

République Algérienne Démocratique et Populaire
Ministère de L'enseignement Supérieur Et de la Recherche Scientifique



Université Hadj lakhdar Batna
Faculté De Technologie
Département d'Electronique



Mémoire

**Présenté pour l'obtention du diplôme de
MAGISTER en Electronique**

Option:

Micro Electronique IC Design

Par

M^r Farah Seyf el islam

Thème

Modélisation d'un ENFET

Soutenu devant le jury composé de :

Dr	DJEFFAL Fayçal	Prof.	Université de Batna	Président
Dr	Zohir DIBI	Prof.	Université de Batna	Rapporteur
Dr	BENHAYA Abd el hamid	Prof.	Université de Batna	Examineur
Dr	MAHAMDI Ramdane	Prof.	Université de Batna	Examineur
Dr	Abd el hafid CHAABI	Prof.	Université de Constantine	Examineur

Remerciements

Je remercie ALLAH le Tout-puissant de m'avoir donné le courage, la volonté et la patience de mener à terme ce présent travail.

Ce travail a été effectué sous la direction de monsieur **Zohir DIBI**, Professeur à l'Université de Batna et vice recteur chargé de la pédagogie.

Je lui exprime particulièrement toute ma reconnaissance pour m'avoir fait bénéficier de ces compétences scientifiques, ses qualités humaines et sa constante disponibilité.

J'exprime mes sincères remerciements à monsieur **DJEFFAL Fayçal**, Professeur à l'Université de Batna, d'avoir accepté de présider le Jury de ce mémoire.

Je remercie sincèrement monsieur **MAHAMDI Ramdane** et **BENHAYA Abd el hamid** Professeurs à l'Université de Batna et monsieur **Abd el hafid CHAABI** Professeur à l'Université de Constantine d'avoir accepté de faire partie du Jury et d'examiner mon travail.

Enfin j'exprime ma reconnaissance et ma sympathie à mes collègues de laboratoire de l'électronique avancée (LEA), mes frères et mes amis.

A mes parents

A mes frères

A ma famille

A mes amis.

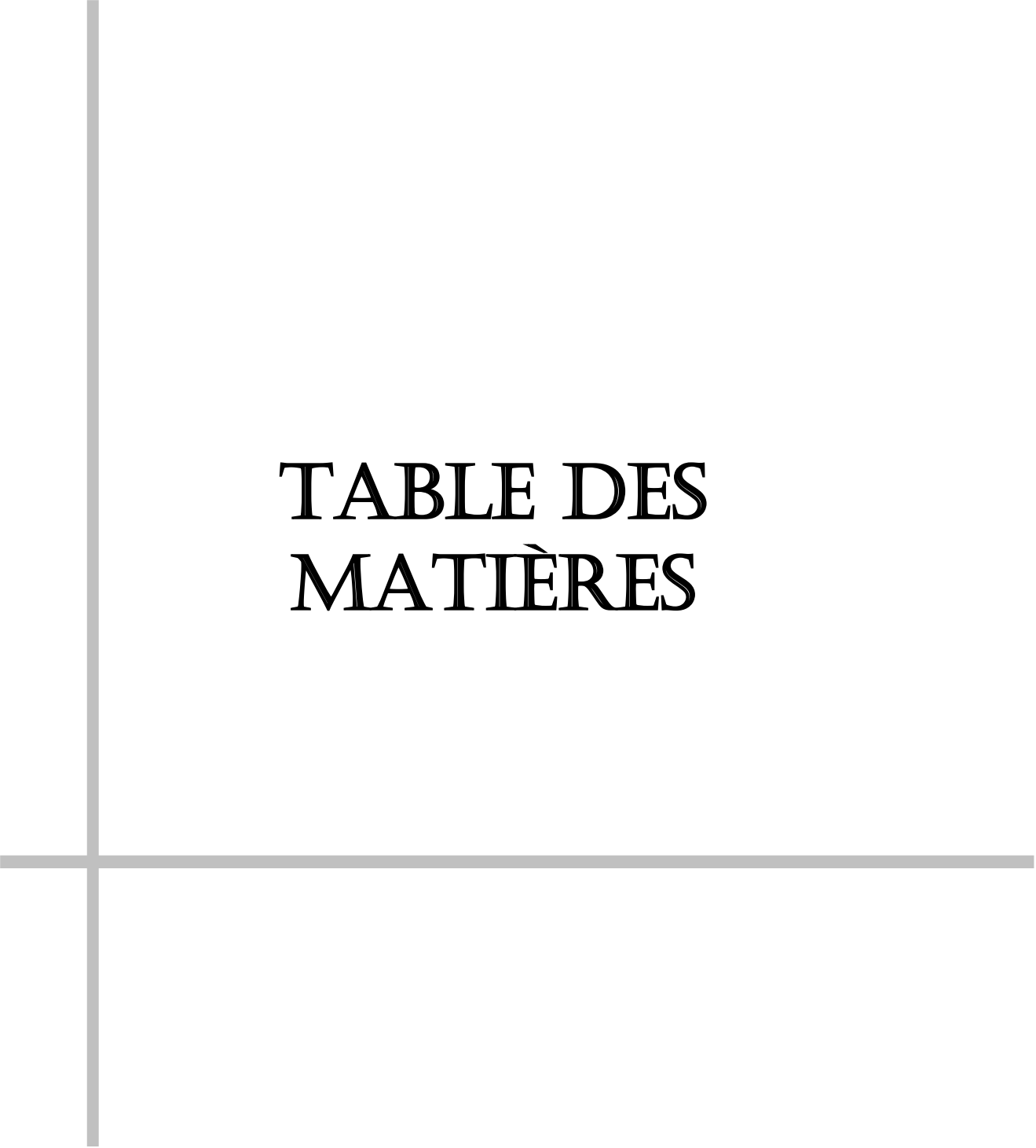


TABLE DES MATIÈRES

Table des matières

Table des matières	ii
Table des figures.....	ii
Introduction générale.....	1
Chapitre I : Extension du fonctionnement du MOSFET au capteur ENFET	
Chapitre I : Extension du fonctionnement du MOSFET au capteur ENFET	6
I-1 Introduction.....	6
I-2 Transistor MOSFET	6
I-2-1 Structure du Transistor MOSFET.....	7
I-2-2.Principe de fonctionnement	7
I-2-3 Tension drain-source V_{ds} faible (zone linéaire)	11
I-2-4 Tension drain-source V_{ds} élevée (zone de saturation)	12
I-2-5 Transconductance et conductance de drain	13
I-2-6 Principaux paramètres des MOSFET	15
I-3 Capteur ISFET	16
I-3-1 Principe de fonctionnement des ISFETs	16
I-3-2 Principe physico-chimique de détection.....	17
I-3-3 Détermination du potentiel chimique ψ_0	18
I-3-3-1 Etude de l'interface solide-électrolyte.....	18
I-3-3-2 Interface Electrolyte-Isolant-Solide (EIS).....	22
I-4 Capteur ENFET :	25
I-4-1.Historique et principe de fonctionnement des ENFETs	25
I-4-1-1 Etude théorique	28
I-4-1-2 Détection d'un substrat à partir d'une enzyme.....	28
I-4-2 Détermination de C et de pH	30
I-4-2-1 Détermination de la réponse potentiométrique de l'EnFET.....	31
I-4-3 Etude de la créatinine ENFET	31

I-4-3-1 Equations chimiques	31
I-4-3-2 Calcul de pH.....	31
I-5 Conclusion	32

Chapitre II : Réseaux de neurones et linéarisation

Chapitre II : Réseaux de neurones et linéarisation	34
II.1. Introduction.....	35
II.1.1 Modèle d'un neurone	35
II.1.2 Fonctions de transfert.....	38
II.1.3 Architecture de réseaux.....	40
II.1.4 Le perceptron multicouche	44
II.1.5 L'apprentissage (supervisé).....	44
II.1.6 La rétro-propagation	45
II.2.1 Erreurs dans la courbe de transfert de capteur	46
II.2.2 Fonction de transfert de capteurs	47
II.2.3 Linéarisation	48
II.2.4 Linéarisation de caractéristique de capteur.....	49
II.2.5 Linéarisation basée sur l'ajustement de courbe « Curve-fitting ».....	50
Conclusion	51

Chapitre III : Modélisation du capteur ENFET par les ANN

Chapitre III : Modélisation du capteur ENFET par les ANN.....	52
Introduction	53
III-1 Résultat de simulation pour le créatinine-EnFET du capteur	53
III-1-2 Influence du potentiel d'hydrogène initial pH0	53
III-1-3 Influence de la constante de Michaelis	54
III-1-4 Influence de la quantité d'enzyme	55
III.2 Modélisation du capteur	56

III.2.1 Choix de la base de données	56
III.2.2 Création d'une base de validation	57
III.2.3 L'apprentissage du réseau de neurone.....	58
III.2.4 Mesure de la performance du modèle obtenu.....	63
Conclusion.....	65

Chapitre IV : Modèle intelligent (INV-ANN) du capteur

Chapitre IV : Modèle intelligent (INV-ANN) du capteur	66
Introduction	67
IV.1 Modélisation de l'INV-ANN.....	67
IV.1.1 Linéarisation de la sortie du modèle.....	67
IV.1.2 Création des bases de données et de tests.....	68
IV.1.3 L'apprentissage du réseau de neurone.....	69
IV.1.4 Mesure de la performance du modèle obtenu	70
Conclusion.....	72
Conclusion générale	73
Référence	75





Introduction Générale

Introduction générale

Les espèces vivantes, afin de survivre, ont besoin de connaître leur environnement, et ont ainsi développé des capteurs naturels suivant leurs besoins. Ces capteurs leur permettent de localiser des proies, des prédateurs ou tout autre danger. Pour l'homme par exemple, des informations en continu de son environnement lui sont données par ses cinq sens, la vue, l'ouïe, l'odorat, le goût et le toucher. La connaissance du monde qui nous entoure est primordiale. Ainsi l'homme a continuellement développé des capteurs lui permettant de recevoir des informations sur toutes sortes de choses lui étant utiles. Les premiers capteurs chimiques utilisés par l'homme sont le nez et la langue. Il s'agit de capteurs naturels ou innés, liés à son évolution, qu'il a cherché à copier au travers du développement de multitudes de capteurs "artificiels".

On définit le capteur comme étant "un dispositif qui fournit une sortie utilisable en réponse à une grandeur à mesurer donnée", cette sortie utilisable est le plus souvent électrique [1].

En 1970, Bergveld invente l'ISFET (Ion Sensitive Field Effect Transistor) [2], un microcapteur basé sur la technologie à effet de champ. Ce MOSFET (Metal Oxide Semiconductor Field Effect Transistor) modifié a permis la mesure du pH, puis, les développements ont étendu la gamme de mesure à d'autres ions, et des nombreux dérivés de ce capteur original ont vu le jour. Ces dérivés ne se limitent pas aux capteurs chimiques mais aussi à des capteurs biochimiques. L'un des plus populaires est l'EnFET (Enzymatic Field Effect Transistor), qui est un capteur enzymatique. Une couche enzymatique recouvre la zone sensible et permet la détection de molécules biochimiques comme l'urée [3], la créatinine [4]...

Les capteurs classiques montrent une caractéristique de transfert non linéaire. De plus, l'influence de différents paramètres sur le modèle physique est notable dans un milieu de travail assez complexe. Pour ce fait on a adopté les réseaux de neurone comme méthode générale de linéarisation afin d'obtenir un capteur intelligent. Ce principe, qui tend à se développer, fait appel au concept de capteur 'Intelligent'.

Il s'agit dans ce mémoire d'associer au capteur une structure électronique permettant d'effectuer des corrections, afin d'obtenir une information précise sous forme numérique, donc directement exploitable et pouvant être par exemple facilement raccordé à un réseau industriel.

L'environnement **Matlab** est utilisé pour reproduire les résultats numérique de l'EnFET, la programmation sur **Matlab** a permis d'ajuster les courbes de réponse de notre capteur et de créer une base de données de notre modèle et une autre pour la vérification. L'apprentissage du réseau de neurone est également un programme écrit en **Matlab** qui est élaboré pour obtenir un réseau de neurone similaire à notre capteur.

Une linéarisation, par un programme **Matlab**, est appliquée à la réponse de l'EnFET dont le but est de créer une base de données d'un élément de correction, permettant de corriger la réponse non linéaire de l'EnFET. L'apprentissage pour cette nouvelle base de données nous donne le modèle inverse INV-ANN. Notons que ce composant est totalement différent de l'ANN qui reproduit le comportement du capteur par contre le INV-ANN joue le rôle d'un correcteur de réponse.

Le premier chapitre est consacré à un rappel sur la théorie et le principe de fonctionnement du transistor MOSFET conventionnel. L'extension de son utilisation à la détection d'espèces chimiques nécessite de donner les principes fondamentaux de l'électrochimie, à travers les principales réactions qui se produisent aux interfaces (électrolyte/isolant/semiconducteur). A la fin de ce chapitre, nous faisons un état de l'art sur les capteurs EnFETs au moyen d'une étude bibliographique.

Dans le deuxième chapitre, nous nous sommes intéressés en premier lieu à une présentation du réseau de neurone. Ensuite, on décrira quelques types d'erreurs de la réponse des capteurs ainsi que les méthodes de linéarisation de ces erreurs.

Le troisième chapitre regroupe les interprétations des différents résultats issus de la simulation du modèle analytique du capteur EnFET. Par la suite, nous donnerons une synthèse sur les différents paramètres influant sur la réponse du capteur en vue de l'application de la technique neuronal sur ce capteur en construisant un modèle ANN du capteur à étudier. A la fin de ce chapitre, nous exposons les résultats de simulations obtenus par cette technique en comparant ces résultats avec celles du modèle analytique.

Enfin, le dernier chapitre présentera les différentes étapes de la conception du modèle inverse INV-ANN en vue d'obtenir une réponse linéaire.

Nous terminerons ce mémoire par une conclusion générale qui récapitule les différents résultats trouvés.

A decorative gray crosshair consisting of a vertical line on the left and a horizontal line at the bottom, intersecting in the lower-left quadrant of the page.

Chapitre I

**Extension du fonctionnement du
MOSFET au capteur ENFET**

I-1 Introduction

La très grande majorité des circuits intégrés logiques et analogiques et même des capteurs sont fabriqués à base des transistors de type MOS (Métal-Oxyde-Semi-conducteur) et des composants passifs (principalement des résistances et des condensateurs).

Le fonctionnement du transistor MOSFET (à effet de champ) est simple dans le principe, mais assez complexe quand on rentre dans les détails et quand on s'intéresse à son optimisation. L'effet de champ désigne la possibilité de contrôler une conduction par porteurs majoritaires dans un semi-conducteur dopé par l'influence d'un champ extérieur. Donc la création d'un canal ionisé par effet de champ dans un semi-conducteur, c'est le principe du MOSFET.

Le capteur de pH-ISFET (Ion Selective or Sensitive Field Effect Transistor) et le capteur enzymatique ENFET sont issus du transistor MOSFET dont la grille est remplacée par une membrane chimiquement sensible aux ions H^+ en contact direct avec la solution à étudier.

A cet effet, dans ce chapitre, on rappelle tout d'abord la structure et le principe de fonctionnement électrique du transistor MOSFET conventionnel, ensuite son application en premier lieu comme un capteur de pH ISFET et deuxièmement comme ENFET (capteur enzymatique) en donnant aussi le principe de fonctionnement des deux capteurs ISFET et ENFET respectivement. Puis on va présenter le modèle du capteur créatinine-EnFET dans son environnement, ce qui va permettre de définir les paramètres qui caractérisent ce capteur.

I-2. Transistor MOSFET

Le transistor MOSFET (Métal Oxyde Semiconductor Field Effect Transistor) est, de loin, le dispositif le plus répandu dans la production actuelle de composants semi-conducteurs, car il est le composant de base de la technologie CMOS (Complementary MOS), qui, à elle seule, englobe plus de 70 % de la production mondiale de circuits intégrés [1,5].

Plusieurs sigles plus ou moins justifiés sont utilisés dans la littérature pour décrire le transistor MOS (Metal Oxide Semiconductor) : MOSFET (MOS Field Effect

Transistor), IGFET (Insulated Gate Field Effect Transistor) et MOST (Metal Oxide Semiconductor Transistor) [1].

I-2-1. Structure du Transistor MOSFET

Un transistor NMOS au silicium est fabriqué à partir d'un substrat semi-conducteur habituellement du silicium type P, les zones source et drain de type N fortement dopées sont équivalentes à des réservoirs d'électrons de chaque côté du canal. Une couche mince de SiO_2 isole le canal d'une métallisation constituant l'électrode de grille (métal ou polysilicium fortement dopé).

La tension appliquée sur l'électrode de grille assure le contrôle de la conductivité du canal. Le choix judicieux de la tension de grille va permettre le passage d'un courant électrique entre la source et le drain. La Figure (I-1) représente le transistor à canal N (substrat type P). Les paramètres les plus importants de la structure MOS sont:

La longueur du canal L , la largeur de canal W , l'épaisseur de l'oxyde t_{ox} , la largeur de la jonction r_j et le dopage du substrat N_a .

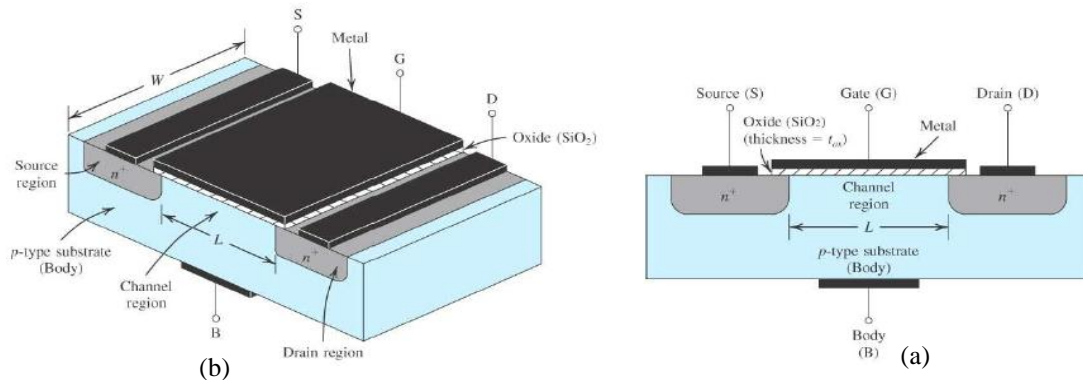


Figure I-1: Schéma d'un transistor MOS canal sur substrat type P. (a) schéma en coupe. (b) schéma en vue 3D [1].

I-2-2 Principe de fonctionnement [5]

Un transistor est avant tout un interrupteur commandé: un signal électrique (courant ou tension) de faible puissance, dit de commande, doit contrôler un signal électrique de plus forte puissance.

Cela permet deux types de fonctionnement: soit en amplification pour les applications de type analogique, soit en tout ou rien pour les applications logiques.

Le transistor MOSFET se caractérise par le fait que la grille, par l'effet de champ électrique, contrôle à travers l'oxyde de grille la densité de porteurs dans le canal du dispositif et ainsi l'intensité du courant dans le canal L.

➤ *MOSFET à canal non -préformé (Normally-OFF)*

Le nom de transistor MOSFET découle de sa structure verticale : Métal /Oxyde/Semi-conducteur. Cette structure, hachurée sur le schéma de la (Figure II-2) (a) est celle d'une capacité Conducteur/Isolant/Semi-conducteur.

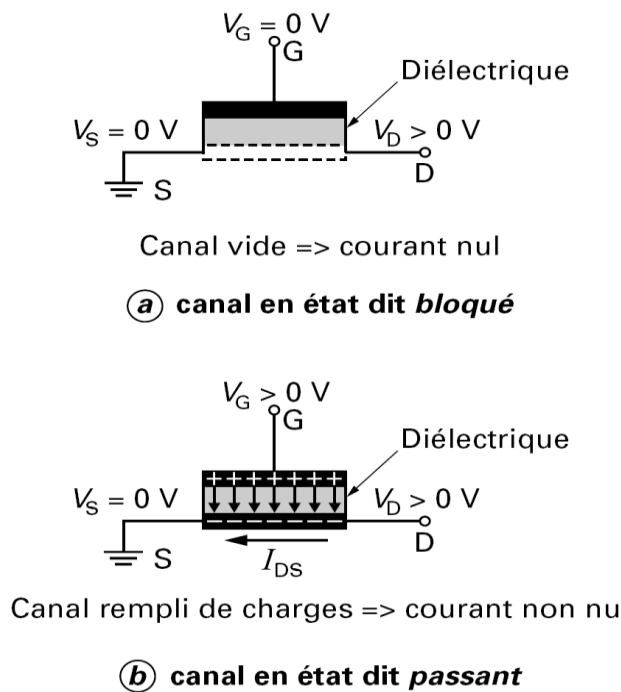


Figure I-2: Principe de fonctionnement d'un transistor MOS [7] :

(a) Etat bloqué ; (b) Etat passant.

Le principe de fonctionnement d'un tel dispositif est schématisé en Figure I-3. La tension de grille crée un champ vertical qui par l'intermédiaire de la capacité MOS, module la densité de porteurs libres à l'interface Substrat/Oxyde permettant ainsi de commander sa conductivité.

Lorsque la tension de grille ne permet pas d'obtenir la couche d'inversion « convenablement » donc aucun courant ne peut circuler entre la source et le drain quelle que soit la tension appliquée à l'électrode de drain; c'est l'état bloqué. Comme illustré en Figure I-3, la tension de grille nulle sont dits “normally off” (par opposition aux “normally on”, tels les transistors à canal N pré implanté).

Lorsque V_g devient supérieure à V_t , (la tension de seuil) le nombre de porteurs libres à l'interface Substrat /Oxyde est suffisant pour qu'ils forment un canal conducteur (si et seulement s'ils sont du même type que ceux des réservoirs de source et drain), figure II-4; les porteurs du canal sont des électrons, le transistor est dit à canal N et est appelé NMOS. Lorsque la tension de drain devient positive, un courant de drain I_D peut circuler dans le canal, c'est l'état passant.

La tension de seuil est donnée par la formule suivante

$$V_T = \frac{\Phi_M - \Phi_{si}}{q} - \frac{Q_{ss} + Q_{ox} - Q_b}{q} + 2\Phi_f \quad (I-1)$$

Où : Φ_{MS} reflètent la différence des travaux de sortie entre la grille métallique Φ_M et le silicium Φ_{Si} .

Les charges Q_{OX} , Q_{SS} et Q_b sont respectivement les charges dans l'oxyde, à l'interface oxyde-silicium et dans la couche de déplétion du substrat silicium et Φ_f est caractéristique du niveau de dopage du substrat.

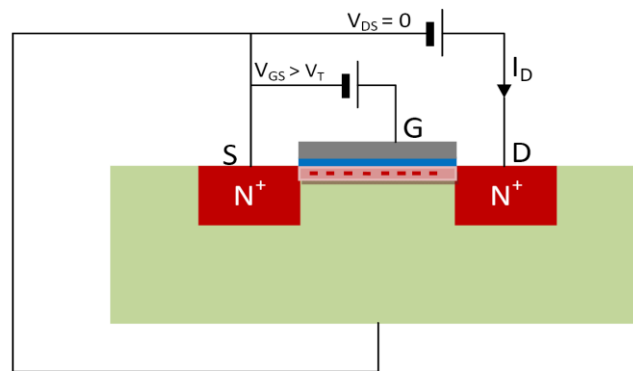


Figure I-3 : Transistor NMOSFET en régime linéaire [8].

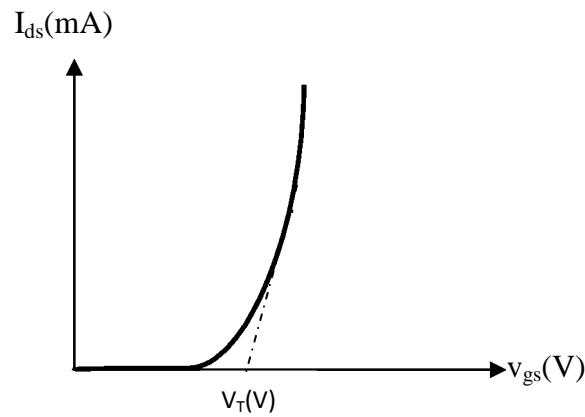


Figure I-4: Caractéristique de transfert d'un MOSFET à enrichissement.

➤ *MOSFET à canal préforme (Normally-ON)*

Si le transistor possède un canal de conduction entre la source et le drain de telle sorte que le dispositif est passant, même à la tension nulle de la grille, le dispositif est appelé transistor MOS à appauvrissement (Normally-ON).

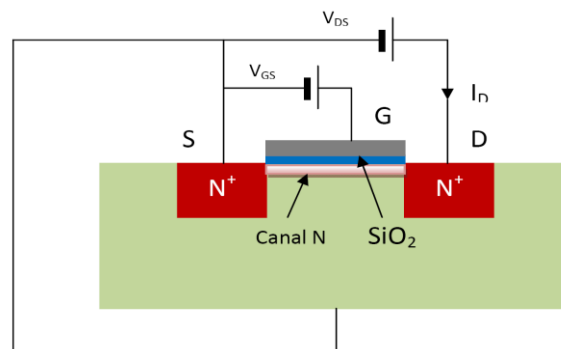


Figure I-5: Transistor MOSFET Normally-ON.

La caractéristique de transfert obéit à la forme de la figure I-6, où on constate que la tension de seuil est négative.

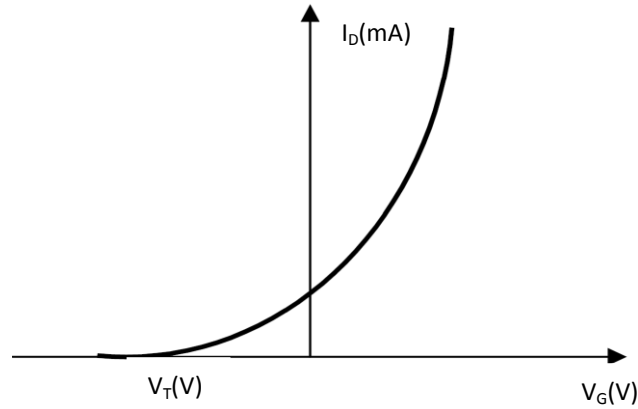


Figure I-6: Caractéristique de transfert d'un MOSFET à appauvrissement.

I-2-3 Tension drain-source V_{ds} faible (zone linéaire):

Cette zone est également appelée zone ohmique qui correspond à une évolution quasi-linéaire du courant de drain (I_{ds}) pour de faibles valeurs de la tension drain source (V_{ds}). En effet, pour de faibles valeurs de la tension de drain, le canal reste de section sensiblement uniforme sous la grille. Alors le rôle de la grille étant de contrôler la densité de charges mobiles sous la grille, on peut caractériser ce contrôle par une loi $N(V_{gs})$ où N représente la densité surfacique de charges et V_{gs} la différence de potentiel appliquée entre grille et source. À une tension drain-source V_{ds} faible, on peut admettre que la densité de charges N est uniforme sous la grille. La figure (I-7) montre la zone linéaire.

Le courant I_{ds} est donné par la formule suivante :

$$I_D = \frac{W}{L} \mu_n C_{ox} \left[(V_{GS} - V_T) V_{DS} - \frac{1}{2} (1 + \delta) V_{DS}^2 \right] \quad (I-2)$$

Où :

C_{ox} : la capacité de la grille par unité de surface ;

μ_n : la mobilité des porteurs dans le canal;

L : la longueur du canal ;

W : la largeur (perpendiculaire à L).

$$\delta = \frac{\gamma}{2\sqrt{2\phi_f + V_{SB}}} \quad (\text{I-3})$$

$$\gamma = \frac{\sqrt{2qN_a\phi_f}}{C_{ox}} \quad (\text{I-4})$$

V_{SB} : tension source bulk.

La tension de seuil, V_T est donnée par l'équation suivante :

$$V_T = V_{T0} + \gamma\left(\sqrt{2\phi_f + V_{SB}} - \sqrt{2\phi_f}\right) \quad (\text{I-5})$$

Avec :

$$V_{T0} = V_{BP} + 2\phi_f + \gamma\sqrt{2\phi_f} \quad (\text{I-6})$$

ϕ_f : est la différence de potentiel entre le niveau de Fermi E_F du silicium dopé et son niveau intrinsèque E_i ,

$$\phi_f = \frac{KT}{q} \ln\left(\frac{N_a}{n_i}\right) \quad (\text{I-7})$$

V_{BP} : C'est la tension de bande plate elle est donnée par l'équation suivante :

$$V_{BP} = \phi_{ms} - \left(Q_{ss} - \frac{Q_{ox}}{C_{ox}}\right) \quad (\text{I-8})$$

Où ϕ_m et ϕ_s : représentent le travail de sortie du métal et du semi-conducteur, respectivement,

$$\phi_{ms} = \left(\chi + \frac{e_g}{2} + \left(\frac{KT}{q}\right) \ln\left(\frac{N_a}{n_i}\right)\right) - \phi_m \quad (\text{I-9})$$

- Q_b : la quantité de charges de la couche de déplétion ;
- Q_{ox} : la quantité de charges fixes dans l'oxyde;
- Q_{ss} : la quantité de charges à l'interface semi-conducteur-oxyde ;

I-2-4 Tension drain-source V_{ds} élevée (zone de saturation)

L'augmentation de la tension drain-source ($V_{ds} > V_g - V_T$) a plusieurs effets:

- ✚ la couche d'inversion devient non uniforme sous la grille ; elle diminue du côté source au côté drain: c'est l'effet de pincement du canal.
- ✚ le champ électrique longitudinal sous la grille augmente et devient non uniforme. La vitesse des électrons n'est plus proportionnelle au champ électrique. Dans le cas des grilles courtes ($L < 1 \mu\text{m}$), le gradient spatial de champ électrique est important, ce qui rend le transport électronique non stationnaire (la vitesse ne suit plus la caractéristique $v(E)$ obtenue en champ uniforme).
- ✚ des électrons sont injectés dans le substrat produisant un courant parasite qui est à l'origine de la valeur non nulle de la conductance de sortie. L'addition de tous ces phénomènes entraîne une saturation du courant de drain I_{ds} en fonction de la tension V_{ds} . Pour les valeurs de tension V_{ds} très importantes, le champ électrique sous la grille peut être suffisant pour induire de la multiplication par avalanche et, dans ce cas, le courant drain I_{ds} augmente très rapidement : c'est le phénomène de claquage, qui est généralement destructif et qui constitue une limitation fondamentale des performances des transistors de puissance.

La figure (I-7) montre la zone de saturation.

$$I_{Dsat} = \frac{W}{L} \mu_n C_{ox} \frac{(V_{gs} - V_T)^2}{2(1 + \delta)} \quad (\text{I-10})$$

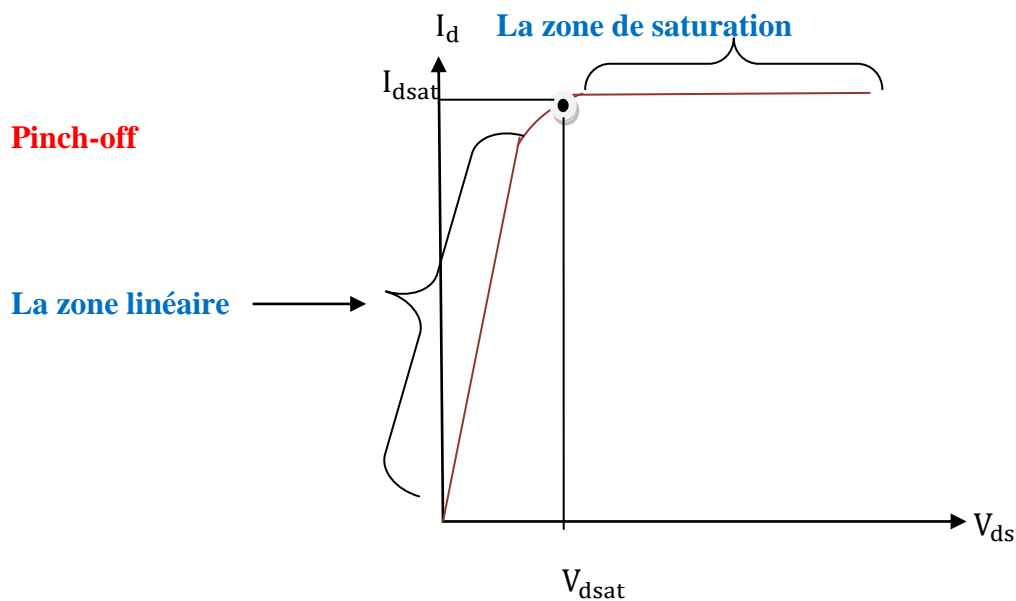


Figure I-7 : Caractéristique (I_d, V_{ds}).

I-2-5 Transconductance et conductance de drain

L'expression de $I_d = (V_{ds}, V_{gs})$ permet de calculer les deux paramètres fondamentaux du transistor qui sont la transconductance g_m et la conductance du canal appelée conductance de drain g_d .

Lorsque le transistor est polarisé à un point de fonctionnement donné par les tensions statiques V_g et V_d , le courant de drain est I_d . La variation du courant du drain résultant des variations de tensions de grille et de drain s'écrit:

$$dI_d = \frac{\partial I_d}{\partial V_g} dV_g + \frac{\partial I_d}{\partial V_d} dV_d \quad (\text{I-11})$$

Ce qui permet de linéariser le fonctionnement du transistor autour d'un point de polarisation par l'expression:

$$I_d = g_m V_g + g_d V_d \quad (\text{I-12})$$

Où I_d , V_g et V_d représente respectivement les variations du courant de drain et des tensions grille- source et drain-source.

La transconductance est donnée par:

$$g_m = \left. \frac{\partial I_D}{\partial V_g} \right|_{V_{ds} = \text{cste}} \quad (\text{I-13})$$

La conductance g_d quantifie l'imperfection de la saturation. Elle est égale à la pente de la courbe $I_D(V_{ds})$ à $V_{ds} > V_{ds_{sat}}$

$$g_d = \left. \frac{\partial I_D}{\partial V_d} \right|_{V_{gs} = \text{cste}} \quad (\text{I-14})$$

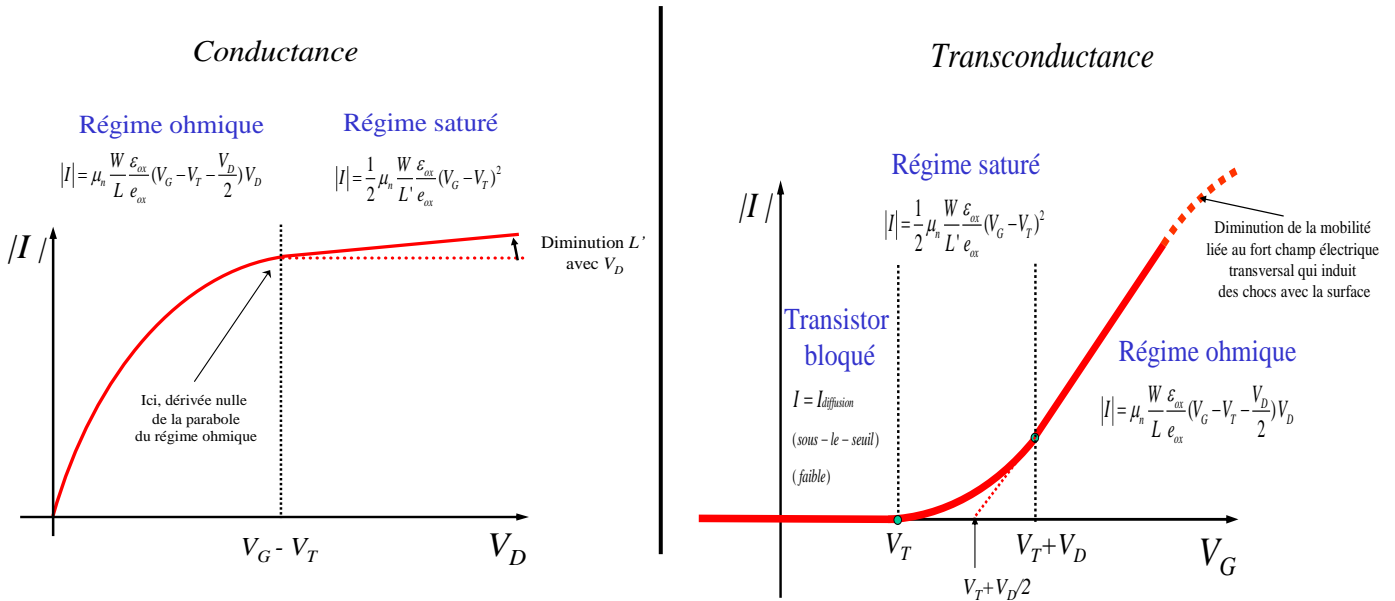


Figure I-8: Conductance et transconductance du canal.

I-2-6 Principaux paramètres des MOSFET [5,6]

Les trois régimes de fonctionnement (bloqué, linéaire et source de courant) décrits au paragraphe précédemment sont indiqués sur les caractéristiques $I_D(V_{ds})$ à différentes tensions de grille V_g dans la figure (II-9).

L'état passant d'un transistor MOSFET se caractérise principalement par :

- ❖ La résistance à l'état passant R_{on} : inverse de la pente de courbe $I_D(V_{ds})$ à $V_g = V_{DD}$ et faible V_{DS} .
- ❖ Le courant de saturation: I_{on} , c'est-à-dire le courant I_D à $V_g = V_{DD}$ et $V_{ds} = V_{DD}$ Figure (I-9).
- ❖ La transconductance g_m .
- ❖ La conductance g_d .

Au-dessous du seuil, le blocage n'est pas parfait, il existe un courant faible mais non nul ($I_D \neq 0$). Ce courant n'est pas un courant de conduction comme à l'état passant mais un courant diffusif, d'où la dépendance exponentielle de la caractéristique $I_D(V_g)$ sous le seuil.

- ❖ Le courant à l'état bloqué I_{off} correspond au courant I_D à $V_g = 0$ et $V_{ds} = V_{DD}$ Figure (I-9).
- ❖ De plus on définit la pente sous le seuil S comme l'inverse de la pente $\log [I_D(V_g)]$

à faible V_g soit $S = \left(\frac{\partial \log(I_D)}{\partial V_g} \Big|_{V_{ds} = cste} \right)^{-1}$

❖ La modélisation du courant sous le seuil donne une pente :

$$S = \frac{k_B T}{q} \ln(10) \left(1 + \frac{C_{ZCE}}{C_{ox}} \right),$$

Où K_B est la constante de Boltzmann, T la température, q la charge élémentaire, C_{ox} la capacité d'oxyde et C_{ZCE} la capacité de la zone de charge d'espace. Pour $C_{ox} \gg C_{ZCE}$ on obtient la pente S idéale $S_{idéale} = K_B \times T / q \times \ln(10)$, c'est-à-dire égale à 60 mV par décade à 300K.

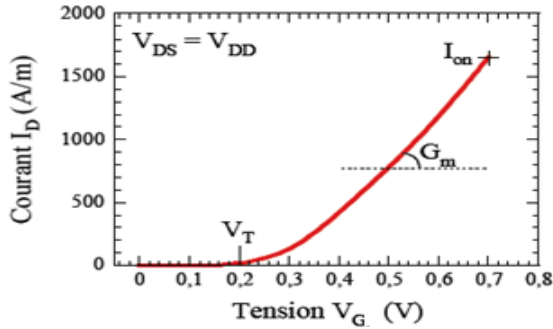


Figure I-9:Caractéristique $I_D(V_{gs})$ à $V_{ds} = V_{DD}$ typique d'un NMOS. Ion, Gm et V_T sont indiqués.

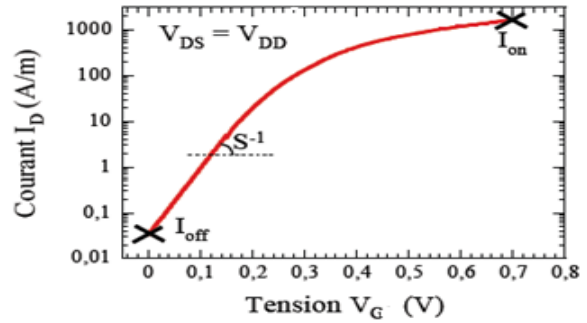


Figure I-9:Caractéristique $\log [I_D(V_{gs})]$ à $V_{ds} = V_{DD}$ typique d'un NMOS. Ion, Ioff et S sont indiqués.

I-3 Capteur ISFET :

I-3-1.Principe de fonctionnement des ISFETs

En 1970, Piet Bergveld [2] développa un nouveau procédé électronique permettant de mesurer l'activité des ions dans un milieu chimique et biochimique. Il utilisa le principe d'une électrode de verre et d'un transistor à effet de champ. Il mit en évidence la sensibilité aux ions H^+ d'un transistor MOS (Métal-Oxyde-Semiconducteur) sans grille métallique. Il introduisit ainsi le premier capteur chimique (ChemFET) à effet de champ, l'ISFET (Ion Sensitive Field Effect Transistor). La méthodologie de l'ISFET pour la mesure d'ions est développée sur la base du transistor MOSFET (transistor à effet de champ commandé en tension par une grille métallique). Le principe de base du transistor MOSFET est de pouvoir contrôler le courant circulant entre deux zones de semi-conducteur (source et drain) par l'application d'une tension V_{gs} sur la grille.

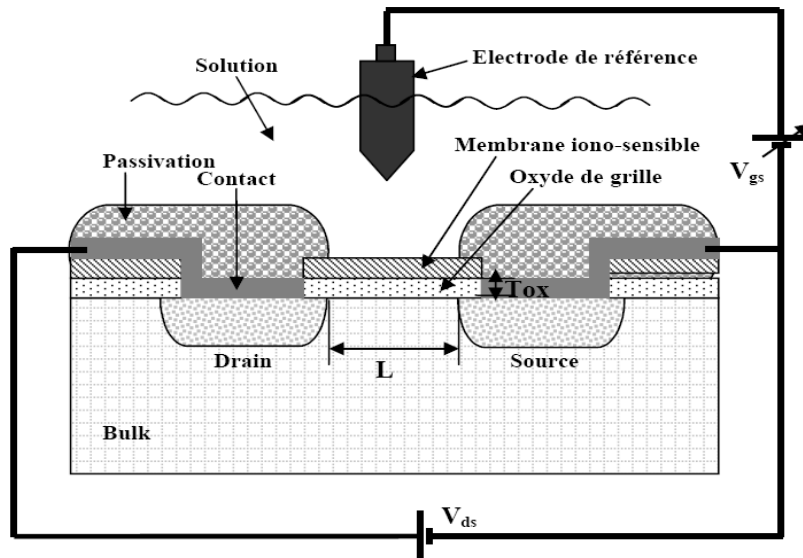


Figure I-10 : Capteur chimique ISFET [10].

L'électrode de grille métallique est isolée du drain et de la source au moyen d'un oxyde de silicium (SiO_2) et commande le courant drain source (I_{ds}) électrostatiquement. L'impédance d'entrée, extrêmement élevée de l'électrode de grille implique qu'il n'est pas nécessaire d'appliquer une grande tension d'entrée pour commander ce courant (I_{ds}). Dans le cas de l'ISFET, la grille métallique est remplacée par une électrode de référence, l'électrolyte à analyser est une grille isolante sensible à la concentration en ions recherchés (par exemple H^+). Le système fondamental de mesure de l'ISFET est montré sur la figure (I-10).

Quand Bergveld présenta pour la première fois le composant ISFET, celui-ci fonctionnait sans électrode de référence. Cependant, des travaux ultérieurs ont indiqué que les opérations propres à l'ISFET demandent la présence d'une électrode de référence pour établir un potentiel dans l'électrolyte en contact avec le substrat en silicium [32].

I-3-2 Principe physico-chimique de détection

On rappelle l'équation qui régit la tension de seuil d'un MOSFET présenté précédemment [1,2] :

$$V_T = \frac{\Phi_M - \Phi_{si}}{q} - \frac{\Phi_{ss} + \Phi_{ox}}{q} + 2\Phi_f \quad (\text{I-15})$$

Dans le cas de l'ISFET, le même procédé de fabrication est utilisé.

Cependant des contributions supplémentaires se manifestent; en effet l'électrode métallique de grille du MOSFET étant remplacée par une électrode de référence, l'électrolyte et la couche chimiquement sensible, l'équation précédente devient [5,9]:

$$V_T(ISFET) = E_{ref} + \chi^{sol} - \psi_0 - \frac{\Phi_{si}}{q} - \frac{\Phi_{ss} + \Phi_{ox} + \Phi_b}{q} + 2\Phi_f \quad (I-16)$$

$$V_T(ISFET) = V_T(MOSFET) - \frac{\Phi_M}{q} + E_{ref} + \chi^{sol} - \psi_0 \quad (I-17)$$

Le terme E_{ref} représente le potentiel de l'électrode de référence, ψ est le potentiel chimique en fonction du pH et χ^{sol} est un paramètre constant représentant le potentiel de surface du solvant.

Le principe de fonctionnement du capteur chimique ISFET est donc basé sur le piégeage d'ions au niveau de la couche sensible. Les charges piégées induisent une variation du potentiel chimique ψ et donc de la tension de seuil du transistor V_T .

I-3-3 Détermination du potentiel chimique ψ_0 :

La modélisation des ISFET fournit des outils importants pour la prédiction des fonctions qui régissent le fonctionnement du dispositif surtout pour des nouvelles membranes sensibles qui peuvent être utilisées pour fabriquer des dispositifs avec une sensibilité élevées.

Depuis l'introduction du modèle de site binding, des nombreux modèles ont été développés certains sont physico-chimique et certaines sont basées sur SPICE (Simulation Program Integrated Circuit Emphasis).

Mais quelle que soit l'approche utilisée, l'objectif de base de la modélisation d'ISFET est d'obtenir une relation de la forme $\psi_0 = f(\text{pH})$ et presque tous les modèle sont considéré l'état de charge de la neutralité d'une structure électrolyte/isolant/semi-conducteur (EIS) [10] conjointement avec la théorie du site binding et la théorie de la double couche électrique.

I-3-3-1 Etude de l'interface solide-électrolyte

Du fait de la dimension finie des ions et des molécules de solvant dans une solution électrolytique, il apparaît une différence entre les zones de charge d'espace d'un système solide-électrolyte.

Une solution électrolytique a des ions appelés anions et cations. Ces ions forment des paires d'ions avec les sites de la surface de charges opposées, un processus connu sous le nom de complexations de surface.

La formation des complexes de surface réajuste également l'acide - base et affecte la charge de surface en compensant partiellement les sites chargés. Bien sûr la répartition des ions dans la solution d'électrolyte peut être bien expliquée à l'aide de la théorie de Gouy – Chapman – Stern [11].

Selon cette théorie, les deux couches sont formées dans l'électrolyte. Une couche interne et une couche diffuse.

La couche interne appelée aussi couche d'Helmholtz est constituée de deux plans ; le premier appelé plan intérieure d'Helmholtz (PHI) et le plan externe de Helmholtz (PEH). PHI est le lieu des centres d'ions adsorbés qui forment des paires avec des sites de surface chargés.

Stern [12] a amélioré ce modèle en tenant compte de la taille des ions solvatés et en considérant que ceux-ci ne pouvaient s'approcher de la surface que jusqu'au plan interne d'Helmholtz (PIH). La deuxième couche appelée couche de Stern est réservée aux ions solvatés. Cette région s'étend de la distance de contact entre les ions adsorbés et les ions solvatés jusqu'au centre des ions solvatés. Le centre des ions solvatés, le plus proche de la surface du solide est appelé plan externe d'Helmholtz (PEH) [8,13].

La couche diffuse s'étend à partir de PHO au sein de l'électrolyte et contient des ions non spécifiquement adsorbés qui se comportent comme un nuage ionique équilibrée par les sites de surface non compensés. Cette couche diffuse est comparable à la zone de charge d'espace des MOSFETs; l'extension de cette couche dépend du potentiel et de la concentration en ions de l'électrolyte [14].

Avec ce modèle, la double couche électrique se comporte comme deux condensateurs C_H et C_D en série où C_H est la capacité d'Helmholtz et C_D est la capacité de la couche de diffusion comme indiqué sur la figure (I-11).

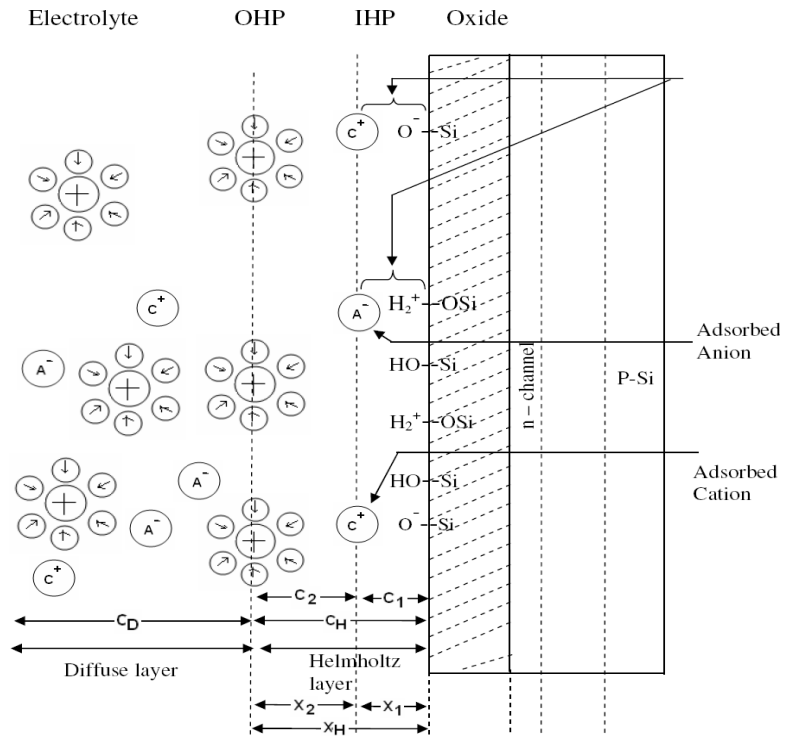


Figure I-11 : Distribution des espèces à l'interface-solide électrolyte, (modèle site binding de la double couche électrique) [14].

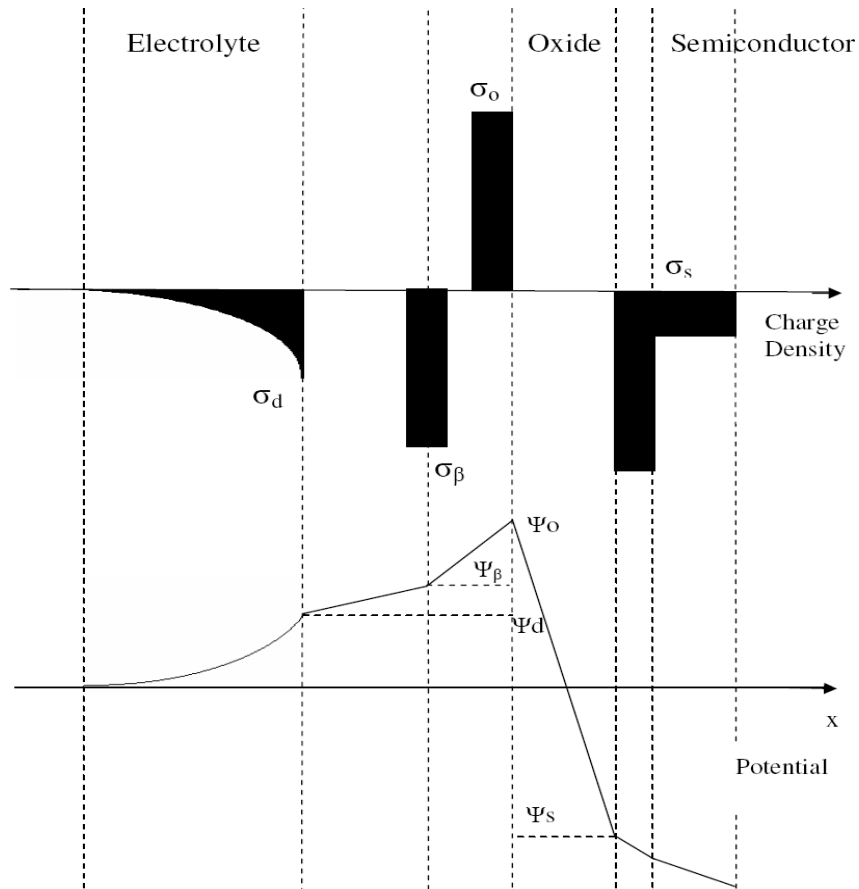


Figure I-12: Distribution des charges et de potentiel d'un ISFET PH<PHpzc.

La relation entre le potentiel électrique $\varphi_0(x)$ à une distance x du plan PEH et la densité de charge d'espace $\rho(x)$ est donc :

$$\frac{d^2 \varphi_0(x)}{dx^2} = - \frac{\rho(x)}{\varepsilon_0 \cdot \varepsilon_r} \quad (\text{I-18})$$

Où : ε_r est la permittivité de l'eau et ε_0 celle du vide.

La distribution des ions dans la double couche sous l'action du potentiel et de l'agitation thermique est décrite par la statistique de Boltzmann :

$$C_i(x) = C_{i0} \cdot \exp\left\{-\frac{q_i \varphi_0(x)}{k.T}\right\} \quad (\text{I-19})$$

Où : C_i et q_i sont respectivement la concentration et la charge de l'ion (i).

La densité de charge est :

$$\rho(x) = \sum_i q_i \cdot C_i = \sum_i q_i \cdot C_{i0} \cdot \exp\left\{-\frac{q_i \varphi_0(x)}{k.T}\right\} \quad (\text{I-20})$$

La combinaison des équations I-3 et I-5 conduit à l'équation Poisson-Boltzmann :

$$\frac{d^2 \varphi_0(x)}{dx^2} = - \frac{1}{\varepsilon_0 \cdot \varepsilon_r} \sum_i q_i \cdot C_{i0} \cdot \exp\left\{-\frac{q_i \varphi_0(x)}{k.T}\right\} \quad (\text{I-21})$$

Pour un électrolyte symétrique, dans lequel les ions ont une charge de valeur absolue q :

$$q_+ = q = -q$$

$$c_+ = c = c$$

Il est possible d'intégrer l'équation I-21 avec comme conditions aux limites :

$$\varphi_0(x) = \varphi_{0d} \quad \text{à } x = 0$$

$$\rho_0(x) = 0 \text{ donc } \frac{d\varphi_0(x)}{dx} = 0 \quad \text{à } x \rightarrow \infty$$

La solution de l'équation (I-21) est alors donnée par :

$$\frac{d\varphi_0(x)}{dx} = - \left(\frac{8.k.T.C}{\varepsilon_0 \cdot \varepsilon_r} \right)^{1/2} \cdot \sinh\left(\frac{q \varphi_0(x)}{2.k.T} \right) \quad (\text{I-22})$$

En utilisant la loi de Gauss, on obtient la charge de la couche diffuse :

$$\sigma_d = - (8 \cdot \varepsilon_0 \cdot \varepsilon_r \cdot k.T.C)^{1/2} \cdot \sinh\left(\frac{q \varphi_0(x)}{2.k.T} \right) \quad (\text{I-23})$$

Il est maintenant possible de calculer la capacité différentielle C_d de la couche diffuse en différenciant l'équation précédente :

$$C_d = \frac{d\sigma_d}{d\varphi_{0d}} = - \left(\frac{2 \cdot q^2 \varepsilon_0 \cdot \varepsilon_r \cdot C}{k \cdot T} \right)^{1/2} \cdot \cosh \left(\frac{q\varphi_{0d}}{2 \cdot k \cdot T} \right) \quad (\text{I-24})$$

Cette capacité diffuse, qui varie avec la concentration passe par un minimum.

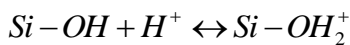
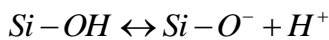
C_d croît rapidement de part et d'autre de ce minimum. Stern [13], en tenant compte de la taille finie des ions, et du fait qu'ils ne peuvent approcher la surface qu'à une distance finie, a montré que la capacité est en réalité constituée de deux composantes montées en série [13]:

- une capacité indépendante du potentiel correspondant à la capacité des charges portées par le plan externe d'Helmholtz,
- une capacité en forme de V correspondant à la capacité de la charge réellement diffuse.

I-3-3-2 Interface Electrolyte-Isolant-Solide (EIS)

Le mécanisme responsable de la variation de la charge de surface peut être expliqué par la théorie du site binding bien connu introduit en 1973 par Yates et al [14] pour décrire les propriétés d'une interface électrolyte / oxyde, et elle a été généralisée en 1986 par Fung et al [15] pour caractériser le capteur ISFET avec des isolants d'oxyde, selon cette théorie, la surface d'isolation contient des groupes hydroxyle (OH) qui peuvent être protonés (donc se chargé positivement) ou déprotonés (donc se chargé négativement) en fonction de la concentration des ions d'hydrogène dans l'électrolyte. Les groupes hydroxyles de surface, qui peuvent fixer les ions d'hydrogène sont appelés sites de liaison.

Dans le cas de SiO_2 isolant, il est supposé qu'il n'a qu'un seul type de site de liaison spécifique H^+ représentée par SiOH , SiO^- et SiOH^+ . Les réactions d'ionisation sont:



Avec H^+ représente les protons au voisinage de la surface.

Il est donc clair que la surface initialement neutre peut devenir un site positif en acceptant des protons de l'électrolyte ou un site négatif en donnant des protons à l'électrolyte. A la suite de ces réactions chimiques à l'interface, la surface d'oxyde initialement neutre contenant des sites neutres est transformée en une surface chargée avec des sites positifs et négatifs ; donc ces ions sont responsables de l'état de charge à l'interface SiO_2 /électrolyte. Au contact de la solution aqueuse, des groupements de silanol (SiOH) se forment à la surface de l'isolant. Ces groupements peuvent être,

chargés positivement, ou chargés négativement ou neutres, suivant le pH de la solution. Donc, H^+ et OH^- sont désignés comme des ions qui déterminent le potentiel pour cette interface.

Le pH particulier pour lequel la surface de la membrane a zéro charge est appelé «pH au point de charge nulle» pH_{PCN} ou (pH_{pzc}). La présence de ces groupements de charges amène une correction à l'équation de Nernst habituellement utilisée en électrochimie.

La figure (I-13) illustre les trois différents types de groupements silanols à la surface d'une membrane.

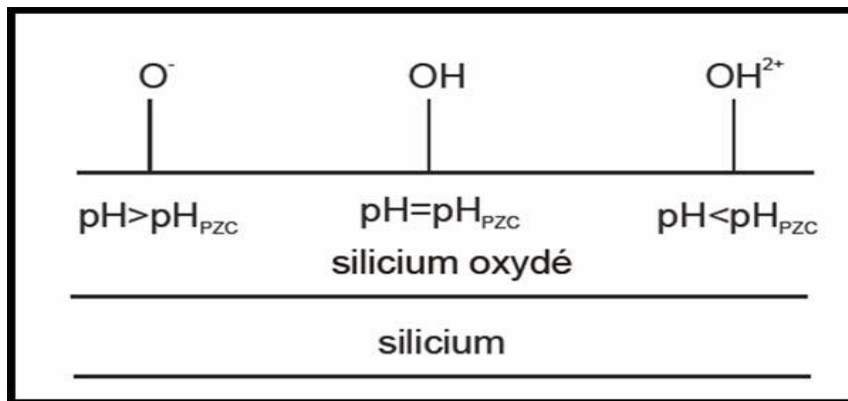
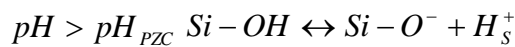


Figure I-13 : Représentation schématique de la théorie du site-binding [16].

La manière la plus simple de calculer la relation reliant la différence de potentiel entre la surface de l'isolant et l'électrolyte (ϕ_0) et la charge de surface de l'isolant (σ_0) est d'utiliser les constantes d'équilibres k_a (constante d'acidité) et k_b (constante de basicité) des réactions de dissociation des sites hydroxyles amphotères.



$$\text{Avec } k_a = \frac{[Si - O^-][H_s^+]}{[Si - OH]}$$



$$\text{Avec } k_b = \frac{[Si - OH_2^+]}{[Si - OH][H_s^+]}$$

Où H_s représente la concentration en ions H^+ à la surface de l'isolant et $[H^+]$ représente la concentration des ions H^+ dans l'électrolyte. Comme dans l'équation I-19, la distribution des ions hydrogène dans l'électrolyte peut être décrite par la statistique de Boltzmann :

$$[H_s^+] = [H^+] \exp\left(-\frac{q\psi_0}{kT}\right) \quad (\text{I-25})$$

La théorie du site binding permet ainsi de montrer que :

$$[H^+] = \left(\frac{k_a}{k_b}\right)^{1/2} \left(\exp\left(-\frac{q\psi_0}{kT}\right)\right) F(\varphi_0) \quad (\text{I-26})$$

En prenant le logarithme de l'équation précédente, on aboutit à :

$$pH = -\log\left(\frac{k_a}{k_b}\right)^{1/2} - \frac{q\varphi_0}{kT(\ln 10)} - \log F(\varphi_0) \quad (\text{I-27})$$

Ainsi, en isolant le potentiel ϕ_0 , on obtient :

$$\frac{q\varphi_0}{kT} + G(\varphi_0) = \ln(10) \cdot (pH_{psc} - pH) \quad (\text{I-28})$$

Avec

$$pH_{psc} = -\frac{1}{2} \log\left(\frac{k_a}{k_b}\right) \quad (\text{I-29})$$

Donc

$$\psi_0 = 2.3 (pH_{pcn} - pH) \cdot \frac{kT}{q} \cdot \frac{\beta}{\beta+1} \quad (\text{I-30})$$

β est le facteur significatif de la qualité de l'interface isolant/ électrolyte.

$$\beta = \frac{2q^2 N_s}{\left(\frac{K_a}{K_b}\right)^{1/2} C_D kT} \quad (\text{I-31})$$

Ce terme β va rendre compte de la sensibilité finale. Il est fonction de l'équilibre acide base relatif aux réactions de surface, du nombre total de sites amphotères à la surface de l'isolant N_s et de la capacité de la double couche C_D (équation 24).

Ainsi, la sensibilité de l'ISFET sera définie par :

$$S = \left| \frac{d\varphi_0}{dpH} \right| = \ln 10 \cdot \frac{kT}{q} \cdot \frac{\beta}{\beta+1} \quad (\text{I-32})$$

Pour un bon nitrure ($\beta \gg 1$), à $T = 300^\circ\text{K}$, la sensibilité est Nernstienne ($S \approx 59 \text{ mV/pH}$) [13].

I-4 Capteur ENFET :

I-4-1. Historique et principe de fonctionnement des ENFETs

Depuis son développement dans les années soixante pour les patients souffrant d'insuffisance rénale, l'hémodialyse a été en évolution afin d'améliorer la santé. Aujourd'hui, afin de procéder à cette opération, l'efficacité de dialyse doit être connue avec précision par connaître la concentration d'urée et de la créatinine au cours du traitement d'hémodialyse.

La modélisation des mécanismes enzymatiques a été d'abord présentée par Michaelis et Menten [17] en 1913, qui décrivent la cinétique d'une réaction enzymatique en fonction de la concentration du substrat et de son affinité avec l'enzyme. Le premier modèle d'un biocapteur enzymatique a été publié par Racine and Mindt en 1971 [18]. Ce modèle décrit le fonctionnement d'une électrode ampérométrique, ne prend pas en compte les phénomènes de saturation, ainsi considère l'équation de Michaelis-Menten comme étant purement linéaire, et ne prend en compte que la diffusion du substrat. Puis de nombreux modèles de capteurs ampérométriques plus complets apparaissent, dont celui de Bartlett et al, qui prend en compte tous les mécanismes enzymatiques (Michaelis-Menten), l'activité enzymatique, les caractéristiques de la membrane, la diffusion du substrat et des espèces générées en intégrant que les effets du coefficient de diffusion [19].

D'autres modèles de capteurs ampérométriques sont apparus par la suite, souvent décrits pour une application donnée. Un ouvrage, paru récemment en 2009, a été consacré à ces modèles reprenant les derniers travaux concernant la modélisation de ce type de capteur [20].

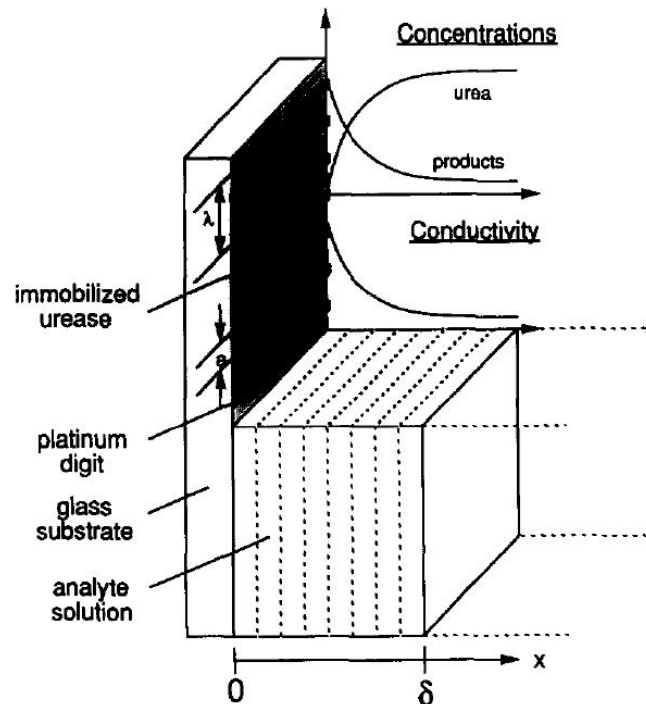


Figure 1.10: Schéma du modèle du capteur conductimétrique de l'urée.

Toujours dans les détecteurs enzymatiques, des modèles ont été développés pour les capteurs conductimétriques, dont le modèle de référence est celui proposé par Sheppard et al [21], qui présente un modèle d'un capteur conductimétrique pour la détection de l'urée. Ce modèle de capteur sensible à l'augmentation de la conductivité de la solution à la surface, due à l'hydrolyse de l'urée, est présenté figure 1.10, où est illustré le capteur en coupe ainsi que les variations spatiales de la concentration de l'urée et des produits issus de la réaction enzymatique.

Le modèle prend en compte la réaction enzymatique et sa cinétique (Michaelis-Menten), les réactions chimiques afin de déterminer les ions participant à la conduction des charges, la diffusion des espèces dans la solution (loi de Fick), les phénomènes de transport de charges, la géométrie de l'électrode et les propriétés des matériaux utilisés.

Concernant les EnFETs, l'objet de notre étude, les premiers travaux de modélisation du capteur potentiométrique EnFET ont été réalisés par Caras et Al. En 1985, où ils présentent le modèle du Glucose-EnFET et du pénicilline-EnFET [21] [22]. Leur modèle (figure 1.11) très simplifié, considère que la réaction enzymatique ne produit qu'un seul acide. Il prend en compte la diffusion du substrat et du produit de la réaction enzymatique (l'acide), en considérant que leurs coefficients de diffusion sont égaux et

négligeables devant la diffusion des protons H^+ . La concentration des couches enzymatiques est considérée en excès, le milieu n'est pas pris en compte. Le pH est calculé en fonction seulement de la génération/consommation de la réaction enzymatique sans la prise en compte des réactions chimiques qui peuvent interagir dans la solution.

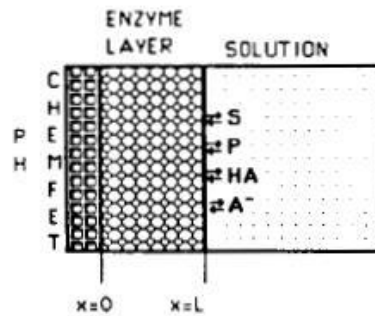


Figure 1.11: Schéma de l'EnFET de Caras [3].

Un autre modèle a été développé, à partir de la modélisation de l'ISFET [23]. Celui-ci très simpliste, partant de l'équation chimique générale de la réaction enzymatique, suppose que la consommation d'une môle d'urée, produise une môle d'ion ammonium (NH^4). De cette équation, ils estiment que la variation de la concentration locale à la surface du capteur de proton est égale à la variation de la concentration d'urée. Ainsi ils en déduisent une relation simple entre la concentration en urée et le pH, ($pH = \alpha * p_{Urée}$), où le coefficient α (inférieur à 1) représente les limitations dues à la diffusion de l'urée dans la solution et les effets du tampon.

Dans la littérature, peu de travaux dédiés à la modélisation des EnFETs ont été réalisés depuis. Ainsi le LAAS a entrepris de réaliser un modèle pour la créatinine-EnFET [24] et l'urée EnFET [25] [26]. Dans les travaux de thèse de Marie-Laure Pourciel-Gouzy un modèle de l'urée-EnFET qui prend en compte les mécanismes enzymatiques décrit par Michaelis-Menten et les réactions acido-basiques, a été proposé. Ce modèle permet d'étudier l'influence du pH initial de la solution et les différentes concentrations des espèces issues de la réaction enzymatique. Quelques hypothèses sont faites, pour s'affranchir de l'effet de la cinétique de réaction, la concentration du substrat est supposée très grande, permettant de dire que la vitesse de réaction en est indépendante. D'après l'équation de Michaelis-Menten, la vitesse de la réaction est ainsi supposée constante et toujours maximale. Ce modèle permet d'intégrer les réactions acido-basiques mais reste à compléter par la prise en compte de la diffusion.

Ainsi, d'après ce que nous avons vu précédemment on peut trouver quelques modèles fiables et assez complets pour les capteurs ampérométriques et conductimétriques, de plus, concernant notre cas ou on envisage d'étudier un capteur EnFET, on retrouve des travaux où les différents phénomènes physico-chimiques liés à la réaction enzymatique, la diffusion des espèces issues de cette réaction enzymatique ou les réactions acido-basiques sont traitées simultanément [27]. Ceci montre la nécessité de développer une autre approche afin de pouvoir simuler le fonctionnement de l'EnFET.

I-4-1-1 Etude théorique

Le principe de détection de créatinine ENFET est basée sur l'utilisation d'une SiO₂ / Si₃N₄ pH-ISFET adapté à la détection enzymatique grâce à une PVA créatinine déiminase riche.

La technologie EnFET fondée sur la mesure de pH avec des ISFET est plus spécialement adaptée à la famille enzymatique des hydrolases. Ce dernier type d'enzyme qui est en effet responsable de l'hydrolyse de la fonction amine NH₂ et ainsi de la production d'ammoniaque NH₄OH en phase aqueuse.

La première étape du fonctionnement de ce capteur est la consommation du substrat par la réaction enzymatique pour produire des molécules NH₃. En présence d'eau, ces molécules vont se transformer en ions ammonium NH₄⁺ afin d'équilibrer les réactions acido-basiques du couple NH₄⁺/NH₃. Le phénomène est connu pour être responsable d'une augmentation de pH. Ainsi nous avons un aperçu des phénomènes physico-chimiques agissant au sein d'une structure enzymatique qui vont être explicités pour le créatinine-EnFET.

I-4-1-2 Détection d'un substrat à partir d'une enzyme

Les enzymes sont des protéines capables de catalyser des réactions chimiques (biocatalyseurs) de manière spécifique. La particularité d'une enzyme est de posséder un site actif. Ce site actif est une petite zone privilégiée de la protéine enzymatique dont la géométrie a une importance considérable sur la spécificité. Il a deux fonctions principales liées à la fixation du substrat et à sa transformation.

Pour exprimer l'activité des enzymes, E.L. Michaelis, M. Menten et V. Henri [17], ont proposé un schéma réactionnel selon lequel un substrat S est transformé en un produit P en passant par l'intermédiaire d'une phase transitoire de création d'un complexe Enzyme-Substrat spécifique.

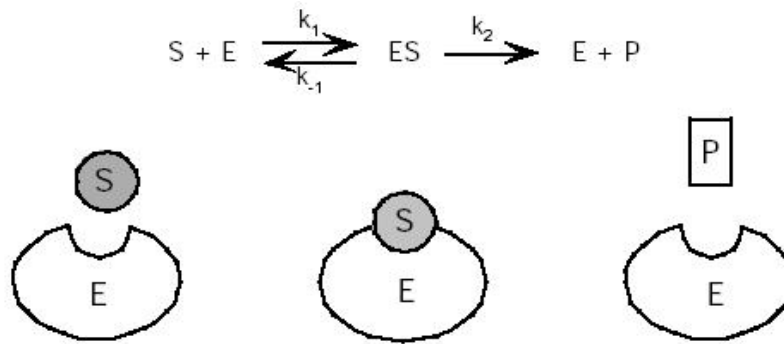


Figure 1.12: Catalyse d'une réaction chimique par une enzyme.

La cinétique de la réaction est donnée par l'équation de Michaelis-Menten

$$v = v_{\max} \frac{[S]}{[S] + K_m} \quad (\text{I-33})$$

où v est la vitesse de la réaction chimique et v_{\max} est sa valeur maximale, $[S]$ est la concentration du substrat en solution et K_M est la constante de Michaelis :

$$K_m = \frac{K_{-1} + K_{-2}}{K_1} \quad (\text{I-34})$$

En fait, v_{\max} est appelé activité enzymatique. Une unité d'activité enzymatique est la quantité d'enzyme qui catalyse la transformation de 1 mole de substrat par minute, soit $a_M = 16,67 \times 10^{-9}$ mol/s.

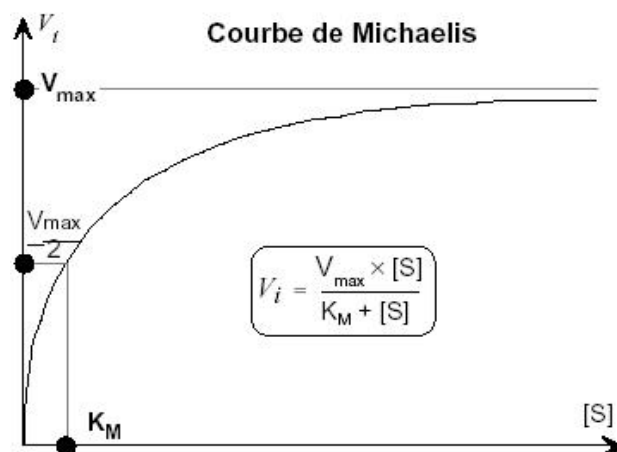


Figure 1.13: Courbe de Michaelis-Menten [17].

Les enzymes sont piégées dans une couche d'alcool polyvinylique (PVA) qui sert de matrice d'immobilisation. Le terme de production/consommation des espèces

biochimiques g exprimé en moles par unité de volume et unité de temps dépend donc du nombre d'unités d'activité enzymatique par unité de volume N_{enz} contenu dans la couche PVA du capteur. Il s'écrit :

$$g = a_m N_{enz} \frac{[S] + K_m}{[S]} \quad (I-35)$$

I-4-2 Détermination de la concentration et du pH

L'acidité ou la basicité d'une solution est déterminé à partir du potentiel d'hydrogène. Ce dernier, a été définie par Sørensen au début du XXe siècle comme étant le cologarithme décimal de la concentration en ions hydrogène [28].

$$PH = -\log(H^+) \quad (I-36)$$

Dans un milieu aqueux, l'ion hydrogène est solvaté par des molécules d'eau et se retrouve sous la forme d'un ion hydronium H_3O^+ , ainsi le pH est en fait une mesure de la concentration de l'ion hydronium donc on a :

$$H^+ = [H_3O^+] \quad (I-37)$$

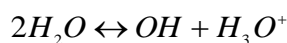
Si on met un acide dans une solution aqueuse, on trouve une base et un ion hydronium. La force d'un acide est donnée par la constante d'acidité K_a , appelée aussi la constante de dissociation, et s'écrit :

$$PH = \frac{[base][H^+]}{[acide]} \quad (I-38)$$

Ainsi plus la constante d'acidité est grande, plus l'acide se dissocie dans l'eau, et donc plus l'acide est fort. Habituellement, dans la littérature c'est le cologarithme de la constante d'acidité qui est utilisé.

$$pka = -\log(ka) \quad (I-39)$$

Comme un composé chimique est considéré électriquement neutre, les charges positives présentes dans une solution sont compensées par la présence de charges négatives opposées. De même le nombre d'anions est égal au nombre de cations, donc on peut constater que l'eau pure se dissocie selon la réaction suivante :



D'après la réaction précédente on peut calculer la constante de dissociation comme suit:

$$Ke = [OH^-][H_3O^+] \quad (I-40)$$

Cette dernière, appelée aussi produit ionique de l'eau, est donnée dans les conditions normales de pression et de température égale à 10^{-14} , donc $pKe = 14$.

Après avoir calculer les concentrations chimiques de toutes les espèces acido-basiques consommées ou produites lors de la réaction enzymatique, et après avoir pris connaissance des réactions chimiques correspondantes, ainsi que les différentes constantes d'acidité on pourra d'établir l'équation d'électroneutralité. La détermination de cette équation nous donne la possibilité de déterminer la fonction pH de la solution en tout point.

I-4-2-1 Détermination de la réponse potentiométrique de l'EnFET

La description du principe de fonctionnement de l'ISFET précédemment, lie de manière simplifiée la tension de seuil V_T au pH par la relation [29] :

$$V_T = V_{T0} + S(pH - pH_{pzc}) \quad (I-41)$$

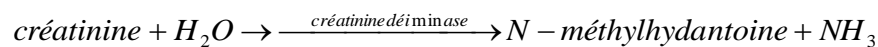
Avec :

- S représente la sensibilité du capteur en mV/pH , elle est donné par l'équation (I - 32).
- V_{T0} est la tension de seuil du capteur ne dépendant que des paramètres technologiques vu dans la section (I-3-2) et elle est présenté par l'équation (I - 15).
- pH_{pzc} : pH au point de charge nulle.

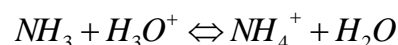
I-4-3 Etude du créatinine ENFET

I-4-3-1 Equations chimiques

La créatinine déiminase est responsable de l'hydrolyse de la créatinine dans une solution aqueuse :



La N-méthylhydantoïne n'ayant aucune propriété acido-basique, cette réaction enzymatique est responsable d'une variation de pH due à la formation d'ammoniac NH_3 en solution aqueuse :



I-4-3-2 Calcul de pH

Le modèle créé se base sur les équations de l'équilibre chimique, de conservation des espèces chimiques et d'électroneutralité. Grace à ces équations nous allons établir une équation qui va nous permettre de déterminer le pH de la solution en fonction de la production enzymatique.

On pose : $[H_3O^+] = h^+$

En considérant les concentrations des différentes espèces chimiques présentes en solution aqueuse, les équations caractéristiques du système chimique NH_4^+/NH_3 donnent:

$$\frac{[NH_3]h^+}{[NH_4^+]} = K_1 \quad (I-42)$$

$$h^+[OH^-] = K_e$$

$$[NH_4^+] + [NH_3] = C_p$$

$$h^+ + [NH_4^+] = [OH^-] + C_t$$

Où:

- K_1 est la constante de dissociation du couple NH_4^+/NH_3 ($K_1 = 5,62 \cdot 10^{-10}$ mol/L).

- K_e est le produit ionique de l'eau ($K_e = 10^{-14}$; $pK_e = 14$).

- C_p est la concentration d'ammoniac produit par la réaction enzymatique.

- C_t est une constante assurant l'électroneutralité de la solution (pour une solution initiale de potentiel hydrogène pH_0 , $C_t = 10^{-pH_0} - 10^{-(pK_e+pH_0)}$).

A partir des équations (I-42), on obtient :

$$h^{+3} + (K_1 + C_p - C_t)h^{+2} - (K_e + K_1C_t)h^+ - K_eK_1 = 0 \quad (I-43)$$

Ce polynôme de troisième degré va permettre de déterminer la concentration d'ions H_3O^+ et ainsi la valeur de potentiel hydrogène ($pH = -\log [H_3O^+]$)

$$g = a_m N_{enz} \frac{[S]K_m}{[S]} \quad (I-44)$$

I-5 Conclusion

Les caractéristiques des capteurs (sensibilité et sélectivité) ne dépendent que des propriétés chimiques des couches ionosensibles. Si l'utilisation d'une électrode de référence ne permet pas leur intégration complète, des solutions, actuellement à l'étude, passent par la fabrication des microélectrodes de pseudo référence en faisant appel aux métaux nobles (or, platine).

Pour expliquer le fonctionnement de cette structure ISFET, la théorie du «Site-Binding» qui semble la seule théorie utilisée à l'heure actuelle a été présentée, ainsi que le modèle de « Gouy-Chapman-Stern » qui décrit la distribution du potentiel dans la couche diffuse de l'interface solide / électrolyte.

Dans ce chapitre Nous avons rappelé dans un premier lieu les principales caractéristiques et le mode de fonctionnement des différentes structures, à savoir le transistor MOSFET à canal N et P.

En deuxième lieu, on a décrit le fonctionnement électrochimique du capteur ISFET. Cette étude va nous permettre de passer à l'étude du capteur EnFET fondée sur la mesure de pH et le développement d'un modèle analytique qui se base sur des équations implicites qui pourront être résolu numériquement, ce qui représente l'inconvénient majeur de ce modèle. Ce problème peut être résolu en utilisant la technique des réseaux de neurones ce qui fera l'objet du chapitre suivant.



Chapitre II

Réseaux de neurones et linéarisation

II.1 Introduction

Dans la première partie de ce chapitre, nous présentons le modèle mathématique que nous emploierons dans les chapitres suivants pour décrire, d'une part, les définitions fondamentales relatives aux réseaux de neurones et, d'autre part, un neurone artificiel, c'est à dire un ensemble de neurones reliés en réseau. Le modèle que nous présentons dans ce chapitre est commun à beaucoup d'architectures. Ensuite nous nous attacherons à détailler le type de réseaux de neurones utilisé dans notre mémoire (MLP), et plus particulièrement ces propriétés et sa mise en œuvre. Pour avoir une idée sur les différents inconvénients des capteurs, la deuxième partie de ce chapitre est consacrée au type d'erreur et de linéarisation des réponses des capteurs.

II.1.1 Modèle d'un neurone

Le neurone artificiel (ou cellule) est un processeur élémentaire. L'idée principale des réseaux de neurones artificiels est de donner une unité simple, un neurone, qui est capable de réaliser quelques calculs élémentaires. Il reçoit un nombre variable d'entrées en provenance de neurones appartenant à un niveau situé en amont. A chacune des entrées est associé un poids w représentatif de la force de la connexion. Chaque processeur élémentaire est doté d'une sortie unique, qui se ramifie ensuite pour alimenter un nombre variable de neurones appartenant à un niveau situé en aval. A chaque connexion est associé un poids [13]. (figure II.1)

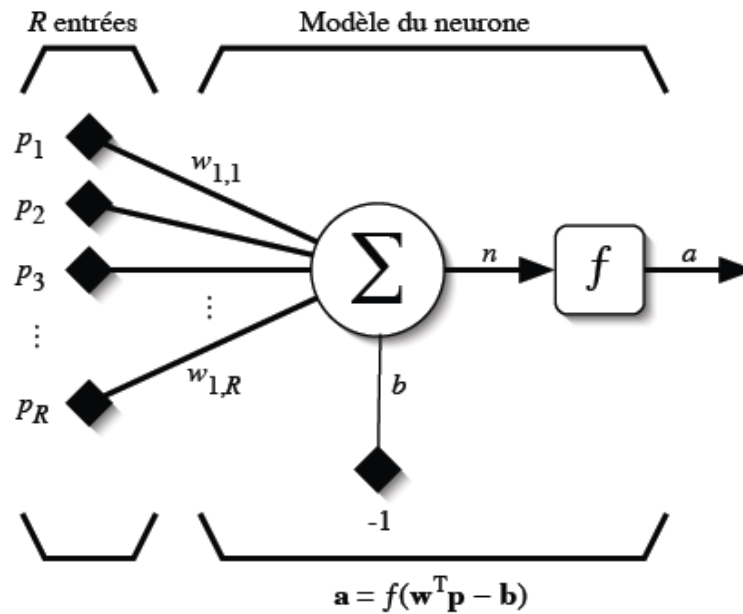


Fig. II.1 - Modèle d'un neurone artificiel

En suivant les notations présentées à la section précédente, les R entrées du neurone correspondent au vecteur $\mathbf{p} = [p_1 p_2 \dots p_R]^T$, alors que $\omega = \omega [\omega_{1,1} \omega_{1,2} \dots \omega_{1,R}]^T$ représente le vecteur des poids du neurone. La sortie n de l'intégrateur est donnée par l'équation suivante :

$$n = \sum_{j=1}^R \omega_{1,j} p_j - b = \omega_{1,1} p_1 + \omega_{1,2} p_2 + \dots + \omega_{1,R} p_{1R} - b, \quad (\text{II-1})$$

Que l'on peut aussi écrire sous forme matricielle :

$$n = W^T \mathbf{p} - b \quad (\text{II-2})$$

Cette sortie correspond à une somme pondérée des poids et des entrées moins le biais b du neurone. Le résultat n de la somme pondérée s'appelle le niveau d'activation du neurone. Le biais b s'appelle aussi le seuil d'activation du neurone. Lorsque le niveau d'activation atteint ou dépasse le seuil b , alors l'argument de f devient positif (ou nul). Sinon, il est négatif.

On peut faire un parallèle entre ce modèle mathématique et certaines informations que l'on connaît à propos du neurone biologique. Dans le cerveau, les neurones sont reliés entre eux par l'intermédiaire d'axones et de dendrites. En première approche, on

peut considérer que ces sortes de filaments sont conductrices d'électricité et peuvent ainsi véhiculer des messages depuis un neurone vers un autre. Les dendrites représentent les entrées du neurone et son axone sa sortie.

Les neurones font une sommation des signaux reçus en entrée et en fonction du résultat obtenu vont fournir un courant en sortie [30]. (figureII.2)

La structure d'un neurone se compose de trois parties :

- La somma : ou cellule d'activité nerveuse, au centre du neurone.
- L'axone : attaché au somma qui est électriquement actif, ce dernier conduit l'impulsion conduite par le neurone.
- Dendrites : électriquement passives, elles reçoivent les impulsions d'autres neurones.

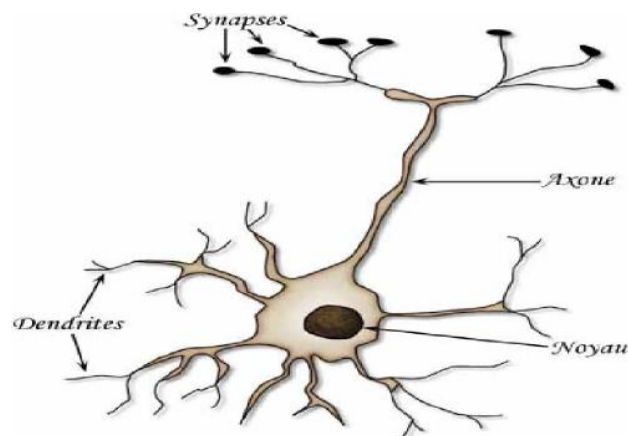


Fig.II.2- Schéma d'un neurone biologique [30]

Un poids d'un neurone artificiel représente donc l'efficacité d'une connexion synaptique. Un poids négatif vient inhiber une entrée, alors qu'un poids positif vient l'accentuer. Il importe de retenir que ceci est une grossière approximation d'une véritable synapse qui résulte en fait d'un processus chimique très complexe et dépendant de nombreux facteurs extérieurs encore mal connus [31].

Un autre facteur limitatif dans le modèle que nous nous sommes donnés concerne son caractère discret. En effet, pour pouvoir simuler un réseau de neurones, nous allons rendre le temps discret dans nos équations. Autrement dit, nous allons supposer que tous

les neurones sont synchrones, c'est-à-dire qu'à chaque temps t , ils vont simultanément calculer leur somme pondérée et produire une sortie $a(t) = f(n(t))$. Dans les réseaux biologiques, tous les neurones sont en fait asynchrones.

Revenons donc à notre modèle tel que formulé par l'équation II.2 et ajoutons la fonction d'activation f pour obtenir la sortie du neurone :

$$a = f(n) = f(\mathbf{w}^T \mathbf{p} - b). \quad (\text{II-3})$$

En remplaçant \mathbf{w}^T par une matrice $\mathbf{W} = \mathbf{w}^T$ d'une seule ligne, on obtient une forme générale que nous adopterons tout au long de cet ouvrage :

$$a = f(\mathbf{W}\mathbf{p} - b) \quad (\text{II-4})$$

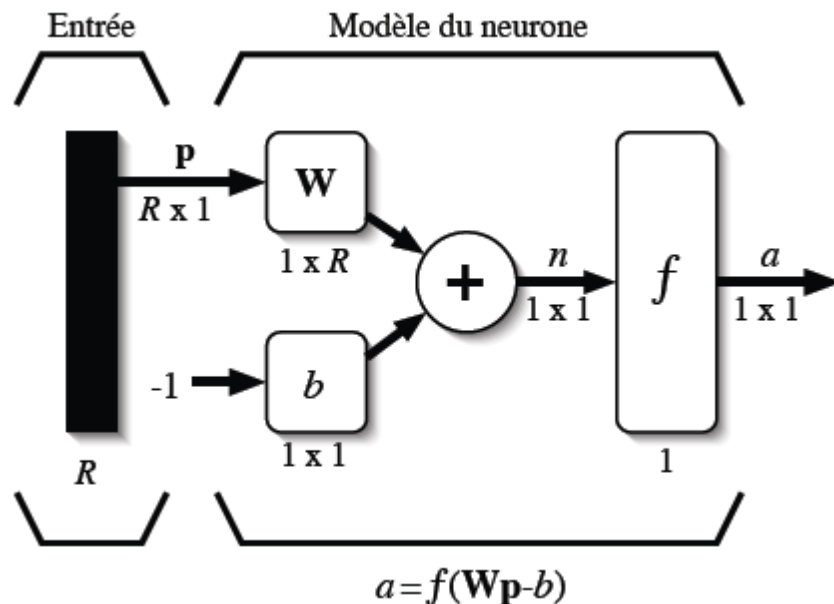


Fig.II.3 - Représentation matricielle du modèle d'un neurone artificiel

L'équation II.4 nous amène à introduire un schéma de notre modèle plus compact que celui de la figure II.1. La figure II.3 illustre celui-ci. On y représente les R entrées comme un rectangle noir (le nombre d'entrées est indiqué sous le rectangle). De ce rectangle sort le vecteur \mathbf{p} dont la dimension matricielle est $R \times 1$. Ce vecteur est multiplié par une matrice \mathbf{W} qui contient les poids (synaptiques) des neurones. Dans le cas d'un neurone simple, cette matrice possède la dimension $1 \times R$. Le résultat de la










multiplication correspond au niveau d'activation qui est ensuite comparé au seuil b (un scalaire) par soustraction. Finalement, la sortie du neurone est calculée par la fonction d'activation f . La sortie d'un neurone est toujours un scalaire.

II.1.2 Fonctions de transfert

Jusqu'à présent, nous n'avons pas spécifié la nature de la fonction d'activation de notre modèle. Il se trouve que plusieurs possibilités existent. Différentes fonctions de transfert pouvant être utilisées comme fonction d'activation du neurone sont énumérées au tableau II.1. Les trois les plus utilisées sont les fonctions «seuil» (en anglais «hard limit»), «linéaire» et «sigmoïde».

Comme son nom l'indique, la fonction seuil applique un seuil sur son entrée. Plus précisément, une entrée négative ne passe pas le seuil, la fonction retourne alors la valeur 0 (on peut interpréter ce 0 comme signifiant faux), alors qu'une entrée positive ou nulle dépasse le seuil, et la fonction retourne 1 (vrai). Utilisée dans le contexte d'un neurone, cette fonction est illustrée à la figure II.4a. On remarque alors que le biais b dans l'expression de $a = \text{hardlim}(\mathbf{w}^T \mathbf{p} - b)$ (équation II.4) détermine l'emplacement du seuil sur l'axe $\mathbf{w}^T \mathbf{p}$, ou la fonction passe de 0 à 1. Nous verrons plus loin que cette fonction permet de prendre des décisions binaires.

Le tableau II-1 résume les fonctions de transfert couramment utilisées.

Nom de la fonction	Relation d'entrée/sortie	Icône	Nom Matlab
seuil	$a = 0$ si $n < 0$ $a = 1$ si $n \geq 0$		hardlim
seuil symétrique	$a = -1$ si $n < 0$ $a = 1$ si $n \geq 0$		hardlims
linéaire	$a = n$		purelin
linéaire saturée	$a = 0$ si $n < 0$ $a = n$ si $0 \leq n \leq 1$ $a = 1$ si $n > 1$		satlin
linéaire saturée symétrique	$a = -1$ si $n < -1$ $a = n$ si $-1 \leq n \leq 1$ $a = 1$ si $n > 1$		satlins
linéaire positive	$a = 0$ si $n < 0$ $a = n$ si $n \geq 0$		poslin
sigmoïde	$a = \frac{1}{1+\exp^{-n}}$		logsig
tangente hyperbolique	$a = \frac{e^n - e^{-n}}{e^n + e^{-n}}$		tansig
compétitive	$a = 1$ si n maximum $a = 0$ autrement		compet

TAB. II.1 – Fonctions de transfert $a = f(n)$

La fonction linéaire est très simple, elle affecte directement son entrée à sa sortie :

$$a = n. \tag{II-5}$$

Appliquée dans le contexte d'un neurone, cette fonction est illustrée à la figure II.4b. Dans ce cas, la sortie du neurone correspond à son niveau d'activation dont le passage à zéro se produit lorsque $\mathbf{w}^T \mathbf{p} = b$.

La fonction de transfert sigmoïde est quant à elle illustrée à la figure II.4c. Son équation est donnée par :

$$a = \frac{1}{1+\exp^{-n}} \tag{II.6}$$

Elle ressemble soit à la fonction seuil, soit à la fonction linéaire, selon que l'on est loin ou près de b , respectivement. La fonction seuil est non-linéaire car il y a une

discontinuité lorsque $\mathbf{w}^T \mathbf{p} = b$. De son côté, la fonction linéaire est tout à fait linéaire. Elle ne comporte aucun changement de pente. La sigmoïde est un compromis intéressant entre les deux précédentes. Notons finalement, que la fonction «tangente hyperbolique» est une version symétrique de la sigmoïde.

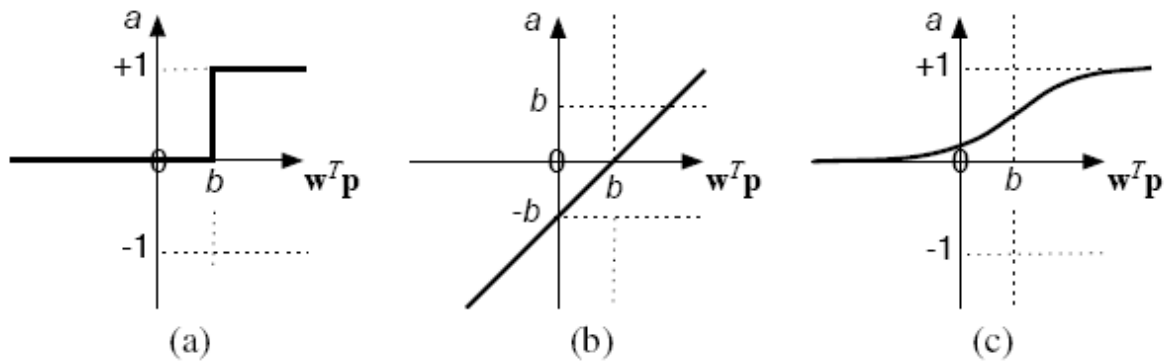


Fig. II.4 – Fonction de transfert : (a) du neurone «seuil» ; (b) du neurone «linéaire», et (c) du neurone «sigmoïde»

II.1.3 Architecture de réseau

Un réseau de neurones est un maillage de plusieurs neurones, généralement organisé en couches. Pour construire une couche de S neurones, il s’agit simplement de les assembler comme à la figure II.5. Les S neurones d’une même couche sont tous branchés aux R entrées. On dit alors que la couche est totalement connectée.

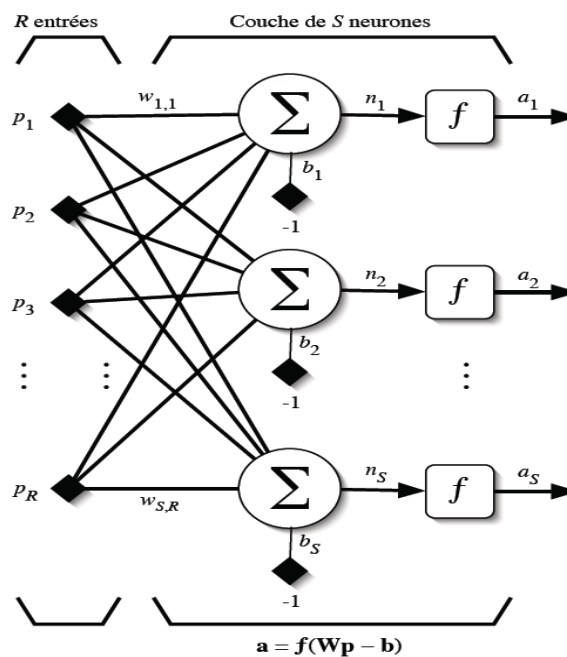


Fig. II.5 – Couche de S neurones

Un poids w_{ij} est associé à chacune des connexions. Nous noterons le premier indice par i et le deuxième par j . Le premier indice (rangée) désigne toujours le numéro de neurone sur la couche, alors que le deuxième indice (colonne) spécifie le numéro de l'entrée. Ainsi, w_{ij} désigne le poids de la connexion qui relie le neurone i à son entrée j . L'ensemble des poids d'une couche forme donc une matrice \mathbf{W} de dimension $S \times R$:

$$\mathbf{W} = \begin{bmatrix} w_{1,1} & w_{1,2} & \dots & w_{1,R} \\ w_{2,1} & w_{2,2} & \dots & w_{2,R} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ w_{S,1} & w_{S,2} & \dots & w_{S,R} \end{bmatrix} \quad (\text{II.7})$$

Notez bien que $S \neq R$, dans le cas général (les nombres de neurones et d'entrées sont indépendants). Si l'on considère que les S neurones forment un vecteur de neurones, alors on peut créer les vecteurs $b = [b_1 b_2 \dots b_S]^T$, $n = [n_1 n_2 \dots n_S]^T$ et $a = [a_1 a_2 \dots a_S]^T$. Ceci nous amène à la représentation graphique simplifiée, illustrée à la figure II.6. On y retrouve, comme à la figure II.3, les mêmes vecteurs et matrice. La seule différence se situe au niveau de la taille, ou plus précisément du nombre de rangées (S), de b , n , a et \mathbf{W} .

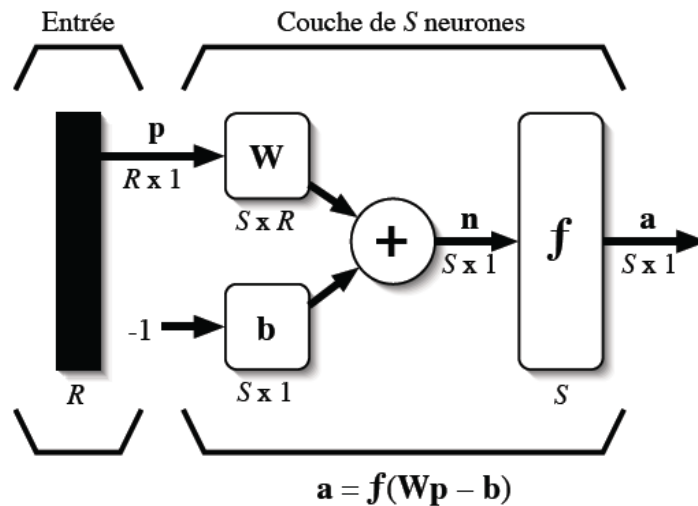


Fig. II.6 – Représentation matricielle d'une couche de S neurones

Finalement, pour construire un réseau, il ne suffit plus que de combiner des couches comme à la figure II.7. Cet exemple comporte R entrées et trois couches de neurones comptant respectivement S1, S2 et S3 neurones. Dans le cas général, de nouveau, S¹, S², S³. Chaque couche possède sa propre matrice de poids W^k, où k désigne l'indice de couche. Dans le contexte des vecteurs et des matrices relatives à une couche, nous emploierons toujours un exposant pour désigner cet indice. Ainsi, les vecteurs b^k, n^k et a^k sont aussi associés à la couche k.

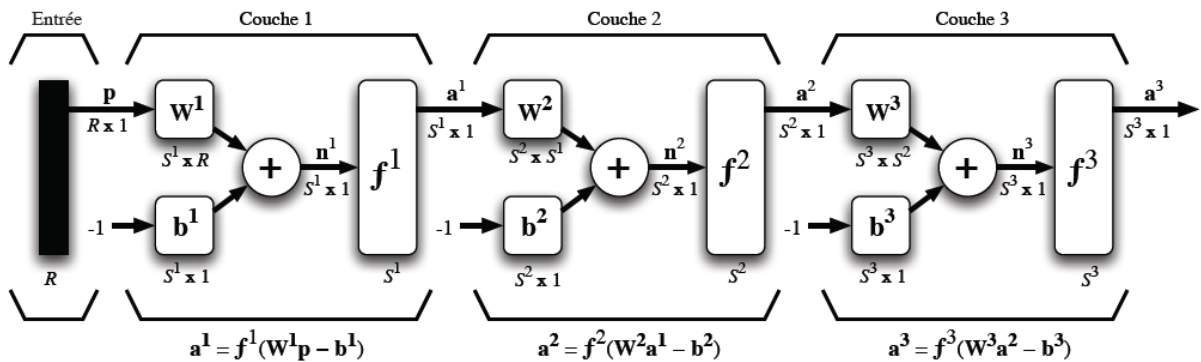


Fig. II.7 – Représentation matricielle d'un réseau de trois couches

Il importe de remarquer dans cet exemple que les couches qui suivent la première ont comme entrée la sortie de la couche précédente. Ainsi, on peut enfileur autant de couche que l'on veut, du moins en théorie. Nous pouvons aussi fixer un nombre quelconque de neurones sur chaque couche. En pratique, il n'est cependant pas souhaitable d'utiliser trop de neurones. Finalement, notez aussi que l'on peut changer de fonction de transfert d'une couche à l'autre. Ainsi, toujours dans le cas général $f^1 \neq f^2 \neq f^3$.

La dernière couche est nommée «couche de sortie». Les couches qui précèdent la couche de sortie sont nommées «couches cachées». Le réseau de la figure II.7 possède donc deux couches cachées et une couche de sortie.

Les réseaux multicouches sont beaucoup plus puissants que les réseaux simples à une seule couche. En utilisant deux couches (une couche cachée et une couche de sortie), à condition d'employer une fonction d'activation sigmoïde sur la couche cachée, on peut entraîner un réseau à produire une approximation de la plupart des fonctions, avec une précision arbitraire (cela peut cependant requérir un grand nombre de neurones

sur la couche cachée). Sauf dans de rares cas, les réseaux de neurones artificiels exploitent deux ou trois couches.

Entraîner un réseau de neurones signifie modifier la valeur de ses poids et de ses biais pour qu'il réalise la fonction entrée/sortie désirée. Pour spécifier la structure du réseau, il faut aussi choisir le nombre de couches et le nombre de neurones sur chaque couche.

Tout d'abord, rappelons que le nombre d'entrées du réseau (R), de même que le nombre de neurones sur la couche de sortie est fixé par les spécifications du problème que l'on veut résoudre avec ce réseau. Par exemple, si la donnée du problème comporte quatre variables en entrée et qu'elle exige de produire trois variables en sortie, alors nous aurons simplement $R = 4$ et $S^M = 3$, où M correspond à l'indice de la couche de sortie (ainsi qu'au nombre de couches). Ensuite, la nature du problème peut aussi nous guider dans le choix des fonctions de transfert. Par exemple, si l'on désire produire des sorties binaires 0 ou 1, alors on choisira probablement une fonction seuil pour la couche de sortie. Il reste ensuite à choisir le nombre de couches cachées ainsi que le nombre de neurones sur ces couches, et leur fonction de transfert. Il faudra aussi fixer les différents paramètres de l'algorithme d'apprentissage. Mais nous y reviendrons en temps et lieu !

Finalement, la figure II.8 illustre le dernier élément de construction que nous emploierons pour bâtir des réseaux dit «récurrents».

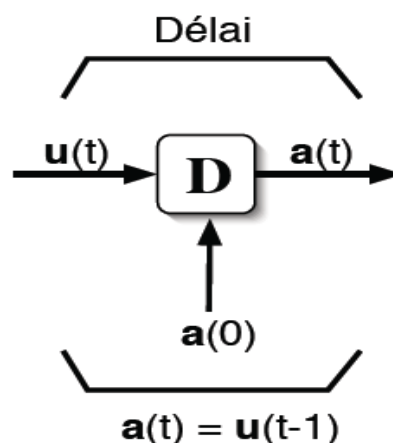


Fig. II.8 – Élément de retard

Il s'agit d'un registre à décalage qui permet d'introduire un retard dans une donnée que l'on veut acheminer dans un réseau. La sortie retardée $a(t)$ prend la valeur de l'entrée u au temps $t - 1$. Cet élément de retard présuppose que l'on peut initialiser la sortie au temps $t = 0$ avec la valeur $a(0)$. Cette condition initiale est indiquée à la figure II.8 par une flèche qui entre par le bas de l'élément.

II.1.4 Le perceptron multicouches

Parmi les types des réseaux de neurones les plus utilisés on trouve le MLP avec son algorithme d'apprentissage, la rétropropagation des erreurs. Le perceptron multicouche est un réseau orienté de neurones artificiels organisé en couches, où l'information voyage dans un seul sens, de la couche d'entrée vers la couche de sortie. Le perceptron multicouches (noté MLP pour Multi Layer Perceptron en anglais) est directement inspiré du raisonnement présenté au dessus. L'idée principale est de grouper des neurones dans une couche. On place ensuite bout à bout plusieurs couches et connecte complètement les neurones de deux couches adjacentes. La couche d'entrée présente toujours une couche virtuelle associée aux entrées du système, elle ne contient aucun neurone. Les couches suivantes sont des couches de neurones. Les entrées des neurones de la deuxième couche sont donc en fait les sorties des neurones de la première couche. Les neurones de la première couche sont reliés au monde extérieur et reçoivent tous le même vecteur d'entrée (c'est en fait l'entrée du réseau). Ils calculent alors leur sorties qui sont transmises aux neurones de la deuxième couche, etc. Les sorties des neurones de la dernière couche forment la sortie du réseau [32].

II.1.5 L'apprentissage (supervisé)

L'apprentissage neuronal fait appel à des exemples de comportement. Soit une base d'apprentissage constituée de N exemples, chacun étant constitué d'un vecteur $x(n)$ appliqué aux entrées du réseau, et du vecteur ' $d(n)$ ' des valeurs désirées correspondantes pour les sorties, le vecteur ' $y(n)$ ' correspond à la sortie du réseau pour l'entrée ' $X(n)$ '. On suppose aussi que le réseau de neurones possède un nombre ' r ' de neurones de sortie. En ajustant les paramètres d'un MLP, on peut lui faire calculer toute sorte de fonction. Si on se donne une fonction vectorielle particulière, on peut tenter de faire apprendre cette fonction par un MLP : c'est l'apprentissage. La méthode classique pour l'apprentissage supervisé consiste à se donner un ensemble d'exemples,

c'est à dire un ensemble fini de couple de vecteurs (x_i, y_i) . Dans un tel couple, x_i désigne l'entrée du réseau et y_i la sortie désirée pour cette entrée. On écrit alors la fonction calculée par le réseau sous une forme paramétrique : $f(x, w)$ désigne la sortie du réseau quand on lui présente en entrée le vecteur x et qu'il utilise les poids synaptiques contenus dans le vecteur w . On se donne enfin une distance sur l'espace vectoriel de sortie, c'est à dire un moyen de mesurer l'erreur commise en un point par le réseau. Si cette distance est notée d , on cherche alors à trouver la valeur de w qui minimise la somme d'erreur totale commise par le réseau, c'est à dire la somme des distances entre les sorties obtenues et les sorties désirées, c'est à dire somme des $d(f(x_i, w), y_i)$. Cette erreur est une fonction de w et on peut donc utiliser les techniques classiques d'optimisation de fonction pour trouver son minimum [33].

II.1.6 La rétro-propagation

L'apprentissage du MLP est attaché à l'algorithme de la rétropropagation des erreurs, cet algorithme, utilisée par les réseaux multicouches, consiste simplement en une descente de gradient, qui est une méthode d'optimisation universelle. On cherche à minimiser une fonction de coût (qui représente l'erreur entre la sortie désirée et la sortie obtenue), en suivant les lignes de plus grande pente. Les algorithmes d'optimisation de fonction efficaces utilisent en général la différentielle de la fonction considérée (c'est à dire son gradient car elle est à valeurs réelles). Quand les fonctions de transfert utilisées dans les neurones sont différentiables, et quand la fonction distance est aussi différentiable, l'erreur commise par un MLP est une fonction différentiable des coefficients synaptiques du réseau. L'algorithme de rétro-propagation permet justement de calculer le gradient de cette erreur de façon efficace : le nombre d'opérations (multiplications et additions) à faire est en effet proportionnel au nombre de connexions du réseau, comme dans le cas du calcul de la sortie de celui-ci. Cet algorithme rend ainsi possible l'apprentissage d'un MLP [32].

II.2.1 Erreurs dans la courbe de transfert de capteur

Dans la production de capteur on désire produire de grandes séries de capteur à la fois, et qui répondent tous selon la même fonction transfert. Pour vérifier ceci les capteurs ont pu être mesurés individuellement. Quand on mesure le transfert d'un

capteur nous pouvons être confrontés avec un ou plusieurs types d'erreurs suivantes [34]:

Offset: quand un signal physique d'entrée zéro (ou minimum) est appliqué, et le signal de sortie mesuré n'est pas zéro (ou minimum de gamme de sortie) il donne la valeur d'offset.

Gain, gamme, ou erreur plein échelle (full-scale error) : Le signal physique d'entrée maximum n'est pas exprimé par un signal électrique de sortie maximum.

Non linéarité : La variation de la sortie du capteur ne change pas linéairement avec la variation du signal physique d'entrée.

Sensibilité multiple : Le capteur est non seulement sensible au signal d'entrée mais également à d'autres paramètres.

Hystérésis : La réponse du capteur peut avoir deux valeurs différentes pour une même grandeur physique suivant un cycle (croissant ou décroissant). La différence entre ces deux valeurs donne la valeur de l'hystérésis.

Dérive de l'offset: La courbe de transfert du capteur change lentement avec le temps.

Les erreurs sont expliquées graphiquement dans la figure .II.9. Généralement, certaines de ces erreurs sont plus grandes que l'exactitude désirée. Pour corriger ces erreurs, tous les capteurs devraient être mesurés et calibrés individuellement pour garantir l'exactitude.

On peut observer les erreurs de Gain d'offset et également de linéarité et de sensibilité multiple pratiquement pour tous les types de capteurs.

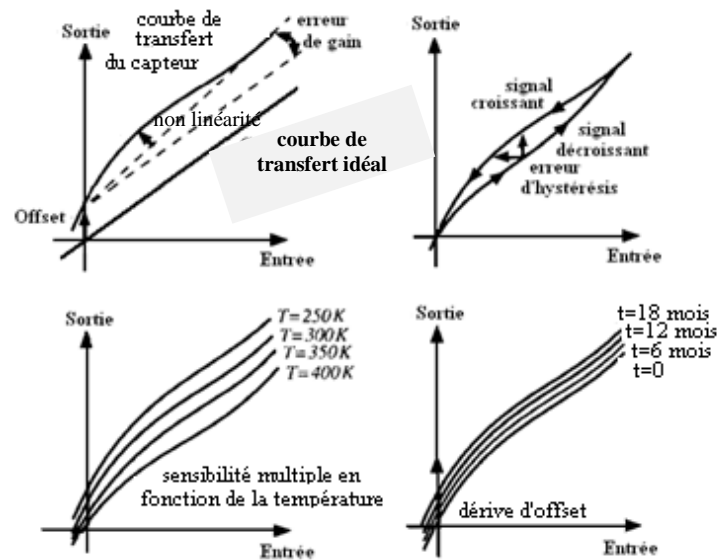


Fig. II.9 – Erreurs des courbes de transfert des capteurs [32].

Les erreurs d'hystérésis et de la dérive de l'offset doivent être examinées pour quelques types de capteurs, mais ils peuvent être négligés pour d'autres capteurs. Bien qu'ils puissent être compliqués, les erreurs d'hystérésis pourraient être calibrées. Cependant, d'autres solutions de capteurs spécifiques devraient être considérées car elles sont moins compliquées ou fournissent de meilleurs résultats. Les erreurs de la dérive de l'offset sont difficiles à compenser car ils exigeraient la prévision des futures erreurs « extrapolation », et la mesure de temps de réponse. Parfois il est possible de réduire la dérive de l'offset du capteur au moyen de calibrage-individuel, à l'aide d'un capteur additionnel.

II.2.2 Fonction de transfert de capteurs

Si nous voulons examiner des capteurs avec une sensibilité à une autre grandeur physique d'entrée, nous devons considérer la courbe de transfert du capteur en tant que deux fonctions. Nous pouvons exprimer la sortie électrique du capteur e_{out} comme fonction S de signal d'entrée de deux signaux physiques d'entrées φ_{in} et ψ_{in} .

$$e_{out} = S(\varphi_{in}, \psi_{in}) \quad (II-8)$$

Encore, nous pouvons transformer le signal de sortie électrique à un signal de sortie normalisée y , et les variables physiques d'entrée pour normaliser les signaux d'entrée x et z . Nous pouvons alors examiner la fonction de transfert bidimensionnelle

normalisée $y = f(x,y)$. Dans le cas idéal, la sortie normalisée y devrait dépendre linéairement de la variable d'entrée x avec l'unité de gain, mais indépendante de l'autre entrée z (gain à zéro).

Ainsi la fonction normalisée idéale est donnée par le $y = g(x, y) = x$. les deux fonctions bidimensionnelles de transfert peuvent être présentées graphiquement comme une surface tridimensionnelles d'une image « 3D ». Les exemples sont montrés dans la figure II.10 dans ce cas, le but du calibrage est de traiter la fonction de transfert à capteur $f(X, Z)$ de telle manière que la fonction qui résulte $h(X, Z)$, laquelle ressemble à une fonction linéaire $g(X, Z)$ ceci exigera le calibrage des mesures $f(X_n, Z_m)$ pour différentes conditions d'entrée définis par $X_n [n=1 \text{ à } N]$ et $Z_m [m=1 \text{ à } M]$.

Le nombre de mesures de ceci s'appelle la calibration $N \times M$, nous pouvons définir l'erreur des deux dimensions de la surface par :

$$\varepsilon(X, Z) = h(X, Z) - g(X, Z). \tag{II.9}$$

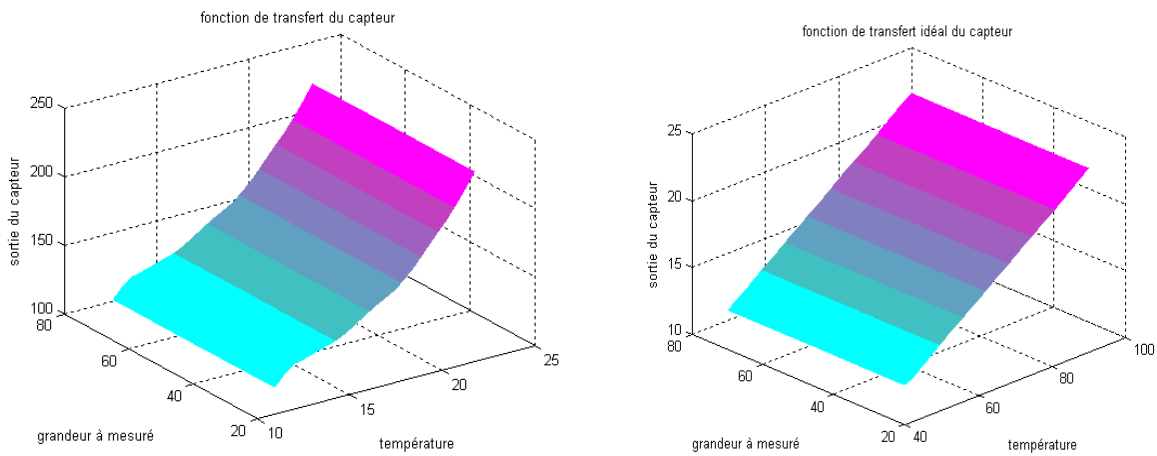


Fig.II.10 –Linéarisation idéale de la fonction de transfert

II.2.3 Linéarisation

La plupart des capteurs montrent une caractéristique de transfert non-linéaire, qui peut être représentée par un modèle physique. Le calibrage exigé peut être simplifié en appliquant d'abord une linéarisation systématique, les variations aléatoires restantes de

la non-linéarité peuvent être alors calibrées en utilisant une méthode générale de linéarisation. De telles méthodes sont appliquées directement pour des capteurs à fonction de transfert plus ou moins linéaire, montrant seulement les erreurs de linéarité qui changent aléatoirement d'un dispositif à un autre. Ce qui suit explique quelques méthodes de linéarisation. Toutes ces méthodes sont basées sur l'utilisation de calibrage des mesures du signal de sortie du capteur. En plus pour linéariser le signal de sortie, le calibrage des mesures est également employé pour corriger l'erreur d'offset et de gain.

II.2.4 Linéarisation de caractéristique de capteur

Certains capteurs montrent une réponse non linéaire, d'une forme de non linéarité connue. Comme une erreur systématique devrait de préférence être corrigée par une linéarisation systématique, plutôt qu'au moyen d'interpolation des mesures multiples de calibrage. Un capteur avec une courbe de transfert logarithmique pourrait être écrit sous la forme de l'équation (II-10) avec a , b , c , et d sont des constantes dépendantes du capteur.

$$e_s = f(\varphi) = a + b \cdot \ln(c + d\varphi) \quad (\text{II-10})$$

Une courbe de transfert logarithmique peut facilement être linéarisée en utilisant un circuit électronique avec une fonction de transfert exponentielle « figure II.11 ». Nous pourrions employer la relation exponentielle entre la tension V_{be} et le courant de collecteur d'un transistor bipolaire. Le signal de sortie de capteur e_s est la tension V_{be} , et le courant de collecteur I_C est converti à une tension de sortie V_{out} par un convertisseur pour le transfert global de capteur et du circuit que nous réalisons.

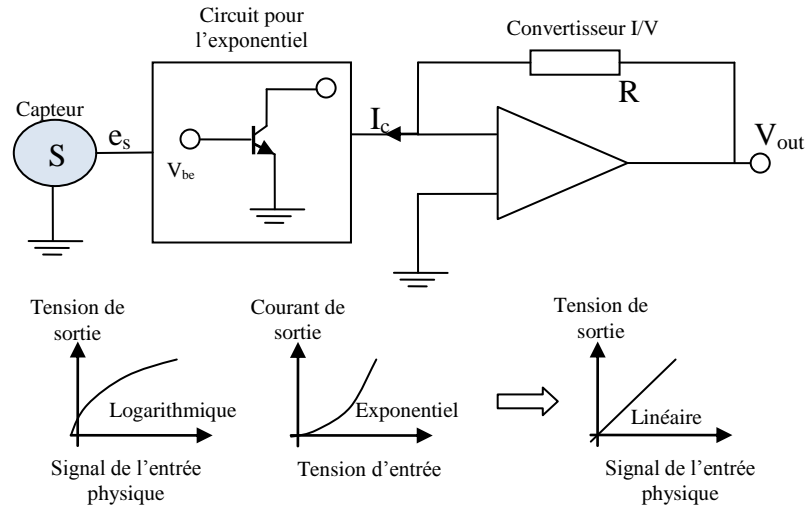


Fig.II.11–Linéarisation de caractéristique du capteur

$$\begin{cases} V_{out} = h(\varphi) = R I_c = R e^{K_T V_{be}} \\ \quad = R e^{K_T \{a + b \ln(c + d \varphi)\}} \\ \quad = R e^{a K_T} e^{b K_T} (c + d \varphi) \end{cases} \quad (II-11)$$

Ce qui peut être écrit sous une forme simplifiée comme :

$$h(x) = A + B.x \quad (II-12)$$

II.2.5 Linéarisation basée sur l'ajustement de courbe « Curve-fitting »

Il est possible de contrecarrer le transfert non-linéaire du capteur avec un transfert inversement non linéaire quand l'expression de la courbe de transfert du capteur est connue. Il est également possible quand la fonction de transfert du capteur n'est pas connue avec précision mais est seulement caractérisée par quelques mesures de calibrage. Les techniques d'ajustement de courbe « Curve-fitting » de précision permettent de calculer une fonction mathématique qui intersecté la fonction réelle de capteur dans les points de mesure [35].

Ceci est habituellement fait en définissant une somme de poids « weighted » d'expressions basées sur la sortie de capteur $y = f(x)$. Les facteurs de poids sont calculés sur la base du $f(X_n)$ de la fonction de transfert du capteur. On peut alors essayer de

calculer la fonction inverse exacte de la fonction trouvée d'ajustement de courbe. Une meilleure approche est de composer une fonction $H[f(x)]$ d'ajustement de courbe pour le transfert inverse du capteur. L'ajustement de courbe se rapporte alors à assortir la fonction de transfert résultante $h(x) = [f(x)]$ de la fonction de transfert linéaire désirée $g(x)$. La fonction de linéarisation peut être exprimée sous la forme suivante :

$$h(x) = \sum_{n=0}^N C_n \cdot E_n\{f(x)\} \quad (\text{II-13})$$

L'expression dépend de la technique spécifique d'ajustement de courbe utilisée, et pourrait être, par exemple, une fonction sinusoïdale, exponentielle ou polynôme de l'ordre croissant (n). Le facteur de poids C_n , également désigné sous le nom des coefficients de calibrage, sont calculés, en utilisant les mesures de calibrage $f(X_n)$ et les valeurs correspondantes pour le transfert désiré $g(X_n)$.

Les calculs exigés peuvent se devisés en deux groupes. D'abord, le calcul des valeurs correctes pour les coefficients de calibrage pendant ou après la phase de calibrage. Ceci peut être fait extérieurement du capteur (sur un ordinateur). Le calcul secondaire du signal de sortie linéarisé basé sur la sortie et les coefficients de calibrage. Cette correction doit être intégrée avec le capteur intelligent, dans le matériel analogue ou numérique, ou dans le logiciel dans un microcontrôleur connectant le capteur. La mémoire doit être présente pour stocker les coefficients de calibrage.

Conclusion

La majorité des capteurs montrent différentes erreurs de mesure, la connaissance de ces erreurs nous permet de les corriger. Cette correction peut être effectuée à partir d'un modèle de réseau de neurones, on peut construire des perceptrons multicouches. Ces outils permettent de calculer des fonctions vectorielles, adaptables à un ensemble d'exemples par le biais d'algorithmes d'optimisation utilisant la technique de la rétro-propagation. De cette façon, on peut espérer faire apprendre une fonction complexe à un MLP, contenant assez peu de neurones. On obtiendra ainsi une modélisation analytique compacte à partir de fonction obtenue expérimentalement.



Chapitre III

**Modélisation du capteur ENFET par les
ANN**

Introduction

L'objectif de ce troisième chapitre est de créer un modèle à base des réseaux de neurone « ANN-model » pour le substituer à la réponse du modèle utilisé (modèle EnFET « Chapitre I ») et de la modélisation statique des réseaux de neurones « Chapitre II » réalisés à l'aide du logiciel **Matlab**.

La construction d'un modèle à base d'ANN pour l'EnFET, est de reproduire fidèlement son comportement lors de la phase de conception du capteur intelligent (chapitre IV). Autrement dit, ce modèle servira à la simulation comportementale du capteur intelligent, vu que le modèle analytique de l'EnFET est limité à des conditions moins dynamiques.

III-1 Résultat de simulation pour le créatinine-EnFET du capteur

Dans cette section nous allons présenter une simulation du capteur EnFET effectué par l'application du modèle analytique présenté dans le chapitre (I) utilisant **Matlab**, de ce fait nous avons utilisé les paramètres suivants :

-Constante de Michaelis $K_m = 3,5 \cdot 10^{-3}$ mol/l pour la créatinine déiminase.

-nombre d'unités enzymatiques par unité de volume : $N_{enz} = 10$ unités/cm⁻³.

-pH de la solution initiale : $pH_0 = 7.5$.

Finalement, le créatinine-EnFET a été étudié dans la gamme de concentration de créatinine en solution [10^{-7} ; 10^{-2} mol/l].

Il est facile de définir trois paramètres influents sur la réponse du capteur tel que :

La constante de Michaelis K_M , le nombre d'unités enzymatiques par unité de volume N_{enz} et le potentiel hydrogène initial de la solution pH_0 .

III-1-2 Influence du potentiel d'hydrogène initial pH_0

La figure III.1 représente les différentes réponses potentiométriques du capteur créatinine-EnFET pour divers valeurs du potentiel hydrogène de la solution initiale pH_0 (pour $K_M = 3,5 \cdot 10^{-3}$ mol/L, $N_{enz}=100$ unités/cm⁻³). Etant donné que le principe de détection choisi est basé sur la mesure du pH, l'influence du potentiel hydrogène initial pH_0 est une évidence.

La réaction enzymatique va consommer la créatinine pour produire l'ammoniac responsable de l'augmentation de la basicité. Plus la consommation de créatinine est importante, plus le pH va augmenter. De même plus le milieu est acide, plus la quantité d'ammoniac nécessaire à cette variation doit être grande, et donc plus la quantité de créatinine à consommer doit être importante.

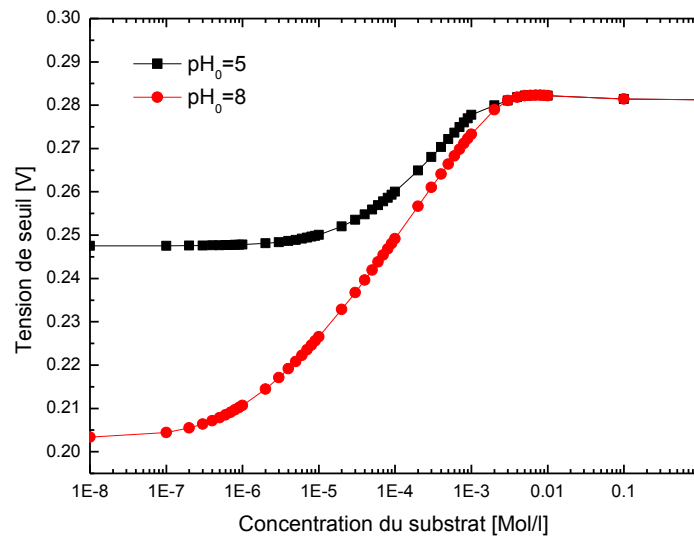


Fig III.1-Réponse du capteur ENFET en fonction des différentes valeurs du potentiel hydrogène pH_0 .

III-1-3 Influence de la constante de Michaelis

La figure III.2 présente l'évolution de la tension de seuil du créatinine-EnFET en fonction de la concentration du substrat pour différentes valeurs de la constante de Michaelis (K_M) avec ($N_{enz}=10$ unités/cm³, $pH_0 = 7,5$).

En observant la figure III.2 on trouve qu'il ya une forte insensibilité et saturation pour les plus faibles et les plus fortes concentrations de K_M , par contre dans la zone intermédiaire il existe une réponse linéaire entre tension de seuil V_T mais avec une sensibilité moyenne.

Sachant que la constante de Michaelis est une donnée d'une enzyme, elle traduit son affinité avec son substrat. En fait, elle caractérise la vitesse de la réaction. Plus la valeur est faible, plus la réaction est rapide. Dans le modèle la constante de Michaelis intervient dans la fonction de génération/consommation d'espèces par la réaction enzymatique $g(x)$ équation (I.44) chapitre I.

Cette équation explique bien les observations de la courbe. Lorsque la valeur de la constante de Michaelis est négligeable devant la concentration du substrat domine, le terme de génération g est maximal. Donc pour avoir une variation de pH, il faut que la concentration de créatinine prend des très grandes valeurs vis-à-vis la valeur de K_M . Finalement, on peut

constater que plus le K_M augmente plus la concentration de créatinine doit être importante pour avoir une bonne réponse du capteur.

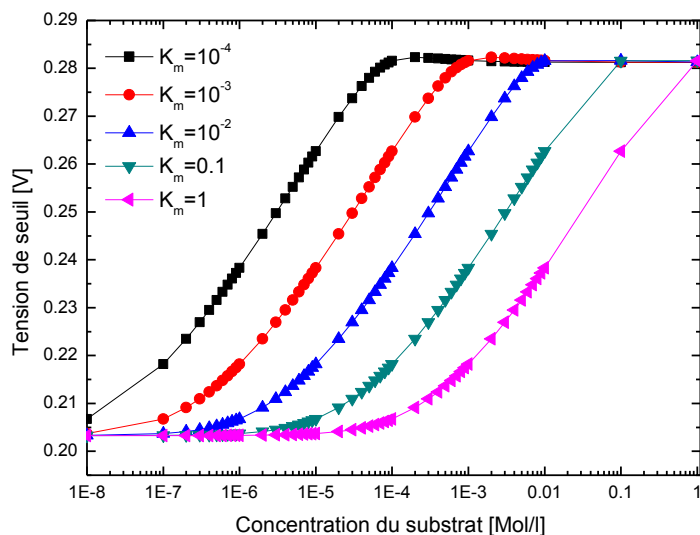


Fig III.2-Réponse du capteur EnFET en fonction des différentes valeurs de constante de Michaelis K_m .

III-1-4 Influence de la quantité d'enzyme

Evolution de la tension de seuil du créatinine-EnFET en fonction de la concentration du substrat pour différentes valeurs de nombre d'unités enzymatiques par unité de volume de PVA (N_{enz}). La figure III.3 représente les différentes réponses potentiométriques du créatinine-EnFET pour différentes valeurs de la concentration enzymatique N_{enz} avec ($K_M = 3,5 \cdot 10^{-3}$ mol/L, $pH_0 = 7,5$). Il apparaît clairement que le nombre d'unités enzymatiques par unité de volume N_{enz} influence la sensibilité du créatinine-EnFET. Cette dernière augmente avec le nombre d'unités enzymatiques par unité de volume. De plus, il est clair que la quantité d'enzyme (N_{enz}) contribue aussi dans la génération/consommation d'espèces de la réaction enzymatique décrite par l'équation (I-44) chapitre I. La diffusion du substrat vient alors limiter la sensibilité. Donc, le changement de pH est contrôlé par la quantité d'enzyme contenue dans la membrane, jusqu'à une limite fixée par la diffusion du substrat.

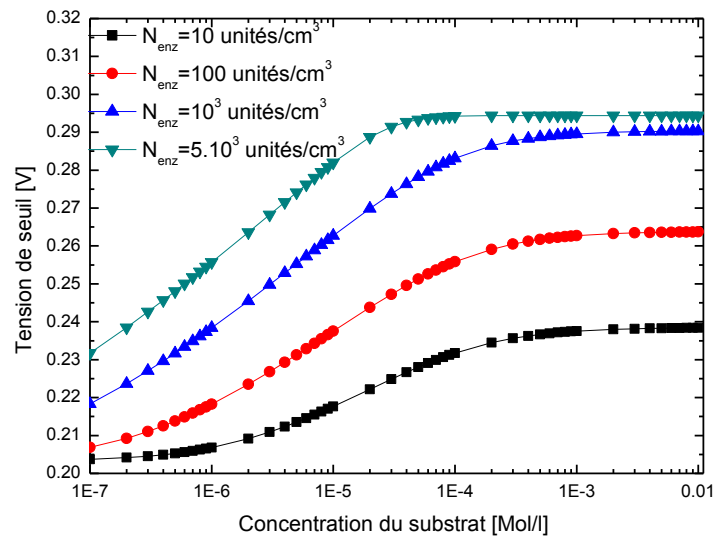


Fig III.3-Réponse du capteur EnFET en fonction des différentes valeurs de la quantité d'enzyme N_{enz} .

III.2. Modélisation du capteur

Pour créer le modèle ANN du capteur enzymatique au moyen des réseaux de neurones on choisi en premier lieu une base de données caractérisée, dans notre cas, par la constante de Michaelis K_m , le nombre d'unités d'activité enzymatique par unité de volume N_{enz} et la concentration du substrat et enfin la réponse du notre capteur. Dans une deuxième étape on procède à une séparation de la base d'apprentissage et celles de validation et de test, puis on fait l'entraînement d'un réseau de neurones sur la base d'apprentissage formé précédemment avec l'algorithme de rétropropagation. Finalement on peut mesurer la performance du modèle obtenu avec la base de données réservée au test.

III.2.1. Choix de la base de données

Le capteur EnFET que nous avons étudié couvre un intervalle de constante de Michaelis entre $1 \cdot 10^{-4}$ à 1 mol/l, une gamme de nombre d'unités d'activité enzymatique par unité de volume de 10 à 5000 unités/cm³ et un intervalle de concentration de substrat entre 10^{-7} à 10^{-2} mol/l [36]. Notant que notre étude du capteur est fondé sur les résultats présentés dans le chapitre I, donc pour la formation de la base de données nous avons choisi un pas de constante de Michaelis 10^{-2} mol/L, et un pas de nombre d'unités d'activité enzymatique par unité de volume 50 unités/cm³ et un pas de concentration de substrat $1 \cdot 10^{-7}$ mol/l, enfin on

obtient une base de données qui dispose donc 46X3X6 éléments et 4 vecteurs de la forme X ($K_m, N_{enz}, C_{sub}, V_t$), en conséquence l'apprentissage du réseau de neurones est réalisé avec une base de données de 828 éléments figure III.1.

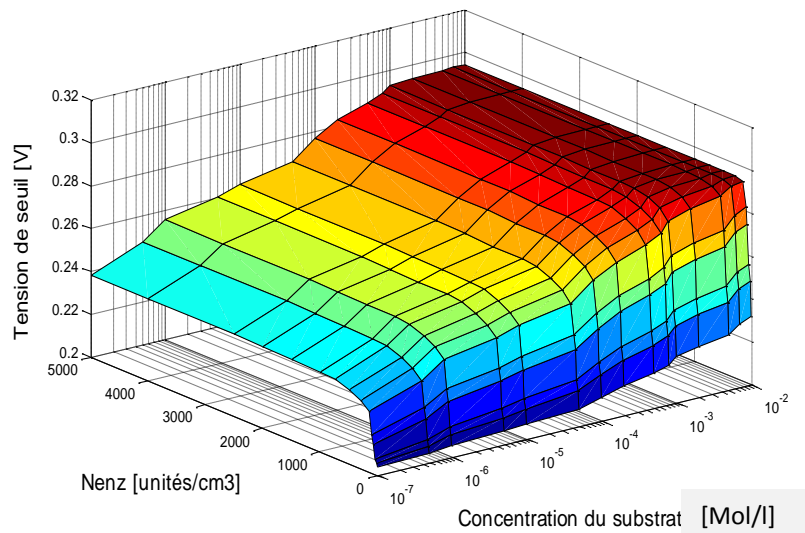


Fig.III.1- Représentation en 3 dimensions de la base de données choisie

III.2.2. Création d'une base de validation

Le but de créer une base de validation est de tester « valider » les résultats obtenus après l'apprentissage. Donc la base de validation est créée par l'introduction des valeurs qui séparent les valeurs de la base d'apprentissage, dans ce contexte il n'y a pas de règles précises qui justifient cette séparation, néanmoins, d'une façon générale la base de test couvre entre 10% et 20% de la base de données, suivant le problème étudié. Les deux bases de données ainsi obtenues par cette séparation doivent forcément couvrir l'espace de fonctionnement. Dans notre cas la formation de ces bases de données peut se faire comme suit: nous avons la concentration de substrat qui varie entre 10^{-7} mol/l et 10^{-2} mol/l, alors les deux bases représentent des différentes valeurs distribuées le long de cet intervalle. Le même concept est appliqué à des intervalles de variation de la constante de Michaelis et de nombre d'unités d'activité enzymatique par unité de volume, respectivement. Dans notre cas la base d'apprentissage est composée de 828 éléments, quand à la base de test elle est composée de 90 éléments. Il est impérativement important de ne pas utiliser aucun élément de la base de test durant l'apprentissage, car cela va nous donner un modèle neuronal complètement faux. Donc cette base est réservée uniquement à la mesure finale de la performance du modèle

obtenu. Autrement dit, elle sert à vérifier si le réseau de neurones a une bonne performance sur les exemples qu'il n'a pas appris « base de test ». Dans l'utilisation de cette technique, il existe toujours le risque de sur-apprentissage, c'est-à-dire, quand le réseau a pris excessivement de paramètres pour évoquer une fonction qui n'est pas très complexe. Nous allons nous retrouver dans un problème de sur apprentissage ce qui est traduit par une augmentation de l'erreur sur la base de validation [37].

III.2.3.L'apprentissage du réseau de neurone

La formation de la base de données est une étape essentielle pour faire l'apprentissage de réseaux de neurone et même pour les deux autres étapes de validation et de test, de plus le nombre de couches et des neurones utilisés dans chaque couche est très important en vue d'avoir un bon entraînement qui permet par la suite d'obtenir un excellent résultat.

L'obtention de valeur minimale de l'erreur quadratique moyenne « EQM » donc le seuil d'estimation « S » voulue, nécessite un bon choix de type des fonctions d'activations et du nombre d'itérations, cela est aussi indispensable pour faire notre apprentissage.

La figure III.2 montre l'organigramme qui interprète notre programme structuré en **Matlab**.

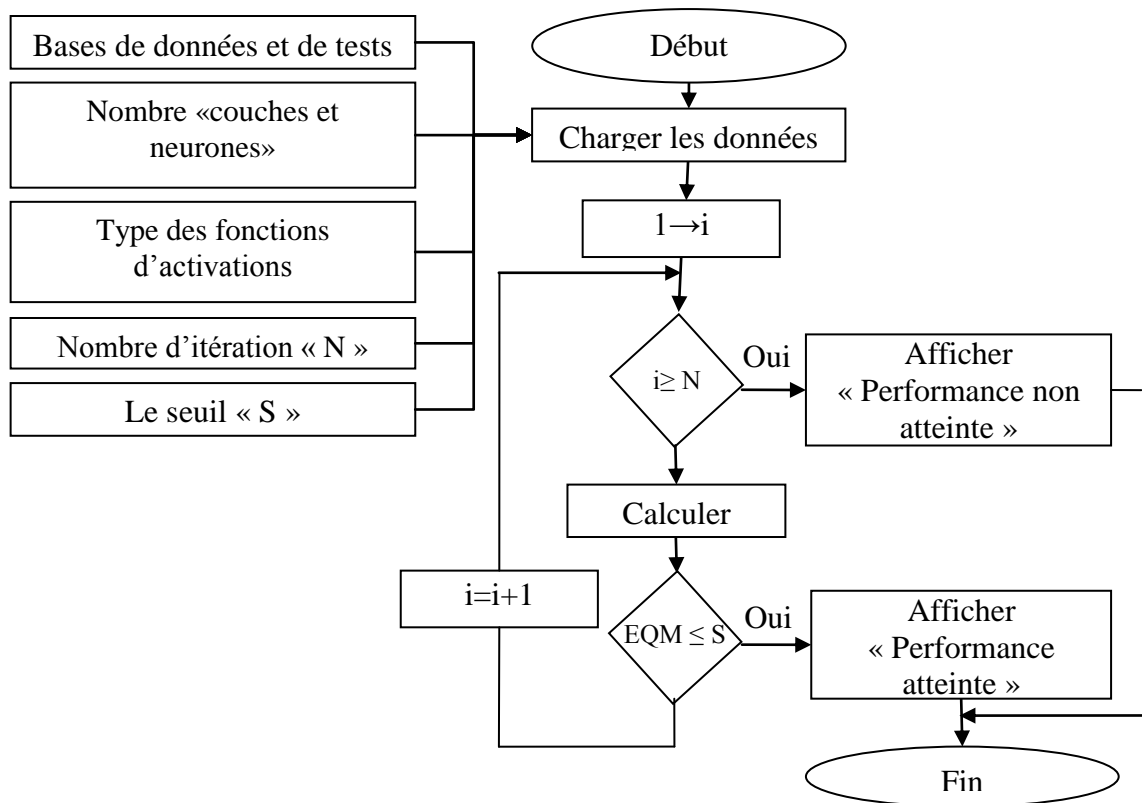


Fig III.2-Organigramme du programme d'apprentissage

Dans notre cas, puisque le nombre des neurones dans la couche de sortie est déterminé par le nombre de sorties du système à modéliser, l'EnFET possède une seule sortie V_T donc un neurone pour la couche de sortie.

Pour que le modèle ANN exprime parfaitement la variation de la tension de seuil de l'EnFET en fonction de la concentration du substrat, il est indispensable de trouver le nombre optimal des couches cachées et le nombre de neurones par couche. Nous avons considéré deux couches, 4 neurones pour la première couche et 4 neurones pour la deuxième couche cachée « figure III.3 ».

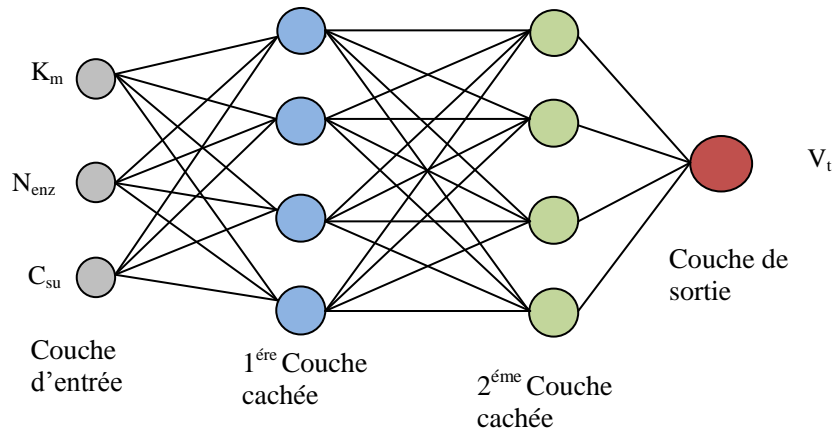


Figure III.3 - Schémas des couches de neurones de l'architecture optimisée

Le choix de l'architecture présentée dans la figure III.3, a été faite après quelque tests de réseau avec un nombre de neurones entre 1 et 6 neurones pour la première couche et entre 0 et 6 neurones pour la deuxième, puis nous avons aperçu la variation de l'erreur d'apprentissage et de test. Le tableau III.1 résume les différents résultats obtenus, cependant l'erreur de test converge vers le minimum dans l'architecture numéros 26 ce qui justifie notre choix.

	Nombre de neurones 1 ^{ère} couche	Nombre de neurones 2 ^{ème} couche	Le seuil « S » Pour EQM=10 ⁻⁸
1	1	0	0.00029707
2	1	1	0.00033467
3	1	2	0.000582
4	1	3	0.0006014
5	1	4	0.00024555
6	1	5	0.00041366
7	1	6	0.00025208
8	2	0	0.00049258
9	2	1	0.00028673
10	2	2	0.00043654
11	2	3	0.00043927
12	2	4	0.00054485
13	2	5	0.00020724
14	2	6	0.00055168
15	3	0	0.054375
16	3	1	0.00041722
17	3	2	0.00018725
18	3	3	0.00072994
19	3	4	0.00019816
20	3	5	0.00049517
21	3	6	0.00069734
22	4	0	0.00045074
23	4	1	0.00043066
24	4	2	0.00084879
25	4	3	0.00040635
26	4	4	0.00014419
27	4	5	0.00042726
28	4	6	0.00019283
29	5	0	0.00048728
30	5	1	0.00025461
31	5	2	0.0003618
32	5	3	0.00015796
33	5	4	0.00020089
34	5	5	0.00043288
35	5	6	0.00086362
36	6	0	0.00021431
37	6	1	0.00066866
38	6	2	0.00068984
39	6	3	0.0004215
40	6	4	0.00040471
41	6	5	0.00030728
42	6	6	0.00055794

Tab III.1 - Variation de l'erreur du test en fonction des différentes architectures

De même pour les choix des types des fonctions d'activations, nombre maximum d'itération ainsi que l'EQM. On procède au test et l'observation de la variation de l'erreur et bien sur la solution pour des différentes valeurs pour avoir les meilleurs résultats. Afin d'évaluer l'influence du seuil S sur le nombre d'itérations nécessaires pour obtenir $EQM < S$. Nous avons choisi plusieurs valeurs de S, les figures III.4 et III.5 et III.6 montrent l'évolution de l'EQM en fonction du nombre d'itérations pour des différentes valeurs du seuil.

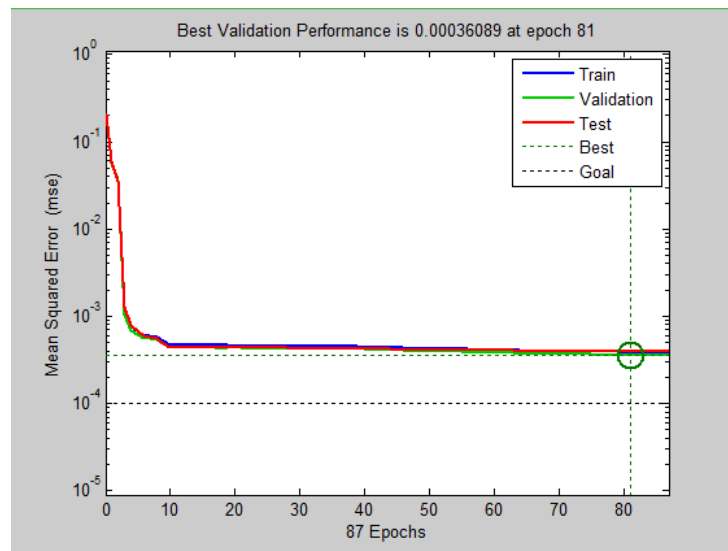


Figure III.4 - EQM en fonction du nombre d'itérations pour $S=10^{-4}$

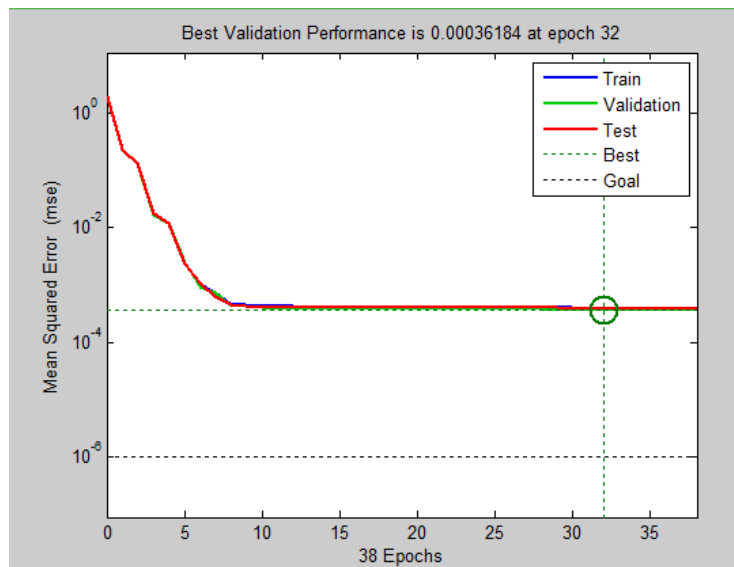


Figure III.4 - EQM en fonction du nombre d'itérations pour $S=10^{-6}$

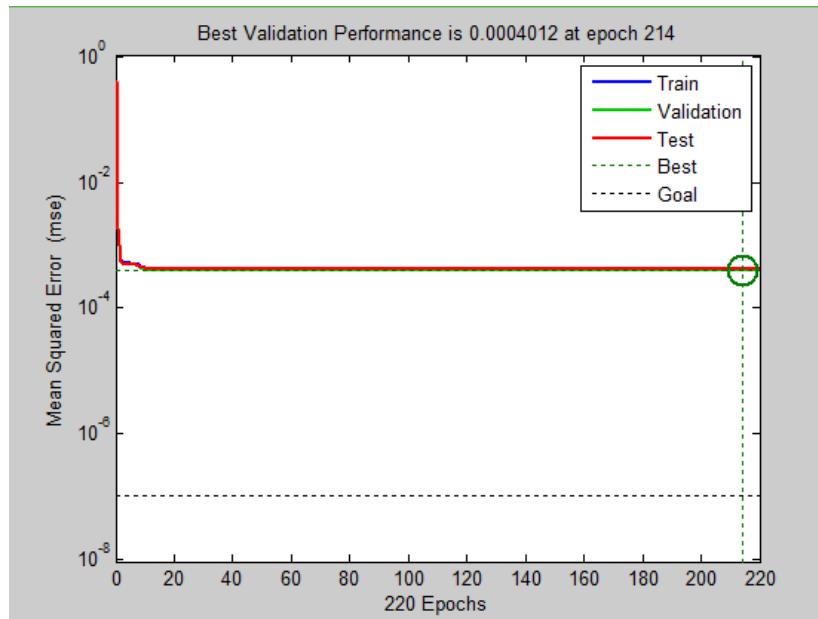


Figure III.5 - EQM en fonction du nombre d'itérations pour $S=10^{-7}$

Le nombre d'itérations montré par les figures précédentes indique que plus le seuil « S » est faible, plus ce nombre d'itérations est important et vis-vers-ça.

III.2.4. Mesure de la performance du modèle obtenu

Dans cette partie notre étude est focalisée sur la comparaison entre la base de données initial et celle obtenue après l'apprentissage, utilisant la base de test, nous avons trouvé que notre modèle exprime parfaitement la variation de la réponse de l'EnFET. Les figures III.6, III.7 et présentent la performance du modèle obtenu pour les deux nombres d'unités d'activités enzymatiques par unité de volume 10 unités/cm³ et 100 unités/cm³.

A partir des figures III.6, III.7 on peut facilement vérifier la fiabilité de notre modèle pour la prédiction de la réponse de l'EnFET sur une large gamme de concentration du substrat et de nombre d'unités enzymatiques.

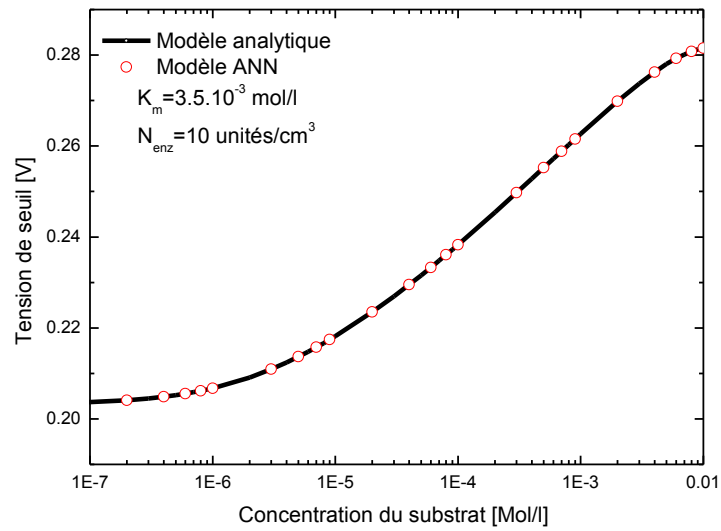


Figure III.6 – Performance du modèle obtenu à 10 unités/cm³

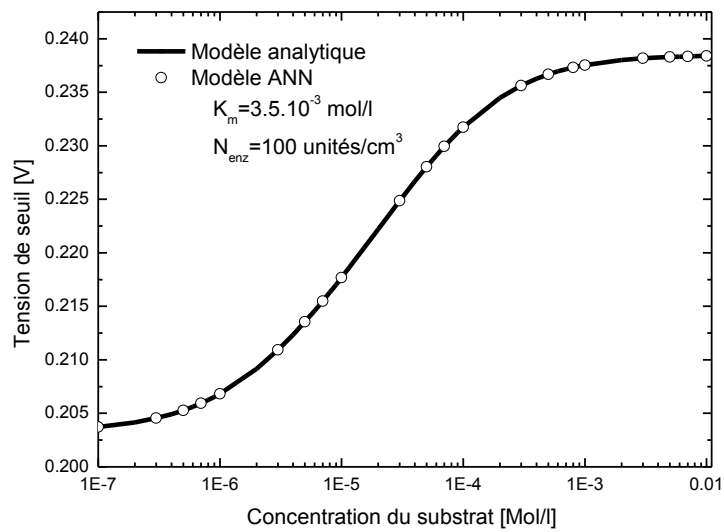


Figure III.7 – Performance du modèle obtenu à 100 unités/cm³

Le tableau III.2 résumé tous les paramètres utilisés pour l'optimisation du modèle ANN du capteur enzymatique.

Paramètre	Valeur optimisée			
Architecture	Feed-forward MLP (perceptron multi-couches)			
Couche cachée	2			
Règle d'apprentissage	Rétropropagation des erreurs (Back propagation)			
Nombre de Neurones	Couche d'entrée	3		
	1ère couche	4		
	2ème couche	4		
	Couche de sortie	1		
La fonction de transfert	1ère couche	Sigmoid		
	2ème couche	Sigmoid		
	Couche de sortie	Linéaire		
Définition des entrées	K_m (mol/l)	N_{enz} (unités/cm ³)	C_{sub} (mol/l)	
	Min	10 ⁻⁴ mol/l	10 unités/cm ³	10 ⁻⁷ mol/l
	Max	1 mol/l	5000 unités/cm ³	10 ⁻² mol/l
Définition des sorties	V_T (V)			
	Max	03 V		
	Min	0.2 V		
EQM de test	10 ⁻⁸			
EQM d'apprentissage	4.012 10 ⁻⁴			
Base de données	Base d'apprentissage	828		
	Base de validation	90		

Tableau III.2 : Paramètres optimisés du réseau de neurones

Conclusion

Dans ce chapitre nous avons développé un modèle du capteur enzymatique. La création du modèle et faite par les réseaux de neurones et **Matlab**, les performances de notre modèle ont été présentés dans cette partie. Nous avons vu que le modèle obtenu délivre la même sortie de l'EnFET, avec ses avantages et ses inconvénients tel que la non linéarité de la réponse de l'EnFET qui pose un problème de mesure de la réponse du capteur. Dans ce contexte, la linéarisation de la réponse de l'EnFET est primordiale pour éviter les erreurs de mesure, ce qui fera l'objet du chapitre suivant.

Chapitre IV

**Modèle intelligent (INV-ANN) du capteur
ENFET**

Introduction

Il est possible de surmonter les inconvénients des capteurs EnFET tel que la non linéarité de ce capteur avec un transfert inversement non linéaire quand l'expression de la courbe de transfert du capteur est connue. Les capteurs intelligents intègrent des circuits de conditionnement, dans le but est la correction des réponses non linéaire. L'utilisation des réseaux de neurones comme des composants de mesure, nous donne la possibilité de corriger la réponse des capteurs, cette technique a connu un essor considérable au cours de ces dernières années. En effet, les ANNs présentent l'avantage d'une grande adaptation aux différents problèmes causés par la non-idéalité des capteurs [38] [39].

Le chapitre présent est consacré à la conception d'un composant de mesure « INV-ANN » permettant la correction de la réponse non linéaire du capteur enzymatique. Et puis on va montrer la validité de notre modèle à travers quelques simulations.

IV.1. Modélisation de l'INV-ANN

Dans le but d'avoir une réponse linéaire de notre capteur, il nous faut un modèle inverse INV-ANN, dit aussi modèle intelligent. Ainsi, pour le développement de ce modèle on commence par la linéarisation de la réponse de la tension de seuil obtenue en utilisant les réseaux de neurones. On choisit une base de données caractérisée, cette fois par la tension de seuil relevée à la sortie, le nombre d'unités d'activité enzymatique par unité de volume N_{enz} et la réponse linéarisée du INV-ANN, respectivement. Deuxièmement, on va procéder à la formation de la base de test et de validation en séparant la base d'apprentissage, puis on fait l'entraînement d'un réseau de neurones sur la base d'apprentissage avec l'algorithme de rétropropagation et finalement on vérifie la performance du modèle obtenu avec la base de test.

IV.1.1. Linéarisation de la sortie du modèle

Pour détourner la non-linéarité de la réponse sur notre modèle, il est nécessaire d'effectuer une linéarisation de la sortie du capteur. De ce fait, on choisie à titre d'exemple la courbe à $N_{enz} = 10$ unités /cm³. La figure IV.1 illustre l'entrée du INV-ANN (V_T) et la sortie V_{TL} linéarisée.

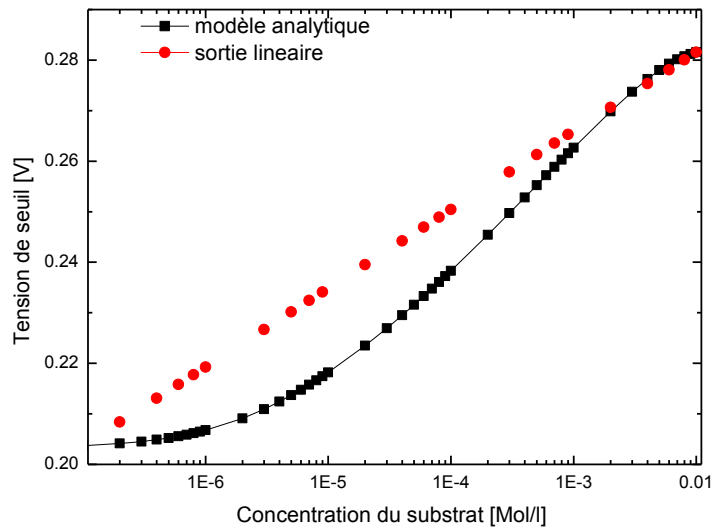


Fig.IV.1-Linéarisation de la réponse à $N_{enz} = 10$ unités / cm^3

IV.1.2. Création des bases de données et de tests

La base de données de INV-ANN est formé de 55 vecteurs de la forme X (K_m , N_{enz} , C_{sub} , V_T , V_{TL}). Avec K_m est la constante de Michaelis, N_{enz} est le nombre d'unités enzymatiques par unité de volume, C_{sub} est la concentration du substrat, V_T est la tension de seuil du capteur avant la linéarisation et V_{TL} est la tension de seuil après la linéarisation. La figure IV.2 représente les éléments C_{sub} , N_{enz} et V_{TL} de la base de données du vecteur X après la linéarisation.

Après la formation de la base de données, il est indispensable de réserver un ensemble des éléments pour la mesure finale de la performance; c'est la base de validation.

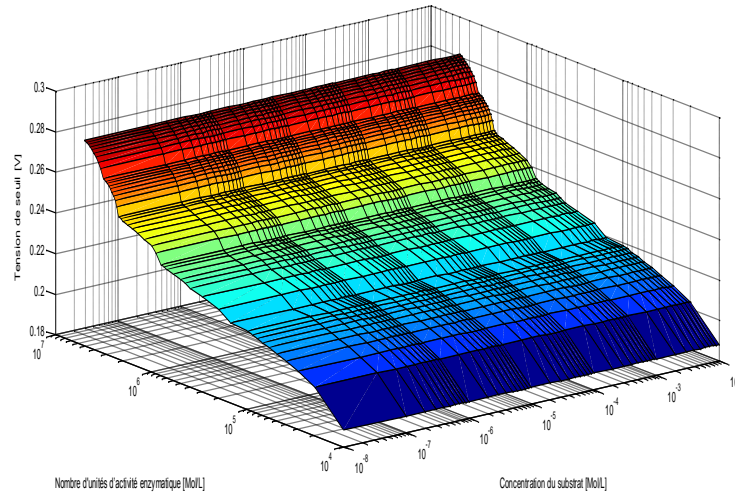


Fig.IV.2- Représentation en 3 dimensions des éléments essentiels de la base de données après linéarisation

IV.1.3. L'apprentissage du réseau de neurone

Dès que la création de la base de données et celle de validation est obtenue, où ces dernières sont nécessaires pour l'apprentissage, on passe à réaliser une simulation par réseaux de neurones où l'on garde la même structure neuronale précédente; le nombre des couches cachées « 2 », le nombre des neurones utilisés dans chaque couche cachée (« 4 » pour la première et « 4 » pour la deuxième), et on garde aussi le même choix de type des fonctions d'activations. Pour que le modèle INV-ANN exprime précisément la linéarisation de la réponse du capteur. Cette structure est illustrée par la figure IV.3.

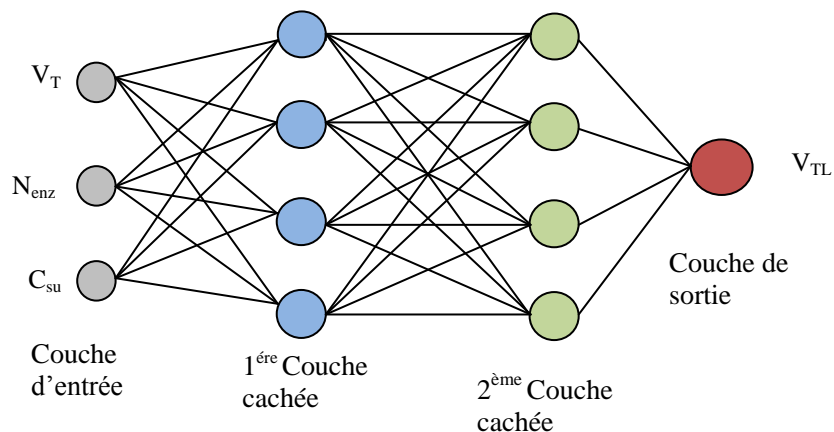


Fig.IV.3- Représentation de la structure neuronale de INV-ANN

Nous avons, maintenant, tous les éléments essentiels pour commencer l'apprentissage du modèle inverse INV-ANN respectant les mêmes procédures adoptés à l'ANN pour le développement du modèle INV-ANN. La figure IV.4 illustre l'évolution de l'erreur globale sur la base d'apprentissage en fonction du nombre d'itérations.

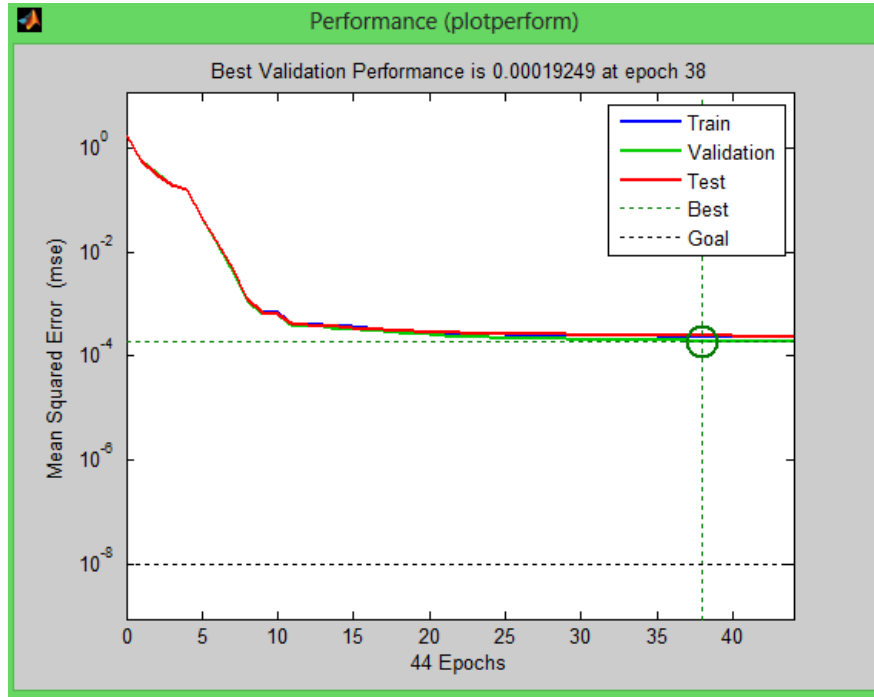


Fig.IV.4-Evolution de l'erreur EQM en fonction du nombre d'itérations pour $S=10^{-8}$

IV.1.4. Mesure de la performance du modèle obtenu

Un programme **Matlab** nous permet de faire une comparaison entre la base de données linéarisée et celle obtenue après l'apprentissage. La figure IV.5 présente le signal d'entrée de INV-ANN à $N_{enz}=100$ unités $/\text{cm}^3$ avec la courbe de linéarisation obtenues après l'apprentissage pour montrer la performance du modèle obtenu.

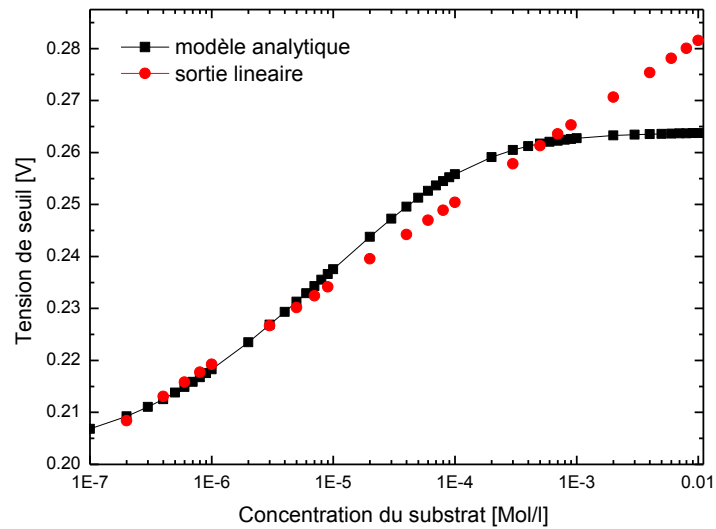


Fig.IV.5-Performance du modèle après l'apprentissage

Le tableau IV.1 résume les différents paramètres optimisés.

Paramètre	Valeur optimisée			
Architecture	Feed-forward MLP (perceptron multi-couches)			
Couche cachée	2			
Règle d'apprentissage	Rétropropagation des erreurs (Back propagation)			
Nombre de Neurones	Couche d'entrée	3		
	1ère couche	4		
	2ème couche	4		
	Couche de sortie	1		
La fonction de transfert	1ère couche	Sigmoid		
	2ème couche	Sigmoid		
	Couche de sortie	Linéaire		
Définition des entrées	V_T (V)	N_{enz}	C_{sub}	
	Min	0.2	10 unités/cm ³	10 ⁻⁷ mol/l
	Max	0.3	5000 unités/cm ³	10 ⁻² mol/l
Définition des sorties	V_{TL} (V)			
	Max	03		
	Min	0.2		
EQM de test	10 ⁻⁸			
EQM d'apprentissage	1.9 10 ⁻⁴			
Base de données	Base d'apprentissage	828		
	Base de validation	90		

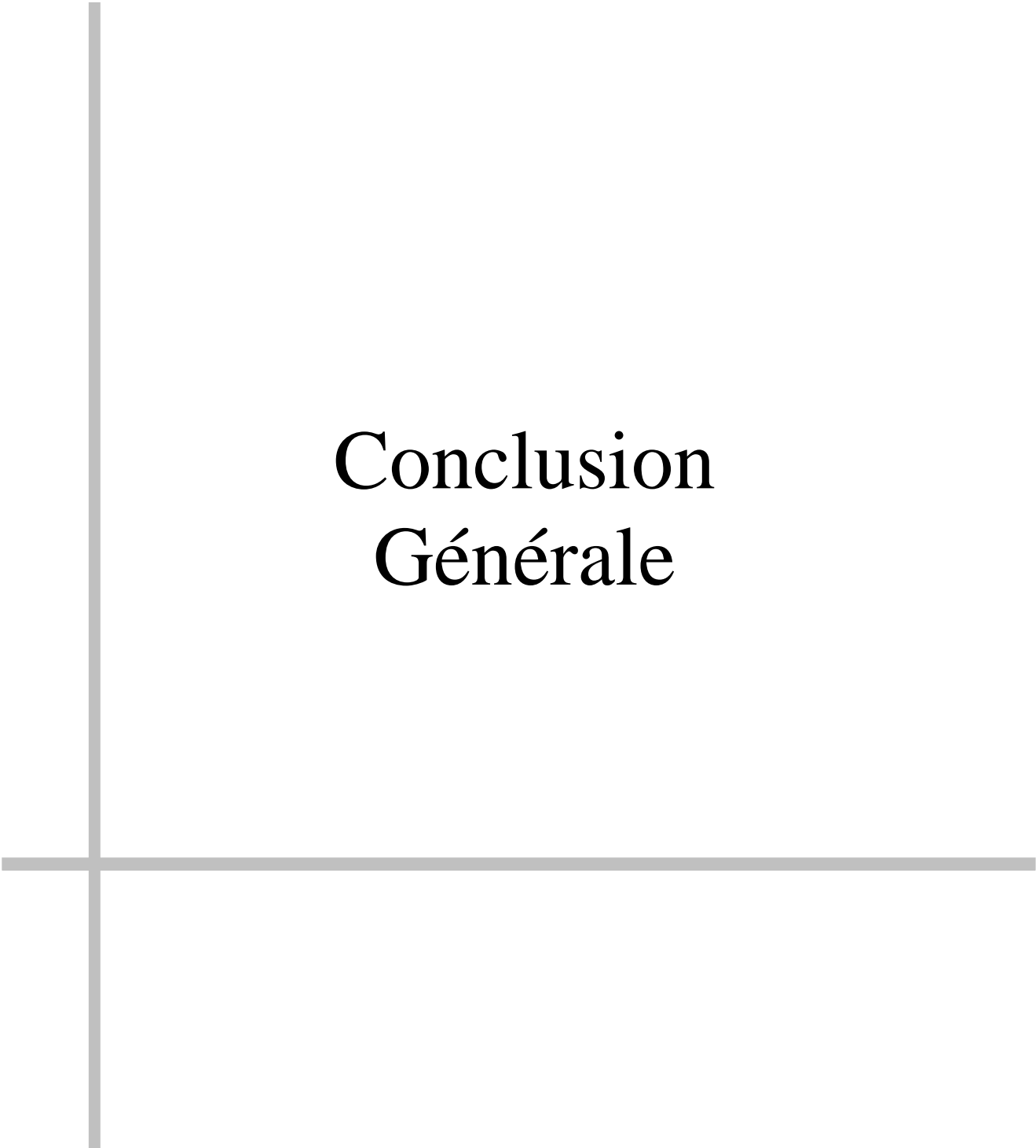
Tableau IV.1 : Paramètres optimisés du réseau de neurones

Par analogie, avec la modélisation du capteur « chapitre III » on procède à la modélisation du modèle inverse « capteur intelligent ». A la fin de la phase d'apprentissage et d'optimisation on obtient une architecture semblable à celle du modèle ANN. L'algorithme d'apprentissage et l'optimisation ont été étudiés au chapitre III.

Nous avons utilisé un programme **Matlab** pour l'apprentissage qui nous donne les matrices des paramètres du réseau de neurones « biais et poids ».

Conclusion

Les résultats de simulation obtenus, montrent que le modèle INV-ANN développé a permis de corriger la sortie du capteur, tout en éliminant la non linéarité. L'association de cet élément de correction, modélisé à base des ANNs a apporté des améliorations considérables sur le fonctionnement du notre capteur.



Conclusion Générale

Conclusion générale

Les capteurs intelligents constituent un domaine de recherche de pointe grâce à leur fonction de monitoring et de contrôle de paramètres physico-chimiques et biologiques, dans tous les domaines de l'activité humaine. Dans le cadre d'applications de détection, d'analyse ou de surveillance. Leurs applications dans des domaines tels que la sécurité (systèmes d'identification et d'authentification), la gestion des biens, le bâtiment, le transport, la fabrication, la détection environnementale, les hydrocarbures, le textile, la maintenance prédictive industrielle, le monitoring médical, ouvrent de nouvelles opportunités de développement économique.

Le principe du capteur intelligent étudié repose sur un dispositif dont le diélectrique est constitué par la solution dont on veut connaître la quantité enzymatique dans la solution (concentration du substrat) selon le décalage de la tension de seuil. Malheureusement, toute variation des grandeurs d'influence (la concentration du substrat ou la constante de Michaelis ...) induit une erreur de la réponse en plus de la réponse non linéaire. Pour arriver à compenser toutes ses dérives, nous avons fait appel, dans ce mémoire, aux réseaux de neurones d'abord pour reproduire fidèlement la nature de la réponse du modèle du capteur enzymatique appelé modèle direct. Puis, en second lieu nous avons conçu un modèle inverse appelé capteur intelligent qui permet d'éliminer toutes les imperfections que nous avons relevées. Comme perspective de ce travail, on peut imaginer son extension à d'autres paramètres qui affectent sa réponse à titre d'exemple nous citerons l'hystérésis, l'intégration matérielle de ce modèle sur des FPGA ou un ASIC qui sera pourquoi pas commercialisé. L'insertion du modèle conçu peut se faire sur le logiciel PSPICE.

Références

- [1] S. M Sze, Physics of semiconductor devices, 2nd edition, editions Wiley, 1981.
- [2] P. Bergveld, Development of an ion-sensitive solid-state device for neurophysiological measurements, IEEE Trans. Biomed. Eng. BME – 17 (1970) 70-71.
- [3] S. Caras & J. Janata. pH based enzyme potentiometric sensors. Parts 1–3. Anal. Chem, vol. 57, pages 1917–1925, 1985.
- [4] W. Sant, ML Pourciel-Gouzy, J. Launay, T. Do Conto, R. Colin, A. Martinez & P. Temple-Boyer. Development of a creatinine-sensitive sensor for medical analysis. Sensors & Actuators : B. Chemical, vol. 103, no. 1-2, pages 260–264, 2004.
- [5] H. Mathiew, Physique des semiconducteurs et des composants électroniques, Editions Dunod, Paris, 5ème édition 2000.
- [6] B. Diagne, Étude et modélisation compacte d'un transistor MOS SOI double - grille dédié à la conception, Thèse de doctorat de l'Université Louis Pasteur - Strasbourg I, 2007.
- [7] X. Yong Étude de transistors MOS à base de matériaux organiques, Stage effectué à l'Institut de Microélectronique, Electromagnétisme et Photonique (IMEP-LAHC), Master 2 Juin 2008.
- [8] D. E. Yates, S. Levine, T. W. Healy, Site-binding model of the electrical double layer at the oxide/water interface, J. Chem. Soc. Farady Tran. 70, pp. 1807-1818, 1974.
- [9] I. Humenyuk. « Développement des micro-capteurs chimiques ChemFETs pour l'analyse de l'eau », Thèse de doctorat, INSA de Toulouse, 2005.
- [10] Bergveld, A. Sibbald, Analytical and Biomedical Applications of Ion selective Field Effect Transistors, Elsevier Science Publishers, Amsterdam, 1988.
- [11] Massimo Grattarola and et al. "Modeling H⁺-Sensitive FETs with SPICE" IEEE trans. Elect. Devices, Vol.39, No.4, April, 1992.
- [12] B. Torbiero. Développement de micro-capteurs électrochimiques pour l'analyse en phase liquide, thèse de doctorat, INSA de Toulouse, 2006.
- [13] S. Martinoia, G. Massobrio. A Behavioral macromodel of the ISFET in SPICE, Sensors and Actuators B 62, pp. 182-189, 2000.
- [14] J. C. Dutta modeling ion sensitive field effect transistors for biosensor applications International Journal of Advanced Research in Engineering and Technology, ISSN 0976 – 6499(Online) Volume 1, Number 1, May - June (2010), © IAEME.

- [15] W.Gopel, P.Heiduschka. Introduction to bioelectronics: interfacing biology with electronics. *Biosensors and Bioelectronics*, 9 (1994).
- [16] George. Ash et collaborateurs, "les capteurs en instrumentation industrielle", BORDAS, Paris 1987, ISBN S2-04-016948-2.
- [17] L. Michaelis & ML Menten. Kinetics of invertase action. *Biochem. Z*, vol. 49, pages 333–369, 1913.
- [18] P. Racine & W. Mindt. On the role of substrate diffusion in enzyme electrodes. *Experientia Suppl*, vol. 18, pages 525–543, 1971.
- [19] PN Bartlett & KFE Pratt. Modelling of processes in enzyme electrodes. *Biosensors & bioelectronics*, vol. 8, no. 9-10, pages 451–462, 1993.
- [20] R. Baronas, I. Feliksas & J. Kulys. "Mathematical Modeling of Biosensors :An Introduction for Chemists and Mathematicians", Springer Verlag, 2009.
- [21] N.F. Sheppard, D.J. Mears & A. Guiseppi-Elie. Model of an immobilized enzyme conductimetric urea biosensor. *Biosensors and Bioelectronics*, vol. 11, no. 10, pages 967–979, 1996.
- [22] S.D. Caras, D. Petelenz & J. Janata. pH-based enzyme potentiometric sensors. Part 2. Glucose-sensitive field effect transistor. *Analytical chemistry*, vol. 57, no. 9, pages 1920–1923, 1985.
- [23] F. Aouni, R. Mlika, C. Martelet, H.B. Ouada, N. Jaffrezic-Renault & A.P. Soldatkin. Modelling of the Potentiometric Response of ENFETs Based on Enzymatic Multilayer Membranes. *Electroanalysis*, vol. 16, no. 22, pages 1907–1911, 2004.
- [24] P. Temple-Boyer, J. Le Gal, ML Pourciel-Gouzy, W. Sant & A. Martinez. Modelling of EnFETs for the créatinine detection. *Sensors & Actuators: B. Chemical*, vol. 118, no. 1-2, pages 47–52, 2006.
- [25] M.L. Pourciel-Gouzy. Développement d'interfaces adaptées aux analyses biochimiques et biologiques - Application aux capteurs chimiques CHEMFETs. Thèse de doctorat, INSA de Toulouse, 2004.
- [26] P. Temple-Boyer, A. Benyahia, W. Sant, ML Pourciel-Gouzy, J. Launay & A. Martinez. Modelling of urea-EnFETs for haemo dialysis applications. *Sensors & Actuators: B. Chemical*, vol. 131, no. 2, pages 525–532, 2008.
- [27] Ahmed BENYAHYA. Conception réalisation et modélisation de microcapteurs pour l'analyse biochimique. Thèse de doctorat, Université de Toulouse, 2010.
- [28] J-C. Boeglin. Contrôle des eaux douces et de consommation humaine. *Techniques de l'ingénieur*, 2009.

- [29] L.J. Bousse. The chemical sensitivity of electrolyte/insulator/silicon structures: fundamentals of ISFET operation. Thèse de doctorat, Technische Hogeschool Twente, 1982.
- [30] Claude TOUZET. These, "Les réseaux de neurones artificiels introduction au connexionnisme", Juillet 1992.
- [31] Marc Parizeau. These, "Réseaux de neurones", Université de laval, Automne 2004.
- [32] Fabien Moutarde. Introduction aux réseaux de neurones, Ecole des Mines de Paris, Avril 2007.
- [33] Rémi COULOM. Apprentissage par renforcement utilisant des réseaux de neurones, avec des applications au contrôle moteur, institut national polytechnique de Grenoble « 2002 ».
- [34] Gert van der Horn, Johan H. Huijsing. Integrated Smart Sensors: design and calibration, Kluwer academic publisher, 1998.
- [35] Won Young Yang, Wenwu Cao, and Tae-Sang Chung and John Morris. "Applied numerical methods using Matlab", John Wiley & Sons, Inc 2005.
- [36] Chia-Yen Lee and Gwo-Bin Lee. "MEMS-based Humidity Sensors with Integrated Temperature Sensors for Signal Drift Compensation". 0-7803-8313, 5 Mars 2003, IEEE.
- [37] Paul BOURRET, James REGGIA, Manuel SAMUELIDES. Réseaux neuronaux une approche connexionniste de l'intelligence artificielle, Ouvrage de l'édition TEKNEA, 1991.
- [38] Kodjo Agbossou, T. James Agbebavi, Demagna Koffi et Mohammed Elhiri. Conception d'un capteur intelligent pour la détection des vapeurs de styrène dans l'industrie, J. Phys. III France 4 2031-2045 « 1994 ».
- [39] ARPAIA, P. – DAPONTE, P. – GRIMALDI, and D. – MICHAELI, L. ANN-Based Error Reduction for Experimentally Modelled Sensors, IEEE Trans. on Instrumentation and Measurement, vol. 51, no. 1, pp. 23-30, (2002).

Résumé

Le but de ce travail est de concevoir un capteur enzymatique intelligent, d'abord qui reproduit le comportement physique du capteur puis d'éliminer la non linéarité de la sortie de notre capteur. A l'aide des réseaux de neurone et du logiciel **Matlab** on a commencé par la phase d'apprentissage afin d'obtenir un modèle ANN. Une linéarisation par le programme **Matlab** est appliquée à la sortie de l'ANN dont le but est de créer une base de données pour la correction permettant de linéariser sa réponse. L'apprentissage pour cette base de données nous donne le modèle inverse INV-ANN. Notre capteur intelligent est constitué de deux blocs : modèle ANN et le modèle inverse INV-ANN.

Mots clés :

Capteur enzymatique EnFET, ANN, INV-ANN, Réseaux de neurones, MLP, créatinine.

<u>Symbole</u>	<u>Description</u>	<u>Unité</u>
EnFET	Enzymatique field effect transistor	
ANN	Artificial Neural Network	
ANN-model	Modèle à base des réseaux de neurones	
INV-ANN	Modèle inverse à base des réseaux de neurones	
MLP	Multilayer Perceptron	
MOSFET	Metal Oxide Semiconductor Field Effect Transistor	
ISFET	Ion Semiconductor Field Effect Transistor	
NL	Non Linéarité	
V_T	Tension de seuil	mV
V_{TL}	Tension de seuil d'ANN-INV	mV