

М. Г. Коротков

### **АЛГОРИТМ КОЛИЧЕСТВЕННОЙ ОЦЕНКИ КОНЦЕНТРАЦИИ ВЕЩЕСТВА НА ОСНОВЕ ЦИФРОВОГО ИЗОБРАЖЕНИЯ**

*В работе сделана попытка разработать алгоритм, позволяющий по цифровому изображению следов (пятен) на поверхности тонкого сорбента, оставленных растворами одного вещества разных концентраций, получить количественную зависимость объемной концентрации вещества в растворе от параметров изображения.*

*Ключевые слова: цифровое изображение, концентрация вещества, количественная тонкослойная хроматография.*

M. G. Korotkov

### **ALGORITHM OF THE QUANTITATIVE ASSESSMENT OF CONCENTRATION OF SUBSTANCE ON THE BASIS OF THE DIGITAL IMAGE**

*In operation the attempt to develop the algorithm allowing to receive according to the digital image of the marks (spots) on a surface of a thin sorbent left by solutions of one substance of different concentration the quantitative dependence of volume concentration of substance in solution from image parameters is made.*

*Key words: digital image, concentration of substance, the quantitative thin layer chromatography.*

---

#### **Введение**

В работе сделана попытка разработать алгоритм, позволяющий по цифровому изображению следов (пятен) на поверхности тонкого сорбента, оставленных растворами одного вещества разных концентраций, получить количественную зависимость объемной концентрации вещества в растворе от параметров изображения.

Подобные задачи встречаются, например, в области количественной тонкослойной хроматографии [1] в сочетании с цифровой цветометрией [2]. В данной сфере существует запрос на недорогую технологию, позволяющую получать приемлемые по точности результаты при относительно небольших трудозатратах исследователя.

Однако предлагаемое на современном рынке автоматическое и специализированное оборудование для проведения количественной ТСХ весьма дорого, и для широкого применения, например, в учебном процессе, его использование проблематично.

В качестве альтернативы некоторые авторы предлагают использовать недорогое фотографическое оборудование и доступное программное обеспечение, например, графический редактор Adobe Photoshop и табличный процессор Microsoft Excel. При этом отсутствует подробное описание предлагаемых алгоритмов [3].

В данной статье авторами предлагается к рассмотрению один из возможных подходов к решению этой проблемы.

#### **Постановка задачи**

В качестве исходных данных выступает цифровое изображение следов (пятен), сформировавшихся на тонкослойном сорбенте растворами одного и того же вещества с разными объемными концентрациями. Полагается, что некоторые концентрации могут быть неизвестными (рис. 1).

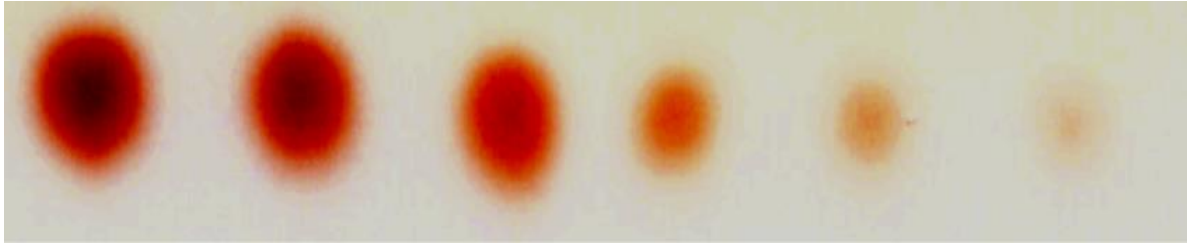


Рисунок 1 – Тонкослойный сорбент с пятнами

Дальнейшие рассуждения предполагают следующие допущения.

1. Изображения получены фотографированием в проходящем свете либо сканированием пластины сорбента, впитавшего раствор.
2. Растворенное вещество и сорбент поглощают свет, растворитель считается прозрачным.
3. Объемы растворов, сформировавшие все пятна, равны.

### Построение математической модели

В основе предлагаемого к рассмотрению алгоритма положен основной закон поглощения света [4]. С учетом поглощения света сорбентом имеем:

$$I = I_0 \cdot e^{-\varepsilon \cdot C_s \cdot l - s \cdot l}, \quad (1)$$

где  $I_0$  – интенсивность падающего света,  $I$  – интенсивность света после прохождения слоя сорбента толщиной  $l$ .  $C_s$  – концентрация исследуемого вещества в сорбенте.  $\varepsilon$  и  $s$  – константы, учитывающие поглощающие свет свойства рассматриваемого вещества и сорбента, соответственно.

Мы принципиально не акцентируем внимание на числовых значениях вводимых констант, поскольку в дальнейшем их знание не потребуется.

Прологарифмировав (1) и проведя очевидные преобразования, получим

$$C_s = a \cdot \ln I + b, \quad (2)$$

$$a = -\frac{1}{\varepsilon \cdot l}, \quad b = -\frac{1}{\varepsilon \cdot l} \cdot (s \cdot l - \ln I_0).$$

где

Рассмотрим прямоугольник из пикселей изображения, содержащий одно пятно. Пусть  $M$  и  $N$  – количество пикселей по вертикали и горизонтали соответственно.

В качестве величины, пропорциональной интенсивности света для отдельного пикселя, возьмем

$$I_{m,n} = k \cdot (\alpha \cdot R_{m,n} + \beta \cdot G_{m,n} + \gamma \cdot B_{m,n}) \quad m = 1..M, \quad n = 1..N,$$

где  $k$  – некоторый неизвестный коэффициент пропорциональности,  $R_{m,n}$ ,  $G_{m,n}$ ,  $B_{m,n}$  – красная, зеленая и синяя составляющая пикселя,  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$  – средние энергии фотонов красного, зеленого и синего диапазона электромагнитных волн. Тогда из (2) для участка сорбента, соответствующего данному пикселю, имеем:

$$C_{s_{m,n}} = a \cdot \ln(\alpha \cdot R_{m,n} + \beta \cdot G_{m,n} + \gamma \cdot B_{m,n}) + a \cdot \ln k + b$$

$$m = 1..M, \quad n = 1..N \quad (3)$$

или, переобозначив,

$$C_{s_{m,n}} = a \cdot \ln(\alpha \cdot R_{m,n} + \beta \cdot G_{m,n} + \gamma \cdot B_{m,n}) + b'$$

$$m = 1..M, \quad n = 1..N \quad (4)$$

Если  $C$  – объемная концентрация растворенного вещества,  $V$  – объем раствора, приведший к формированию рассматриваемого пятна, то количество вещества в прямоугольной области сорбента равно  $C \cdot V$ . С другой стороны, оно равно количеству вещества, заключенного в прямоугольнике сорбента, т. е.

$$C \cdot V = \sum_{m=1}^M \sum_{n=1}^N C_{s_{m,n}} \cdot V_p, \quad (5)$$

где  $V_p$  – объем участка сорбента, соответствующий одному пикселю изображения. Из (5) имеем

$$C = A \cdot \sum_{m=1}^M \sum_{n=1}^N \ln(\alpha \cdot R_{m,n} + \beta \cdot G_{m,n} + \gamma \cdot B_{m,n}) + B, \quad (6)$$

$$A = \frac{V_p}{V} \cdot a, \quad B = \frac{V_p}{V} \cdot b' \cdot M \cdot N.$$

где

$$P = \sum_{m=1}^M \sum_{n=1}^N \ln(\alpha \cdot R_{m,n} + \beta \cdot G_{m,n} + \gamma \cdot B_{m,n}) \quad (7)$$

– величина, значение которой однозначно рассчитывается из изображения  $M \times N$  пикселей. Т. е. имеем:

$$C = A \cdot P + B \quad (8)$$

$A$  – константа.  $B$  будет константой для всех пятен, если размеры изображений для всех пятен по вертикали и горизонтали будут  $M \times N$ .

Значения  $A$  и  $B$  находятся методом наименьших квадратов [5], поскольку для имеющегося на цифровом изображении набора пятен соответствующие им концентрации известны (возможно, за некоторым исключением).

### Этапы алгоритма

Таким образом, для выявления количественной зависимости концентрации раствора от параметров цифрового изображения (8) первым этапом будет локализация пятен прямоугольниками пикселей одинакового размера. Это может быть сделано либо вручную, либо автоматически. Рассмотрение деталей алгоритма автоматической локализации пятен лежит за рамками данной статьи. К тому же здесь возможны разные подходы.

На втором этапе по формуле (7) для каждого пятна вычисляется величина

$$P = \sum_{m=1}^M \sum_{n=1}^N \ln(\alpha \cdot R_{m,n} + \beta \cdot G_{m,n} + \gamma \cdot B_{m,n})$$

На третьем этапе по известным значениям концентраций и соответствующих им значениям  $P$  методом наименьших квадратов строится уравнение (8).

На четвертом этапе подстановкой в (8) значения  $P$  пятна, для которого концентрация неизвестна, находится искомое значение концентрации.

### Результаты численных экспериментов

Для тестирования предложенного к рассмотрению алгоритма была проведена серия численных экспериментов, подтвердивших правильность выбранного подхода, и выявившая некоторые ограничения его применимости в случае плохого качества исходного цифрового изображения.

Проиллюстрируем численный эксперимент примером изображения (рис. 1). Значения соответствующих концентраций вещества (в относительных единицах) приведены в таблице 1.

Таблица 1

№ пятна	1	2	3	4	5	6
Концентрация вещества (фактическая)	1	0,75	0,5	0,25	0,1	0,05

Эксперимент строился следующим образом. Все значения концентраций, кроме № 4, полагались известными. Требовалось, применив предлагаемый к рассмотрению алгоритм, количественно оценить значение неизвестной концентрации и сравнить с фактической.

В результате было получено значение, равное 0,228 при 0,25 реальном.

Относительная погрешность составила 8,8 %. Такая погрешность представляется удовлетворительной с учетом качества исходного изображения и точности дозирования наносимого на сорбент вещества. В таблице 2 приведены значения концентрации, рассчитанные по формуле (8).

Таблица 2

№ пятна	1	2	3	4	5	6
Концентрация вещества по (8)	0,933	0,781	0,569	0,228	0,098	0,043

### Выводы

Результаты экспериментов, проведенных в процессе разработки и тестирования алгоритма, позволяют сформулировать следующие выводы:

1. При нанесении растворов с известными концентрациями на сорбент требуется определенная точность дозирования их объемов.
2. Результаты реализации предлагаемого к рассмотрению алгоритма существенно зависят от способа получения и качества исходного цифрового изображения.
3. Поскольку поглощающие способности конкретного вещества зависят от длины волны падающего света, а предлагаемый алгоритм претендует на некоторую универсальность, при его совершенствовании в дальнейшем, возможно, придется решать задачу по оптимизации значений  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$  в пределах соответствующих диапазонов красного, зеленого и синего света.

В целом полученные в работе результаты, на наш взгляд, можно считать достаточно удовлетворительными, если ориентироваться на близость рассчитанных и фактических значений концентраций.

### Литература:

1. Основы тонкослойной хроматографии (планарная хроматография). Т. 1–2 : перевод с английского / Ф. Гейсс ; под ред. В. Г. Березкина. – Москва : Мир, 1988.
2. Кочубей, В. И. Определение концентрации веществ при помощи спектрофотометрии : рук. к лаб. работе / В. И. Кочубей. – Саратов, 2008. – 14 с.
3. Усовершенствование способа определения фенолов по цветным реакциям с применением цифровых технологий / О. Б. Рудаков [и др.] // Аналитика и контроль. – 2012. – Т. 16, № 4. – С. 368–377.
4. Алешкевич, В. А. Оптика : учеб. для студентов высш. учеб. заведений, обучающихся по направлению подгот. и специальности «Физика» / В. А. Алешкевич. – Москва : Физматлит, 2011. – 318, [1] с. – (Университетский курс общей физики).
5. Рябенский, В. С. Введение в вычислительную математику / В. С. Рябенский. – 2-е изд., испр. – Москва : Физматлит : Наука, 2000. – 294 с.