

IMPLEMENTATION OF THE VANCOUVER RAMAN ALGORITHM

Autores

Edgar Guevara, Francisco Javier González

Descripción

El programa *Implementation of the Vancouver Raman algorithm* (Implementación del algoritmo Vancouver para espectro Raman) se usa para remover la auto-fluorescencia comúnmente presente en los espectros Raman de muestras biológicas (Zhao, Lui, McLean, & Zeng, 2007). El programa se desarrolló mediante el ambiente de programación MATLAB (The MathWorks, Natick, MA, USA). El programa consta de los siguientes archivos:

README.md	Archivo de presentación del programa
data_test.txt	Archivo de texto con datos de ejemplo
importfile.m	Función para importar datos del archivo de texto
norm_auc.m	Función que normaliza unitariamente el área bajo la curva (AUC) del espectro
vancouver.m	Función que realiza la remoción de auto-fluorescencia
vancouver_help.pdf	Archivo con instrucciones de uso
vancouver_screenshot.png	Imagen de ejemplo de resultado
vancouver_script.m	Script de ejemplo, para mostrar el funcionamiento del programa

Instrucciones

A continuación, se detallan los pasos a seguir para un uso correcto del programa de cómputo, mostrando también resultados de un ejemplo de uso.

SINTAXIS

[fluo, raman, waveNumber] = vancouver (waveNumber, originalRaman, polyOrder, errThreshold, nPoints, nIter)

Entradas

waveNumber Corrimiento Raman (cm^{-1})

originalRaman Señal Raman original

[polyOrder] Orden de polinomio (opcional, orden 5 por defecto)

[errThreshold] Umbral de error (opcional, 0.05 por defecto)

[nPoints] Número de puntos en el suavizado de la señal (opcional, 5 puntos por defecto)

[nIter] Máximo número de iteraciones (opcional, 100 iteraciones por defecto)

Salidas

fluo Espectro de auto-fluorescencia de fondo

raman Señal Raman pura, después de remover la fluorescencia

waveNumber Corrimiento Raman (cm^{-1})

La remoción del espectro de auto-fluorescencia del espectro Raman está basada en el artículo científico de Zhao et al. (Zhao et al., 2007). Para ejecutar el programa se requiere la Curve Fitting Toolbox (The MathWorks, Natick, MA, USA).

EJEMPLO DE USO DEL PROGRAMA

El usuario teclea el siguiente comando en la interfaz de MATLAB:

vancouver_script

Enseguida el programa hace su función, desplegando los resultados en forma gráfica, como se muestra en la Ilustración 1. Asimismo, los resultados se guardan en cuatro variables disponibles para el usuario:

originalRaman Señal Raman original

fluo Espectro de auto-fluorescencia de fondo

raman Señal Raman pura, después de remover la fluorescencia

waveNumber Corrimiento Raman (cm^{-1})

El presente programa de cómputo se dio a conocer el 24 de Noviembre de 2016 en la dirección web <https://github.com/guevaracodina/vancouver>

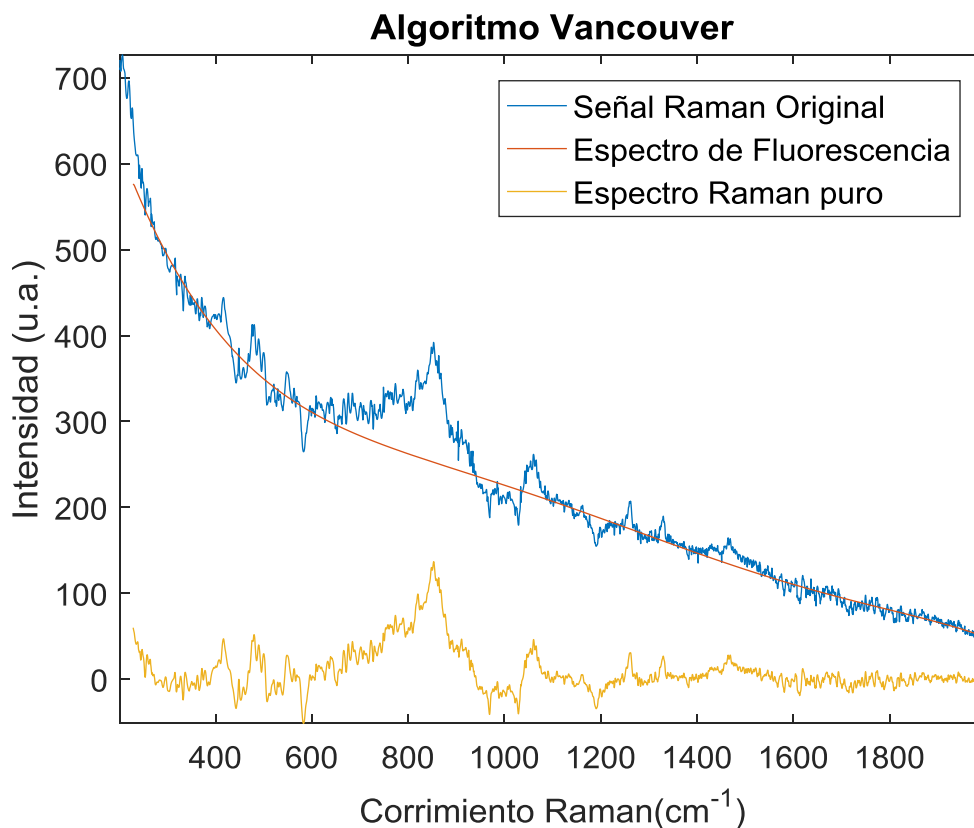


Ilustración 1: Resultado del algoritmo de remoción de la señal de auto-fluorescencia de un espectro Raman

NOTAS

El programa acepta un archivo con los datos del espectrómetro en formato de texto ASCII, ordenado en 2 columnas, siendo la primera el vector de corrimiento Raman y la segunda la intensidad Raman registrada por el instrumento, por ejemplo:

200.807	722.431
201.397	720.559
201.986	709.242
...	...
1999.17	55.1432
1999.46	51.1058
1999.74	45.9604

Referencias

Zhao, J., Lui, H., McLean, D. I., & Zeng, H. (2007). Automated Autofluorescence Background Subtraction

Algorithm for Biomedical Raman Spectroscopy. *Applied Spectroscopy*, 61(11), 1225–1232.