



## Application of Infrared Images of Objects with Extreme Temperature Difference for the Structural Elucidation of Drug Molecules

Dehong DING<sup>1,2</sup>, Kui FANG<sup>1,2\*</sup>, Ming HE<sup>3</sup>, Hexiang YU<sup>2</sup>, Kejun QIAN<sup>2</sup> & Bo LIU<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Hunan Agricultural University, College of Information Science and Technology, Changsha, China, 410128

<sup>2</sup> Hunan Agricultural University, College of Resource and Environments, Changsha, China, 410128

<sup>3</sup> Information Engineering University, College of Information Science and Technology, Zhengzhou, China, 410052

**SUMMARY.** Infrared imaging technology of objects has been widely used to elucidate the structure of drug molecules. When observing objects, especially objects with extreme temperature difference, infrared focal plane imaging systems often have difficulties in evenly describing the grayscales of different temperature sections and capturing enough details. Aimed at this problem, in this study we proposed a self-adaptive dual-local area enhancement algorithm. This paper details the algorithm from two aspects, spatial distribution and statistical grayscale characteristics. Based on the spatial distribution of infrared images, this method divides an infrared image into multiple sub-images in a self-adaptive fashion and performs local histogram statistics individually. After analyzing the local spatial grayscale distribution features, self-adaptive sectional equalization is performed to the histogram of each local space. The enhanced local area images are then assembled using linear interpolation, thereby completing the self-adaptive spatial and grayscale local area enhancement of an infrared image. Experimental validation was performed to the algorithm; by applying the algorithm in infrared focal plane imaging system, excellent enhancing results were obtained and the imaging quality was improved significantly, thereby validated the feasibility of the proposed algorithm.

**RESUMEN.** La tecnología de imagen infrarroja de objetos ha sido ampliamente utilizada para elucidar la estructura de moléculas de fármacos. Cuando se observan objetos, especialmente objetos con extrema diferencia de temperatura, los sistemas de imagen de plano focal infrarrojo a menudo tienen dificultades para describir de manera uniforme las escalas de grises de secciones de diferentes temperaturas y la captura de suficientes detalles. Debido a este problema, en este estudio nos propusimos un algoritmo auto-adaptativo de doble área local de mejora. Este documento detalla el algoritmo a partir de dos aspectos, la distribución espacial y las características estadísticas de escala de grises. Sobre la base de la distribución espacial de las imágenes infrarrojas, este método divide una imagen infrarroja en múltiples sub-imágenes de una manera auto-adaptativa y realiza estadísticas de histograma locales de forma individual. Después de analizar las características de distribución de escala de grises espaciales locales, se realiza la ecualización seccional auto-adaptativa para el histograma de cada espacio local. Las imágenes de área local mejoradas se ensamblan después mediante la interpolación lineal, completando de esta manera la mejora local del área espacial auto-adaptable y la escala de grises de una imagen de infrarrojos. Se realizó la validación experimental para el algoritmo; aplicándolo en el sistema de formación de imágenes de plano focal por infrarrojos y se obtuvieron excelentes resultados, ya que la calidad de imagen se mejoró significativamente, con lo que validó la viabilidad del algoritmo propuesto.

**KEY WORDS:** Chemical imaging, Drug molecules, Extreme temperature difference, Histogram equalization, Infrared image, Self-adaptive dual-local area enhancement.

\* Author to whom correspondence should be addressed. *E-mail:* pou9874@126.com