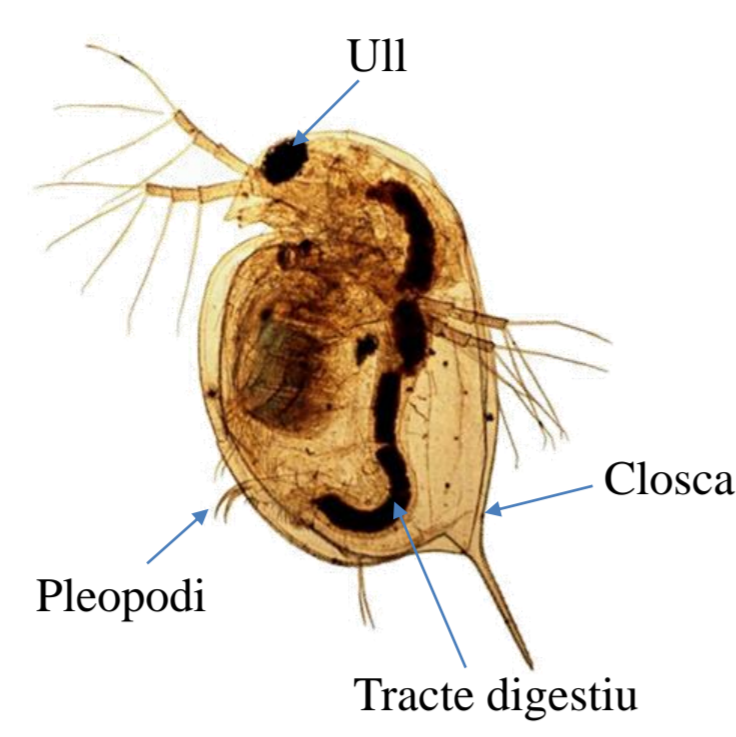


# Estudi del teixit de *Daphnia magna* mitjançant imatges hiperespectrals i mètodes quimiomètrics

## INTRODUCCIÓ

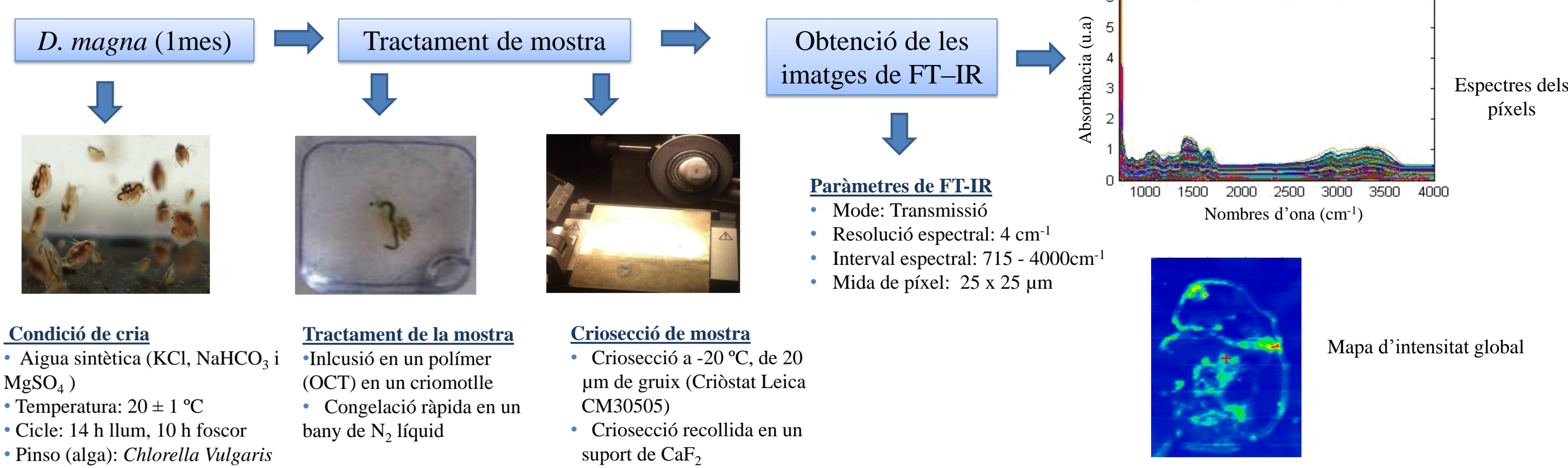
La *Daphnia magna* és un crustaci utilitzat freqüentment per a l'estudi dels efectes de toxicitat en el medi ambient per la seva sensibilitat als contaminants. L'objectiu d'aquest treball és establir una metodologia analítica per al seu estudi mitjançant imatges hiperespectrals i mètodes quimiomètrics [1]. Les imatges hiperespectrals permeten analitzar seccions de l'animal preservant la seva morfologia i proporcionant informació estructural de gran qualitat, inclosa en els milers d'espectres relacionats amb els píxels de la imatge. S'ha utilitzat el mètode de Resolució Multivariant de Corbes per Mínims Quadrats Alternats (MCR-ALS) [2] per tal d'interpretar la gran quantitat d'informació obtinguda de les imatges de la mostra biològica.

### Anatomia de *D. magna*



## PART EXPERIMENTAL

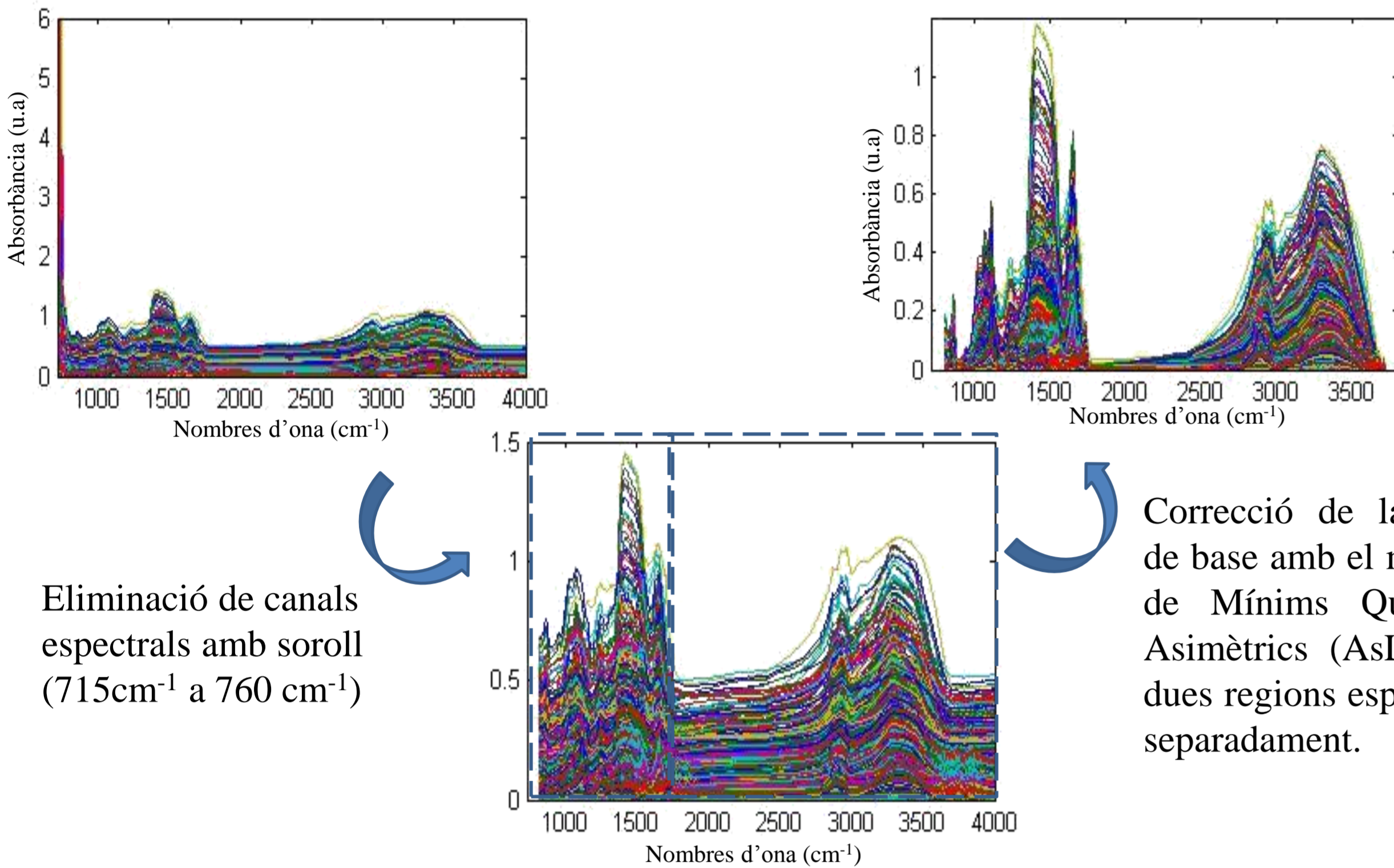
### Preparació de les mostres



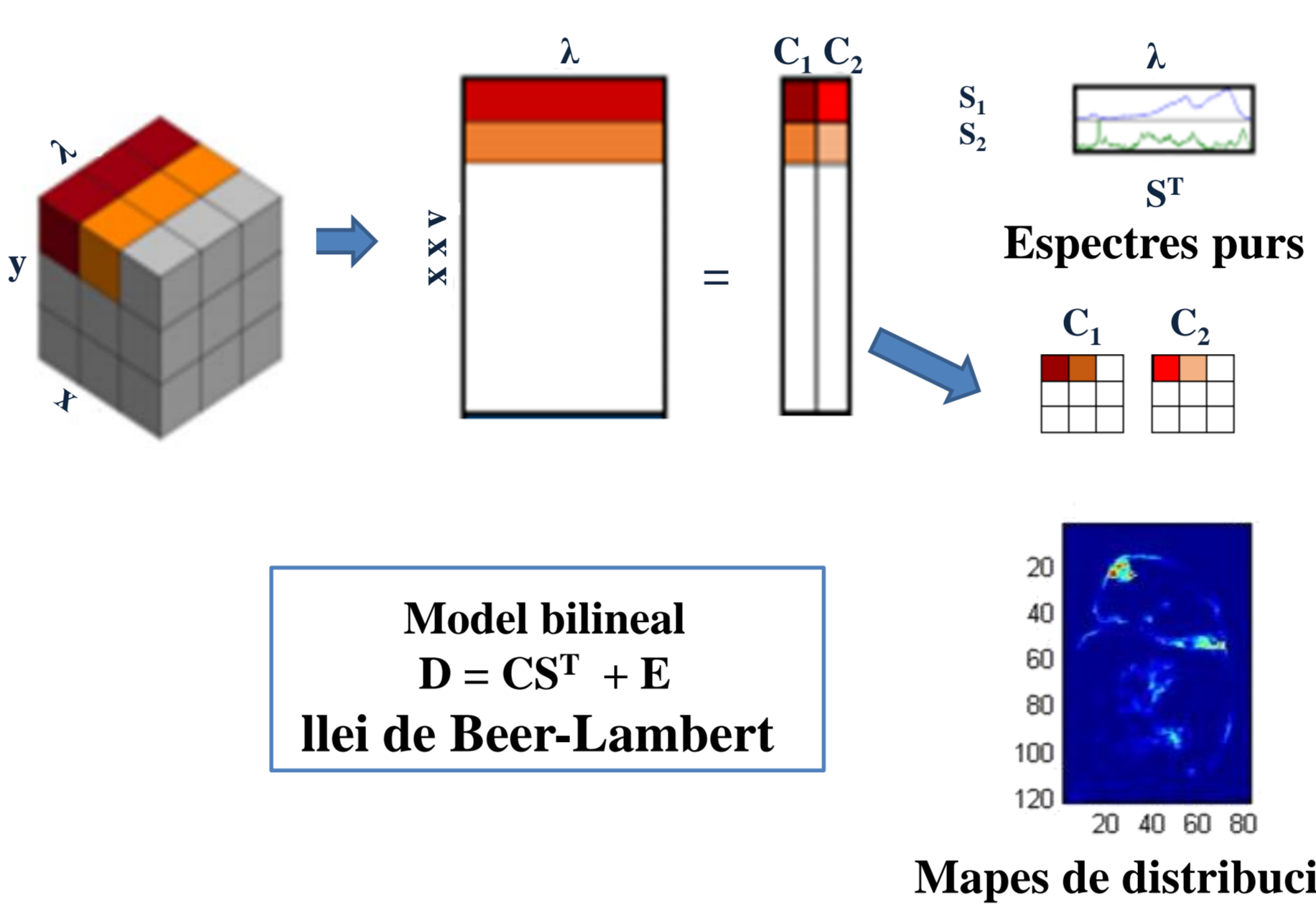
## TRACTAMENT DE DADES

### Dades preprocessades

#### Dades de FT-IR

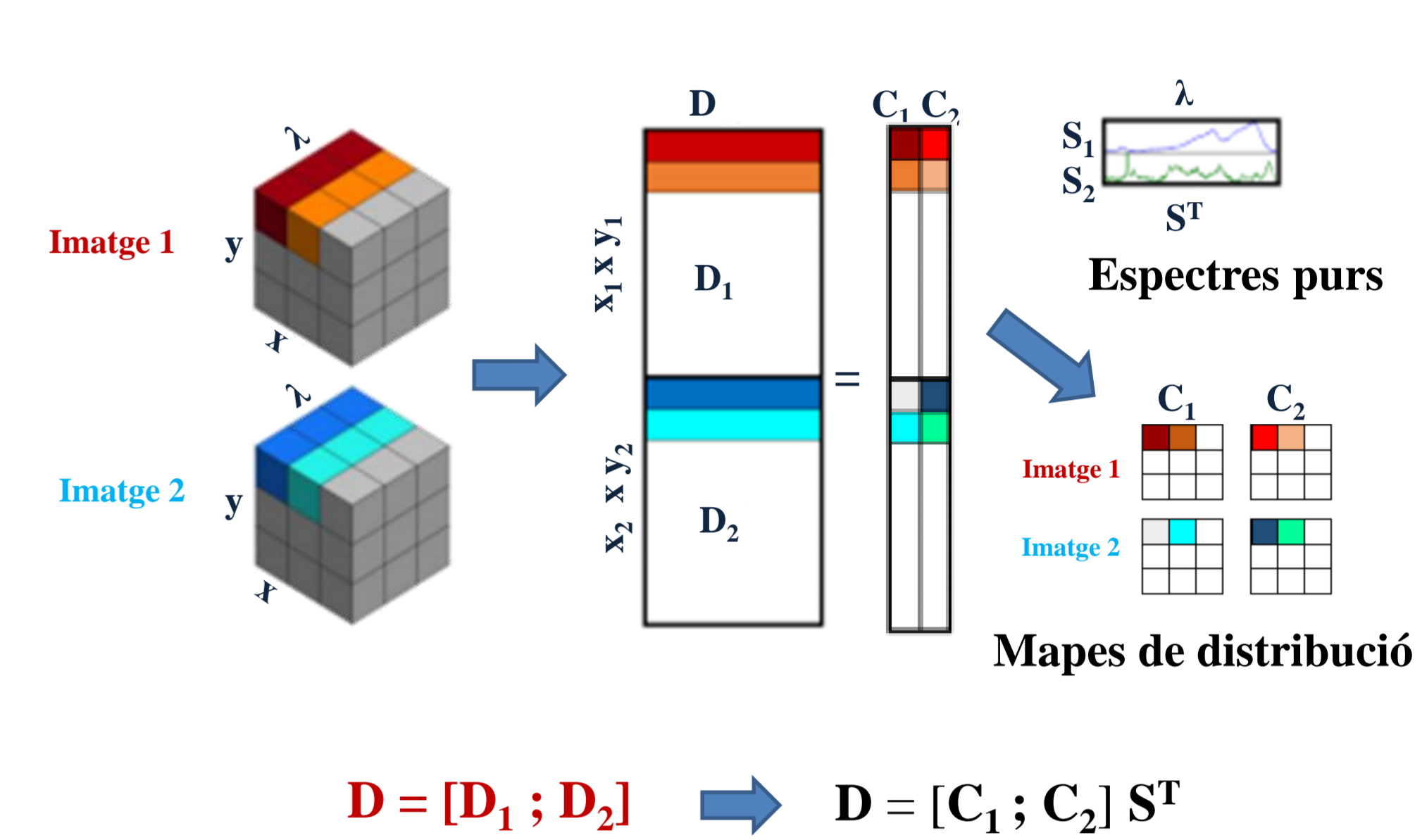


### MCR-ALS aplicat a imatges hiperespectrals



Les imatges hiperespectrals són representades en forma d'un cub on les dimensions x i y corresponen a les dimensions dels píxels i la λ indica les longituds d'ona. El mètode MCR-ALS descompon la matriu d'espectres dels píxels (D) en perfils d'espectres purs (S<sup>T</sup>) i mapes de distribució (C).

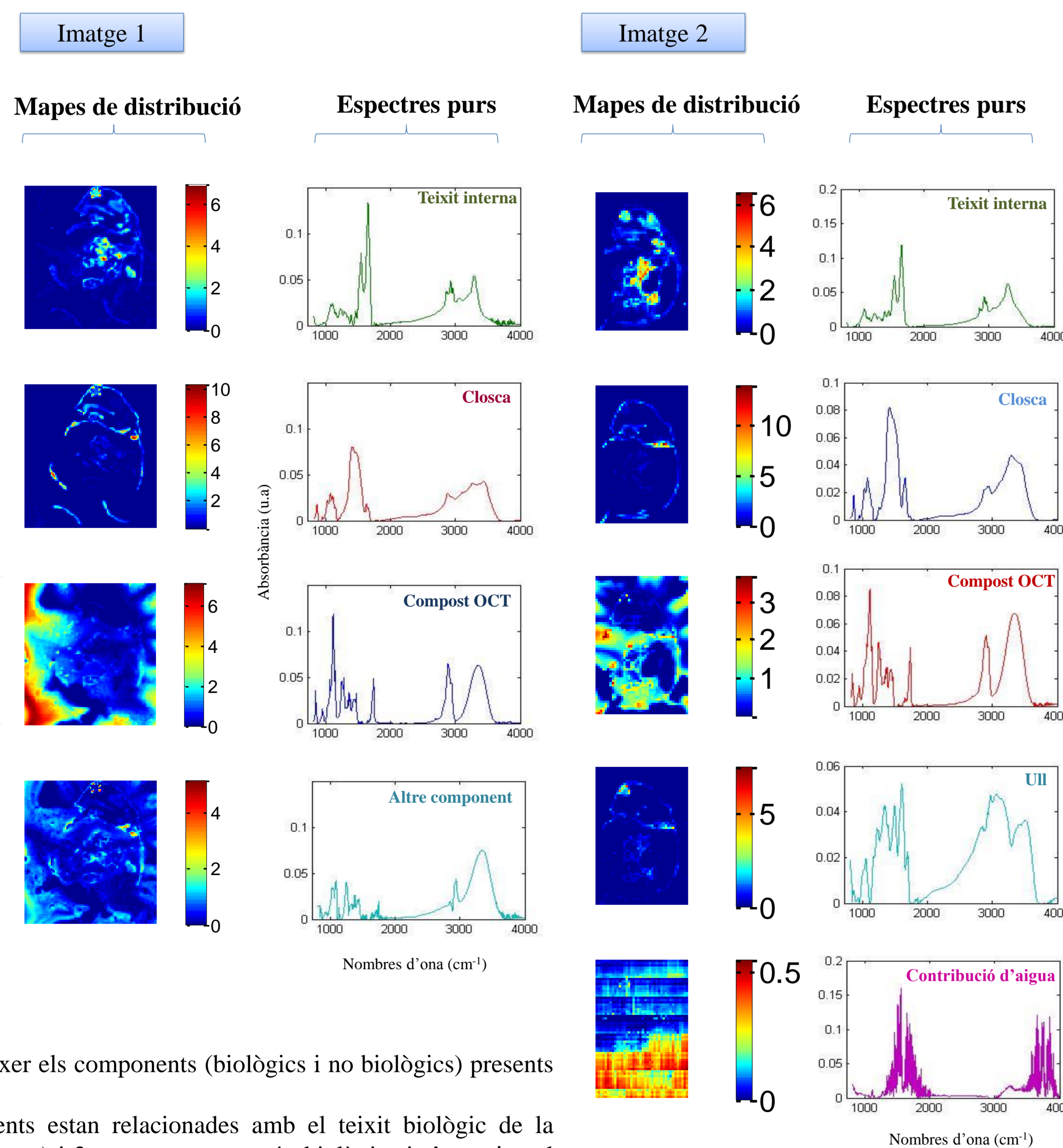
### Estructures multiconjunt (Multiset)



La matriu de dades única d'una imatge no conté suficient informació. L'anàlisi de multiconjunt de imatges simultàniament permet obtenir models MCR-ALS més robustos i una millor interpretació dels resultats.

## RESULTATS I DISCUSSIÓ

### Resolució de les imatges individualment



El mètode MCR-ALS permet reconèixer els components (biològics i no biològics) presents en les imatges de la *Daphnia magna*:

- En la imatge 1, dos components estan relacionades amb el teixit biològic de la *Daphnia magna* (teixit intern i closca) i 2 components no són biològics i s'associen al medi OCT.
- En la imatge 2, 3 components són biològics (els dos de la imatge 1 un present a la zona dels ulls) i dos components no biològics es reconeixen com OCT i vapor d'aigua.
- La similitud dels components resolts en les imatges 1 i 2 ha permès fer un estudi usant una estructura multiconjunt que incorpora les dues imatges.

### Paràmetres dels models MCR-ALS

IMATGES	Nombre de components	VARIÀNCIA EXPLICADA (%)
Imatge 1	4	99,4
Imatge 2	5	99,3
Multiconjunt	5	99,0

## CONCLUSIONS

- S'ha establert una metodologia per a l'estudi i interpretació d'imatges hiperespectrals FT-IR utilitzant crioseccions de *Daphnia magna*.
- El mètode MCR-ALS permet diferenciar aquells components biològics del teixit d'altres artefactes deguts al propi instrument o al senyal del medi de la mostra. S'ha comprovat que és un mètode molt eficaç per a la resolució d'imatges hiperespectrals.
- L'anàlisi conjunta de diverses imatges millora la qualitat d'interpretació dels resultats.

## TREBALL FUTUR

- Avaluar l'efecte d'alguns contaminants com Pyriproxyfen i Tributilestany fent servir imatges hiperespectrals amb espectroscòpia de FT-IR i Raman.
- Realitzar una anàlisi conjunta de les imatges hiperespectrals obtingudes amb les dues tècniques espectroscòpiques per a millorar la interpretació i obtenir més informació sobre la mostra biològica.

## REFERÈNCIES

- [1] de Juan, A.; Piqueras, S. Maedar, M.; Hancewicz, T. Duponchel, L.; Tauler, R. "Chemometric Tools for image Analysis" *Infrared and Raman Spectroscopic imaging*, Wiley-VCH, 2009, 68-73.  
 [2] de Juan, A.; Jaumot, J.; Tauler, R.; Multivariate Curve Resolution (MCR). Solving the mixture analysis problem. *Anal. Methods*. 2014, 6, 4964-4976.

## AGRAÏMENTS

Aquesta recerca ha estat financiada pel Consell Europeu de Recerca en el Programa de la Unió Europea Setè Marc (PM / 2007-2013) / ERC acord de gran n. 32073 (projecte CHEMAGEB)