

Vaizdų technologijos T 111

**AUTOMATINĖ DVIMATĖS ELEKTROFOREZĖS GELIŲ
SU MAŽIAUSIAIS GEOMETRINIAIS IŠKRAIPYMAIS
ATRANKA**

Dalius Matuzevičius

*Vilniaus Gedimino technikos universitetas
El. paštas: dalius.matuzevicius@el.vgtu.lt*

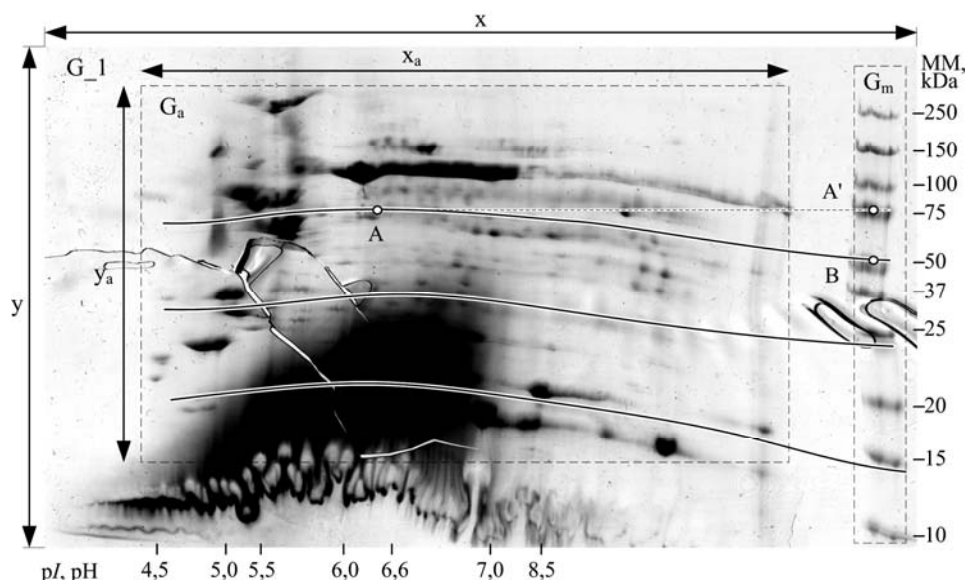
Santrauka. Straipsnyje pristatomas algoritmas, skirtas automatiniam kokybiškiausio dvimatės elektroforezės gelio nustatymui. Kokybės kriterijumi yra vertikalių geometrinių iškreipimų gelyje kiekis. Iš biocheminio eksperimento metu gautos grupės gelių atrinkamas vienas gelis su mažiausiais vertikaliais geometrinių iškreipimais. Vertikalūs iškreipimai, dėl kurių vienodos molekulinės masės baltymai išsidėsto ne horizontalėje, turi didesnę įtaką baltymų parametru nustatymui. Darbe pristatomas geometrinių iškreipimų įvertinimo algoritmas, jo taikymas atrinkant kokybiškiausią gelį bei algoritmo rezultatų palyginimas su eksperto gelių atrankos rezultatais. Reikalui esant algoritmas gali būti adaptuojamas horizontalių iškreipimų įvertinimui.

Reikšminiai žodžiai: dvimatė elektroforezė, 2ME, geometriniai iškreipimai, automatinė gelių analizė.

Įvadas

Baltymai – plačiai gyvojoje gamtoje paplitusios makromolekulės. Tai svarbiausi natūralūs junginiai, formuojantys ląstelių ir audinių struktūrą, reguliuojantys viso organizmo veiklą, dalyvaujantys sudėtingose cheminėse reakcijose. Vienas iš dažniausiai naudojamų baltymų laboratorinių tyrimų yra dvimatė elektroforezė (2ME) (O'Farrell 1975). Izofokusavimo ir elektroforezės metu

peptidai paskleidžiami maždaug A5 lapo dydžio gelio plote pagal dvi savybes: pirmu etapu pagal izoelektrinį tašką (pI), antru – pagal molekulinę masę (MM) (1 pav.). Skirstant baltymus pagal MM, jie juda geliu iš viršaus žemyn. Kuo baltymas yra arčiau apatinio gelio krašto, tuo jo molekulinė masė yra mažesnė. Baltymo vertikalią padėtį palyginus su gelio šone esančiu masės markeriu (vertikali juostelė su 6–9 žinomos MM peptidais) nustatoma apytikslė dominančio baltymo MM (1 pav.).



1 pav. 2ME gelis G_1 su vertikaliais geometrinių iškreipimais: G_a – gelio aktyvi sritis, kurioje yra išskirstyti baltymai; G_m – molekulinės masės markeris. Gelyje trimis kreivėmis pažymėtos tos pačios molekulinės masės sritys. Dėl iškreipimų taškai A ir B yra ne vienoje horizontalioje tiesėje, todėl taške A esančio baltymo molekulinė masė būtų nustatyta 25 kDa didesnė

Fig. 1. Two-dimensional electrophoresis gel G_1 with vertical geometrical distortions: G_a – active area; G_m – MM marker. By three curves levels of similar molecular mass are marked. Because of distortions points A and B are not on the same horizontal line and estimated MM for point A will be larger by 25 kDa

Atliekant tyrimus ne visi veiksniai, įtakojantys 2ME eksperimento rezultatus, yra valdomi arba yra nepakankamai tiksliai valdomi, todėl mažėja rezultatų tikslumas. Dvimatės elektroforezės metu neišvengiami baltymų judėjimo netolygumai – atskiriant baltymus pagal masę, gelio pakraščiuose ir viduryje molekulių judėjimo greičiai nėra identiški, todėl gaunami didesni ar mažesni baltymų pėdsakų vietos vertikalūs poslinkiai nuo konkrečios molekulinės masės buvimą žyminčios horizontalės (Aittokallio 2005). Tokie iškraipymai trukdo gelyje matomus baltymų pėdsakus tiksliai susieti su šone esančiu masės markeriu ir nustatyti baltymo MM. Šie iškraipymai gali būti sumažinti sutapdinimo metu. Kadangi biochemijoje eksperimentų tikslas yra rasti skirtumus tarp bandinių, t. y. palyginti kelis 2ME gelius tarpusavyje ir rasti skirtumus juose (kurių baltymų kiekiai ir kiek pakito) (Matuzevičius *et al.* 2008; Matuzevičius, Serackis 2006), todėl neišvengiamai turi būti atliktas gelių sutapdinimas. Šio proceso metu reikia rasti tokias geometrines transformacijas, kad po jų atitinkamų baltymų pėdsakai iš skirtingų gelių būtų tose pačiose vietose (Matuzevičius, Navakauskas 2005; Dowsey *et al.* 2003).

Gelių sutapdinimui yra parenkamas pagrindinis gelis, ant kurio bus uždėti visi kiti geliai. Vadinasi parinkus gelį, kuris yra mažiausiai paveiktas geometrinių iškraipymų ir transformuojant kitus gelius ant jo, visi geliai bus su mažiausiais iškraipymais iš visų egzistavusių eksperimentinėje 2ME gelių grupėje. Kadangi įprastų eksperimentų metu sukuriama nemaža grupė gelių (Luhn *et al.* 2003), todėl didėja tikimybė rasti toje grupėje gelį, kuris turės pakankamai mažus iškraipymus. Todėl svarbu atrinkti gelį, kuris būtų mažiausiai iškraipytas. Taip pat svarbu atrinkimą atlikti kompiuterizuotais būdais, siekiant automatizuoti procesus laboratorijose, mažinti žmogiškas klaidas bei spartinti tyrimus (Dowsey, Yang 2008).

Straipsnyje pateiktas kokybiškiausio gelio, kaip turinčio mažiausiai vertikalų geometrinių iškraipymų, nustatymo algoritmas. Galiausiai algoritmo rezultatai palyginami su eksperto atrinktais, jo nuomone mažiausiai iškraipytais geliais.

Iškraipymų įvertinimo principas

Norint įvertinti vertikalūs geometrinius iškraipymus, reikia išskirti vaizde tas vietas ir struktūras, kurios būtų paveiktos geometrinių iškraipymų ir proporcingai perteiktų poveikio dydį. Vertikalūs iškraipymai labiausiai atsispindi horizontalių linijinių struktūrų deformacijose, todėl reikia išskirti šias struktūras. Horizontalias struktū-

ras turi horizontaliai išsitusios baltymų pėdsakų „uodegos“. Taip pat galima matyti ir fono elementų, fonui priklausančių darinių, kurie suformuoti ne baltymų, o atsiradę dėl priemaišų likučių bandiniuose. Šios fono struktūros dažnai būna linijinio pobūdžio, tačiau neryškios, todėl reikia jas rasti ir sustiprinti. Geliuose taip pat būna baltymų grupės, kurios sudarytos dėl horizontaliai šalia išsidėsčiusių baltymų pėdsakų. Dažnai baltymų pėdsakai būna susijungę tarpusavyje „uodegomis“. Visi išvardinti dariniai būtų išsidėstę horizontalioje tiesėje, jei nebūtų geometrinių iškraipymų poveikio, todėl įvertinę pastarųjų struktūrų posvyrius nuo horizontalės, galima įvertinti kiek daug yra perkreiptas gelis, kiek daugiau viena gelio dalis yra pasislinkusi nei kita.

Reikalingi įrankiai, kurie galėtų išskirti tik tas 2ME gelio struktūras, kurios suteiktų tinkamus iškraipymų požymius. Tačiau daug išvardintų struktūrų yra neryškios, paveiktos triukšmo (triukšmui priklauso ir vertikalios struktūros), todėl, atsižvelgiant į išvardintas pastabas, sudaryta apibendrinta išskyrimo eiga tokia: sustiprinamos artimos horizontalioms struktūros, jos aproksimuojamos linijomis, įvertinamas linijų posvyris. Detalus sudarytas algoritmas susideda iš 7 žingsnių: a) filtravimas asimetriniu medianos filtru; b) horizontalus vaizdo glodinimas; c) kontūrų išskyrimas modifikuotu Canny detektoriumi; d) trumpų kontūrų segmentų šalinimas; e) kontūrų aproksimavimas daugianariais; f) posvyrio koeficientų filtravimas; g) geometrinių iškraipymų įvertinimas. Šie žingsniai ir jų realizavimas detaliau aptartas kitame skyriuje.

Vertikalų iškraipymų įvertinimo algoritmas

1. *Filtravimas asimetriniu medianos filtru.* Pirmu žingsniu gelio vaizdas $f(x, y)$ filtruojamas medianos filtru (Matuzevičius, Navakauskas 2005; Gonzalez *et al.* 2003). Medianos filtras pasižymi savybe selektyviai nufiltruoti impulsinio tipo triukšmą. Šiame etape medianos filtras naudojamas vertikalų kontrastingų brūkšnių slopinimui, todėl parinktas filtro langas $S_{x,y}$ yra 9×1 vaizdo taškų (stulpelių \times eilučių) dydžio:

$$g(x, y) = \text{median}_{(s,t) \in S_{x,y}} \{f_{x,y}(s, t)\}, \quad (1)$$

čia: $g(x, y)$ – gelio vaizdas po filtravimo $S_{x,y} = 9 \times 1$ medianos filtru; $S_{x,y}$ – filtro langas, kurio centras sutampa su vaizdo tašku, kurio koordinatė (x, y) ; $\{x, y\} = \{1, 2, \dots, M; 1, 2, \dots, N\}$; M, N – vaizdo dydis (stulpelių ir eilučių skaičius).

2. *Horizontalus vaizdo glodinimas.* Siekiant labiau išryškinti gelio horizontalias struktūras, jos „ištempiamos“ horizontaliai. Tai pasiekama vaizdą stipriai suglodinant x kryptimi. Panaudojus asimetrinį filtrą, kuris yra žemo dažnio filtras horizontalia kryptimi, o vertikalio kryptimi pralaidus visiems dažniams, pasiekiamas pageidautas rezultatas. Filtravimas įgyvendinamas dažnių srityje.

Tiesinio filtravimo pagrindas laiko ir dažnių srityje yra sąsūkos teorema, kurią galima užrašyti (Gonzalez *et al.* 2003; Sonka *et al.* 2007):

$$g(x, y) = f(x, y) * h(k, l),$$

$$\begin{matrix} \mathcal{F} \downarrow & \uparrow \mathcal{F}^{-1} \\ G(u, v) = F(u, v) \cdot H(u, v), \end{matrix} \quad (2)$$

čia: $*$ – sąsūkos operacija; \cdot – matricų daugybą panariui. Ši išraiška rodo, kad vaizdo filtravimui taikomą sąsūkos operaciją laiko srityje tarp pradinio vaizdo $f(x, y)$ ir filtro branduolio (filtro perdavimo funkcijos) $h(k, l)$ galima pakeisti jų Furjė transformacijų sandauga bei po to einančia atvirkštine Furjė transformacija.

Reikiamų charakteristikų filtrą patogiau sudaryti dažnių srityje. Idealus žemo dažnio filtras turi tokią dažnių perdavimo funkciją:

$$H(u, v) = \begin{cases} 1, & \text{kai } D(u, v) \leq D_c; \\ 0, & \text{kitur,} \end{cases} \quad (3)$$

čia: D_c – nukirtimo dažnis; $D(u, v)$ – atstumas nuo taško (u, v) iki filtro centro (u_0, v_0) .

Tada filtravimą galima atlikti tokia veiksmų seka:

$$g(x, y) = \text{Re} \left[\mathcal{F}^{-1} \left\{ \mathcal{F} \{ f(x, y) \} \cdot \text{fftshift} (H(u, v)) \right\} \right], \quad (4)$$

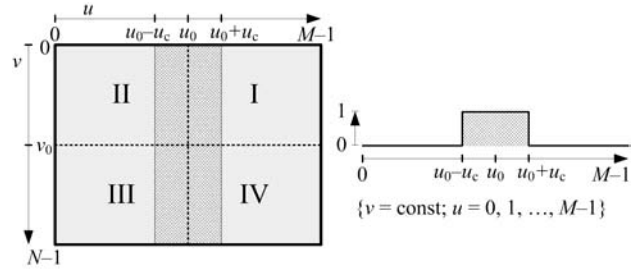
čia: fftshift – operacija sukeičianti I su III ir II su IV ketvirčius vietomis (žr. 2 pav.).

Gelio vaizdą reikia suglodyninti horizontaliai, bet vertikalio kryptimi palikti nepakeistą, todėl sudaroma asimetrinė dažnių perdavimo funkcija:

$$H(u, v) = \begin{cases} 1, & \text{kai } |u - u_0| \leq u_c; \\ 0, & \text{kitur,} \end{cases} \quad (5)$$

čia: $\{u, v\} = \{0, 2, \dots, M'-1; 0, 2, \dots, N'-1\}$; M', N' – tai 2^n reikšmės, artimiausios iš didesnės pusės vaizdo dydžiui M ir N ; $(u_0, v_0) = (M'/2, N'/2)$ – filtro centras; $u_c = D_c \cdot u_0$.

Parinktas nukirtimo dažnis $D_c = 0,035$. Tokio filtro struktūra atvaizduota 2 pav.



2 pav. Dažnių perdavimo funkcija geliu horizontaliam glodinimui

Fig. 2. Frequency transfer function for gel horizontal smoothing

3. *Kontūrų išskyrimas modifikuotu Canny detektoriumi.* Šio etapo tikslas yra išskirti linijinių struktūrų charakteringus kontūrus. Canny kraštų detektorius pasirinktas todėl, kad jis yra optimalus išskiriant pakopinius kraštus, paveiktus balto triukšmo (Canny 1986; Gonzalez *et al.* 2003; Sonka *et al.* 2007). Detektoriaus optimalumas apibūrinamas šiais kriterijais:

- geras aptikimas – algoritmas turi pažymėti vaizde kuo daugiau tikrų kraštų;
- geras lokalizavimas – pažymėti kraštai turi būti kuo arčiau tikrųjų kraštų vietų;
- aiškus atsakas – realus kraštas turi būti pažymėtas tik kartą, ir triukšmas vaizde neturėtų įtakoti klaidingo kraštų pažymėjimo.

Canny kraštų detektorius pažymi kraštus ieškodamas lokalių maksimumų vaizdo $f(x, y)$ gradientu. Vaizdo gradientas paskaičiuojamas naudojant filtro branduolį, suformuotą pagal Gauso funkcijos pirmo laipsnio išvestinę. Metodas naudoja du slenksčius stiprių ir silpnų kraštų nustatymui (histerėzės tipo slenksčio funkcija).

Turint gradientus x ir y kryptimis G_x ir G_y , kiekviename taške gradiento vertė apskaičiuojama:

$$D(x, y) = \sqrt{G_x^2 + G_y^2}, \quad (6)$$

o jo kryptis:

$$\alpha(x, y) = \tan^{-1} (G_y / G_x). \quad (7)$$

Atliekant nemaksimalių verčių panaikinimą, pažymimos vietos, kuriose galėtų būti kontūrai. Vieta pažymima tuomet, jei joje gradientas $D(x, y)$ kryptimi $\alpha(x, y)$ yra lokaliai maksimalus. Kitu žingsniu galimose kontūrams vietose pažymimi kontūrai pagal du slenksčius S_1 ir S_2 , kur $S_1 > S_2$. Jei $D(x, y) \geq S_1$, tada toje vietoje yra stiprus kraštas ir kontūras pažymimas iš karto. Jei $S_2 \leq D(x, y) < S_1$ kontūras pažymimas tik tuomet, jei jis yra besijungiantis su jau pažymėtu kontūru.

Modifikuotoje detektoriaus versijoje kontūras pažymimas ne pagal gradiento dydį, bet pagal jo kryptį – dviejų lygių slenksčio funkcija pritaikoma kontūro kryptčiai. Kadangi vaizde yra ir vertikalūs, ir horizontalūs kontūrai, o reikalingi tik horizontalūs, tai išskiriami tik horizontalia kryptimi dominuojantys kontūrai. Dviguba slenksčio funkcija išskiriant horizontalius kontūrus sumažina kontūrų trūkių dėl gradiento krypties svyravimo, kuriuos sukelia triukšmas vaizde, skaičių. Pagal pirmąjį slenkstį θ_1 kontūras pažymimas tada, jei jis artimas horizontalei, arba gradiento kryptis (krašto normalė) yra ne daugiau nukrypusi nuo 90° nei leidžia slenkstis. Jei gradiento kryptčių diapazonas yra intervale $\alpha = [0^\circ, 180^\circ)$, tai pirmojo slenksčio taisyklė tenkinama, jei:

$$|\alpha - 90^\circ| \leq \theta_1. \quad (8)$$

Kiti kraštai pažymimi kontūrais, jei jie tenkina antrojo slenksčio sąlygą ir yra besiliečiantys prie jau pažymėtų kontūrų:

$$\theta_1 < |\alpha - 90^\circ| \leq \theta_2 \quad (9)$$

Pirmasis ir antrasis slenksčiai buvo parinkti tokie: $\theta_1 = 15^\circ$ ir $\theta_2 = 30^\circ$.

4. *Trumpų kontūrų segmentų šalinimas.* Trumpi kontūrai pašalinami, nes jie arba būna klaidingai pasvirę, arba turi labai mažą įtaką iškraipymų nustatymui lyginant su ilgais (t. y., jie nereprezentatyvūs iškraipymų atžvilgiu; neatspindi tikrųjų iškraipymų). Yra trumpų kontūrų, kurie pasvirę ne dėl geometrinių deformacijų vaizde, o dėl to, kad žymi išpūstos formos baltymo pėdsako formą. Kontūrai pašalinami, jei jų ilgis mažesnis už $M_a/15$; M_a – gelio aktyviosios srities plotis vaizdo taškais.

5. *Kontūrų aproksimavimas daugianariais.* Šiame etape kontūrai, likę po 4 žingsnio trumpų segmentų naikinimo, aproksimuojami trečio laipsnio daugianariais:

$$y(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2 + a_3x^3. \quad (10)$$

Geriausia aproksimacija randama mažiausių kvadratų metodu – ieškoma tokių daugianario koeficientų, prie kurių kvadratinė klaida tarp modeliuojamų (aproksimuojamų) taškų ir sumodeliuotų taškų yra mažiausia. Uždavinį galima išspręsti randant perteklinės lygčių sistemos, sudarytos n taškų kontūro segmentui, apytikslį sprendinį:

$$\begin{bmatrix} 1 & x_1 & x_1^2 & x_1^3 \\ 1 & x_2 & x_2^2 & x_2^3 \\ 1 & x_3 & x_3^2 & x_3^3 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & x_n & x_n^2 & x_n^3 \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix}. \quad (11)$$

Lygčių sistema, užrašyta matricine forma:

$$\mathbf{X}\mathbf{a} = \mathbf{y}. \quad (12)$$

Jei matrica $\mathbf{X}^T\mathbf{X}$ yra neišsigimusi (invertuojama), perteklinės lygčių sistemos apytikslis sprendinys yra unikalus ir optimalus mažiausios kvadratinės klaidos atžvilgiu:

$$\min_{\mathbf{a}} \|\mathbf{X}\mathbf{a} - \mathbf{y}\|. \quad (13)$$

Apytikslis sprendinys randamas taip:

$$\mathbf{a} = (\mathbf{X}^T\mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T \mathbf{y}. \quad (14)$$

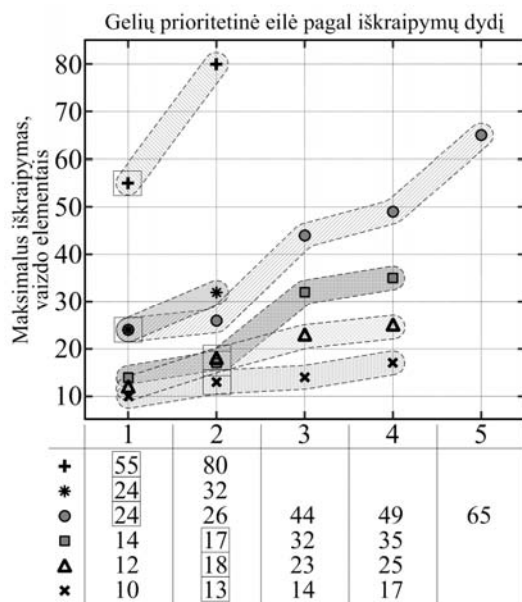
6. *Posvyrio koeficientų filtravimas.* Horizontalių struktūrų posvyris dėl geometrinių deformacijų konkrečiame taške x bus toks kaip daugianario liestinės tame taške posvyrio koeficientas, t. y. pirmos eilės išvestinė:

$$\alpha(x) = \frac{\partial y(x)}{\partial x} = a_1 + 2a_2x + 3a_3x^2. \quad (15)$$

Posvyrio koeficientus α galima susieti su viso gelio geometriniiais iškraipymais. Kadangi pasitaiko kontūrų, kurie yra daugiau pasvirę nei iškraipymai toje gelio vietoje arba kontūras yra lokaliai išlinkęs dėl baltymo pėdsako išsipūtimo, buvo įgyvendintas posvyrio koeficientų filtravimas, paskaičiuojant kelių greta esančių daugianarių, patenkančių į filtro lango apibrėžiamą sritį, posvyrio koeficientų medianą. Filtravimas sumažina atsitiktinai atsiradusius didelius posvyrus. Naudojamo medianos filtro dydis $S = 1 \times N_a/10$ – vieno vaizdo taško pločio ir dešimtosios aktyvios gelio srities aukščio.

7. *Geometrinių iškraipymų įvertinimas.* Po filtravimo žinomi 10 gelio sričių apibūdinantys posvyrio koeficientai. Integruojant posvyrio koeficientus nubrėžiama virtuali srities kreivė, einanti per visą aktyviosios gelio dalies plotį. Iš šios kreivės nustatomi aukščiausias ir žemiausias taškai ir paskaičiuojamas aukščio skirtumas tarp šių taškų – tokiu būdu randamas maksimalus kreivės vertikalus išlinkimas. Iš 10 kreivių maksimalių nuokrypių išrenkamas didžiausias. Šis įvertis naudojamas gelio geometrinių iškraipymų apibūdinimui, ir pagal jį tarpusavyje palyginami eksperimentinės grupės geliai. Kokybiškiausiu geliu išrenkamas tas, kurio kreivių maksimalus nuokrypis buvo mažiausias.

Eksperimentinio tyrimo rezultatai nustatant iškraipymus geliuose pateikti 3 pav. Šiame paveiksle geliai iš kiekvienos eksperimentinės grupės išrikiuoti maksimalių iškraipymų didėjimo tvarka. Kokybiškiausiu išrenkamas pirmoje vietoje esantis gelis. Paveiksle taip pat pažymėti geliai, kuriuos ekspertas pažymėjo kaip labiausiai tinkančius būti baziniu geliu, su kuriuo po to sutapdinami kiti eksperimentinės grupės geliai.



3 pav. Eksperimentinio tyrimo rezultatai: simboliais pažymėti tos pačios eksperimentinės grupės geliai; kvadratu apibrėžti eksperto parinkti baziniai geliai. Geliai išrikiuoti geometrinų iškraipymų didėjimo (kokybės mažėjimo) tvarka

Fig. 3. Results of experimental investigation: symbols indicate gels from the same experimental group; outlined by square are selected by expert basic gels. Gels are ordered by increase of geometric distortions (decrease of quality)

Išvados

1. Dėl vertikalų geometrinių iškraipymų geliuose neįmanoma tiksliai nustatyti baltymo molekulinės masės tiesiogiai susiejant baltymo pėdsako vietą su masės markeriu. Eksperimentinėse gelių grupėse paprastai būna gelių, kurie yra neiškraipyti arba mažai iškraipyti, todėl išrinkus gelį su mažiausiais vertikalais geometriniais iškraipymais ir su juo sutapdinus kitus, visi vaizdai bus mažiausiai deformuoti.

2. Eksperto ir algoritmo išrinkti kokybiškiausi geliai sutapo didesnius iškraipymus turinčių gelių grupėje. Išrenkant iš mažiau iškraipymų turinčių gelių, eksperto parinkti geliai buvo antroje algoritmo sudarytos prioritėtinės eilės vietoje. Tai galima paaiškinti tuo, kad žmogui sunku pastebėti lėtai, bet per visą gelį besitęsiančius pokrypius (viso gelio pasisukimą), arba kai kurių iškraipymų žmogus neįvertina tada, kai jie yra mažiau aktualioje gelio vietoje.

Padėkos

Dėkoju moksliniam vadovui prof. dr. Daliui Navakauskui už pagalbą rengiant straipsnį ir Biochemijos instituto Vystimosi biologijos skyriui už 2ME gelius bei konsultacijas.

Literatūra

- Aittokallio, T.; Salmi, J.; Nyman, T. A.; Nevalainen, O. S. 2005. Geometrical distortions in two-dimensional gels: applicable correction methods, *Journal of Chromatography B* 815(1–2): 25–37. doi:10.1016/j.jchromb.2004.07.037
- Canny, J. 1986. A computational approach to edge-detection, *IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence* 8(6): 679–698. doi:10.1109/TPAMI.1986.4767851
- Dowsey, A. W.; Dunn, M. J.; Yang, G. Z. 2003. The role of bioinformatics in two-dimensional gel electrophoresis, *Proteomics* 8(6): 1567–1596. doi:10.1002/pmic.200300459
- Dowsey, A. W.; Yang, G. Z. 2008. The future of large-scale collaborative proteomics, in *Proceedings of the IEEE* 96(8): 1292–1309. doi:10.1109/JPROC.2008.925421
- Gonzalez, R. C.; Woods, R. E.; Eddins, S. L. 2003. *Digital Image Processing Using MATLAB*. Prentice Hall. 624 p. ISBN 978-0-130-08519-1.
- Luhn, S.; Berth, M.; Hecker, M.; Bernhardt, J. 2003. Using standard positions and image fusion to create proteome maps from collections of two-dimensional gel electrophoresis images, *Proteomics* 3(7): 1117–1127. doi:10.1002/pmic.200300433
- Matuzevičius, D.; Navakauskas, D. 2005. Proteomikoje taikytinų vaizdo segmentavimo metodų tyrimas, *Elektronika ir Elektrotechnika* 63(7): 66–70.
- Matuzevičius, D.; Serackis, A. 2006. Dvimatės elektroforezės gelių vaizdų automatinės analizės sistemos kūrimas, iš *9-osios Lietuvos jaunųjų mokslininkų konferencijos „Mokslas – Lietuvos ateitis“ pranešimų medžiaga*, 67–74.
- Matuzevičius, D.; Žurauskas, E.; Navakauskienė, R.; Navakauskas, D. 2008. Improved proteomic characterization of human myocardium and heart conduction system by computational methods, *Biologija* 4(54): 283–289. doi:10.2478/v10054-008-0058-9
- O’Farrell, P. H. 1975. High resolution two-dimensional electrophoresis of proteins, *The Journal of Biological Chemistry* 250(10): 4007–4021.
- Sonka, M.; Hlavac, V.; Boyle, R. 2007. *Image Processing, Analysis and Machine Vision*. CL-Engineering. 864 p. ISBN 978-0-495-08252-1.

AUTOMATIC SELECTION OF TWO-DIMENSIONAL ELECTROPHORESIS GEL WITH LEAST GEOMETRIC DISTORTIONS

D. Matuzevičius

Abstract

The paper presents an algorithm for automated selection of the highest quality two-dimensional gel electrophoresis image. The quality criterion is the amount of vertical geometric distortions of the gel. The aim is to select the least distorted gel from the group received during the same biochemical experiment. Vertical geometric distortions displace proteins of the same molecular mass from the horizontal line and have a greater impact on the determination of protein characteristics than horizontal distortions. After presenting algorithm for evaluation of distortions and selection of base gel results are compared to expert’s made selections. If necessary, algorithm may be adapted for horizontal distortion evaluation.

Keywords: two-dimensional electrophoresis, 2DE, geometric distortions, automatic gel analysis.