

## АЛГОРИТМ ОБРАБОТКИ СПЕКТРОВ ФЛУОРЕСЦЕНЦИИ МЕТОДОМ “ЭЛЛИПСОИДА РАССЕЯНИЯ”

Калайда В.Т., к.т.н., доц.каф.АСУ, Шестак О.Г., студентка каф.АСУ

*The images analysis method as one of the numeric parameters receiving method with studying plants fluorescence spectrums is considered in this article. The spectrum 2D curved performance by the equivalent dispersing ellipse allows to solve the problem of recognition exactly and effectively enough.*

Интегральные спектры флуоресценции ряда природных объектов, таких как минералы, растения, нефтепродукты, возбуждаемые в ближнем УФ – диапазоне спектра, являются, как правило, наложением спектров большого числа центров флуоресценции. Для интерпретации и анализа таких спектров необходимы их объективные числовые характеристики, позволяющие сопоставлять их с эталоном или друг с другом. Естественно, что число таких числовых параметров, характеризующих каждый из спектров, должно быть ограниченным. Описание спектров флуоресценции в виде ограниченного числа параметров, выраженных в числовом виде, позволяет привлечь компьютерные средства анализа и создать структурированный набор данных по характеристикам спектров в виде базы данных. Одним из возможных путей получения числовых параметров, характеризующих спектры флуоресценции, является обработка спектров методами анализа изображений.

Будем считать, что спектр (кривая распределения интенсивности флуоресценции по длинам волн) касается на границах диапазона шкалы длин волн и вместе с этой шкалой (осью координат  $y$ ) образует геометрический сюжет  $f(x,y)$  или образ, подлежащий числовому описанию. Обработка заключается в нахождении числовых параметров, характеризующих этот образ.

Удобной и надежной системой признаков для изображений по их геометрическим характеристикам служат моменты инерции различных порядков. Начальные

$$m_{\alpha\beta} = \iint_{\infty} f(x,y) x^{\alpha} y^{\beta} dx dy, \quad (\alpha, \beta = 0, 1, \dots)$$

и центральные

$$\mu_{\alpha\beta} = \iint_{\infty} f(x,y) (x - x_c)^{\alpha} (y - y_c)^{\beta} dx dy, \quad (\alpha, \beta = 0, 1, \dots),$$

где  $x_c, y_c$  – координаты центра масс, определяемые выражениями

$$x_c = m_{10} / m_{00}; \quad y_c = m_{01} / m_{00}.$$

Использование моментов в качестве признаков базируется на следующей фундаментальной теореме.

*Бесконечная последовательность моментов изображения  $\{m_{\alpha\beta}\}$  или  $\{\mu_{\alpha\beta}\}$  однозначно определяется функцией  $f(x,y)$  и, наоборот, функция  $f(x,y)$  однозначно определяется последовательностью моментов изображения  $\{m_{\alpha\beta}\}$  или  $\{\mu_{\alpha\beta}\}$   $(\alpha, \beta) = 0, 1$ .*

Следовательно, вычислив некоторые моменты изображения, можно с достаточной вероятностью его опознать. Какие моменты при этом использовать и с какой точностью необходимо их вычислять, как правило, определяется экспериментально. Для непрерывных дифференцируемых кривых, к которым можно отнести спектры флуоресценции, целесообразно использовать центральные моменты второго порядка относительно осей  $x, y$ :

$$\mu_{02} = \iint_{\infty} f(x, y)(y - y_c)^2 dx dy,$$

$$\mu_{20} = \iint_{\infty} f(x, y)(x - x_c)^2 dx dy$$

и смешанный момент относительно центра масс

$$\mu_{11} = \iint_{\infty} f(x, y)(x - x_c)(y - y_c) dx dy,$$

которые характеризуют степень концентрации изображения около оси  $x$ , оси  $y$  и центра масс соответственно. Отметим, что в теории вероятностей для характеристики рассеяния случайной величины применяются понятия *среднеквадратичного отклонения*  $\sigma_x, \sigma_y$  и *дисперсии*  $\sigma_x^2, \sigma_y^2$ , причем величины  $\sigma_x^2, \sigma_y^2$  по своему смыслу идентичны моментам инерции  $\mu_{02}$  и  $\mu_{20}$  соответственно. Таким образом, для геометрической характеристики распределения  $f(x, y)$  в плоскости  $xOy$  выделяем следующие признаки: координаты центра распределения  $x_c, y_c$ , моменты инерции  $\mu_{20}, \mu_{02}$  относительно осей  $x, y$ , (т.е. “дисперсии” изображения  $\sigma_x^2, \sigma_y^2$ ) и момент инерции  $\mu_{11}$  (ковариация). Использование моментов более высоких порядков позволяет получить более подробную информацию об изображении. Так, например, величины

$$\gamma_x = \mu_{30} / \sigma_x^2, \quad \gamma_y = \mu_{03} / \sigma_y^2$$

называемые *коэффициентами асимметрии* вдоль соответствующей оси, характеризуют степень асимметрии кривой по сравнению с нормальным распределением. Знак коэффициентов указывает на левостороннюю или правостороннюю асимметрию. Например, если  $\gamma_x < 0$ , то это означает, что изображение более растянуто вдоль оси  $Ox$  слева от моды, чем справа и наоборот. Из теории вероятностей известно, что в случае одномерного распределения некоторой случайной величины  $\zeta$  со средним значением  $m$  и среднеквадратическим отклонением  $\sigma$  от среднего значения  $m$  интервал значений  $\zeta$  от  $(m - \sigma\sqrt{3})$  до  $(m + \sigma\sqrt{3})$  можно считать характеристикой величины  $\zeta$  (интервалом концентрации значений  $\zeta$  около его центра тяжести  $m$ ). Будем искать аналогичную геометрическую характеристику концентрации двумерного изображения  $f(x, y)$  около его центра тяжести  $(x_c, y_c)$ . Для этой цели ищем кривую, окружающую точку  $(x_c, y_c)$ , и такую, что если единица “массы” равномерно распределена по площади, ограниченной этой кривой, то такое распределение должно иметь те же моменты первого и второго порядка, что и  $f(x, y)$ . В такой формулировке задача, конечно, является неопределенной. Поэтому ограничимся отысканием *эллипса*, обладающего указанными свойствами, который и будем называть *эллипсом рассеяния*.

В общем случае кривая спектра на плоскости  $xOy$  описывается следующим выражением

$$a_{11}x^2 + 2a_{12}xy + a_{22}y^2 + 2a_{13}x + 2a_{23}y + a_{33} = 0.$$

Для такого уравнения три величины

$$I = a_{11} + a_{22}, \quad D = \begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{vmatrix}, \quad A = \begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{vmatrix}$$

являются инвариантами относительно переноса и поворота осей. Они определяются свойствами кривой и не зависят от ее положения на плоскости.

Многие важные свойства кривой второго порядка могут быть изучены при помощи характеристической квадратичной формы.

$$F_0(x, y) = a_{11}x^2 + 2a_{12}xy + a_{22}y^2.$$

Интерес представляют корни ее характеристического уравнения

$$\begin{vmatrix} a_{11} - \lambda & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} - \lambda \end{vmatrix} = 0 \quad \text{или} \quad \lambda^2 - I\lambda + D = 0.$$

Инварианты  $I, D$  следующим образом выражаются через корни характеристического уравнения

$$I = \lambda_1 + \lambda_2, \quad D = \lambda_1 \lambda_2.$$

В случае, если  $D \neq 0$ , кривая называется центральной и перенос начала координат в точку ее центра масс приводит уравнение кривой к виду

$$a_{11}x_0^2 + 2a_{12}x_0y_0 + a_{22}y_0^2 + A/D = 0,$$

где  $x_0, y_0$  - координаты относительно новой системы осей. Приведенное выше уравнение определяет эллипсоид рассеивания:

$$\sum_{i=1}^n \sum_{k=1}^n \Lambda_{ik} x_i x_k = n + 2,$$

где  $(\Lambda_{ik}) = (\mu_{ik})^{-1}$  есть матрица, обратная матрице моментов, если коэффициенты кривой  $a_{ij}$  являются элементами матрицы, обратной матрице моментов,

$$\begin{vmatrix} \mu_{02} & \mu_{11} \\ \mu_{11} & \mu_{20} \end{vmatrix}^{-1} = \begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{vmatrix}, \quad a - \frac{A}{D} = n + 2,$$

где  $n$  - размерность эллипсоида (для двумерных изображений  $n=2$  - "эллипс").

Таким образом:

$$a_{11} = \mu_{02} / M, \quad a_{12} = -\mu_{11}, \quad a_{22} = \mu_{20} / M,$$

$$\text{где } M = \mu_{02}\mu_{20} - \mu_{11}^2.$$

Введем понятие главной оси кривой второго порядка. *Главной осью кривой второго порядка* называется диаметр, перпендикулярный к сопряженным ему хордам. Каждая центральная кривая второго порядка либо имеет две взаимно перпендикулярные главные оси, либо каждый диаметр представляет собой главную ось (в случае окружности). Угол между положительным направлением оси  $Ox$  и главной полуосью (в случае эллипса) определяется формулой:

$$\varphi = \frac{1}{2} \arctg \left( \frac{2a_{12}}{a_{11} - a_{22}} \right) = \frac{1}{2} \arctg \left( \frac{2a_{11}}{\mu_{02} - \mu_{20}} \right).$$

Если ввести *главную систему координат*, совершив дополнительно поворот на указанный угол, то уравнение можно свести к стандартному уравнению эллипса:

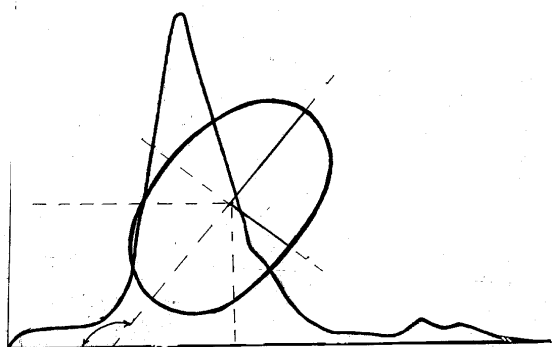
$$\frac{x^2}{a^2} + \frac{y^2}{b^2} = 1,$$

где  $a$  и  $b$  - длины главных полуосей эллипса определяются выражением

$$a^2 = -\frac{1}{\lambda_2} \frac{A}{D} = -\frac{A}{\lambda_1 \lambda_2^2}, b^2 = -\frac{1}{\lambda_1} \frac{A}{D} = -\frac{A}{\lambda_1^2 \lambda_2},$$

Таким образом, мы получили три параметра  $(a, b, \varphi)$ , которыми и будем характеризовать изображение.

Изложенные выше методы анализа изображений были использованы для обработки и нахождения численных характеристик спектров флуоресценции проростков пшеницы с различным азотным корневым питанием, полученных группой исследователей ИОА СО РАН (Андриенко О.С., Воробьева Л.П., Климкин В.М., Сокоиков В.Г., Федорищев В.Н.) и ТГУ (Астафурова Т.П., Борозновская Н.Н). Записи спектров представлены на рисунке. Спектры на крыльях спектрального диапазона, а именно в точках  $\lambda=275$  нм и  $\lambda=800$  нм, были искусственно “обнулены” — спектральная кривая в этих точках была соединена отрезками прямой с “нулевой” линией записи спектра. Таким образом спектр был превращен в образ, подлежащий обработке. Затем для указанных спектральных кривых по специально разработанной вычислительной программе были найдены моменты, центры тяжести, оси эллипса и угол его наклона. В таблице приведены результаты обработки спектров.



В таблице линейные размеры даны в пикселах, угол в градусах, разрешение 38 пикселей на дюйм линейного размера записи спектра. Начало координат совмещено с левым нижним пикселем. Рисунок поясняет физический смысл величин  $x_i, y_i, a_i, b_i, f_i$ :  $x_i, y_i$  — координаты центра тяжести;  $a_i, b_i$  — полуоси эллипса;  $f_i$  — угол наклона эллипса.

Как видно из приведенных в таблице значений, все определяемые параметры значимо различаются для всех образцов спектров.

Параметры спектра	Контрольный спектр	Спектр растений с подкормкой $\text{NH}_4$	Спектр растений с подкормкой $\text{NO}_3$
$x_i$	65	49	52
$y_i$	111	117	121
$a_i$	23.96	24.0	23.81
$b_i$	17.38	15.48	15.77
$f_i$	122.7	109.4	121.7

Видно, что центры тяжести спектров для проростков с подкормкой смещены на величину 10-15% относительно центра тяжести спектров для контрольных проростков. Формы кривых близки, но для проростков с подкормкой крылья основного пика приподняты (разница в длине осей эллипсоида более выражена, чем у контрольного). Таким образом, методы анализа изображений дают возможность найти ряд числовых характеристик спектров флуоресценции, позволяющих объективно сопоставлять их между собой и эталоном.