]. Available: https://www.amphenol-sensors.com/index.php?option=com_edocman&task=document.download&id=112. [Accessed 11 May 2020].

Lisad

Lisa 1. Ioonide liikumise kiirus kapillaaris

Ioonide liikumiskiiruse kapillaarelektroforeesil määrab ioonile mõjuv takistusjõud F_T

$$F_T = 6\pi\eta r v$$

v – iooni liikumiskiirus

η – puhvri viskoossus

r – iooni raadius

ja tõmbejõud F_L

$$F_L = q \cdot E$$

q – iooni laeng

E – elektrivälja tugevus

$$E = \frac{U}{l}$$

U – kõrgepinge,

l – kapillaari pikkus.

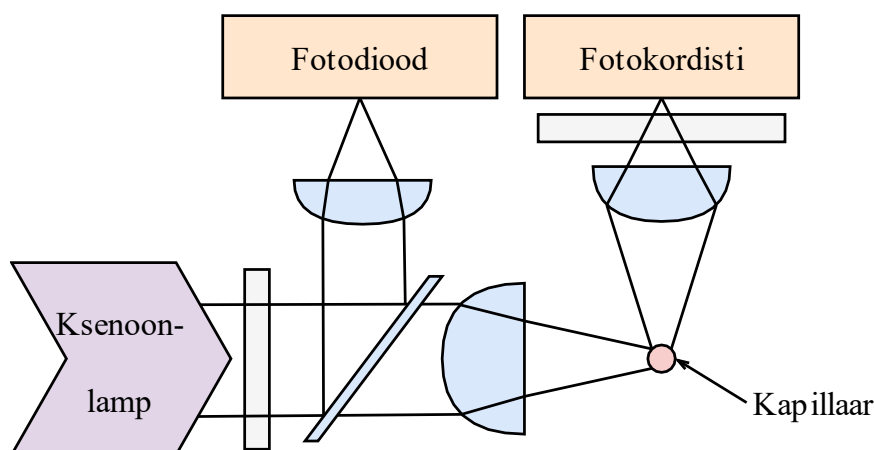
Tasakaaluolekus on mõlemad jõud võrdsed ja ioon liigub kiirusega v

$$v = \frac{q}{6\pi\eta r} E. [29]$$

Lisa 2. Detektor

Detektori arendus ei ole käesoleva lõputöö osa, kuid DrugHunterist tervikliku ülevaate saamiseks kirjeldatakse siin peatükis kokkuvõtlikult detektori ülesehitust. Uue detektori peamiseks väljatöötamise põhjusteks olid:

- vajadus kindla lainepikkuse vahemikus toimiva ergastuslampi järele, et võimaldada võimalikult paljude narkootiliste ainete fluorestseeruma panekut ning;
- vajadus mõõta vastavalt sobilikus lainepikkuse vahemikus fluorestseerunud valgust [3].



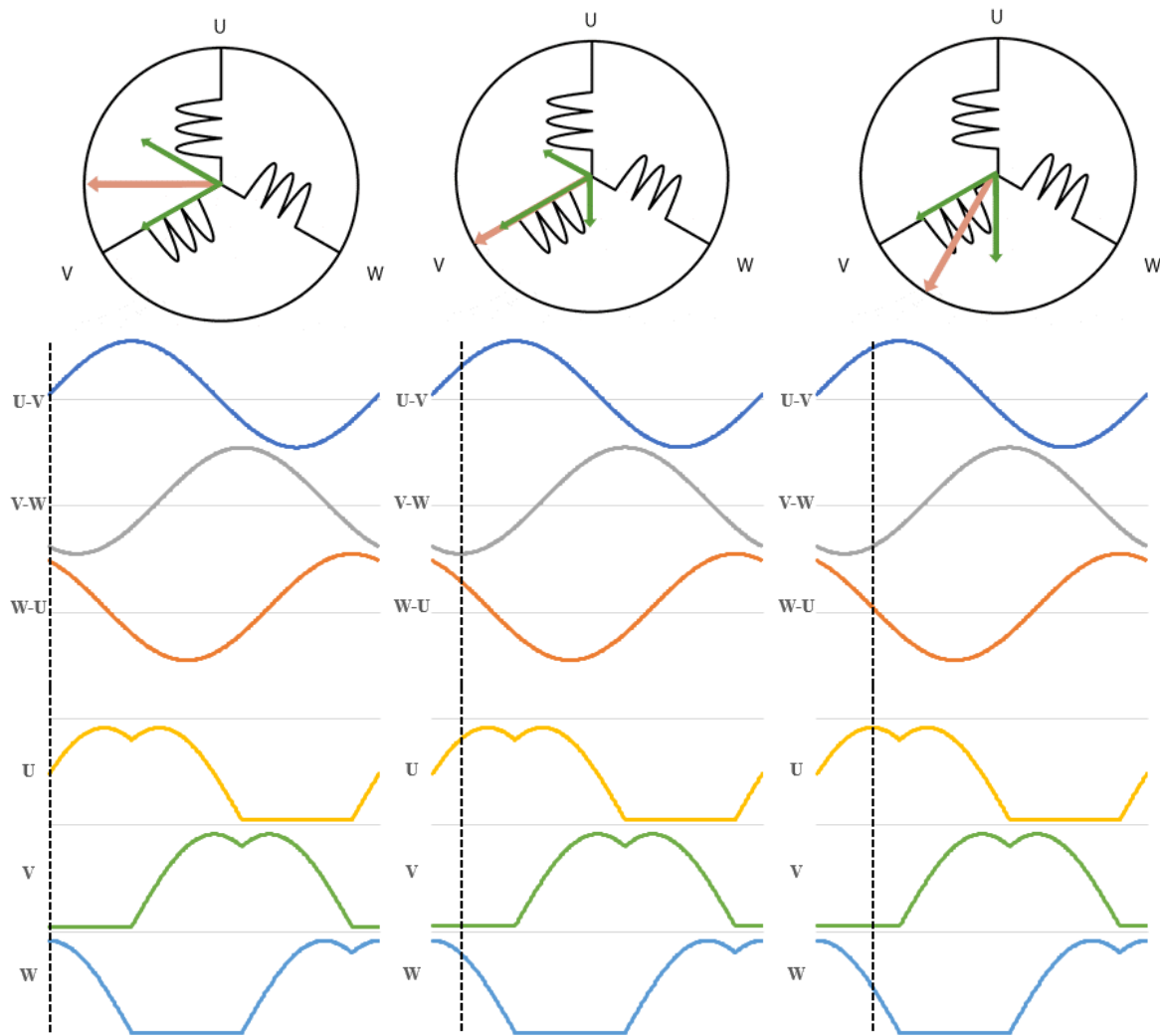
Joonis 28. DrugHunteri lihtsustatud detektori ülesehitus

Joonisel 28 on näidatud detektori lihtsustatud ülesehitus, sinisega on tähistatud optika osad: läätsed ning nurga all poolläbipaistev peegel ja halliga filtrid. Detektori tööpõhimõtte näeb ette, et ksenoonlambiga tekitatakse valgussähvatusi, mis läbivad detektori ette paigutatud filtrid. Filtrid lasevad läbi 230-250 nm lainepikkusega valguse, millega fluorestseerusid kõik tuvastamist vajavad narkootiliste ainete ioonid [3].

Osa ksenoonlambist tulevast valgusest suunatakse peegli abil fotodiodi, mille mõõtetulemust nimetatakse referentssignaaliks. Referentssignaali mõõdetakse, et vajadusel saaks tarkvaras kompenseerida võimalikku ksenoonlambi degradeerumist või muid võimalikke ergastusvalguse muutusi. Ülejäänud ksenoonlambi valgusest fokuseeritakse kapillaarile, millega pannakse kapillaaris olevad ioonid fluorestseeruma. Fluorestsentsvalgus filtreeritakse ja fokuseeritakse fotokordistile, mis mõõdab fluorestsentsi tugevust.

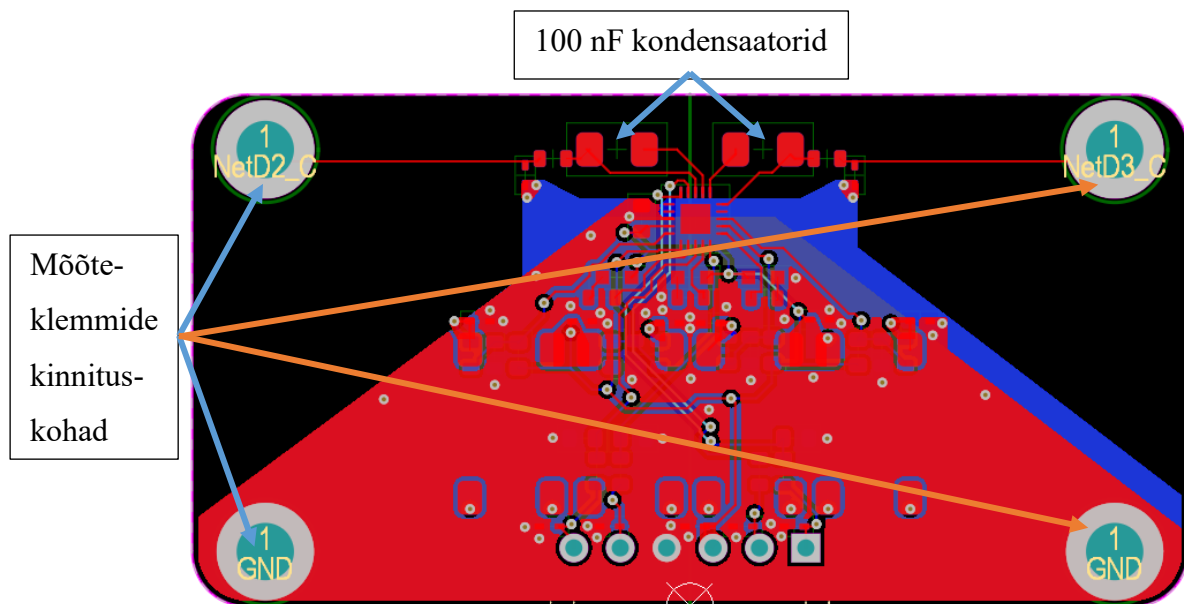
Lisa 3. Siinuskommuteerimise magnetvoogude selgitus

Allpool paikneval joonisel 29 näidatakse siinuskommuteerimisel mootori magnetvoogusid kolme erineva elektrilise nurga puhul. Rohelised nooled tähistavad mootori mähiste magnetvoogusid ja nende magnetvoogude summa on tähistatud punase noolega. Allpool paiknevatel graafikutel tähistab must punktiirjoon elektrilisele nurgale vastavaid mootori mähiste (U-V, V-W, W-U) ja mootori klemmidele rakendatud pinged (U, W, V).

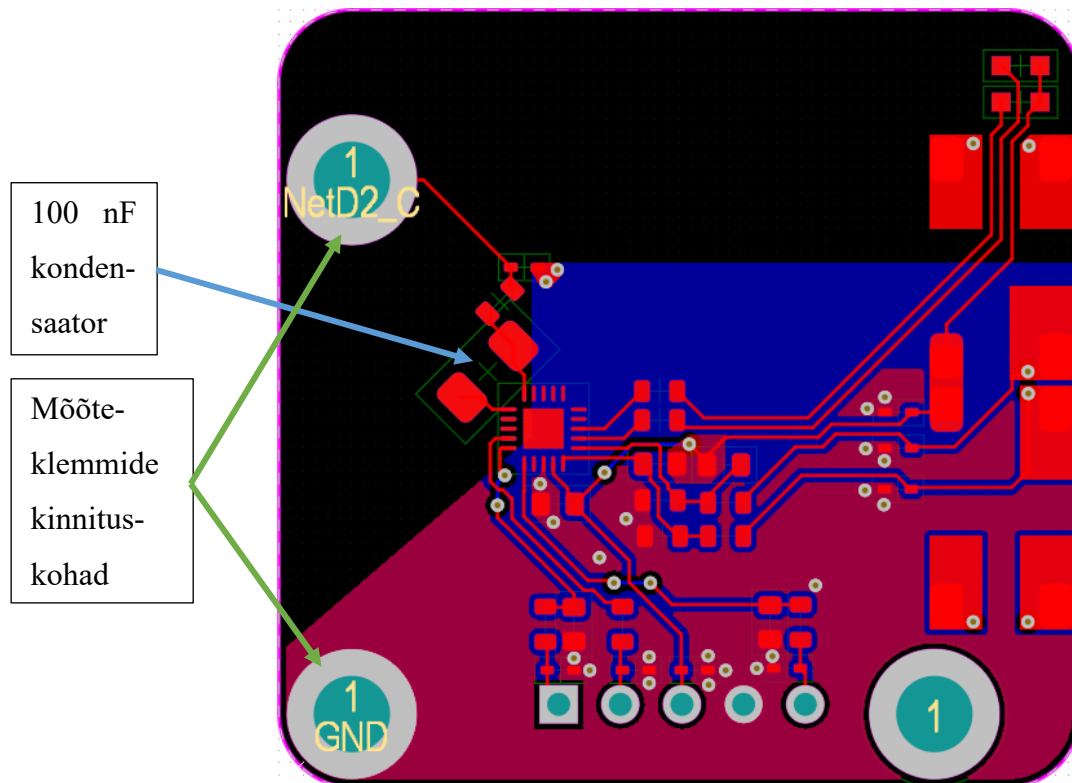


Joonis 29. Siinuskommuteerimise magnetvoogude suundade muutumine elektrilise nurga liikumisel. Mähiste magnetvoogu piltide allikas: [45]

Lisa 4. Nivooandurite trükkplaatide disain



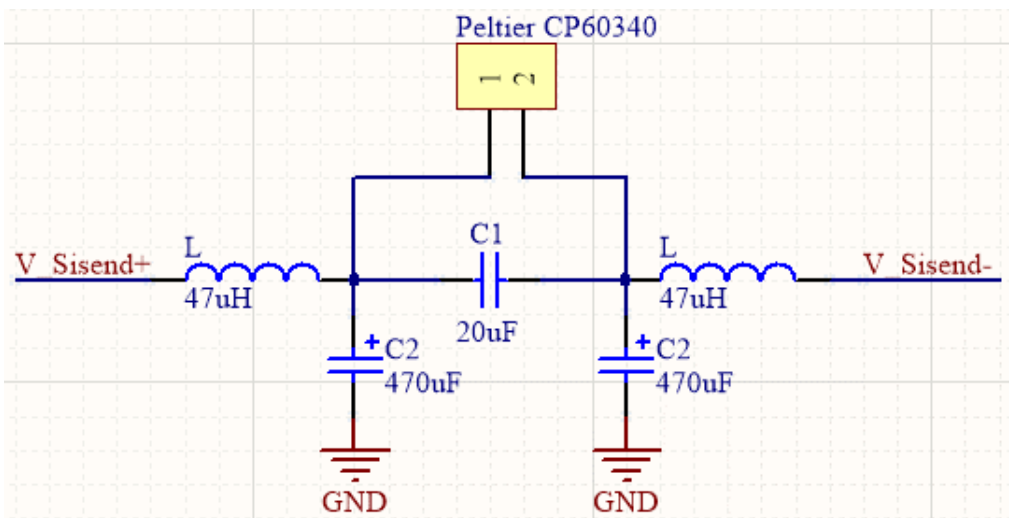
Joonis 30. Pesuvedelike nivooandurite trükkplaadi disain



Joonis 31. Jääkaine anuma nivooanduri trükkplaat

Ülaltoodud joonisel on mustaga tähistatud vasevaba ala, mille eesmärk on maandamata mõõteklemmiga ühendatud radade parasiitmahtuvusi vähendada.

Lisa 5. Peltier' elemendi LC filtri analüüs



Joonis 32. Lihtsustatud skeem Peltier' elemendi LC filtriga

Joonisel 32 on Peltier' elemendi toiteskeemi LC filter ilma H-silla komponentideta. Selle filtri sumbumustegurit uuriti erinevatel sagedustel Laplace teisenduste abil. Allpool näidatud valemities V_{Sisend} on Laplace teisendus LC filtrist ja V_{Peltier} on Peltier' elemendile rakendatud toitepingest [39]. Peltier' elemendi takistuslik väärtus R on arvatatud CP60340 andmelehe [40] maksimaalse toitepinge ja voolu järgi.

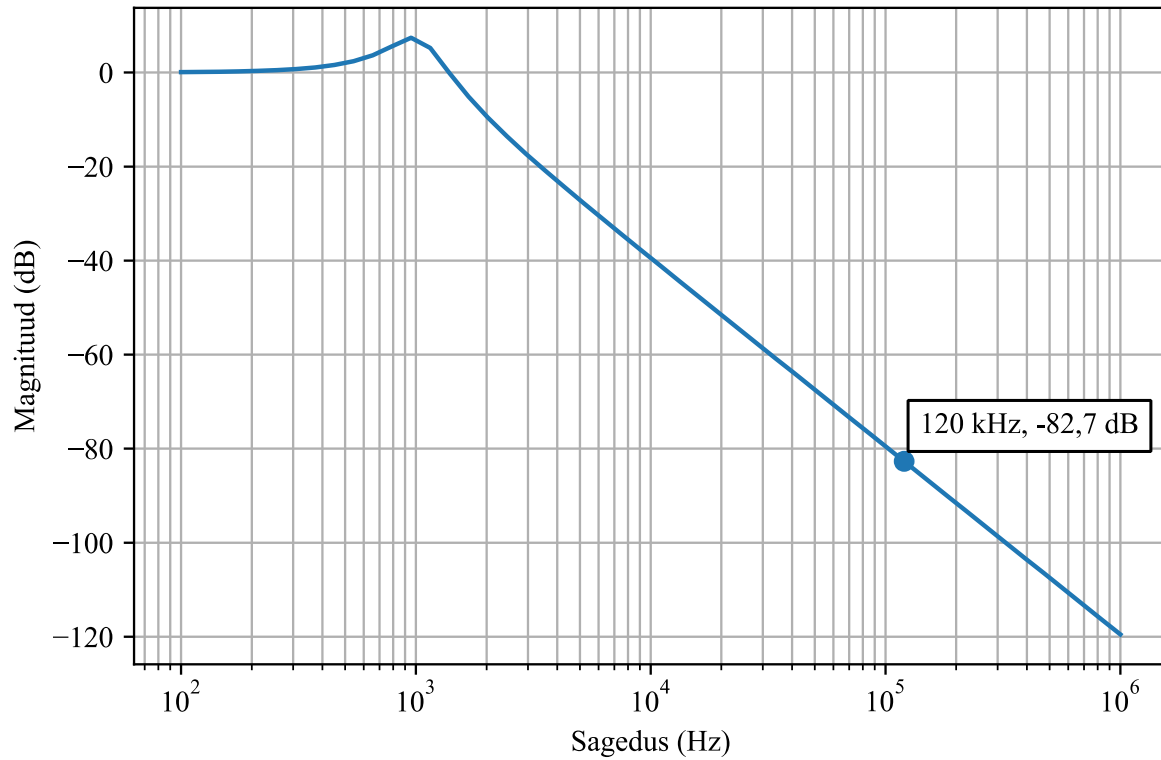
$$\frac{V_{\text{Peltier}}(s)}{V_{\text{Sisend}}(s)} = \frac{\omega_n^2}{s^2 + 2\zeta\omega_n + \omega_n^2}, \text{ kus}$$

$$\omega_n^2 = \frac{1}{LC_1 + 2LC_2}$$

$$\zeta = \frac{1}{R} \sqrt{\frac{L}{C_1 + 2C_2}}$$

$$R = 1,4 \Omega, L = 47 \mu\text{H}, C_1 = 470 \mu\text{F}, C_2 = 20 \mu\text{F}$$

Joonisel 33 on näidatud antud LC madalpääsfiltri magnituudi-sageduse karakteristik (V_{Peltier} ja V_{Sisend}) suhe ning filtri sumbumustegur 120 kHz juures. Arvutuste juures tuleb märkida, et skeemi kondensaatorite ja induktiivpoolide parasiitomadusi ei ole arvesse võetud, mistõttu reaalse filtri tulemus nii head sumbumust (-82,7 dB) ei anna.



Joonis 33. Peltier' elemendi LC filtri analüüs

LTSpice elektroonika simulatsiooni tarkvaraga uuriti filtrit komponentide tüüpiliste parasiitväärtustega. Kondensaatoritele C2 lisati jadainduktiivsus 30 nH ja kondensaatorile C1 2 nH [46]. Simulatsioon andis selliste parameetritega filtri sumbumuseks sageduse 120 kHz juures -51,9 dB.

Lisa 6. Peltier' elemendi mudeli kasutusnäited

Tabelis 6 on mõned näited Peltier' elemendi mudeli

$$U = f(Q, \Delta T) = 0,1956 \cdot \Delta T - 0,07743 \cdot Q - 0,001186 \cdot \Delta T^2 + 0,0003166 \cdot \Delta T \cdot Q - 0,0005774 \cdot Q^2$$

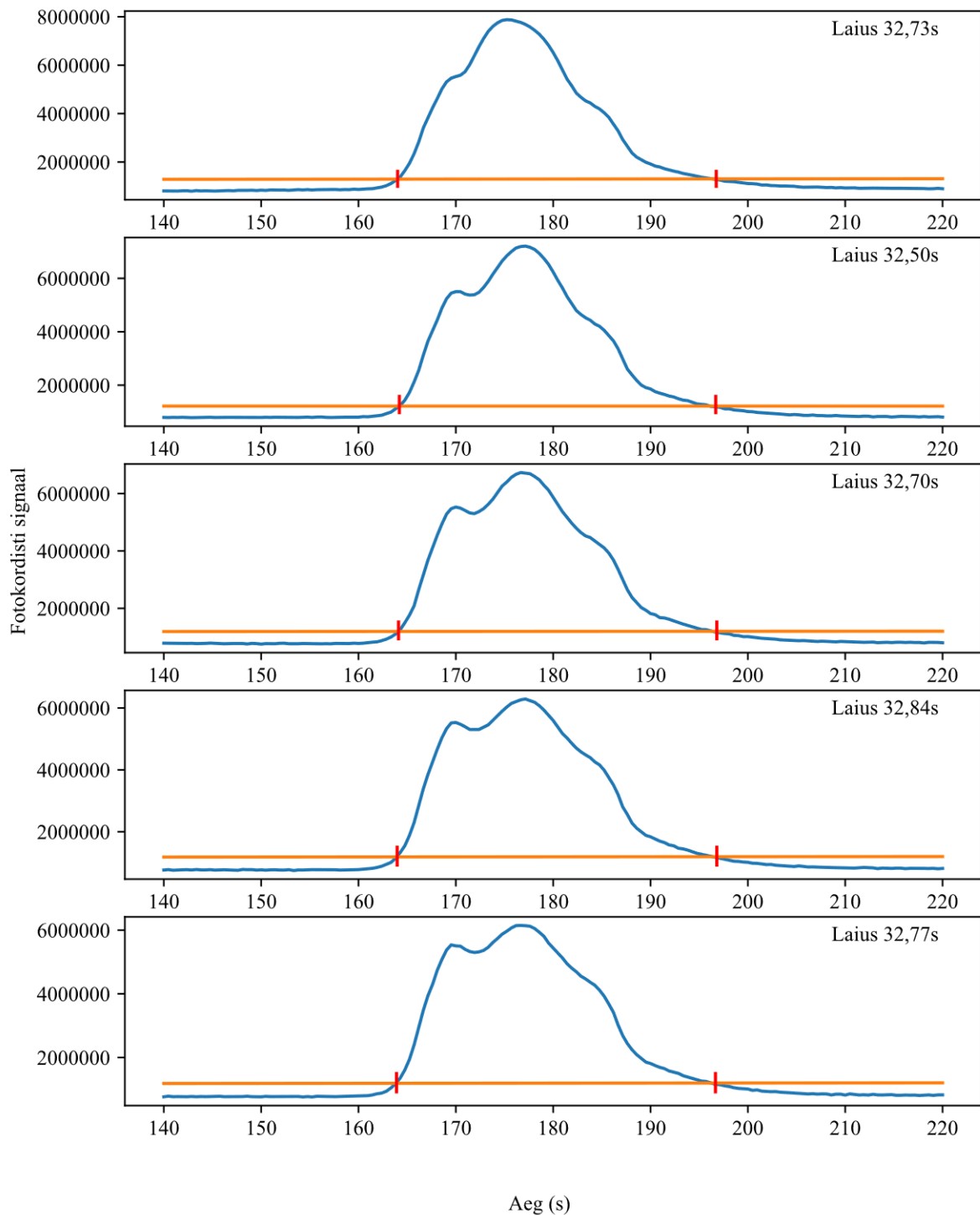
tööst erinevate elemendi poolte temperatuuri vahest ΔT , saavutatud jahutusvõimsusest Q ja selle võimsuse saavutamiseks rakendatud pingest U .

Tabel 6. Peltier' elemendi mudeli kasutusnäited

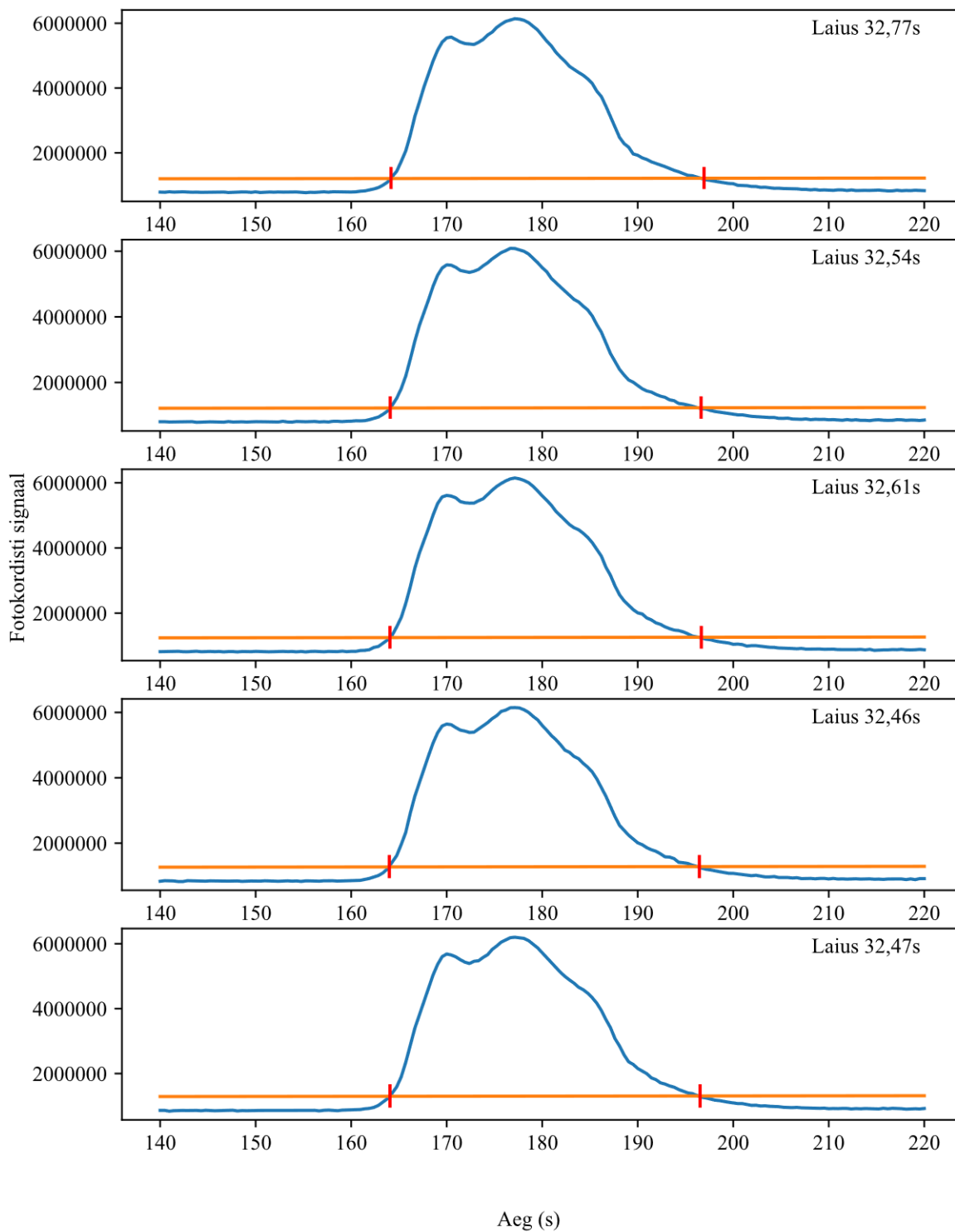
	ΔT (°C)	Q (W)	U (V)
1. rida	40,00	-10,00	-6,22
2. rida	0,00	-10,00	-2,07
3. rida	20,00	0,00	-1,77

Esimene rida kirjeldab pinget, mida on vaja rakendada, et saavutada -10 W jahutusvõimsust, kui elemendi sooja ja külma plaadi temperatuuri vahe ΔT on 40 °C. Teise rea puhul $\Delta T = 0$ °C, mistõttu on -10 W jahutusvõimsust lihtsam saada ja tänu sellele on nüüd rakendatav pinge ligikaudu kolm korda väiksem. Kolmanda rea puhul kirjeldatakse olukorda, kus võrdlemisi suure ΔT tõttu tuleb Peltier' elemendi külmale poolele soojuse lisandumise takistamiseks ($Q = 0$ W) elemendile pinget rakendada.

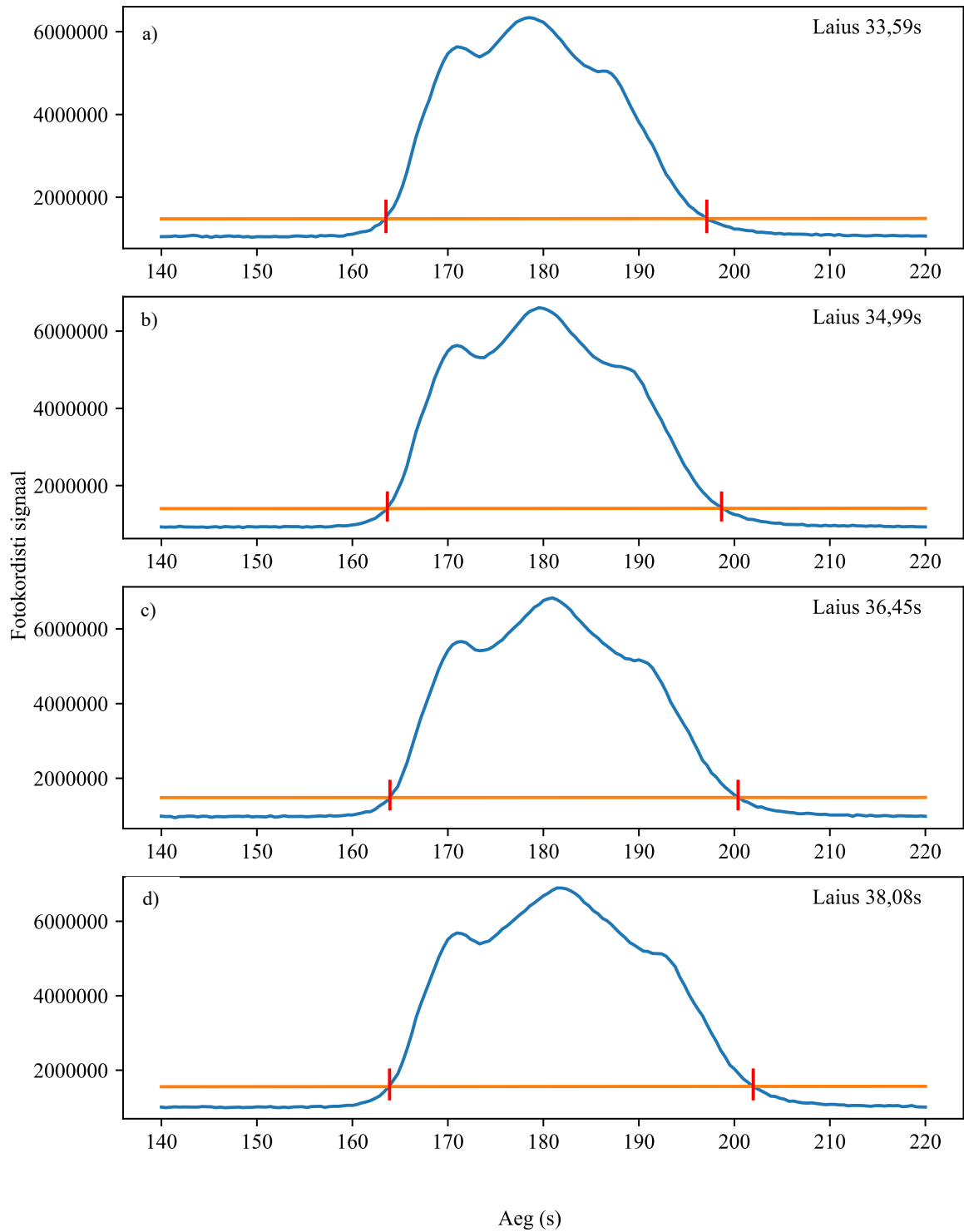
Lisa 7. Proovi alarõhuga sisestamise katsed



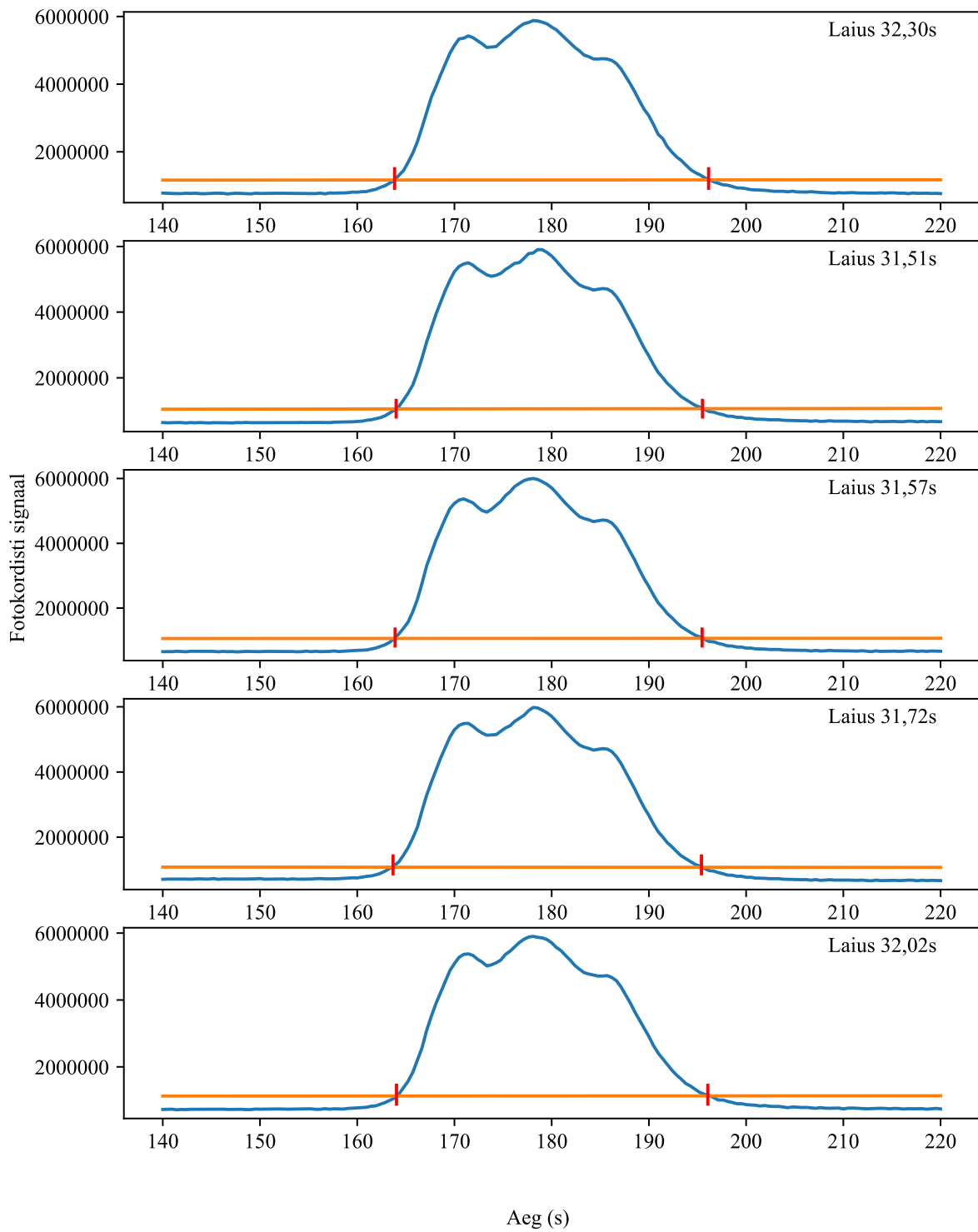
Joonis 34. Klapiga süstimine: tühi jäätmeanum, rõhk 40 mbar, 25 s



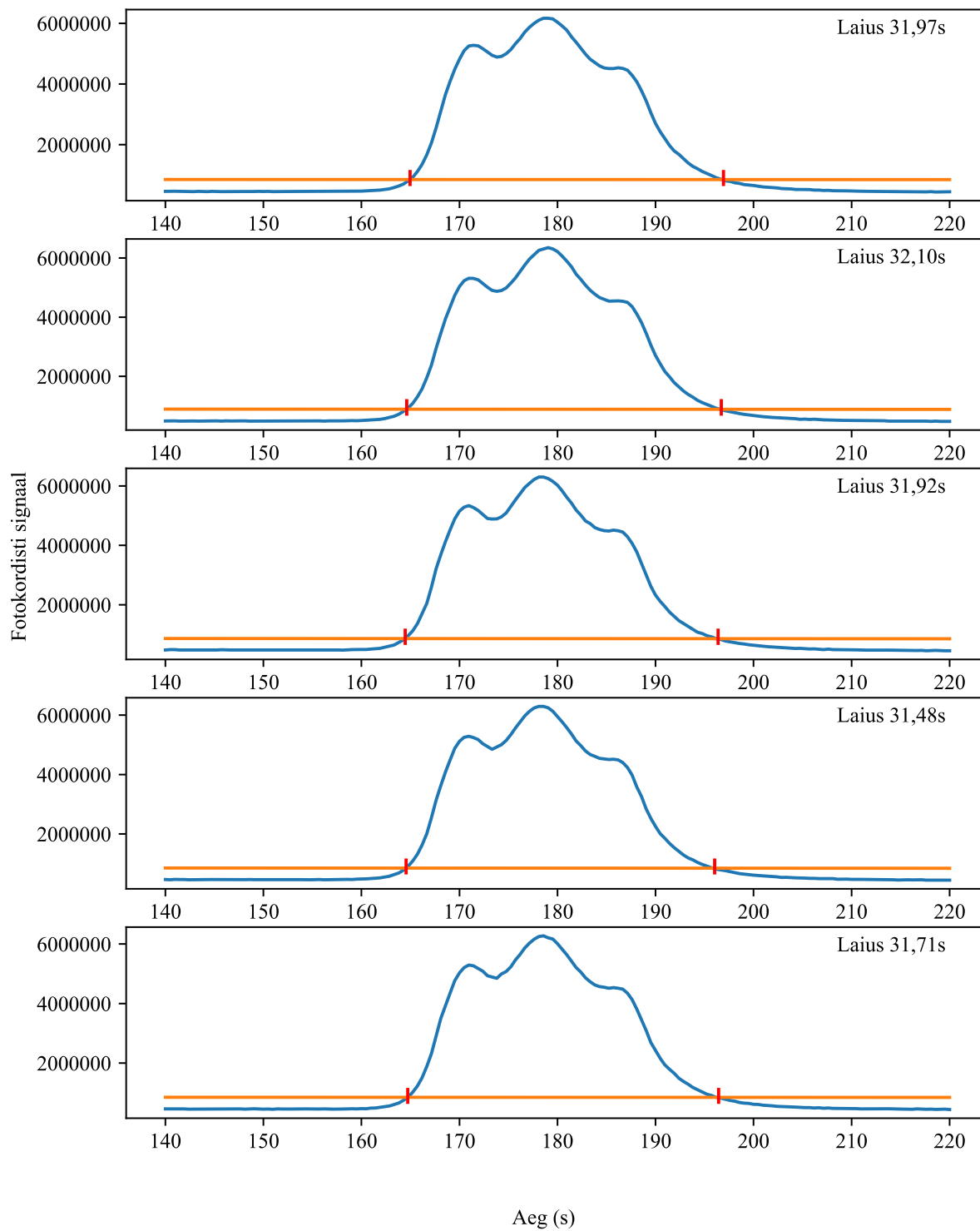
Joonis 35. Klapiiga süstimine: täis jäätmeanum, rõhk 40 mbar, 25 s



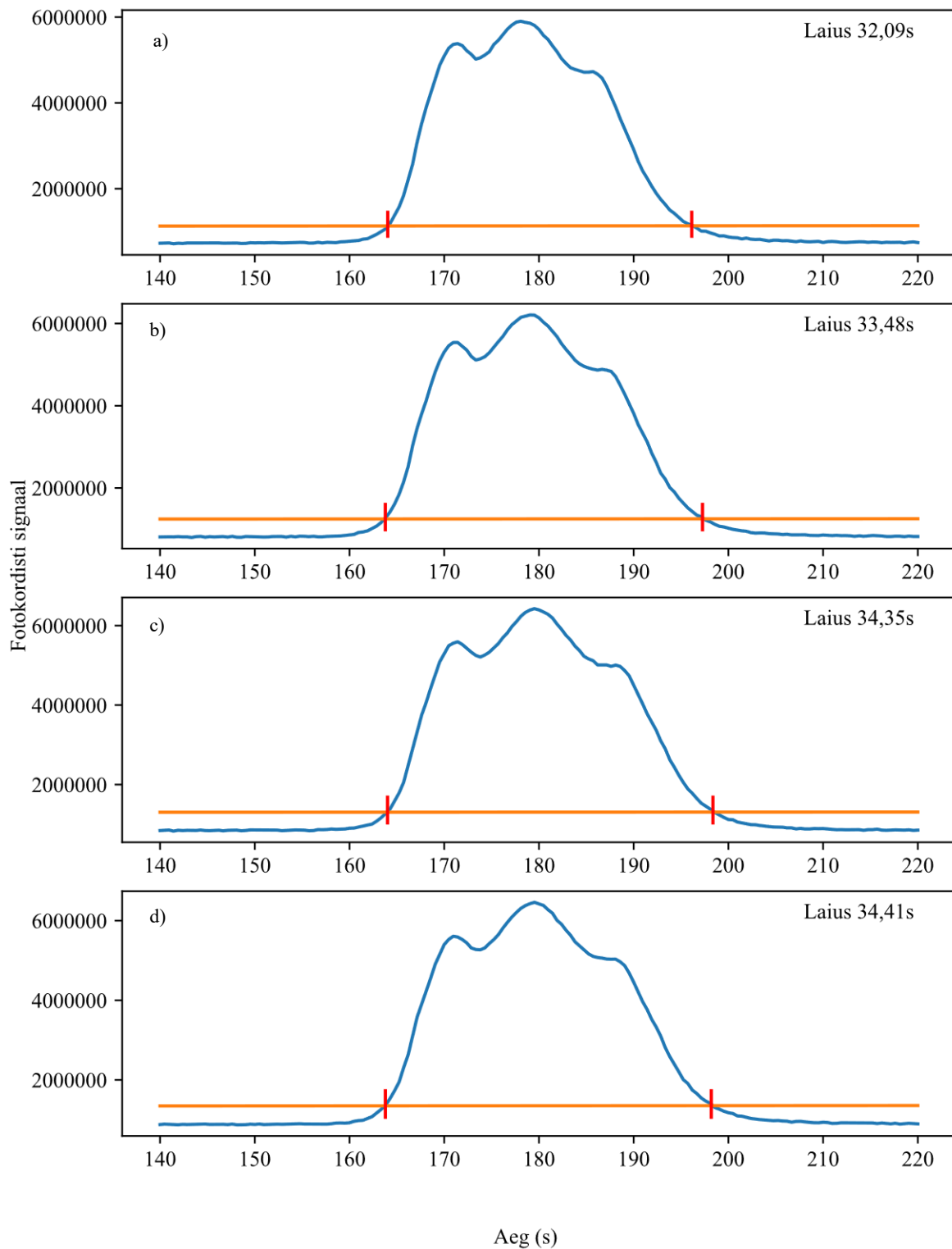
Joonis 36. Klapiga süstimised tühja jäätmeanumaga: a) 40 mbar 25 s, b) 60 mbar 16,7 s, c) 80 mbar 12,5 s, d) 100 mbar 10 s



Joonis 37. Klapita süstimine: tühi jäätmeanum, maksimaalne rõhk 40 mbar, 1000 mbar·s



Joonis 38. Klapita süstimine: täis jäätmeanum, maksimaalne rõhk 40 mbar, 1000 mbar-s



Joonis 39. Klapita süstimised tühja jäätmeanumaga, 1000 mbar-s ning maksimaalsete rõhkudega: a) 40 mbar, b) 60 mbar, c) 80 mbar, d) 100 mbar

Tänuavaldused

Täna kõiki Eesti Politsei ja Piirivalve, Sisejulgeolekufondi ja Siseministeriumi inimesi, kes leidsid, et siin töös kirjeldatud narkotester on kasulik tööriist ja arendustööd väärt seade. On olnud suur au olla kaasatud nii suurde projekti, kui seda on DrugHunteri arendustöö ja loodan, et antud tööriist annab positiivse panuse inimeste heaolu ja tervise edendamisse.

DrugHunteri senine arendustöö on olnud huvitav ja mitmekülgne ning kindlasti jääb sama kehtima ka tuleviku kohta, sest projekti on kaasatud paljude eri valdkondade inimesed: seadme lõppkasutajatena politseinikud ja piirivalveametnikud; seadme üldise ülesehituse ja vajaduste kaardistamisel ning seadme mõõteprotsesside arendamisel keemikud; mehaanika, optika, elektroonika ning programmeerimisega tegelenud inimesed.

Suur tänu Tallinna Tehnikaülikooli keemia ja biotehnoloogia instituudi inimestele ja käesoleva lõputöö juhendajale Jekaterina Mazina-Šinkarile lõputöö juhendamise ning kapillaarelektroforeesiga kurssi viimase eest. Põnev oli tutvuda OMECi elegantsete optika ja mehaanika lahendustega – minu isiklik lemmik on viaali katiku lahendus.

Täna SmartStuffi kolleege Jane Saart, Timo Tiiratsit ning Jaas Ježovit alati kaasa mõtlemast ning häid lahendusi pakkumast, Helina ja Koit Kulparit hea töömeeleolu hoidmisel. Eraldi suur tänu käesoleva töö igakülgse juhendamise, põhjalike selgituste ja õpetuste eest Artur Abelsile.

Täna veel oma peret ja elukaaslast moraalse toe eest, huvi tundmast ning kaasa elamast!

A handwritten signature in black ink, consisting of a large, stylized letter 'R' with a long, sweeping tail that curves back towards the left.

Lihtlitsents lõputöö reprodutseerimiseks ja üldsusele kättesaadavaks tegemiseks

Mina, Juhan Raedov

1. annan Tartu Ülikoolile tasuta loa (lihtlitsentsi) minu loodud teose

„Kapillaarelektroforeesil põhineva narkootiliste ainete tuvastusseadme DrugHunteri püsivara arendus“,

mille juhendajad on Artur Abels ja Jekaterina Mazina-Šinkar, reprodutseerimiseks eesmärgiga seda säilitada, sealhulgas lisada digitaalarhiivi DSpace kuni autoriõiguse kehtivuse lõppemiseni.

2. Annan Tartu Ülikoolile alates **20.05.2025** loa teha punktis 1 nimetatud teos üldsusele kättesaadavaks Tartu Ülikooli veebikeskkonna, sealhulgas digitaalarhiivi DSpace kaudu Creative Commons'i litsentsiga CC BY NC ND 3.0, mis lubab autorile viidates teost reprodutseerida, levitada ja üldsusele suunata ning keelab kuni autoriõiguse kehtivuse lõppemiseni luua tuletatud teost ja kasutada teost ärieesmärgil.
3. Olen teadlik, et punktides 1 ja 2 nimetatud õigused jäävad alles ka autorile.
4. Kinnitan, et lihtlitsentsi andmisega ei riku ma teiste isikute intellektuaalomandi ega isikuandmete kaitse õigusaktidest tulenevaid õigusi.

Juhan Raedov

20.05.2020