

PLATAFORMA FOTÔNICA MULTIMODAL PARA APLICAÇÕES EM MICROSCOPIA E ESPECTROSCOPIA DE ÓPTICA LINEAR E NÃO LINEAR NA FÍSICA BIOLÓGICA, CATÁLISE E NA CARACTERIZAÇÃO DE PETRÓLEO

Lara Domingos Hissa, Carlos Lenz Cesar

Propondo-se obter uma clusterização dos dados das imagens de medidas obtidas do dissulfeto de molibdênio (MoS₂) pelo Second-Harmonic Imaging Microscopy (SHIM) foi utilizado conhecimentos sobre correlação e clusterização. Para isso foram realizadas várias medidas de SHIM da mesma região da amostra com diferentes comprimentos de onda. Assim, foi obtido uma espectro para cada pixel da imagem. Esses espectros foram unidos em um único conjunto de dados. Com este dado foi possível calcular a correlação pixel vs pixel, o que pode ser representado por uma matriz de correlação muito grande. A clusterização para este projeto foi baseada na reordenação das matrizes de correlação usando a Minimum Spanning Tree. Dificuldades de clusterização foram encontradas por problemas computacionais como falta de memória para um grande conjunto de dados. Com a matriz de correlação dada pela covariância e variância dos pares de linhas dos conjunto de dados se pode encontrar a matriz de distância de correlação. Utilizando a matriz de correlação no pacote de análise de redes sociais chamado PAJEK foi extraído a diagonal. Cada pixel é um vértice nesta rede. Assim, foi desenvolvido um programa em Python para calcular a Minimum Spanning Tree pelo método de PRIM. O método de PRIM se inicia procurando os dois vértices mais próximos. Em seguida o algoritmo procura o vértice mais próximo de qualquer um dos vértices conectados. Dessa forma, isso permite que a matriz seja reorganizada pela proximidade de correlação sendo possível visualizar os clusters mais semelhantes. Reorganizar a matriz via proximidade de correlação e visualizar os clusters mais semelhantes. Portanto, dificuldades de clusterização foram encontrados devido aos computadores utilizados terem pouca memória para um conjunto de dados muito grande.

Palavras-chave: Second-Harmonic Imaging Micros. Minimum Spanning Tree. clusterização. matriz de correlação.