

Johanna Riihimäki

**Uuden hyperspektrikuvantamismenetelmän arviointi
epälineaarissa ongelmassa spektrienerottelualgoritmia
käyttäen**

Tietotekniikan pro gradu -tutkielma

27. marraskuuta 2024

Jyväskylän yliopisto

Informaatioteknologian tiedekunta

Tekijä: Johanna Riihimäki

Yhteystiedot: johanna.p.riihimaki@jyu.fi

Ohjaajat: Anna-Maria Raita-Hakola ja Ilkka Pölönen

Työn nimi: Uuden hyperspektrikuvantamismenetelmän arviointi epälineaarissa ongelmas-
sa spektrienerottelualgoritmia käyttäen

Title in English: Evaluation of a new hyperspectral imaging technology in a non-linear
problem using a spectral unmixing algorithm

Työ: Pro gradu -tutkielma

Opintosuunta: Teknis-matemaattinen mallintaminen ja päätösanalytiikka

Sivumäärä: 60+2

Tiivistelmä:

Hyperspektrikuvantaminen on edistyksellinen kuvantamismenetelmä, jonka avulla kuvaus-
kohteesta voidaan saada ihmissilmien havaitsemattomissa olevaa informaatiota. Menetel-
mää on hyödynnetty esimerkiksi lääketieteessä ja elintarviketeollisuudessa. Tässä tutkiel-
massa arvioidaan uuden Teknologian Tutkimuskeskuksen (VTT) kehittämän valonlähdelait-
teen (TLS) käyttöön perustuvan hyperspektrikuvantamismenetelmän suorutumista haasta-
vassa, epälineaarissa ongelmassa verrattuna kaupallisesti saatavilla olevaan Specim IQ-
hyperspektrikameraan. Uusi kuvantamismenetelmä suoriutui analyyseistä hyvin, etenkin ver-
tailukohtana käytettyyn kameraan verrattuna. Tulosten perusteella voidaan sanoa, että uusi
valonlähde laite vaikuttaa lupaavalta ja sen käyttö tuo mukanaan etuja kaupalliseen kuvanta-
mismenetelmään verrattuna.

Avainsanat: aallonpituussäädettävä valonlähde, TLS, hyperspektrikuvantaminen, spektriku-
vantaminen, spektrien erottelu

Abstract: Hyperspectral imaging is an advanced imaging method, which has been widely
used, for example, in medicine and the food industry. This thesis evaluates the performance
of a new hyperspectral imaging method that is based on a Tunable Light Source (TLS) de-

veloped by the Technical Research Center of Finland (VTT). The new imaging method performed well in the analyses, especially in comparison to the commercial spectral imager (Specim IQ) used as a benchmark. Based on these results, the new light source component seems promising and offers advantages compared to the commercial imaging method.

Keywords: tunable light source, TLS, hyperspectral imaging, spectral imaging, spectral unmixing

Termiluettelo

Epälineaarinen sekoittumismalli	Mallintaa valon käyttäytymistä intiimeissä seoksissa, joissa valonsäteet voivat esimerkiksi sirota materiaaleissa. (<i>Nonlinear Mixing Model</i>)
Hapken malli	Muuntaa epälineaarisesti käyttäytyvän reflektanssidatan approksimaatioksi lineaarisesti käyttäytyvästä SSA-datasta.
Hyperspektrikuvantaminen	Edistyksellinen kuvantamismenetelmä, joka hyödyntää digitaalisia kuvantamismenetelmiä ja spektroskopiaa.
Intiimi seos	Seos, joissa partikkelit ovat lähikontaktissa keskenään sekoittuneina. (<i>Intimate mixtures</i>)
Lineaarinen sekoittumismalli	Mallintaa valon käyttäytymistä materiaaleissa, jotka eivät ole sekoittuneita ja joissa valonsäteet vuorovaikuttavat vain yhden materiaalin kanssa. (<i>Linear Mixing Model, LMM</i>)
NIR	Lähi-infrapun alue, alkaa näkyvän valon aallonpituusalueen jälkeen. (<i>Near Infrared</i>)
MAE	Keskipoikkeama (<i>Mean Absolute Error</i>)
MSE	Virheen neliöllinen keskiarvo (<i>Mean Squared Error</i>)
Ominaispektri	Materiaalin uniikki spektri tai sormenjälki, jonka perusteella materiaali voidaan tunnistaa.
PFPI	Teknologia, johon TLS-laitteen toiminta perustuu. (<i>Piezo-actuated Fabry-Pérot Interferometer</i>)
Pimeäreferenssi	Täysin pimeissä olosuhteissa otettu kuva. Kuvataan käyttäen samaa valotusaikaa kuin kuvasarjassa, mutta jätetään linssisuojus paikoilleen. Käytetään laitteiston kuviin aiheuttaman kohinan poistoon reflektanssikalibraatiota tehdessä. (<i>Dark reference</i>)
Puoliarvoleveys	Spektrikäyrän leveys mitattuna puolivälissä sen enimmäiskorkeutta. (<i>Full Width Half Maximum, FWHM</i>)
Reflektanssi	Mittaa valon heijastuvuutta pinnasta.
SAM	Kahden spektrin muodon samanlaisuuden arviointifunktio. (<i>Spect-</i>

	<i>ral Angle Mapper)</i>
Spatiaalinen resoluutio	Sensorin kyky kuvata pieniä yksityiskohtia tarkasti; pienimmän kohteen mitta, jonka kuvatuloksessa voi erottaa kokonaisuutena.
Spektraalinen resoluutio	Kuvantamisessa käytettyjen aallonpituuksien puoliarvoväleveys; mitä pienempi puoliarvoväleveys, sitä parempi spektraalinen resoluutio.
SSA	Kuvaa valon (lineaarista) vuorovaikutusta yksittäisen partikkelin kanssa mikroskooppisella tasolla. (<i>Single Scattering Albedo</i>)
TLS	VTT:n kehittämä, aallonpituuksittain säädettävä valonlähde-laite. (<i>Tunable Light Source</i>)
Spektrien erottelu	Spektrikuvien analysointiin käytetty tekniikka, jonka tavoitteena on selvittää kuvassa läsnäolevat puhtaat materiaalit sekä niiden pitoisuudet sekoitespektrien perusteella.
Valkoreferenssi	Raakakuvan kalibroinnissa reflektanssidataksi käytetty, lähes kaiken siihen tulevan valon heijastava pinta. (<i>White reference</i>)
VIS	Näkyvän valon aallonpituusalue, eli n. 400-700 nm. (<i>Visible light</i>)
VTT	Teknologian tutkimuskeskus

Kuviot

Kuvio 1. Yksinkertainen havainnollistus näkyvän valon spektristä.	4
Kuvio 2. Havainnollistus spektrikuvasta ja spektrikäyrästä.	5
Kuvio 3. Kuva lineaarisesta (vasen) ja epälinearisesta (oikea) sekoittumisesta.	9
Kuvio 4. Konenäkökamera ja TLS.....	14
Kuvio 5. TLS-menetelmän kuvantamisperiaate.	14
Kuvio 6. Kuva TLS-kuvantamismenetelmän ohjaamiseen käytetystä käyttöliittymästä	15
Kuvio 7. Specim IQ-hyperspektrikamera.....	16
Kuvio 8. Viivaspektrin kuvantamisperiaate.....	16
Kuvio 9. TLS-laitetta hyödyntävä kuvausasetelma	19
Kuvio 10. Lähikuva TLS-menetelmän kuvausasetelmasta.	20
Kuvio 11. Specim IQ-kuvausasetelmassa käytetty halogeenivalonlähde.	21
Kuvio 12. Specim IQ-kuvausasetelma sivulta.	21
Kuvio 13. Specim IQ-kuvausasetelma yläviistosta.	21
Kuvio 14. TLS-menetelmän kuvasarja.	23
Kuvio 15. Specim IQ:n kuvasarja.....	24
Kuvio 16. Havainnollistus analyyseissa käytettyjen alueiden ko'oisista.....	25
Kuvio 17. Näytteiden keskimääräiset reflektanssit.....	26
Kuvio 18. Havainnollistus kuvien liittämistä.....	27
Kuvio 19. Havainnollistus SSA-datan normalisointikonfiguraatioista.	30
Kuvio 20. TLS-menetelmällä kuvatun reflektanssidatasetin tulokset	34
Kuvio 21. TLS-menetelmän reflektanssidatasetin analyysitulosten virheet.	34
Kuvio 22. TLS-menetelmän SSA-datasetin analyysitulokset	35
Kuvio 23. TLS-menetelmän SSA-datasetin analyysitulosten virheet.	35
Kuvio 24. IQ:lla kuvatun reflektanssidatasetin analyysitulokset.	36
Kuvio 25. IQ:lla kuvatun reflektanssidatasetin analyysitulosten virheet.	36
Kuvio 26. Specim IQ-menetelmän SSA-datasetin analyysitulokset.	37
Kuvio 27. Specim IQ-menetelmän SSA-datasetin analyysitulosten virheet.	37
Kuvio 28. Väripaneeleista otetut kuvat, sekä merkityiltä alueilta lasketut reflektanssit.	38
Kuvio 29. Normalisoidut ja normalisoimattomat reflektanssikäyrät.	39

Taulukot

Taulukko 1. Taulukko suolan ja sokerin sekoitussuhteista	17
Taulukko 2. Kuvasarjojen ominaisuudet	22

Sisällys

1	JOHDANTO	1
2	TEORIA	4
2.1	Sähkömagneettinen säteily	4
2.2	Spektrikuvantaminen	4
2.2.1	Reflektanssi	6
2.2.2	Spatiaalinen ja spektraalinen resoluutio	6
2.2.3	Spektrienerottelualgoritmit	7
2.2.4	Sekoittumismallit	7
2.3	Käytetyt menetelmät	9
2.3.1	Lineaariset ja epälineaariset spektrienerottelualgoritmit	10
2.3.2	Hapken malli	10
2.3.3	Tutkimuksessa käytettävä algoritmi	11
2.4	Laitteiston kuvaus	13
2.4.1	Aallonpituussäädettävä valonlähde (TLS)	13
2.4.2	TLS osana spektrikuvantamismenetelmää	13
2.4.3	Specim IQ	15
3	DATAN KERÄYS JA ESIKÄSITTELY	17
3.1	Näytteet	17
3.2	Kuvausasetelmat ja kuvaaminen	18
3.2.1	TLS-menetelmä	18
3.2.2	Specim IQ	20
3.3	Kuvasarjat	22
3.3.1	TLS-kuvasarja	22
3.3.2	Specim IQ-kuvasarja	23
3.4	Datan esikäsittely	25
3.4.1	Analysoitavan alueen rajaaminen ja reflektanssien laskeminen	25
3.4.2	Huonojen ja ylimääräisten kaistojen poistaminen	26
3.4.3	Kuvien liittäminen	27
4	ANALYYSIT	29
4.1	Hapken malli	29
4.2	Optimointiongelma spektrienerottelualgoritmina	29
4.2.1	Datan normalisointi	29
4.2.2	Spektrienerottelualgoritmin hyperparametrin optimointi	31
5	TULOKSET	33
5.1	TLS: reflektanssidata	33
5.2	TLS: SSA-data	34
5.3	Specim IQ: reflektanssidata	35
5.4	Specim IQ: SSA-data	36
5.5	Lisätutkimukset	37

6	POHDINTA	40
6.1	Tulosten arviointia	40
6.1.1	Erot menetelmien välisissä tuloksissa	40
6.1.2	Erot reflektanssi- ja SSA-datasettien välillä	41
6.1.3	Muita huomioita	42
6.2	Jatkotutkimuksesta	43
6.3	Tutkimuskysymyksiin vastaaminen	44
7	YHTEENVETO.....	46
	LÄHTEET	47
	LIITTEET.....	53
	A Optimointialgoritmi	53

1 Johdanto

Spektrikuvantaminen on edistyneellinen kuvantamismenetelmä, jossa yhdistyy spektroskopia ja digitaaliset kuvantamistekniikat. Siinä missä harmaasävykuvissa on yksi värikaista ja RGB-kuvissa kolme, spektrikuvissa on kymmeniä, satoja tai jopa tuhansia eri väri- eli aallonpituuskaistoja. Koska spektrikuvissa aallonpituuskaistoja on enemmän, kuvat sisältävät myös enemmän informaatiota tavallisiin kuviin verrattuna. Spektrikuvantamisen avulla voidaan esimerkiksi tunnistaa eri materiaaleja ja määrittellä niiden pitoisuuksia kuvattavassa kohteessa hyvinkin tarkasti.

Alunperin spektrikuvantamista käytettiin kaukokartoituksesta (Khan ym. 2018), mutta sitä on hyödynnetty laajasti eri skaalalla, aina satelliiteista (Green ym. 1998) mikroskopiaan (Faltynkova ja Wagner 2023), ja monilla eri aloilla, kuten esimerkiksi maataloudessa (Zahir ym. 2022), ruokateollisuudessa (Lanjewar, Panchbhai ja Patle 2024, Kamruzzaman, Makino ja Oshita 2016), lääketieteessä (Yoon 2022), maalausten analysoinnissa (Vermeulen ym. 2021, Radpour, Delaney ja Kakoulli 2022) ja rikospaikkatutkinnassa (Edelman ym. 2012). Koska spektrikuvantamiselle on monia erilaisia sovelluskohteita erilaisine vaatimuksineen, on laitteiston pystyttävä vastaamaan näihin vaatimuksiin; onkin tärkeää kehittää uutta laitteistoa vastaamaan tarpeeseen entistä paremmin.

Tässä tutkimuksessa vertaillaan kahta, toimintaperiaatteiltaan hyvin erilaista spektrikuvantamismenetelmää. Toinen menetelmä hyödyntää tavallista konenäkösensoria sekä Teknologian tutkimuskeskuksen (VTT) suunnittelemaa ja rakentamaa aallonpituussäädettävää valonlähdelaitetta (*Tunable Light Source, TLS*). TLS-laite kykenee erottelemaan alueen 450-850 nm aallonpituudet piezoaktuaattoreilla ohjattavalla Fabry-Pérot-interferometrillä (*Piezo-actuated Fabry-Pérot Interferometer, PFPI*) eli fabryllä. TLS-laite kykenee tuottamaan yllämainitulta alueelta valitun aallonpituista valoa. Laitteen erottelemien aallonpituuksien puoliarvoveveys on 18-21 nm. Tämän kuvantamismenetelmän hyvä puoli moniin muihin menetelmiin verrattuna on TLS-laitteen tuoma joustavuus kuvausasetelman rakentamiseen: koska aallonpituuksien erottelu tapahtuu valonlähteen puolella, käyttäjä voi esimerkiksi valita vapaasti tilanteeseen sopivat optiset komponentit ja sensorit. Tätä menetelmää vertaillaan perinteiseen, kaupallisesti saatavilla olevaan Specim IQ-spektrikamera, jossa aallonpituuksien

erottelu tapahtuu prismalla kameran sisällä.

Kuvantamismenetelmien suoriutumista arvioidaan ottamalla molemmilla menetelmillä kuvat samoista näytteistä, analysoimalla kuvatulokset samalla spektrienerottelualgoritmilla sekä lopuksi vertailemalla saatuja analyysituloksia. Molemmilla menetelmillä kuvataan samantyyppiset kuvasarjat suola-sokeri-seosnäytteistä, pitäen kuvausolosuhteet mahdollisimman samantyyppisinä. Analyysien tavoitteena on määrittää kunkin kuvan suola- ja sokeripitoisuudet. Tuloksia vertailemalla selvitetään, millä tavalla ja kuinka suuria eroja menetelmien suoriutumisen välillä on epälineaarissa spektrinerotteluongelmassa.

Kuvantamismenetelmien täysin erilaisien toimintaperiaatteiden ja jo lähtödatassa esiintyvien eroavaisuuksien vuoksi on todennäköistä, että analyysien tulokset eroavat toisistaan. Kiinnostavaa on, millaisia eroja on havaittavissa ja miten merkittäviä erot ovat. Lisäksi tutkimuksessa selvitetään uuden TLS-hyperspektrikuvantamismenetelmän heikkouksia ja vahvuuksia verrattuna kaupalliseen spektrikameraan, sekä pohditaan, millaisissa sovelluksissa tätä uutta teknologiaa voitaisiin hyödyntää. Tarkemmin eriteltynä, tutkimuskysymykset ovat seuraavat:

- Miten merkittäviä eroja näiden kahden kuvantamismenetelmän välillä on?
- Mitä heikkouksia ja vahvuuksia TLS-laitetta hyödyntävällä kuvantamismenetelmällä on verrattuna kaupalliseen spektrikameraan?
- Millaisiin sovelluksiin tämä uusi teknologia tehtyjen kokeiden perusteella saattaisi soveltua?

Tutkimusmenetelmänä tässä tutkielmassa käytetään hypoteettis-deduktiivista menetelmää. Sen mukaan työn alussa esitetään jokin hypoteesi, joka yleensä koskee välittömän havainnon tavoittamattomissa olevia ilmiöitä ja jonka on määrä ratkaista esitetty tutkimusongelma. Hypoteesista ja lisäoletuksista johdetaan loogisia seurauksia, joita testataan. Jos nämä hypoteesin loogiset seuraukset osoittautuvat tosiksi, on hypoteesi saanut vahvistusta. Jos taas seuraukset ovat epätosia, on hypoteesi hylättävä. (Haaparanta ja Niiniluoto 2016)

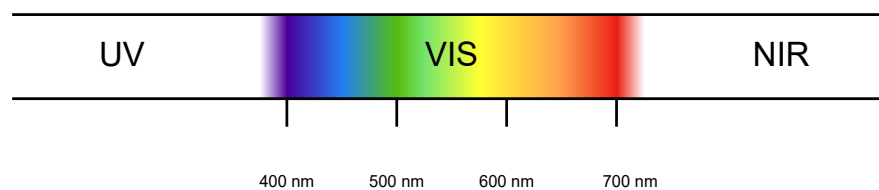
Hypoteesina tässä tutkimuksessa on, että spektrikuvantamismenetelmien välillä on eroja, jotka heijastuvat analyysituloksiin. Näiden analyysitulosten sekä käyttökokemusten perusteella oletettavasti voidaan myös vetää johtopäätöksiä uuden menetelmän heikkouksista ja vahvuuksista, sekä antaa alustavaa arvioita, millaisiin sovelluksiin uusi teknologia voisi sopia.

Tutkielman rakenne on seuraavanlainen: seuraavassa kappaleessa esitellään tutkielman ymmärtämisen kannalta oleellinen teoria. Kappaleessa 3 kuvaillaan datan keräys- ja esikäsittely yksityiskohtaisesti. Kappaleessa 4 kuvaillaan tarkemmin datan varsinainen analysointi, jonka tulokset esitellään luvussa 5. Luvussa 6 pohditaan saatuja tuloksia, esitetään jatkotutkimusideoita sekä vastataan tutkimuskysymyksiin. Luvussa 7 tehdään johtopäätökset.

2 Teoria

2.1 Sähkömagneettinen säteily

Sähkömagneettinen säteily kattaa laajan aallonpituusalueen, mutta tämän työn puitteissa kiinnostuksen kohteena vain näkyvä valo (VIS) ja lähi-infrapuna (NIR). Näkyvä valo on ihmissilmän havaittavissa olevaa säteilyä, joka kattaa, yksilöstä riippuen, noin aallonpituusalueen 400-700 nm. Tämä valkoinen valo, kuten auringon valo, voidaan hajottaa prismalla säteenkaareksi, jolloin nähdään koko näkyvän valon väriskaala eli sen spektri. (Knight 2017) Aallonpituuksien kasvaessa siirrytään näkyvän valon alueelta infrapuna-alueelle, joista lähimpänä näkyvää valoa on lähi-infrapuna.



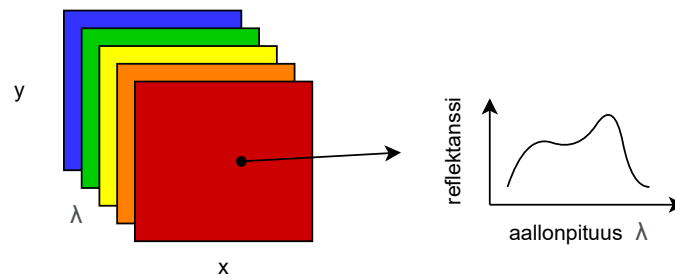
Kuvio 1: Yksinkertainen havainnollistus näkyvän valon spektristä.

Tämän työn kontekstissa elektromagneettisen säteilyn ominaisuuksista riittää ymmärtää hyvin yleisellä tasolla mitä tarkoittaa, kun säteily heijastuu tai siroaa materiaalista, tai kun se absorboituu materiaaliin: kun valonsäde heijastuu, se kimpoaa yhtenäisenä uuteen suuntaan heijastuspinnasta. Kun valonsäde siroaa, se hajoaa useiksi säteiksi, jotka kimpoavat eri suuntiin. Kun valonsäde absorboituu, se "imeytyy" materiaaliin ja muuttuu toisenlaiseksi energiaksi, jolloin valo katoaa näkyvistä. (Knight 2017)

2.2 Spektrikuvantaminen

Spektrikuvantaminen on edistysellinen kuvantamistekniikka, joka ei tuhoa tai vahingoita näytteitä. Se perustuu tavallisiin, digitaalisiin kuvantamismenetelmiin sekä valon vuorovaikutukseen kuvattavan materiaalin kanssa; koska valo käyttäytyy eri tavoin eri materiaaleissa aallonpituudesta riippuen, on materiaaleilla omat uniikit spektrikäyrät eli ominaisspektrit, joiden perusteella ne voidaan tunnistaa (Khan ym. 2018).

Spektrikuvantamismenetelmiä on erilaisia, mutta lopputuloksena kaikissa kolmiulotteinen spektrikuva. Spektrikuvalla on tavallisen kuvan tavoin spatiaaliset ulottuvuudet x ja y , mutta niiden lisäksi kolmantena ulottuvuutena aallonpituus. Spektrikuvan voi ajatella olevan nippu samasta kohteesta otettuja tavallisia kuvia, joita on valaistu eri aallonpituusalueilla. Spektrikuva havainnollistettu kuviossa 2. Kuvioon on myös piirretty yhden spektrikuvan pikselin kuvitteellinen spektrikäyrä, jossa aallonpituus on x -akselilla ja reflektanssi y -akselilla. Spektrikäyrä kertoo, kuinka paljon kyseisessä pikselissä oleva materiaali heijastaa valoa kul-lakin aallonpituudella.



Kuvio 2: **Havainnollistus spektrikuvasta ja spektrikäyrästä.**

Spektrikuvantaminen voidaan jakaa multi- ja hyperspektrikuvantamiseen. Multispektrikuvantamisessa aallonpituuskaistoja vähemmän, tyypillisesti alle kymmenen, mikä rajoittaa useiden materiaalien tunnistamista ja erottamista toisistaan. Hyperspektrikuvantamisesta puhuttaessa aallonpituuksia on enemmän kuin multispektrikuvantamisessa; niitä voi olla jopa satoja tai tuhansia. Useammilla aallonpituuskaistoilla kuvantaminen auttaa saamaan yksityiskohtaisempaa tietoa kuvauskohteesta. (Khan ym. 2018)

Spektrikuvantamista on hyödynnetty hyvin laajalla mittakaavalla. Menetelmää on yhdistetty esimerkiksi mikroskopiaan mikromuovien tunnistamista käyttäen (Faltynkova ja Wagner 2023) ja maapallon kuvantamiseen avaruudesta käsin (Green ym. 1998). Spektrikuvantamista on hyödynnetty myös esimerkiksi maataloudessa kasvien sairauksien ja stressitilojen tunnistamiseen. Tämä on mahdollista, sillä kasvien spektriset piirteet muuttuvat kasvien ollessa sairaita tai stressaantuneita, jopa jo oireettomassa vaiheessa. (Zahir ym. 2022) Myös ruoka-teollisuudessa on hyödynnetty spektrikuvantamista esimerkiksi elintarvikkeiden puhtauden

varmistamiseksi; Lanjewar, Panchbhai ja Patle (2024) onnistuivat spektrikuvantamista käyttäen määrittämään hyvin tarkasti, milloin hunajaa oli laimennettu sokerisiirapilla. Kamruzzaman, Makino ja Oshita (2016) puolestaan ovat tehneet vastaavanlaista tutkimusta, yhdistäen spektrikuvantamista ja koneoppimista tunnistukseen, milloin naudanjauhelihaa oli jatkettu kanalla. Spektrikuvantamista on hyödynnetty myös rikosteknisessä tutkinnassa esimerkiksi todistusaineiston havaitsemiseksi ja tunnistamiseen (Edelman ym. 2012).

2.2.1 Reflektanssi

Reflektanssi mittaa kuinka paljon kohde heijastaa siihen tulevasta elektromagneettisesta säteilystä (Khan ym. 2018). Reflektanssin laskemiseen tarvitaan säteilylähteestä kohteeseen tulevan säteilyn määrä, joka ei aina ole suoraan mitattavissa. Säteilyn määrää voidaan approksimoida valkoreferenssin avulla käyttäen kaavaa

$$R = \frac{I_0 - D}{W - D} \quad (2.1)$$

missä R on relatiivinen reflektanssi, I_0 on raakakuva, D on pimeäreferenssikuva ja W on valkoreferenssikuva (esim. Shaikh ym. 2021). Funktio 2.1 saa arvon 1, jos kohde heijastaa kaiken siihen tulevan valon takaisin ja arvon 0, mikäli kohde absorboi kaiken siihen tulevan valon. Yleensä reflektanssiarvot ovat kuitenkin jotain näiden kahden arvon väliltä.

Pimeäreferenssi on kameralla linssisuojuksen ollessa kiinni otettu kuva täysin pimeissä olosuhteissa, jonka avulla saadaan mitattua laitteiston kuvaan aiheuttama kohina. Valkoreferenssi puolestaan on kuva täysin valkoisesta kohteesta, joka heijastaa kaiken tai lähes kaiken siihen tulevasta säteilystä.

2.2.2 Spatiaalinen ja spektraalinen resoluutio

Sensorin spatiaalinen resoluutio määräytyy sen näkökentän perusteella (Bioucas-Dias ym. 2013), toisin sanoen, se kuvaa sensorin kykyä kuvata tarkkoja yksityiskohtia. Spatiaalinen resoluutio on pienimmän asian mitta, jonka voi havaita kokonaisuutena kuvassa. Spektraalisella resoluutiolla viitataan kuvantamisessa käytettyjen aallonpituuksien kaistanleveyteen (Bioucas-

Dias ym. 2013). Korkean spektraalisen resoluution spektrikuvassa on useita kapeita aallonpituuskaistoja laajalta aallonpituusalueelta. Tällainen kuva sisältää paljon spektraalista informaatiota.

2.2.3 Spektrienerottelualgoritmit

Datamäärältään hyperspektrikuvat ovat erittäin suuria verrattuna esimerkiksi tavalliseen digitaaliseen kuvaan. Kuvien analysointia, esimerkiksi materiaalien tunnistamista, ei ole mahdollista tehdä paljain silmin, koska data on hyvin monimutkaista ja sitä on paljon (Garini, Young ja McNamara 2006). Analysointiin tarvitaan siis hienostuneempia menetelmiä. Analysointia hankaloittaa se, että kuvan pikseleissä puhtaiden materiaalien spektrit ovat usein sekoittuneita keskenään, johtuen esimerkiksi matalasta spatiaalisesta resoluutiosta (esim. satelliittikuvat) tai kuvauskohteen rakenteesta (esim. laboratoriokuvat) (Heylen ja Gader 2013). Kun sekottumista on tapahtunut, ei voida suoraan sanoa mitä materiaaleja on läsnä kuvassa, vaan täytyy sekoitespektreistä ratkoa puhtaiden materiaalien pitoisuudet. Tämä voidaan tehdä spektrienerottelualgoritmien avulla (*spectral unmixing algorithms*).

Yksinkertaisuudessaan spektrienerottelualgoritmien toimintaperiaate on seuraavanlainen: oletetaan, että kuvan spektrit ovat sekoitespektrejä puhtaiden materiaalien ominaisspektreistä joissakin tuntemattomissa suhteissa. Spektrienerottelualgoritmi pyrkii määrittämään kuvassa esiintyvien materiaalien pitoisuudet niiden ominaisspektrien avulla. Algoritmit voidaan luokitella ohjattuihin, ohjaamattomiin ja osittain ohjattuihin algoritmeihin (Themelis, Rontogiannis ja Koutroumbas 2010). Ohjatuissa erottelualgoritmeissa ominaisspektrit tiedetään ennaltaan, kun taas ohjaamattomissa puhtaiden materiaalien ominaisspektrit eivät ole ennalta tiedossa ja ne arvioidaan suoraan datasta. Osittain ohjatut spektrienerottelualgoritmit olettavat spektrikirjaston olemassaolon, josta löytyy myös monien kuvissa läsnäolevien puhtaiden materiaalien ominaisspektrit. (Themelis, Rontogiannis ja Koutroumbas 2010)

2.2.4 Sekoittumismallit

Useimmiten spektrienerottelualgoritmit rakentuvat sekoittumismallien (*mixing models*) vaaraan. Nämä sekoittumismallit pyrkivät kuvaamaan valon käyttäytymistä materiaalissa (Pals-

son ym. 2018). Sekoittuminen voi olla joko lineaarista tai epälineaarista. Lineaarinen sekoittumismalli (*linear mixing model, LMM*) olettaa, että materiaalit eivät ole lähikontaktissa keskenään, eivätkä valonsäteet esimerkiksi siroa materiaalissa useaan suuntaan (Heylen ja Gader 2013). Lineaarinen sekoittumismallin mukaan sekoittunut spektri on lineaarikombinaatio puhtaista ominaisspektreistä ja se voidaan ilmaista muodossa

$$x = \sum_{m=1}^M a_m e_m, \quad (2.2)$$

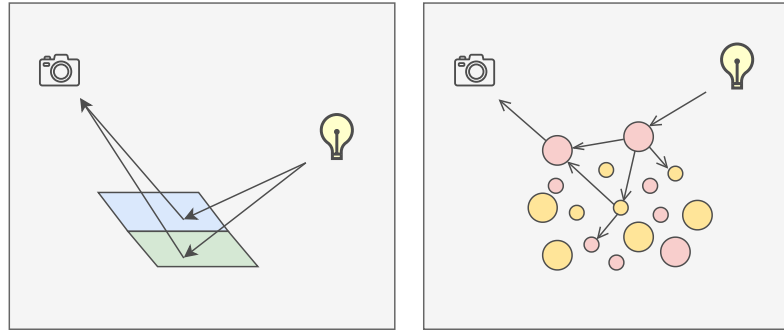
missä x on havainnoitu spektri, e_m ovat puhtaiden aineiden ominaisspektrit (*endmembers*), a_m niiden pitoisuudet (*abundances*) ja M on kuvassa esiintyvien puhtaiden aineiden lukumäärä (Heylen ja Gader 2013). Lineaariset mallit ovat toimivia, mutta useat käytännön ongelmat eivät noudata tätä sekoittumismallia, vaan valon käyttäytyy materiaalissa epälineaarisesti (Heylen ja Gader 2013). Epälineaarilla käyttäytymisellä voidaan tarkoittaa esimerkiksi valon siroamista intiimeissä seoksissa.

Intiimit seokset (*intimate mixtures*) ovat seoksia, joissa rakeet tai partikkelit ovat lähikontaktissa keskenään, kuten suola ja sokeri tässä tutkimuksessa. Intiimeissä seoksissa valo tyypillisesti vuorovaikuttaa partikkelien kanssa useita kertoja ennen materiaalista poistumista. Materiaalista riippuen, jokaisella vuorovaikutuksella valo voi esimerkiksi siroa satunnaisesti tai absorboitua partikkeliin. (Heylen, Parente ja Gader 2014) Intiimeissä seoksissa lineaarinen sekoittumismalli ei välttämättä toimi, joten tarvitaan epälineaarista sekoittumista kuvaavia malleja. Epälineaarinen sekoittumismalli voidaan ilmaista kaavana

$$\mathbf{Y} = F(\mathbf{A}, \mathbf{E}), \quad (2.3)$$

missä F on (jokin) epälineaarinen funktio, $Y \in \mathbb{R}^{p \times n}$ on spektrikuva, jossa on n -pikseliä ja p aallonpituuskaistaa, $E \in \mathbb{R}^{p \times r}$ sisältää r kappaletta puhtaiden aineiden ominaisspektrejä ja $A \in \mathbb{R}^{r \times n}$, $r \ll n$ niiden pitoisuuksia (Rasti, Koirala ja Scheunders 2022).

Kuvio 3 havainnollistaa lineaarista (vasen) ja epälineaarista (oikea) sekoittumista. Lineaarisessa sekoittumisessa materiaaliin tulevista valonsäteistä toinen osuu vihreään ja toinen si-



Kuvio 3: **Kuva lineaarisesta (vasen) ja epälineaarisesta (oikea) sekoittumisesta.**

niseen materiaaliin, josta valonsäteet heijastuvat samaan pikseliin. Tällöin kyseisen pikselin spektri on lineaarikombinaatio näiden kahden materiaalin ominaisspektreistä. Epälineaarisessa sekoittumisessa valonsäde tulee intiimisti sekoittuneeseen materiaaliin ja siroaa siellä joka suuntaan. Lopulta pikseliin päätyvä valonsäde ovat monimutkainen yhdistelmä puhtaiden materiaalien ominaisspektrejä, mikä hankaloittaa spektrien erottelua.

2.3 Käytetyt menetelmät

Spektrienerottelualgoritmeja on useita erilaisia. Perinteisiä menetelmiä ovat esimerkiksi kärkipistekomponenttianalyysi (*Vertex Component Analysis*, VCA) (Nascimento ja Dias 2005) ja erilaiset pienimmän neliösumman menetelmään (*Least Squares*, LSQ) pohjautuvat algoritmit (Heinz ym. 2001). Nykyään neuroverkkopohjaiset erottelualgoritmit ovat suosittuja ja monissa tapauksissa toimivat tehokkaammin kuin perinteisemmät menetelmät (Gröhl ym. 2021, Smith, Ochoa ja Intes 2020). Käytetyimpiä arkkitehtuureja ovat syvät autoenkooderit, konvoluutioneuroverkot ja generatiiviset mallit (Bhatt ja Joshi 2020). Neuroverkkojen huono puoli on niiden monimutkaisuus; spektrikuvien suuri koko tekee verkkojen kouluttamisesta laskennallisesti raskasta ja aikaavievää. Tästä syystä myös esimerkiksi hyperparametrien optimointi saattaa olla erityisen haastavaa ja hidasta.

2.3.1 Lineaariset ja epälineaariset spektrienerottelualgoritmit

Spektrienerottelualgoritmeja kehitettiin pitkään lineaarisen sekoittumismallin mukaan, mistä johtuen siihen pohjautuvia menetelmiä on paljon. Epälineaarisen sekoittumisen huomioivien metodien kehitys käynnistyi myöhemmin. (Heylen, Parente ja Gader 2014) Lineaarisen sekoittumismallin ympärille rakentuvat spektrienerottelualgoritmit eivät välttämättä selviä kovin hyvin intiimien seosten kuvien analysoinnista niiden epälineaarisuuden vuoksi. Ongelma voidaan kiertää käyttämällä Hapken mallia, joka approksimoi epälineaarisesti sekoittuneen reflektanssidatan lineaarista sekoittumismallia noudattelevaksi SSA-dataksi (*Single Scattering Albedo*) (Hapke 2012). Lineaarisesti sekoittuneeseen SSA-dataan voidaan soveltaa lineaariseen sekoittumismalliin pohjautuvia spektrienerottelualgoritmeja (Lin ja Zhang 2017).

2.3.2 Hapken malli

Valon käyttäytymiselle partikkeleiden intiimeissä seoksissa on olemassa monia malleja, mutta niistä suosituin on Hapken malli (Heylen, Parente ja Gader 2014). Se on alunperin kehitetty käytettäväksi mallintamaan valon vuorovaikutusta planeettojen pintamateriaaleissa, mutta sitä on hyödynnetty myös laboratorio-olosuhteissa (Howari ym. 2018). Hapken malli ei ole täydellinen, sillä esimerkiksi osa parametreista on empiirisiä ja toisistaan riippuvia (Shkuratov ym. 2012). Malli on kuitenkin osoittautunut toimivaksi monissa tapauksissa (Rasti, Koirala ja Scheunders 2022), Howari ym. 2018, Ahmad ja Nair 2024, Lin ja Zhang 2017), joten sitä käytetään myös tässä työssä.

Tiettyjen oletusten ollessa voimassa, kuten oletus partikkelien pallomaisesta muodosta ja niiden isotrooppisesta valonsäteiden sirottamisesta, Hapken mallilla voidaan muuntaa intiimien seosten epälineaarinen reflektanssidata approksimaatioksi lineaarista sekoittumismallia noudattavasta SSA-datasta (Hapke 2012). SSA on aallonpituusriippuvainen partikkelin ominaisuus, jota voidaan käyttää kuvaamaan valon vuorovaikutusta yksittäisen partikkelin kanssa mikroskooppisella tasolla. Kun reflektanssit on muunnettu SSA-dataksi, lineaarisen sekoittumismallin varaan rakentuvia spektrienerottelualgoritmeja voidaan käyttää analysointiin. (Heylen, Parente ja Gader 2014)

Relatiivinen reflektanssi voidaan ilmaista yhtälönä

$$\Gamma(w, \mu, \mu_0) = \frac{w}{(1 + 2\mu\sqrt{1-w})(1 + 2\mu_0\sqrt{1-w})}, \quad (2.4)$$

missä μ_0 ja μ ovat tulevan ja lähtevän säteilyn kulmien kosinit, w on SSA-arvo ja Γ on relatiivinen reflektanssi (Hapke 2012). Yhtälö 2.4 on kääntyvä, eli tuntematon w voidaan ratkaista. Saatu yhtälö on muotoa

$$w = R^{-1}(\Gamma) = 1 - \left(\frac{[(\mu_0 + \mu)^2 \Gamma^2 + (1 + 4\mu_0 \mu \Gamma)(1 - \Gamma)]^{0.5} - (\mu_0 + \mu) \Gamma}{1 + 4\mu_0 \mu \Gamma} \right)^2. \quad (2.5)$$

Reflektanssidata voidaan siis muuntaa SSA-dataksi yhtälön 2.5 avulla.

2.3.3 Tutkimuksessa käytettävä algoritmi

Aiemmin lueteltiin muutamia eri spektrien erotteluun käytettyjä algoritmeja. Tässä tutkimuksessa käyttöön valittiin pienimmän neliösumman menetelmään pohjautuva optimointialgoritmi, joka on yleisesti käytössä oleva ja hyvin tunnettu menetelmä. Sitä on käytetty esimerkiksi referenssinä tutkimuksissa, joissa arvioidaan uusien menetelmien toimivuutta (Smith, Ochoa ja Intes 2020, Gröhl ym. 2021), joten se sopii myös uusien kuvantamismenetelmien vertailutuloksien laskemiseen. Tässä tutkimuksessa algoritmista toteutettiin täysin rajoitettu (*fully constrained*) versio, sillä sen on osoitettu toimivan vähintään yhtä hyvin, tai jopa paremmin, kuin osittain tai ei lainkaan rajoitetut versiot (Ahmad ja Nair 2024, Heinz ym. 2001).

Kuvat analysoidaan pikseli kerrallaan. Algoritmille annetaan puhtaiden materiaalien, eli suolan ja sokerin ominaisspektrit, joiden avulla se pyrkii rekonstruoimaan alkuperäisen pikselin etsimällä suolalle ja sokerille parhaat pitoisuusarvot eli abundanssit. Pikselin rekonstruktioon käytetään yhtälön 2.2 mukaista lineaarista sekoittumismallia. Rekonstruktion onnistumista arvioidaan objektifunktiolla, joka mittaa eroa alkuperäisen ja rekonstruoidun pikselin välillä. Tuloksena on pitoisuuskartat, jotka kertovat kuinka paljon suolaa tai sokeria on kussakin kuvan pikselissä. Optimointiongelman muotoa

$$\min \alpha \text{MSE} + (1 - \alpha) \text{SAM} + \lambda (a_1^2 + a_2^2) \quad (2.6)$$

siten, että

$$a_1 + a_2 = 1$$

$$0 \leq a_1, a_2 \leq 1,$$

missä a_1 ja a_2 ovat sokerin ja suolan abundanssit, MSE on virheen neliöllinen keskiarvo (*Mean Squared Error*) ja SAM (*Spectral Angle Mapper*) on funktio, joka arvioi spektrikäyrien samanmuotoisuutta. MSE lasketaan kaavalla

$$\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (\mathbf{y}_i - \hat{\mathbf{y}}_i)^2 \quad (2.7)$$

ja SAM kaavalla

$$\arccos \left(\frac{\mathbf{y} \cdot \hat{\mathbf{y}}}{\|\mathbf{y}\| \|\hat{\mathbf{y}}\|} \right), \quad (2.8)$$

missä \mathbf{y} on alkuperäinen pikseli ja $\hat{\mathbf{y}}$ lineaarisella sekoittumismallilla mallinnettu pikseli.

Regularisaattoritermin λ on pieni vakio ja painokerroin $\alpha \in [0, 1]$. Käytetty objektifunktio pohjautuu artikkelissa Raita-Hakola, Rahkonen ja Pölönen (2024) esitettyyn neuroverkon tappiofunktioon, johon lisättiin L2-regularisointiparametri. Optimointiongelman asetettujen rajoitteiden mukaan pitoisuusarvojen a_1 ja a_2 on kuuluttava välille $[0, 1]$ ja niiden summan on oltava 1.

Ongelma toteutettiin SciPy-kirjaston minimize-funktiolla (Virtanen ym. 2020). Minimointialgoritmina käytettiin kirjaston valmista toteutusta SLSQP-algoritmista (*Sequential Least Squares Programming*), kuten myös Gröhl ym. (2021) tekivät käyttäessään sitä vertailumetodina uuden neuroverkkopohjaisen spektrienerottelualgoritmin arviointiin. SLSQP on iteratiivinen, pienimmän neliösumman menetelmään pohjautuva optimointialgoritmi. Optimointifunktion Python-kooditoteutus liitteessä A.

2.4 Laitteiston kuvaus

2.4.1 Aallonpituussäädettävä valonlähde (TLS)

Tämän tutkimuksen tarkoituksena on arvioida VTT:n kehittämän aallonpituussäädettävän valonlähteen (*Tunable Light Source*, TLS) suoriutumista osana spektrikuvantamismenetelmää kaupalliseen menetelmään verrattuna. TLS-laitteen aallonpituusalue on laajuudeltaan 450-850 nm, eli se kattaa näkyvän valon alueen ja osan lähi-infrapunan alueesta. Aallonpituuskaistojen puoliarvoveveydet ovat 18-21 nm.

Valonlähteessä on kaksi LED-komponenttia, joiden aallonpituuksien erottelu tapahtuu laitteen sisällä PFPI-teknologiaa käyttäen. Fabryn toiminta pohjautuu puoliläpäisevien metallipeilien etäisyyden säätelyyn. Peilien etäisyyttä säätelämällä voidaan kontrolloida interferometrin läpi päästävän säteilyn aallonpituutta (Antila ym. 2017).

Valonlähde pystyy siis tuottamaan valitun aallonpituista valoa, mikä on erityisen hyödyllistä spektrikuvantamissovelluksissa; käyttäjä voi rakentaa ja optimoida kuvantamislaitteiston kohdekohtaisesti ja valita esimerkiksi tilanteen vaativat optiset komponentit. Spektrikuvantamiseen TLS-laitetta voi käyttää yhdessä esimerkiksi endoskoopin, mikroskoopin tai tavallisen konenäkökameran kanssa. Tämä tuo käyttäjälle joustavuutta kuvantamisetelman rakentamiseen, etenkin verrattuna perinteisiin spektrikuvantamislaitteisiin, joissa on integroidut kuvantamiskomponentit.

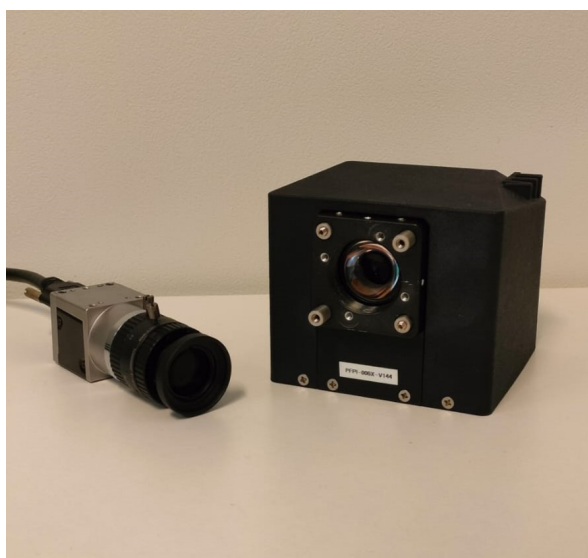
Valonlähdettä on helppo ohjata VTT:n tekemän Python-ohjelmakirjaston kautta. Käyttäminen vaatii kalibraatiotiedostot, joiden perusteella määrätty esimerkiksi LED-komponenteille annettavan sähkövirran määrä kullakin valitulla aallonpituudella, mikä puolestaan määrää sen ulostuottaman valon kirkkauden. Tämän tutkimuksen puitteissa käytettiin kuvantamiseen 237 kalibroitua aallonpituutta, eli tällä asetuksella otetut spektrikuvat sisältävät 237 eri aallonpituuskaistaa.

2.4.2 TLS osana spektrikuvantamismenetelmää

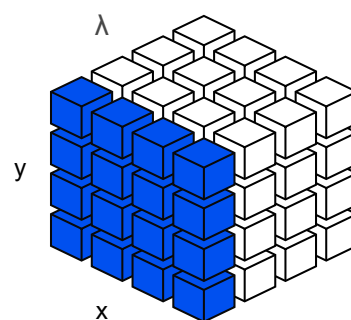
Kuten aiemmin mainittiin, TLS:n hyvä puoli spektrikuvantamisessa on sen skaalautuvuus: käyttäjä pystyy itse räätälöimään kuvantamisetelman kohteen vaatimusten mukaisesti va-

litsemalla esimerkiksi juuri oikeat optiset komponentit. Tässä tutkimuksessa kuvantamiseen käytetään tavallista Basler acA2500 14 μ m-konenäkösensoria, johon on kiinnitetty Navitar 12.5 m/F1.4 -linssi. Yhdessä nämä komponentit muodostavat konenäkökameran.

TLS-spektrikuvantamismenetelmässä valonlähteen tuottama valo ohjataan kuitua pitkin ren- gasvalokomponenttiin, jonka keskelle asennetaan konenäkökamera. Kuvauksen kohdetta va- laistaan yhdellä aallonpituusalueella kerrallaan ja otetaan kuva. Tätä toistetaan, kunnes ha- luttu aallonpituusalue on käyty läpi. Lopputuloksena on kuvion 2 kaltainen spektrikuva. Lait- teisto ja kuvantamismenetelmän toimintaperiaate esitetty kuvioissa 4 ja 5.



Kuvio 4: **Konenäkökamera ja TLS.** Huom. kuvauksissa käytetty linssi eri kuin yllä.



Kuvio 5: **TLS-menetelmän kuvanta- misperiaate.** Spektrikuva muodostuu ku- va kerrallaan eri aallonpituuksilla valais- tuista "tavallisista" kuvista.

Laitteistoa ohjataan tutkielman tekijän rakentamasta, yksinkertaisesta, Jupyter Notebookis- sa pyörivästä käyttöliittymästä, joka hyödyntää esimerkiksi kirjastoja kuten ipywidgets ja camazing (Jääskeläinen ym. 2019). Spektrikuvatiedostot ja niiden metadata tallennetaan netCDF-tiedostoihin xarray-muodossa. Kuvauksessa käytettävät aallonpituudet annetaan käyt- töliittymälle sen avaamisen yhteydessä.

Kuviossa 6 on kuvakaappaus käyttöliittymästä. Laitteistoa ohjataan keskellä sijaitsevista pai- nikkeista: ylimpänä on kameran asetusten säätö, keskellä spektrikuvantamisen oleelliset toi- minnot, eli tekstilaatikat mihin syötetään taustatotuus ja kuvatiedoston nimi. Alin laatikko

kontrolloi valonlähdettä, jolle voi antaa minkä tahansa aallonpituuden (alueen yli menevät klipataan lähimpään sallittuun arvoon), tai esikatsella kaikki spektrikuvantamisessa käytettävät aallonpituudet.



Kuvio 6: Kuva TLS-kuvantamismenetelmän ohjaamiseen käytetystä käyttöliittymästä

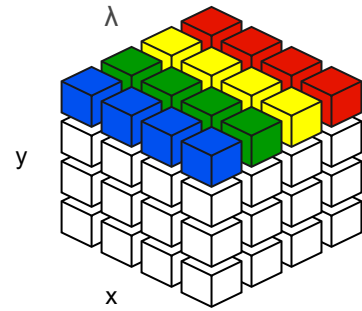
Kuvan ottamisen keston vaikuttaa käytettävien aallonpituuskaistojen lukumäärä, fabryn asettumisaika ja sensorin valotusaika. Tässä tutkimuksessa yhden spektrikuvan ottamiseen menee noin 3 minuuttia, mutta siihen kuluva aika on mahdollista pienentää. Tämän tutkimuksen kuvaustilanteessa ei ollut kiire, joten asetukset jätettiin tarkoituksella niin suuriksi, että valonlähde ehtii varmasti vaihtaa aallonpituuden ja asettua stabiiliksi ennen kuvan ottamista.

2.4.3 Specim IQ

Vertailukohtana edellisessä luvussa kuvaillulle menetelmälle käytetään perinteistä, kaupallisesti saatavilla olevaa Specim IQ-hyperspektrikameraa. Sen kuvaama aallonpituusalue on 400-1000 nm eli se kattaa näkyvän valon aallonpituusalueen, sekä osan lähi-infrapunan alueesta. Aallonpituuskaistojen puoliarvoveveys on 7 nm ja niitä on yhteensä 204 kappaletta. Specim IQ kuvaa viivaspektriä, eli se erottelee aallonpituudet sisällään prismalla, käyttää niitä yhden rivin kuvantamiseen ja muodostaa kuvan rivi kerrallaan. Kamera ja sen kuvantamismenetelmän toimintaperiaate on esitetty kuvioissa 7 ja 8.



Kuvio 7: **Specim IQ-hyperspektrikamera.** IQ erottelee aallonpituudet sisällään prisman avulla.



Kuvio 8: **Viivaspektrin kuvantamisperiaate.** Spektrikuva muodostuu rivi kerrollaan.

Kameraa voi ohjata joko itse kamerasta tai erillisen ohjelmiston kautta tietokoneella. Kuvat ja niihin liittyvä metadata tallentuu ENVI-yhteensopivina tiedostoina. Kuvakoko on 512×512 pikseliä.

3 Datan keräys ja esikäsittely

3.1 Näytteet

Kuvauskohteeksi valittiin tavallisesta ruokasuolasta (Meiran jodioitu ruokasuola) ja kidesokerista (Rainbow kidesokeri) tehdyt seokset. Suola ja sokeri valittiin kuvauskohteeksi niiden helpon saatavuuden sekä niiden luoman ongelman luonteen vuoksi; koska suola ja sokeri ovat hyvin samannäköiset ja valon käyttäytyminen seoksissa on epälineaarista, on niiden erottelu haastava ongelma. Suola ja sokeri kuvattiin sekä puhtaina aineina että eri suhteissa seoksina. Sekoitussuhteet lueteltuna taulukossa 1.

	Sokeri	Suola
Seos 1	100%	0%
Seos 2	90%	10%
Seos 3	80%	20%
Seos 4	70%	30%
Seos 5	60%	40%
Seos 6	50%	50%
Seos 7	40%	60%
Seos 8	30%	70%
Seos 9	20%	80%
Seos 10	10%	90%
Seos 11	0%	100%

Taulukko 1: Taulukko suolan ja sokerin sekoitussuhteista

Näytteet mitattiin keskenään samanlaisiin, halkaisijoiltaan 7 cm kokoisiin petrimaljoihin. Maljoihin mitattiin 10 ml seosta. Mittaus tehtiin maustemitalla, jonka tilavuus oli 1 ml. Näin voitiin helposti laskea näytteiden suhteet: yksi mitallinen on 10% koko seoksesta, jolloin esimerkiksi 50% suolaa ja 50% sokeria sisältävä seos muodostettiin mittaamalla viisi mitallista kumpaakin.

Kaikki näytteet sekoitettiin huolellisesti ja niiden pinnat tasoiteltiin varjostumien synnyn minimoinniksi. Samalla varmistettiin, ettei missään näytteessä jäänyt petrimaljan pohjaa näkyviin, mikä olisi voinut aiheuttaa analyysia hankaloittavia heijastuksia kuviin.

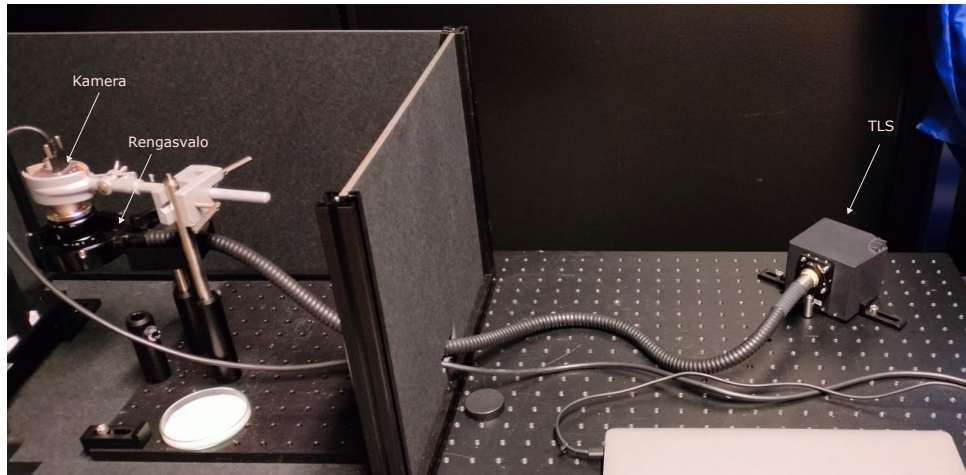
3.2 Kuvausasetelmat ja kuvaaminen

Kuvaukset suoritettiin kahdella eri menetelmällä; ensin TLS-spektrikameralla, jonka jälkeen kuvaukset toistettiin Specim IQ-spektrikameralla. Kuvausasetelma pyrittiin pitämään molemmille menetelmille mahdollisimman samanlaisena. Valo ohjattiin kuitua pitkin rengasvaloon, joka oli asetettu 6,5 cm etäisyydelle näytteistä. Petrimaljat asetettiin onttoon ympyrälieriön muotoiseen korotettuun näytetelineeseen, joka liu'utettiin kuvausasetelman alle. Näyteteline asetettiin aina tarkasti samaan, teipillä merkittyyn kohtaan. Koska teline on halkaisijaltaan hieman petrimaljoja suurempi, maljoilla on liikkumavaraa telineessä. Petrimaljat pyrittiin asettamaan mahdollisimman samaan kohtaan telineen pohjalle näytteitä kuvattaessa. Kuvausasetelmat eroavat toisistaan käytetyn laitteiston suhteen (eri kamerat sekä valonlähteet), minkä lisäksi asetelmissa jouduttiin käyttämään eri kuvausetäisyyksiä laitteiston vaatimuksista johtuen.

Molemmille menetelmille käytettiin samoja näytteitä, jotka kuvattiin samassa kuvausjärjestyksessä, edeten taulukon 1 mukaisessa järjestyksessä seoksesta 1 alkaen. Kuvaukset suoritettiin täysin pimennetyssä huoneessa. Kuvausasetelma rakennettiin mustaan laatikkoon (kts. kuvio 9), joten edes kannettavan tietokoneen ruudun valo ei päässyt kulkeutumaan kuviin. Myös näyteteline vuorattiin spektrisesti mustalla teipillä heijastusten minimoinniksi. Kuvattaessa pidettiin tarkasti tiedossa taustatotuus, eli kunkin näytteen pitoisuudet, joka kirjattiin kuvien metadataan.

3.2.1 TLS-menetelmä

TLS-menetelmän kuvausasetelma on nähtävissä kuviossa 9. Valonlähde on oikeassa reunassa pöytään kiinnitettynä. Valo on ohjattu laitteesta kuitua pitkin kuvan vasemmassa reunassa näkyvään rengasvaloon, jonka etäisyys kuvauskohteesta on 6,5 cm. Kamera on asetettu pidikkeeseen kiinnitettynä rengasvalon keskelle. Myös kuvausetäisyys on 6,5 cm. Kamera ja

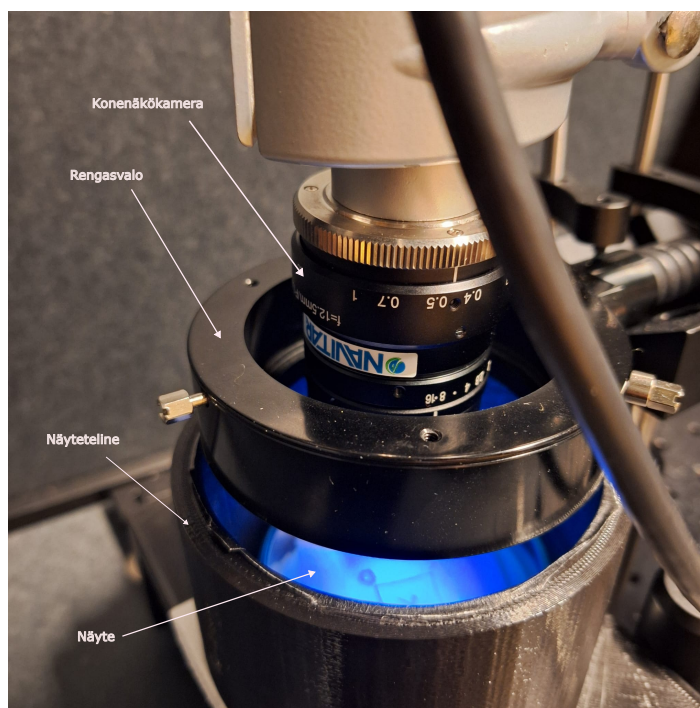


Kuvio 9: **TLS-laitetta hyödyntävä kuvausasetelma** TLS on oikeassa reunassa pöytään kiinnitettynä, josta valo on ohjattu kuitua pitkin kuvan vasemmassa reunassa näkyvään rengasvaloon. Konenäkökamera on asetettu pidikkeeseen kiinnitettynä rengasvalon keskelle. Valon ja kameran etäisyys kuvauskohteesta on 6,5 cm.

valonlähde on molemmat yhdistetty tietokoneeseen, josta niitä ohjattiin.

Ennen varsinaisten kuvausten aloittamista säädettiin valonlähteen kirkkaus kaistakohtaisesti kuvien ylivalottumisen ehkäisemiseksi. Säädöt tehtiin manuaalisesti kalibraatiodoston kunkin aallonpituuden sähkövirran arvoja säätämällä. Prosessi oli iteratiivinen, eli arvojen säädön jälkeen otettiin kuva valkoreferenssinä käytetystä valkoisesta teflonista. Valkoisen teflonin ominaisuutena on korkea heijastuvuus, 99% siihen tulevasta valosta heijastuu takaisin, minkä vuoksi se sopii hyvin kohteeseen tulevan valon mittaamiseen. Mikäli otettu kuva oli ylivalottunut, kyseisen aallonpituuskaistan kirkkautta pienennettiin ja tarkasteltiin vaikutuksia ottamalla uusi kuva. Näin tehtiin, sillä aallonpituuskaistojen kirkkaudet vaihtelivat. Pelkkä valotusajan säätö ei siis olisi riittänyt; pahimmassa tapauksessa osa kaistoista olisi mennyt täysin pimeiksi, kun taas osa olisi edelleen ylivalottunut.

Kuvauksissa käytetty valotusaika oli 650 ms ja gain-arvo oli 2. Kuvauksissa käytettiin aallonpituuskaistoja väliltä 467.3 - 841.8 nm ja niitä oli yhteensä 237 kappaletta. Ledien vaihtumiskohdassa, eli aallonpituusalueen 585.4-606.6 nm välissä sijaitsevia aallonpituuksia ei



Kuvio 10: Lähikuva TLS-menetelmän kuvausasetelmasta. Valonlähde on asetettu valaisemaan sinisen aallonpituuden valoa.

käytetty, sillä tällä välillä olevat aallonpituudet eivät ole stabiileja. Kuvat rajattiin jo kuvausvaiheessa siten, että valmiissa tuotoksissa näkyvissä vain suola-sokeriseosta hyvin valaistulta, 1592×1044 pikselin kokoiselta alueelta. Itse näytteiden lisäksi kuvattiin myös valko- ja pimeäreferenssit suhteellisten reflektanssien laskemista varten.

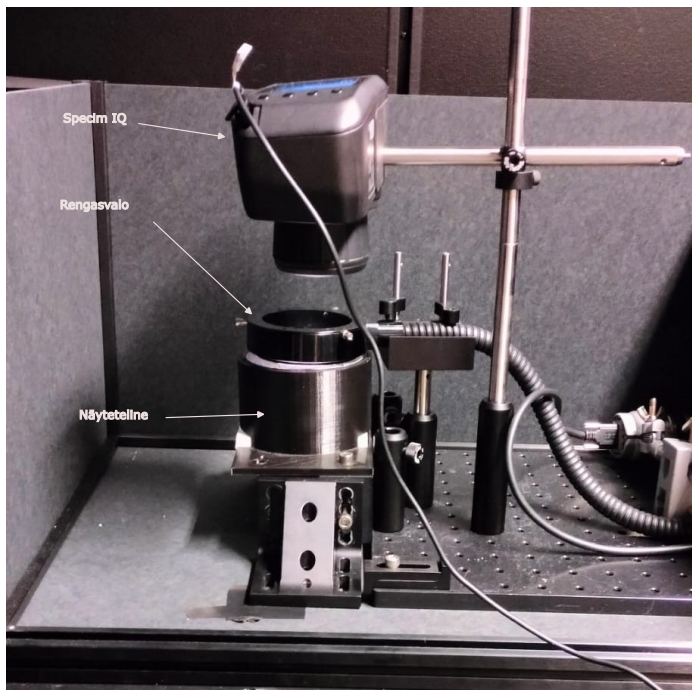
3.2.2 Specim IQ

IQ-kameran kuvausasetelma pidettiin muuten samana kuin TLS-menetelmän asetelma, mutta kamera oli asetettava sen minimikuvausetaisyden, 15 cm, päähän kuvauskohteesta. Lisäksi valonlähde vaihdettiin halogeenivalonlähteeseen, sillä Specim IQ erottelee valon aallonpituudet sisällään prismalla. Käytetty valonlähde nähtävissä kuviossa 11 ja muu kuvausasetelma nähtävissä kuvioista 12 ja 13. Kuten voi havaita, asetelma on muuten sama, paitsi kuvausetaisyys on suurempi IQ-kameran minimitarkennusetaisydestä johtuen.

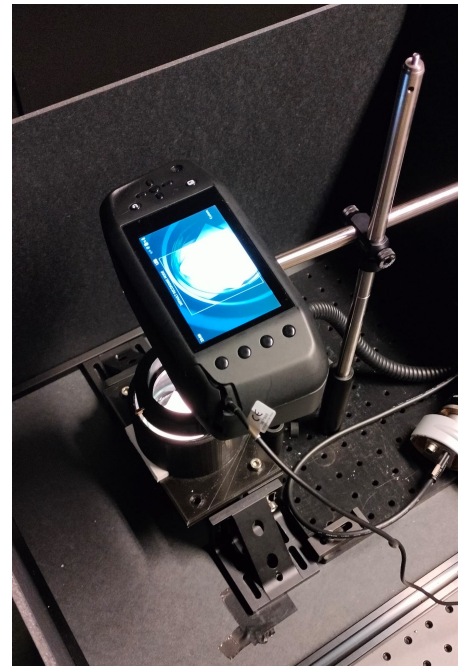
Ennen suola-sokeriseosten kuvausta IQ-kameralla määritettiin valkoreferenssi kamerasetukseen, minkä lisäksi otettiin varsinainen valkoreferenssikuva. Valotusaika oli 50 ms, jonka



Kuvio 11: **Specim IQ-kuvausasetelmassa käytetty halogeenivalonlähde.** Valo ohjattiin TLS:n kanssa samanlaista kuitua pitkin rengasvaloon, eli kuvantamisen valaistus oli molemmissa asetelmissa samanlainen



Kuvio 12: **Specim IQ-kuvausasetelma sivulta.** Asetelma muuten sama kuin TLS-menetelmällä, mutta kamerasen etäisyys näytteestä on 15 cm.



Kuvio 13: **Specim IQ-kuvausasetelma yläviistosta.**

kameran oma automatiikka määrittä. Valkoreferenssin jälkeen kuvattiin näytteet taulukon 1 mukaisessa järjestyksessä samalla 50 millisekunnin valotusajalla. Yhden spektrikuvan ottamiseen meni noin minuutti. Pimeäreferenssin hoitaa kameran oma automatiikka. Kuvat on tiedostomuodoltaan ENVI-yhteensopivaa dataa.

3.3 Kuvasarjat

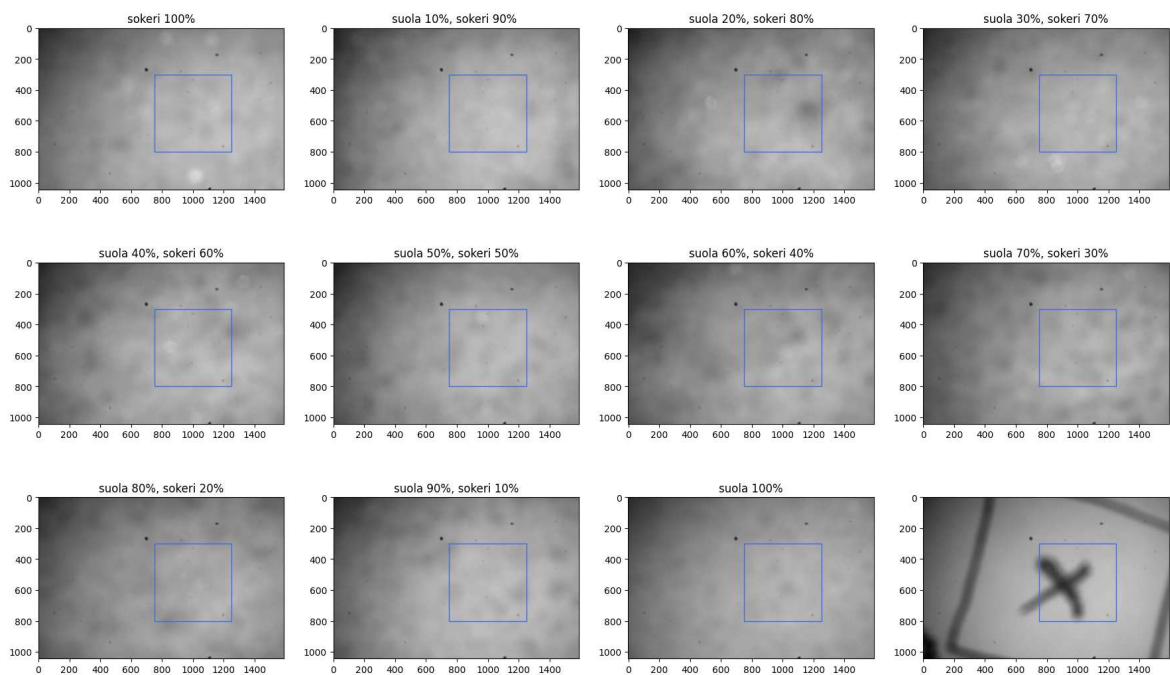
Kuvausten lopputuloksena on siis kaksi kuvasarjaa, jossa molemmissa 11 kuvaa suola-soke-
riseoksista eri sekoitusasteissa. Koska käytetyt kuvausmenetelmät ovat toimintaperiaatteil-
taan hyvin erilaiset, myös kuvasarjat eroavat toisistaan. Kuvasarjojen ominaisuudet käydään
läpi tarkemmin seuraavissa luvuissa. Oleelliset kuvantamisessa käytetyt metatiedot ja ku-
vasarjojen ominaisuudet on esitelty taulukossa 2 vertailun helpottamiseksi. Rajatun alueen
koolla tarkoitetaan analyysiin käytetyn alueen kokoa.

	TLS	Specim IQ
Pikseliresoluutio	1592 × 1044	512 × 512
Aallonpituuskaistojen lukumäärä	237	204
Aallonpituusalue	467,3 - 841,8 nm	400 - 1000 nm
Valotusaika	650 ms	50 ms
FWHM	18-21 nm	7 nm
Rajatun alueen koko (pikseleinä)	501 × 501	81 × 81
Rajatun alueen koko (cm)	n. 0.5 × 0.5 cm	n. 1 × 1 cm

Taulukko 2: Kuvasarjojen ominaisuudet

3.3.1 TLS-kuvasarja

Sarjan raakakuvatulokset esitettynä kuviossa 14. Spektrikuvista esitetty vain aallonpituus-
kaista 50, eli aallonpituudella 530.9 nm kuvattu kuva. Kuvausta varten käytettiin sensorin
korkeus-, leveys-, offset-asetuksia niin, että tallennettaviin kuviin tuli näkyviin vain hyvin
valaistua aluetta näytteistä. Kuvista rajattiin pois mekaaninen vignetointi, mikä johtui linssin
ja sensorin formaattieroista.



Kuvio 14: TLS-menetelmän kuvasarja. Spektrikuvista esitetty vain aallonpituuskaista 50, eli aallonpituudella 530.9 nm valaistu kuva. Neliöillä merkitty analyysiin käytetyt alueet.

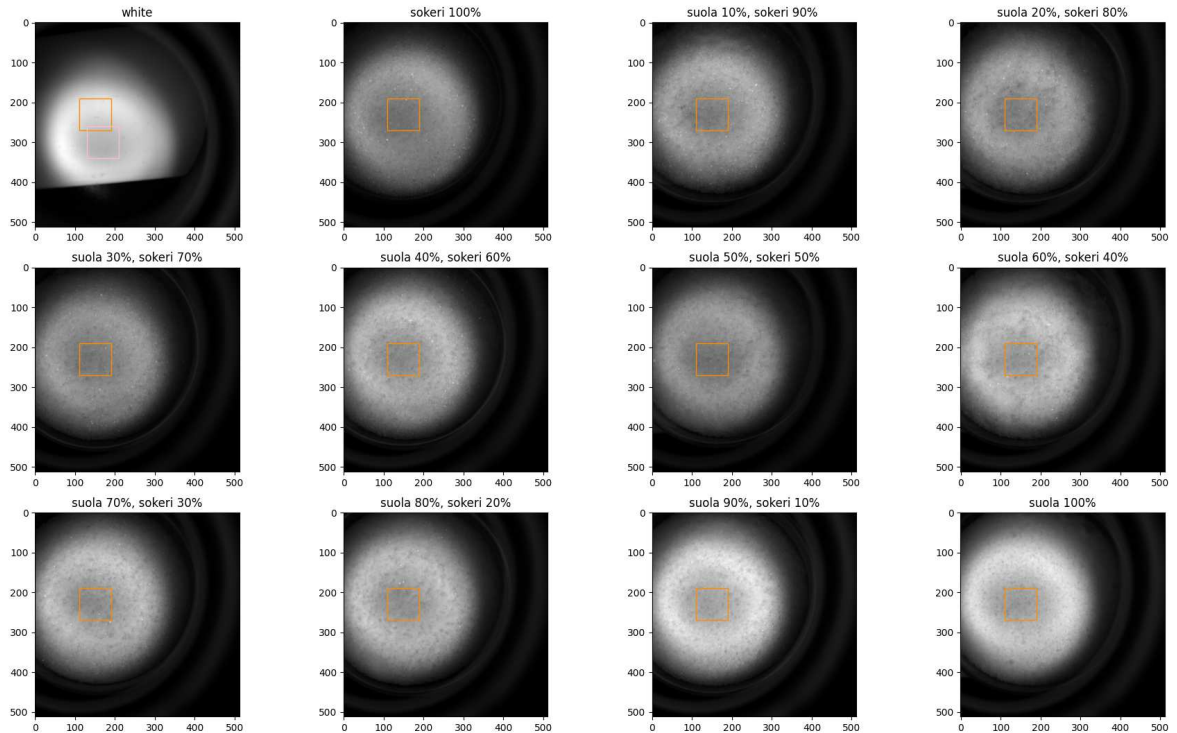
TLS-menetelmällä otettujen kuvien pikseliresoluutio on 1592×1044 , ja aallonpituuskaistoja on yhteensä 237. Kuvissa näkyy rajattuna sinisellä neliöllä 501×501 pikselin kokoinen alue, josta myöhemmin laskettiin analyyseissa käytetyt reflektanssiarvot.

Kuvausetäisyys vaikuttaa TLS:n tuottamaan valotehoon, jonka vuoksi kameraa ja rengasvaloa ei haluttu siirtää 6,5 cm kauemmaksi kuvauskohteesta. Kuvauksia tehdessä oli haastavaa löytää linssiä, jonka saisi tarkennettua 6,5 cm päähän. Tästä johtuen kuvien tarkkuus ei ole paras mahdollinen, kuten kuvion 14 oikeassa alareunassa näkyvästä kuvasta voi havaita. Tämän pienen epätarkkuuden ei kuitenkaan pitäisi vaikuttaa analyyseihin, sillä se vain hieman keskiarvoistaa kuvaa.

3.3.2 Specim IQ-kuvasarja

Specim IQ-menetelmän kuvausten tuloksena myös 11 kuvaa, joiden pikselikoko 512×512 . Aallonpituuskaistoja on yhteensä 204 kappaletta, aallonpituusalueelta 400-1000 nm. Kuviossa 15 esitettynä valkoreferenssin ja näytteiden spektrikuvien kaista 50, eli aallonpituudella

613.38 nm otettu kuva. Kuviin on merkitty oranssilla neliöllä 81×81 pikselin kokoinen alue mahdollisimman tasaisesti valaistulta alueelta, jolta analyyseissä käytetyt reflektanssit laskettiin.



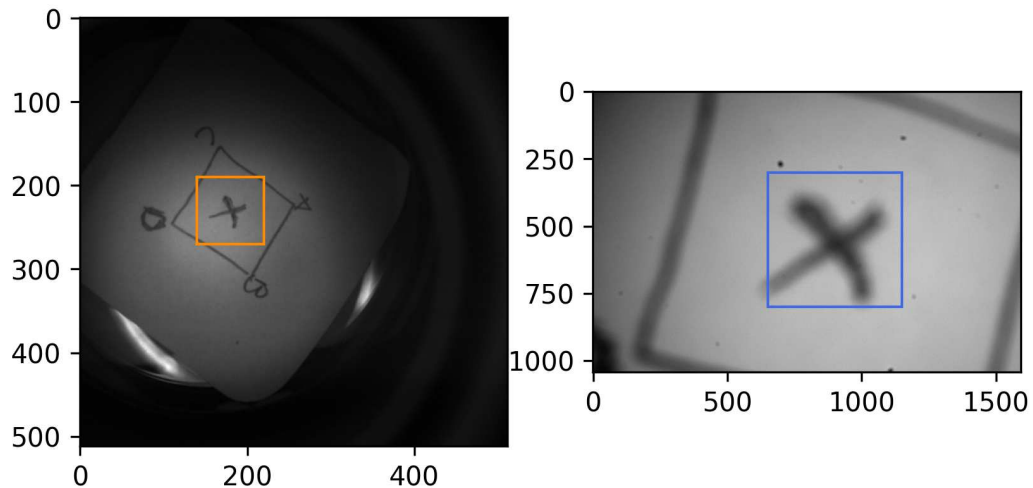
Kuvio 15: Specim IQ:n kuvasarja. Kuvassa esitettynä valkoreferenssin ja näytteiden spektrikuvien kaista 50, eli aallonpituudella 613.38 nm otettu kuva. Neliöillä merkitty analyyseihin käytetyt alueet.

Kuvissa on selkeästi havaittavissa rengasvalon valaisema kehä ja sen keskelle jäävä varjostuma, josta voi huomata että valkoreferenssikuva (vasen yläreuna) ei osu pikseleittäin kohdakkain näyttekuvien kanssa. Tämä johtuu siitä, että näytteitä telineeseen asettaessa ei huomattu kohdistaa valkoreferenssin ja näytteiden paikkoja. Virheellinen kohdistus aiheuttaisi vääristymää reflektansseihin ja tästä syystä valkoreferenssin raja (vaaleanpunainen neliö) siirrettiin samalle alueelle kuin muut näytteet. Valkoreferenssikuvassa näkyvä terävä musta raja on valkoreferenssinä käytetyn valkoisen, näytetelineen pohjalle kiinnitetyn teflonpalkan reuna.

3.4 Datan esikäsittely

3.4.1 Analysoitavan alueen rajaaminen ja reflektanssien laskeminen

Kuten aiemmin jo mainittiin, kuvista rajattiin pienempi alue analysoitavaksi, mahdollisimman tasaisesti valaistusta kohdasta. Kuviosta 16 voi huomata, että vaikka IQ:n kuvien rajattu alue on pikselikooltaan reilusti TLS:n kuvia pienempi, on IQ:n kuvissa analysoidun alueen koko itse asiassa suurempi kuin TLS:n kuvissa. Rajatut alueet ovat samankokoisia kuin analyyseissä käytetyt, mutta niitä on siirretty paremmin ympäröimään kohdennuslapun rasti, jotta alueen pinta-alaa pystyisi arvioimaan tarkemmin. IQ:n alue on noin 1×1 cm ja TLS:n noin 0.5×0.5 cm.

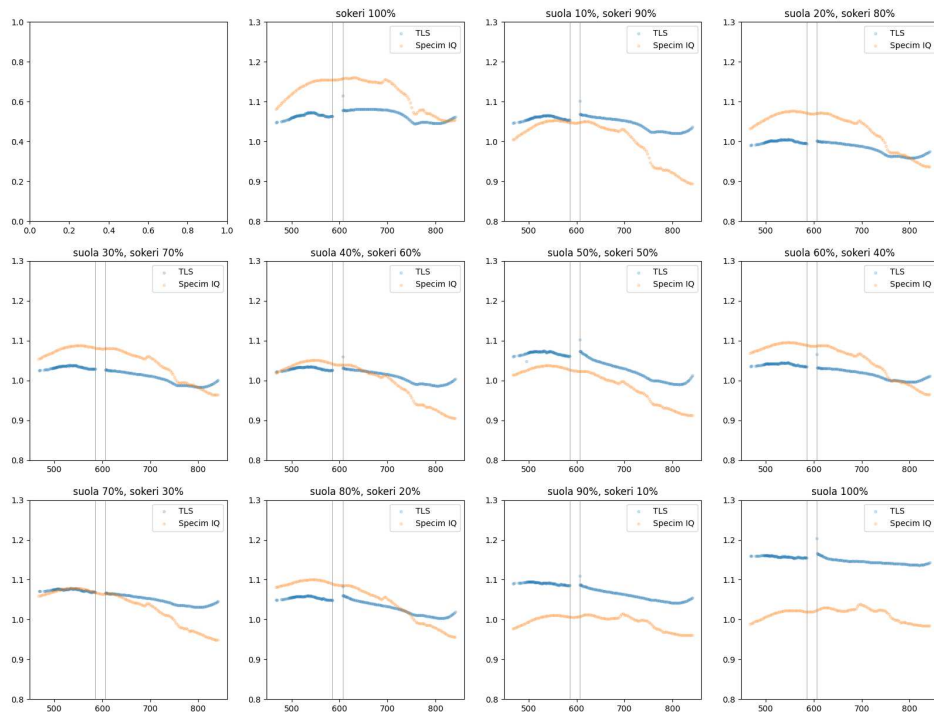


Kuvio 16: **Havainnollistus analyyseissä käytettyjen alueiden ko'oista.** IQ:n kuva vasemmalla ja TLS:n oikealla. IQ:n alue on noin kaksi kertaa suurempi kuin TLS:n.

Reflektanssit kuville laskettiin kaavalla 2.1. Valkoreferenssinä käytettiin molemmille kuvasarjoille itse otettuja valkoreferenssikuvia, mutta pimeäreferenssinä käytettiin IQ:n kuville kameran oman automatiikan ottamaa referenssiä. TLS-kuvasarjalle käytettiin itse otettua pimeäreferenssikuvaa. Reflektanssit laskettiin alkiioittain numpy-taulukkomuotoisille kuville. Tuloksina on siis samanmuotoisen 3D-taulukot, joissa aallonpituus on indeksissä 0, y-dimensio indeksissä 1 ja x-dimensio indeksissä 2.

Reflektanssikäyrät seoksittain nähtävissä kuviossa 17, missä aallonpituus kulkee x-akselilla ja reflektanssi y-akselilla. Specim IQ-kuvasarjan aallonpituudet on rajattu samalle alueelle

TLS-kuvien kanssa. Kuviin piirretyt reflektanssiarvot ovat aallonpituuskaistojen keskiarvoja.



Kuvio 17: **Näytteiden keskimääräiset reflektanssit.** Harmailla pystyviivoilla merkitty TLS-kuvien aallonpituusalue, jota ei käytetty kuvantamiseen. Reflektanssikäyrien kulkeminen on paikoitellen epäloogista: esimerkiksi puhdas sokeri reflektoi IQ:lla kuvannettuna enemmän kuin TLS-menetelmällä, kun taas puhtaan suolan kohdalla tilanne on päinvastainen.

Huomataan, että reflektanssidata on monissa kohdissa yli 1, mitä sen teoriassa ei tulisi olla. Tämä johtuu siitä, että valkoreferenssinä käytetty teflon heijastaa lähes kaiken siihen tulevalta valosta, mutta suola-sokeriseokset heijastavat enemmän. Suolan ja sokerin kiderakenteista aiheutuvat spekulariheijastukset saattavat myös vaikuttaa asiaan.

3.4.2 Huonojen ja ylimääräisten kaistojen poistaminen

Ennen analyysien tekoa spektrikuvista on poistettava huonot aallonpituuskaistat. Huonoja kaistoja ovat esimerkiksi sellaiset kaistat, joilla reflektanssikäyrässä on havaittavissa piikkejä. Usein ensimmäiset ja viimeiset kaistat ovat tällaisia.

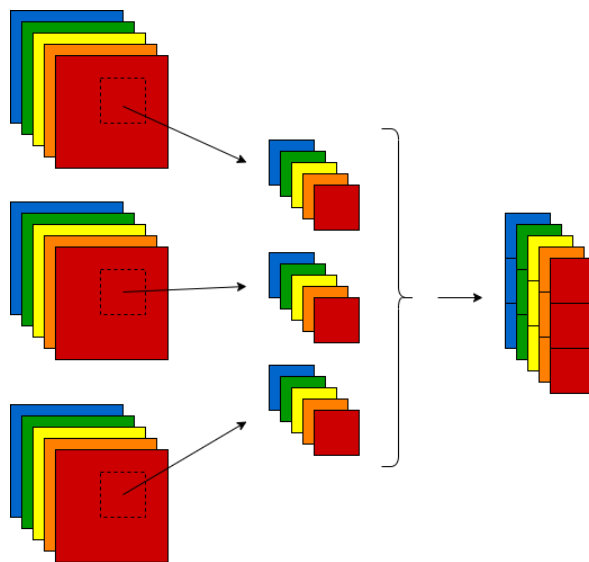
TLS-kuvista tunnistettiin yksi huono kaista (kaista numero 100, aallonpituudeltaan 606.6

nm) reflektanssikäyriä tutkimalla. Huono kaista näkyy suurimmassa osassa kuvion 17 reflektanssikäyristä muita arvoja korkeampana pisteenä. Tämän yhden huonon kaistan poiston jälkeen jäljelle jäi 236 eri aallonpituuskaistaa. Specim IQ-kuvien aallonpituusalue rajattiin alueelle 466.77 - 841.18 nm, jotta se vastaisi TLS-menetelmän käyttämää aallonpituusaluetta. Aallonpituuskaistoja jäi tällöin jäljelle 127 kappaletta. Rajauksen jälkeen kuviin ei jäänyt jäljelle huonoja kaistoja.

Lisäksi tarkasteltiin reflektanssien keskihajontaa, sillä suuri keskihajonta viittaa huonoihin kaistoihin. Muita huonoja kaistoja ei löytynyt.

3.4.3 Kuvien liittäminen

Kuvien rajaamisen, reflektanssidatan muodostamisen ja huonojen kaistojen poiston jälkeen reflektanssimuotoiset pienet alikuvakuutiot liitettiin yhteen Numpy-kirjaston (Harris ym. 2020) concatenate-funktiolla y-akselin suhteen kuvaamisjärjestyksessä: ylimpänä puhdas sokeri, jonka alapuolelle liitettiin seos, jossa 90 % sokeria ja 10 % suolaa ja niin edelleen puhtaan suolaan asti. Kuviossa 18 on havainnollistettu kuvien liittäminen.



Kuvio 18: **Havainnollistus kuvien liittämisestä.** Huom. esimerkki piirretty vain kolmella kuvalla, oikeasti kuvia on 11.

Tuloksena saatu kuva tallennetaan numpy-taulukkona .npy-tiedostoon. Kuvien liittäminen

yhteen helpottaa ja nopeuttaa analyysien tekoa; jokaista kuvaa ei tarvitse analysoida erikseen vaan riittää analyysien suorittaminen yhteenliitetyille alikuvilla.

4 Analyysit

4.1 Hapken malli

Suola-sokeriseosten reflektanssidataon epälineaarisen sekoittumismallin mukaista. Koska valitun analyysimenetelmän pohjalla on lineaarinen sekoittumismalli, on luultavaa, että se ei välttämättä selviytyisi kovin hyvin epälineaarisesti käyttäytyvästä datasta. Tästä syystä reflektanssidataseiteistä muunnettiin Hapken mallilla lineaarista sekoittumismallia noudattavat approksimaatiot. Muunnokset tehtiin syöttämällä yhtälöön 2.5 epälineaarinen reflektanssidata, sekä tulevan ja lähtevän säteilyn kulmien kosinit μ ja μ_0 . Yksinkertaisuuden vuoksi niiden arvoiksi oletettiin $\mu_0 = 1$ ja $\mu = 1$, kuten Rasti, Koira ja Scheunders (2022) tekivät.

4.2 Optimointiongelma spektrienerottelualgoritmina

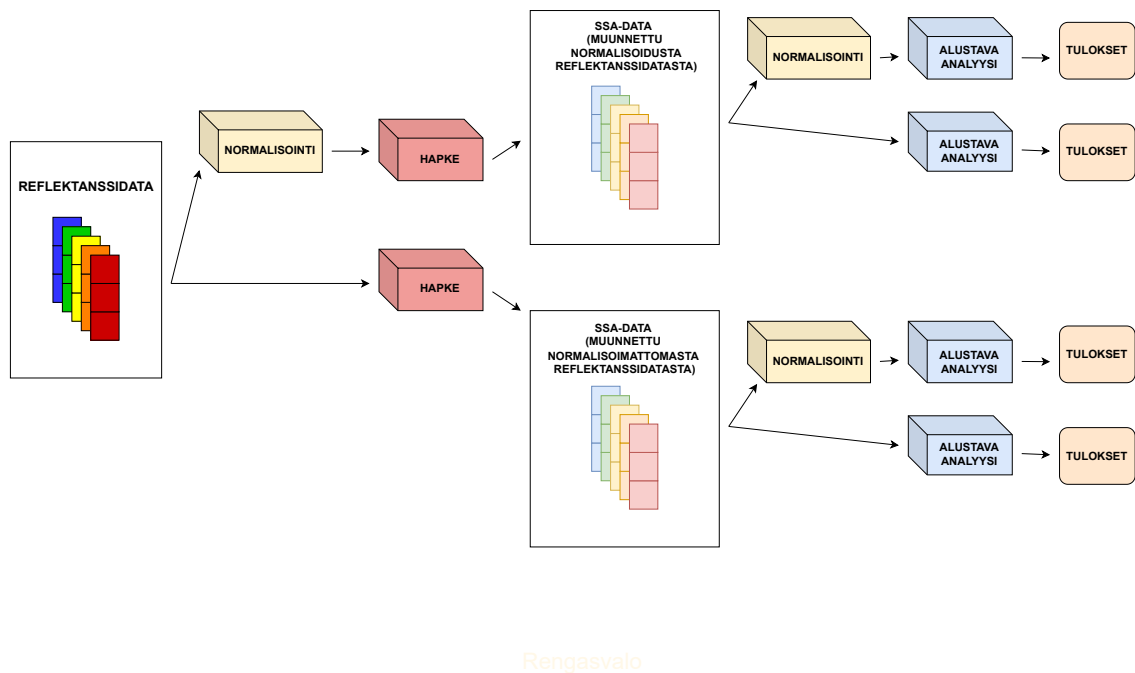
Spektrien erottelu toteutettiin optimointiongelmana, joka analysoi kuvan pikseli kerrallaan. Algoritmille annetaan suolan ja sokerin ominaisspektrit ja pikseli, jonka pitoisuudet halutaan selvittää. Se palauttaa arvion suolan ja sokerin pitoisuuksista kyseisessä pikselissä. Käytetty analyysi kuvattu tarkemmin luvussa 2.3.3 ja sen Python-kooditoteutus on liitteessä A.

Analysoinnin helpottamiseksi kolmiulotteiset datasetit purettiin kaksiulotteisiksi taulukoiksi Numpy-kirjaston reshape-funktiolla siten, että alkuperäisten datasettien pikselit olivat indeksissä 0 ja kunkin pikselin aallonpituusarvot olivat indeksissä 1. Tällöin esimerkiksi (5511, 501, 237) -muotoisista, kolmiulotteisista TLS-dataseiteistä tuli (2761011, 237) -muotoisia, kaksiulotteisia datasettejä. Tässä muodossa datasetti oli helppo käydä silmukassa läpi pikseli kerrallaan, tallentaen jokaisen pikselin pitoisuustulokset taulukkoihin. Analyysin valmistuttua nämä yksiulotteiset taulukot muotoiltiin kaksiulotteisiksi ja visualisoitiin matplotlib-kirjaston (Hunter 2007) imshow-funktiolla.

4.2.1 Datan normalisointi

Molempien kuvantamismenetelmien reflektanssidatsettien arvot olivat monin paikoin yli reflektanssin teoreettisen ylärajan 1. Saattaa olla, että reflektanssidatasta Hapken mallilla

tehty muunnos ei välttämättä käyttäydy oletetulla tavalla, sillä malli odottaa saavansa reflektanssiarvoja väliltä $[0, 1]$. Tästä syystä dataseteille kokeiltiin erilaisia normalisointikonfiguraatioita, joista valittiin kunkin datasetin parhaat alustavien analyysien perusteella. Alustavilla analyysillä tarkoitetaan, että optimointialgoritmi suoritettiin kaikille yllä mainituille dataseteille muutamilla eri painokertoimen α arvoilla. Alustavissa analyysissä käytettyjä konfiguraatioita oli SSA-dataseteillä 4 kappaletta (kts. kuvio 19). Lisäksi alustavat analyysit suoritettiin normalisoimattomille ja normalisoiduille reflektanssidataseteille (ilman Hapken muunnosta), joista valittiin paremmin suoriutunut versio jatkoanalyysiin. Yhteensä alustavia analyyskejä suoritettiin 12 eri datasetille.



Kuvio 19: **Havainnollistus SSA-datan normalisointikonfiguraatioista.** Hapken mallilla muunnettiin SSA-data normalisoidusta ja normalisoimattomasta reflektanssidatasta. Näille SSA-dataseteille suoritettiin alustavat analyysit sekä normalisoimattomille, että normalisoiduille versioille. Paras konfiguraatio valittiin tulosten perusteella.

Datan normalisointiin käytettiin kaavaa

$$Y_{norm} = \frac{Y - \min(Y)}{\max(Y) - \min(Y)}, \quad (4.1)$$

missä Y_{norm} on normalisoitu ja Y on normalisoimaton data, $\min(Y)$ on datasetin pienin arvo ja $\max(Y)$ suurin. Näin datan arvot saadaan välille $[0, 1]$ säilyttäen datapisteiden väliset suhteelliset erot.

Kokeilujen perusteella parhaat konfiguraatiot dataseteille ovat seuraavat:

- TLS-reflektanssidata: normalisoitu ennen analyysia.
- IQ-reflektanssidata: normalisoitu ennen analyysia.
- TLS:n SSA-data: muunnos normalisoimattomasta reflektanssidatasta, jonka tuloksena saatu SSA-data normalisoitiin ennen analyysia.
- IQ:n SSA-data: muunnos normalisoidusta reflektanssidatasta. Tuloksena saadun SSA-datan suurin arvo 1 ja pienin 0, joten normalisoinnilla ei merkitystä.

4.2.2 Spektrienerottelualgoritmin hyperparametrin optimointi

Jokaisen neljän datasetin kohdalla suoritettiin spektrienerottelualgoritmin hyperparametrin, eli objektifunktiossa käytetyn painokertoimen α , optimointi. Hyperparametrin optimointi suoritettiin manuaalisesti haarukoimalla, kunnes painokertoimen α arvo oli saatu rajattua riittävän pienelle välille.

Tulosten parhautta mitattiin laskemalla taustatotuuskien ja analyysien tuloksena saatujen pitoisuuskarttojen välistä keskimääräistä absoluuttista virhettä (*Mean Absolute Error, MAE*) kullekin seokselle. MAE laskettiin kaavalla

$$\frac{1}{11} \sum_{i=1}^{11} |t_i - p_i|, \quad (4.2)$$

missä kirjaimella i numeroidaan eri seokset, t_i tarkoittaa seosta i vastaavaa taustatotuutta ja p_i tarkoittaa seosta i vastaavan pitoisuuskartta-alueen keskiarvoa. Tässä tapauksessa hyperparametrin optimointi on konvekssi ongelma, jolloin sillä on vain yksi minimikohta. Voidaan siis olla varmoja, että minimikohta, eli paras painokertoimen α arvo sijaitsee löydettyllä välillä.

Objektifunktion painokertoimen α parhaan arvon haarukoinnin kolme viimeisintä tulosta on esitettyä alapuolen taulukoissa jokaiselle neljälle datasetille. Taulukoissa keskimmäisinä ovat ne painokertoimen α arvot, joilla seuraavassa luvussa esitetyt tulokset on saavutettu.

TLS (reflektanssi)

α	MAE
0.05	0.1522
0.1	0.1243
0.15	0.1272

TLS (SSA)

α	MAE
0	0.1680
0.05	0.1626
0.1	0.1662

Specim IQ (reflektanssi)

α	MAE
0.7	0.2052
0.75	0.1861
0.8	0.2027

Specim IQ (SSA)

α	MAE
0.45	0.2461
0.5	0.2266
0.55	0.2275

5 Tulokset

Analysoitavana oli neljä eri datasettiä: kummankin kuvantamismenetelmän reflektanssidata, sekä siitä muunnettu SSA-data. Datasetit analysoitiin samalla menetelmällä, mutta objektifunktion painokertoimen α optimointi tehtiin erikseen jokaiselle neljälle datasetulle edellisessä luvussa kuvatulla tavalla.

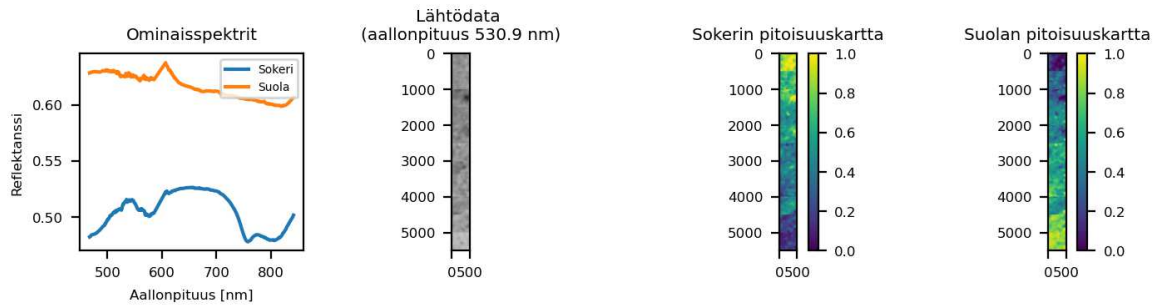
Analyysien tulokset esitetään seuraavissa alaluvuissa. Ensin käydään läpi TLS-menetelmän analyysitulokset, ja sen jälkeen Specim IQ:n tulokset. Tulokset esitetään kaavioina, joissa vasemmassa reunassa on piirretty ominaisspektrit suolalle ja sokerille kyseisestä datasetistä mitattuna. Tämän vieressä oikealla on yhden aallonpituuskaistan kuva lähtödatasta. Aallonpituus on merkitty kuvaan. Analyysien varsinaiset tulokset, eli sokerin ja suolan pitoisuuskartat sijaitsevat oikeassa reunassa. Kaikissa dataseteissä kuvajärjestys on sama, joten taustatotuuden mukaan abundanssikarttojen värityksen tulisi olla liukuvärimäinen: sokerilla ylhäältä keltainen, alaspäin mentäessä väritys muuttuu asteittain tumman violetiksi ja suolalla päinvastoin.

Tuloskaavion alapuolella on visualisoitu kunkin datasetin analyysien virheet seoksittain: suolan ja sokerin pitoisuudet on laskettu kunkin seoskuvan keskiarvona ja tulokset merkitty kuvaajiin pisteillä. Seokset ovat lueteltuna x-akselilla ja pitoisuudet y-akselilla. Kunkin seoksen taustatotuutta merkitään harmaalla pylväällä. Mitä lähempänä pisteen keskipiste on pylvään huippua, sitä lähempänä taustatotuutta tulos on.

5.1 TLS: reflektanssidata

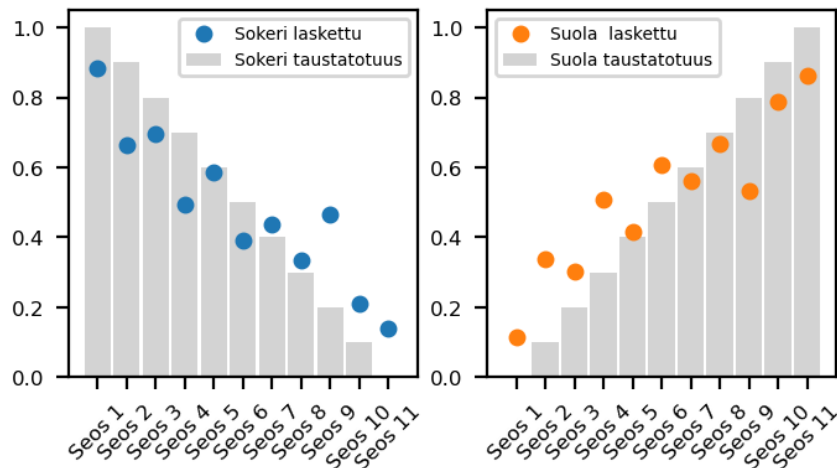
Kaikista neljästä datasetistä TLS-menetelmän reflektanssidatalla saatiin parhaat tulokset. Analyysitulosten keskimääräinen virhe oli 0.1243. Kuviossa 20 nähtävät pitoisuuskartat vastaavat melko hyvin taustatotuuden liukuvärimäisyyttä. Kuvioista 21 nähdään, että saadut tulokset eivät vastaa täydellisesti taustatotuuksia, mutta tulokset ovat selkeästi oikeansuuntaiset ja mukailevat taustatotuutta.

TLS, reflektanssi (SLSQP)



Kuvio 20: TLS-menetelmällä kuvatun reflektanssidatasetin tulokset

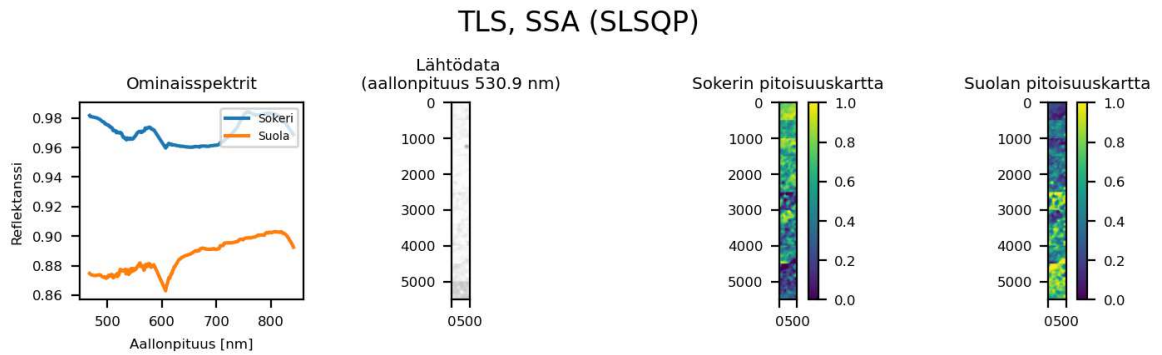
TLS, reflektanssi (SLSQP) (MAE: 0.1243)



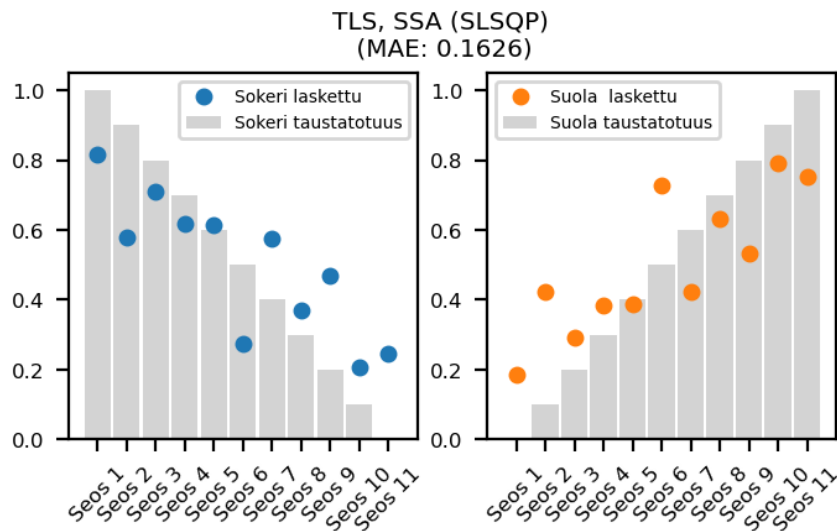
Kuvio 21: TLS-menetelmän reflektanssidatasetin analyysitulosten virheet. Tulokset mu-
kailevat taustatotuutta melko hyvin.

5.2 TLS: SSA-data

Kuviossa 22 esitetty TLS-menetelmän SSA-datasetin analyysitulokset. Tuloksista voidaan huomata, että pitoisuuskartat ovat "rakeisempia" kuin saman menetelmän reflektansseilla. Tarkkuus SSA-datasetille ei ole yhtä hyvä kuin reflektanssidatasetille; oikeastaan miltei kaikki tulokset ovat kauempana taustatotuuksista reflektanssidatasetin tuloksiin verrattuna.



Kuvio 22: TLS-menetelmän SSA-datasetin analyysitulokset

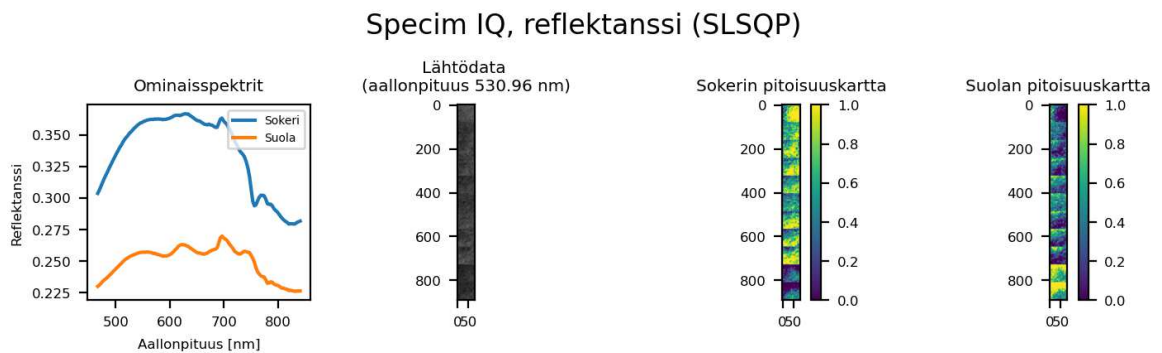


Kuvio 23: TLS-menetelmän SSA-datasetin analyysitulosten virheet. Tulokset objektiivisesti huonommat kuin vastaavalle reflektanssidatasetille.

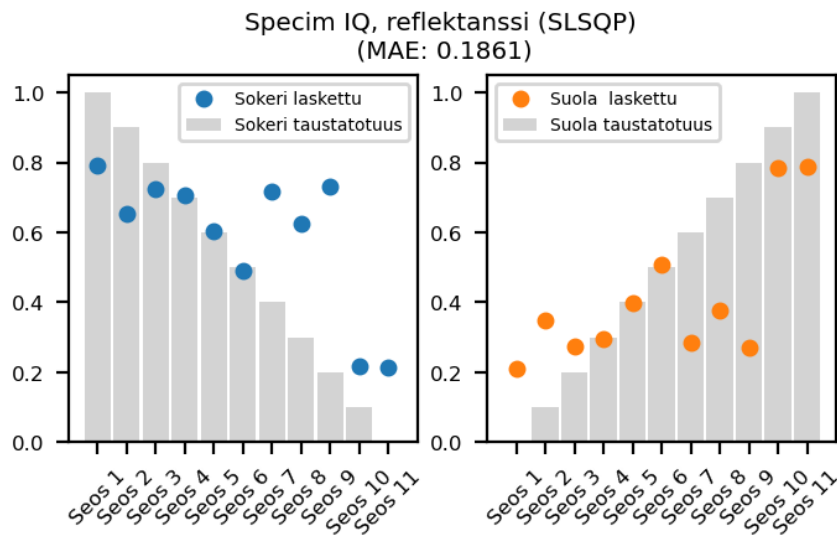
5.3 Specim IQ: reflektanssidata

Kuviossa 24 esitettyjen Specim IQ-menetelmän reflektanssidatan analyysituloksista voidaan huomata, että pitoisuuskartoissa ei ole nähtävissä kovin hyvää liukuväri-ilmiötä. Kun pitoisuuskarttoja verrataan lähtödatakuvaan, voidaan huomata, että pitoisuuskartoissa korostuu lähtödatassa esiintyvät kirkkauden vaihtelut; tummemmat kohdat esiintyvät suolana ja vaaleammat sokerina. Kun katsotaan kuviossa 25 esitettyjä keskimääräisiä pitoisuusarvoja seoksille, voidaan huomata, että seoksilla 4-6 analyysi on kuitenkin antanut lähes täydellisen

oikean tuloksen, vaikka keskimäärin tulokset ovat huonoja.



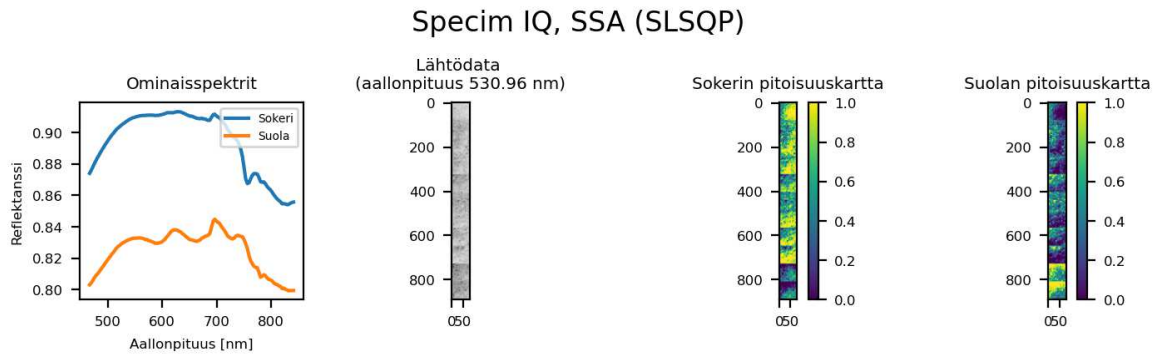
Kuvio 24: IQ:lla kuvatun reflektanssidatasetin analyysitulokset.



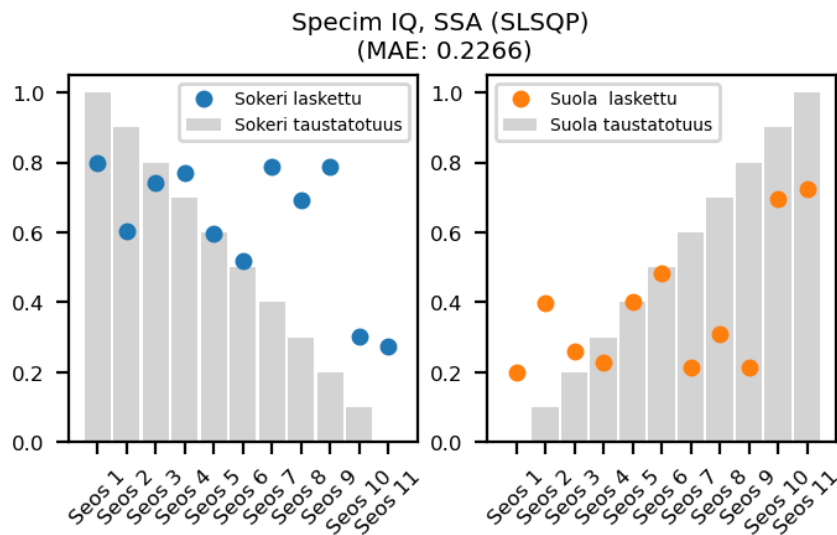
Kuvio 25: IQ:lla kuvatun reflektanssidatasetin analyysitulosten virheet. Huomaa seosten 4-6 tulokset, jotka osuvat lähes täydellisesti oikeaan.

5.4 Specim IQ: SSA-data

Kuviossa 26 esitetty IQ-menetelmän SSA-datasetin analyysitulokset. Pitoisuuskartat näyttävät yhtä epätarkoilta kuin reflektanssidatasetille. Kuviossa 27 esitettyjen tulosten virheiden pohjalta voidaan huomata, että SSA-datasetin analyysitulokset tulokset ovat huonommat kuin reflektanssidatan tulokset.



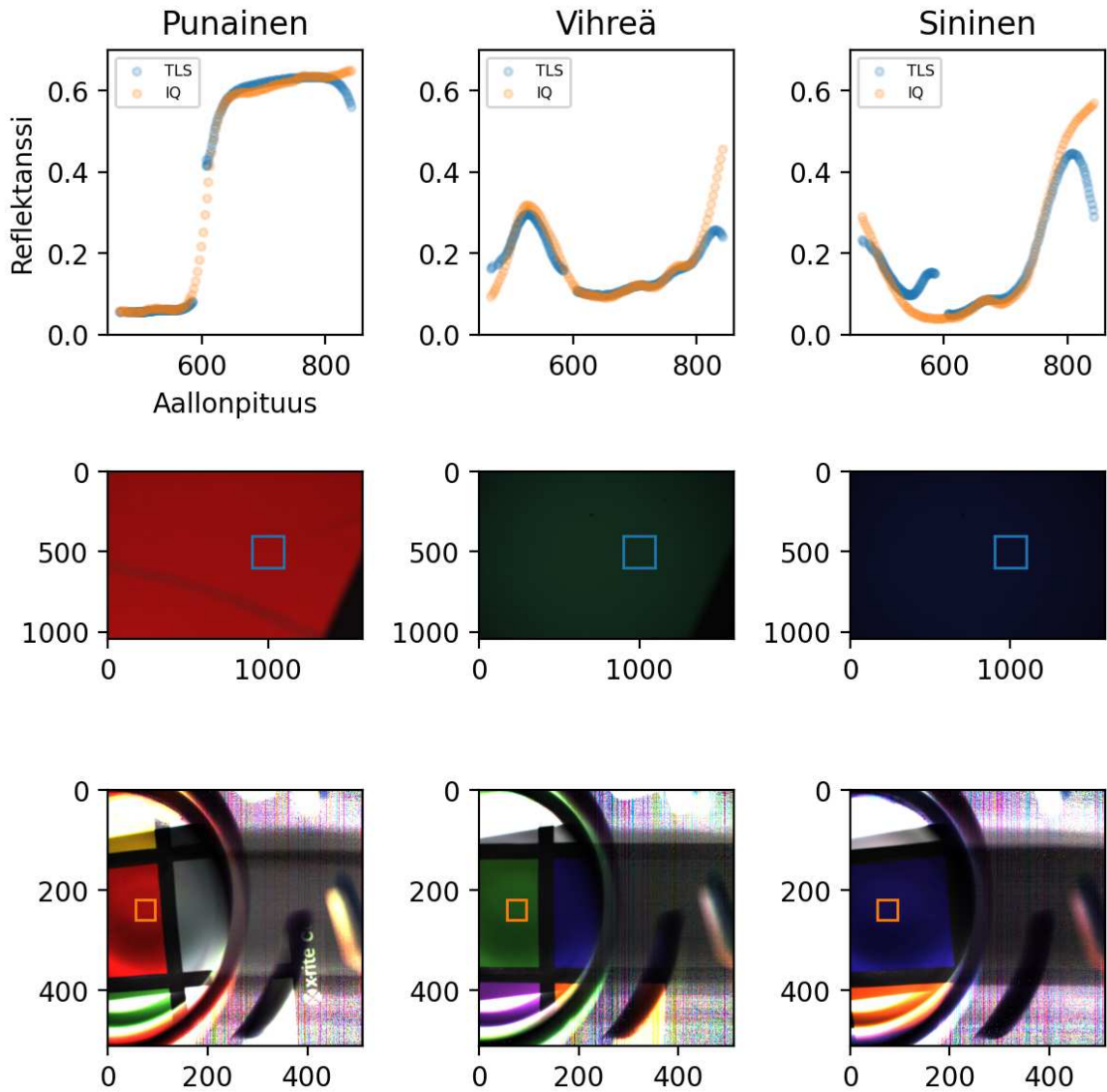
Kuvio 26: Specim IQ-menetelmän SSA-datasetin analyysitulokset.



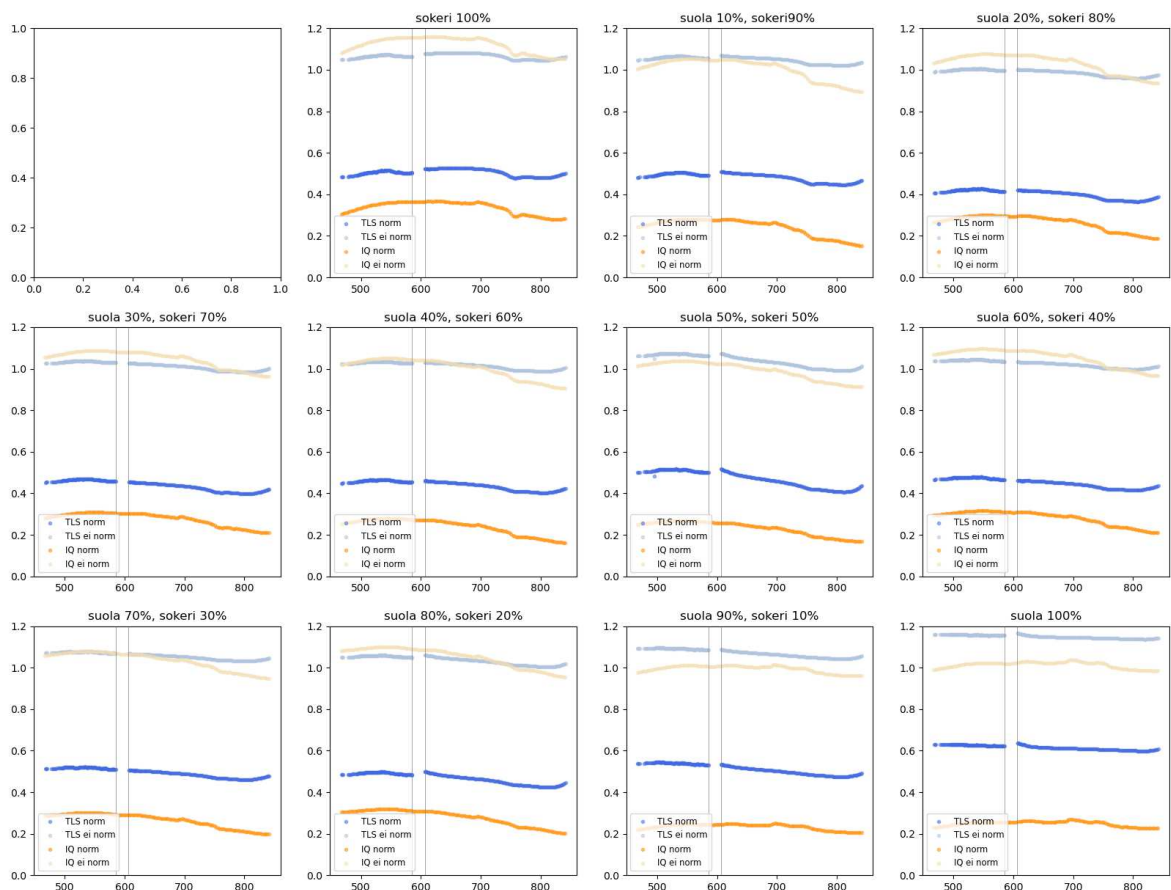
Kuvio 27: Specim IQ-menetelmän SSA-datasetin analyysitulosten virheet. Tulokset objektiivisesti huonommat kuin vastaavalla reflektanssidatasetillä.

5.5 Lisätutkimukset

Tuloksien vertailukelpoisuutta tarkasteltiin myös kuvaamalla valkoista referenssiä ja sinistä, vihreää sekä punaista väripaneelia. Näiden kuvausten tulokset on esitetty kuviossa 28. Lisäksi tarkasteltiin normalisoinnin vaikutusta reflektanssikäyriin, jotka on visualisoitu kuviossa 29.



Kuvio 28: Väripaneeleista otetut kuvat, sekä merkityiltä alueilta lasketut reflektanssit. Ylärivillä reflektanssikäyrät, TLS-menetelmällä otetut kuvat toisella rivillä ja IQ:n kuvat alimpana. Kuvat esitetty RGB-rekonstruktiona reflektanssidatasta ja reflektanssikäyrät on laskettu neliöidyiltä alueilta.



Kuvio 29: Normalisoidut ja normalisoimattomat reflektanssikäyrät. Normalisointi kasvattaa käyrien välistä etäisyyttä, mutta myös stabiloii niiden käyttäytymisen; käyrät kulkevat johdonmukaisesti ja toisiaan mukaillen.

6 Pohdinta

6.1 Tulosten arviointia

6.1.1 Erot menetelmien välisissä tuloksissa

Kuten edellisessä luvussa kävi ilmi, TLS-kuvasarjan analyysitulokset ovat paremmat kuin IQ-kuvasarjojen analyysitulokset. Yleisesti ottaen, korkeampi spektraalinen ja spatiaalinen resoluutio johtaa tarkempiin analyysituloksiin. On todennäköistä, että TLS-menetelmän parempi suoriutuminen analyyseistä johtuu sen paremmasta spatiaalisesta resoluutiosta ja useammasta aallonpituuskaistasta.

TLS-menetelmän spatiaalinen resoluutio on parempi kuin IQ-kameran: TLS-kuvien yhden pikselin kuvantama pinta-ala on noin 0.01×0.01 mm, kun taas IQ:lla se on noin 0.12×0.12 mm. Suolan ja sokerin kiteiden koot vaihtelevat arviolta 0.2 ja 1 mm välillä, eli paikoitellen kiteiden koko saattaa olla hyvinkin lähellä yhden IQ-pikselin kokoa, mikä puolestaan saattaa vaikeuttaa kuvan yksityiskohtien erottelua. Nyquistin teoreeman mukaan (Shannon 1949) näytteenottotaajuuden, eli tässä tapauksessa kuvantamisessa käytetyn resoluution tulisi olla vähintään puolet pienimmän kuvattavan yksityiskohdan koosta, jotta informaatiota ei katoaisi. Tämän perusteella IQ:n spatiaalinen resoluutio ei olisi välttämättä riittävä pienimpien kiteiden tarkkaan kuvantamiseen. Vaikkakin spektrienerottelualgoritmien tulisi pystyä (tiettyyn pisteeseen asti) käsittelemään myös huonosta spatiaalisesta resoluutiosta johtuva pikselien sekoittuminen, käy järkeen että huonompi spatiaalinen resoluutio vaikuttaa negatiivisesti analyysituloksiin.

Huonojen ja ylimääräisten kaistojen poiston jälkeen TLS-kuvasarjalla on miltei tuplasti enemmän aallonpituuskaistoja (236 kpl) kuin IQ-kuvasarjalla (127 kpl). Aallonpituuskaistojen puoliarvoleveys IQ:lla (7 nm) on paljon pienempi kuin TLS:llä (18-21 nm), eli IQ:n spektraalinen resoluutio on parempi. Vaikuttaisi kuitenkin siltä, että IQ-kameran spektraalinen resoluutio ei välttämättä ole riittävän suuri tämänkaltaisen ongelman ratkaisemiseen; Radpour, Delaney ja Kakoulli 2022 käyttivät Specim IQ:ta taulujen analysoinnissa ja totesivat, että vaikka Specim IQ:n avulla on mahdollista tunnistaa suhteellisen puhtaita pigmenttejä,

on pigmenttisekoitusten (joka on epälineaarisen sekoittumismallin mukaista) tunnistaminen on huomattavasti haastavampaa ja vaatisi suuremman spektraalisen resoluution.

Toisaalta IQ-kameraa on käytetty hyvälläkin menestyksellä moniin sovelluksiin (esim. Raita-Hakola, Rahkonen ja Pölönen 2024, Calamita ym. 2021). Tämänkin tutkimuksen puitteissa reflektanssidatan analyyseissa kolme arvoa osuu oikeaan melkein täydellisesti. Saattaa olla, että IQ:n huono suoriutuminen johtuu lähtödatan laadusta. Aiemmin mainittiin, että valkoreferenssin kohdistamisessa oli ongelmia; jos valkoreferenssiä ei onnistuttu asettamaan kohdilleen, kalibraatio ei silloin ole välttämättä onnistunut ja tuloksena saadut reflektanssiarvot ovat vääristyneitä. Koska suolan ja sokerin reflektanssit hyvin samankaltaiset, pienikin heitto saattaa aiheuttaa suuria vaikutuksia ja hankaloittaa spektrien erottelua.

6.1.2 Erot reflektanssi- ja SSA-datasettien välillä

Tuloksia tarkastelemalla on myös helppo havaita, että molemmille menetelmille SSA-datasettien analyysitulokset ovat järjestään huonompia kuin niiden reflektanssidatasettien. Tämä on mielenkiintoinen ilmiö, sillä spektrienerottelualgoritmi rakentuu lineaarisen sekoittumismallin varaan, jolloin sen pitäisi teoriassa toimia paremmin lineaarista sekoittumismallia noudattelevaan SSA-dataan kuin epälineaaraisesti sekoittuneeseen reflektanssidataan. On mahdollista, että Hapken malli ei sovellu tähän tilanteeseen; kenties tehdyt oletukset (kts. luvut 2.3.2, 4.1) eivät ole valideja tässä tilanteessa. On myös mahdollista, että painokertoimen α optimointia ei viety riittävän pitkälle, ja oikeat, tarkat minimi-voisivat olla SSA-datalla parempia kuin reflektanssidatalla.

Jos kuitenkin oletetaan, että löydetty painokertoimen α arvot ovat lähellä totuutta ja tehdyt oletukset ovat valideja, epäjohdonmukaisuudet saattavat johtua esimerkiksi datan normalisoinnista sekä reflektanssidatan muuntamiseen SSA-dataksi käytetystä Hapken mallista. Koska reflektanssidatan arvot ovat monissa kohdin suurempia kuin reflektanssin teoreettinen maksimi-arvo 1 ja Hapken malli olettaa sisääntulevien arvojen olevan reflektansseja (eli lukuarvoja 0 ja 1 väliltä), on mahdollista että se ei osaa muuntaa teoreettisesti mahdottomia reflektanssiarvoja oikeanlaisiksi SSA-arvoiksi. TLS-kuvien analyyseihin käytetty SSA-data muunnettiin normalisoimattomasta reflektanssidatasta. Saattaa siis olla, että Hapken mallin-

nuskyky heikkenee, kun sille syöttää liian suuria reflektanssiarvoja.

IQ:n analyysiä varten käytetty SSA-data puolestaan tehtiin normalisoidusta reflektanssidatasta. Voi olla, että normalisointi on liian aggressiivinen keino tuoda reflektanssien arvot sallitulle alueelle. Vaikka käytetty normalisointimenetelmä säilyttää datapisteiden väliset etäisyydet ja siten spektrin muodon, saattaa se vääristää dataa. Eräs vaihtoehto olisi kokeilla hieman varovaisempaa lähestymistapaa ja esimerkiksi skaalata reflektanssien arvot sallitulle alueelle jollain sopivalla vakiolla kertomalla. Tällöin alkuperäinen reflektanssidata säilyttäisi ominaisuutensa paremmin ja ehkä Hapken mallilla saataisiin parempia tuloksia.

Kuvioon 29 on piirretty sekä normalisoimattomat että normalisoidut reflektanssikäyrät. Voidaan huomata, että normalisoidut käyrät (tummempi oranssi ja sininen) kulkevat nätisti toisiaan mukailleen, varsinkin kun vertaa normalisoimattomiin käyriin (haaleammat oranssi ja sininen). Käyrien välinen ero ja niiden muotojen liioittelu kasvaa normalisoidussa datassa. Normalisoidut reflektanssit käyttäytyvät loogisesti ja kuvan perusteella käy järkeen, että normalisoidun reflektanssidatan analyysit olivat parempia kuin normalisoimattoman.

6.1.3 Muita huomioita

Pitoisuuskarttojen perusteella voi huomata, että analyysi ei tunnista puhtaita seoksia kovinkaan tarkasti, vaikka niiden ominaispektrit on annettu algoritmille. Ominaispektrit ovat kuitenkin vain koko analysoitavan alueen keskiarvo, jolla todennäköisesti on vaihtelua esimerkiksi kiteiden luomien varjostumien tai kiteiden eri kokojen ja asentojen, sekä niistä johtuvien erilaisten heijastumisten vuoksi. Nämä tekijät saattavat vaikuttaa puhtaiden seosten pikselien spektreihin, eivätkä perinteiset spektrienerottelualgoritmit välttämättä ota tätä huomioon, mikä saattaa johtaa mallinnusvirheisiin ja vääristyneisiin tuloksiin (Borsoi ym. 2021).

Alkuperäisiä, normalisoimattomia reflektanssikäyriä tutkimalla voidaan havaita, että osassa graafeista TLS-reflektanssikäyrät kulkevat IQ-reflektanssikäyriä korkeammalla ja välillä tilanne on päinvastainen. Tämä on epäloogista, sillä näytteiden spektrien olettaisi noudattelevan toisiaan ja kulkevan johdonmukaisesti "samoin päin", kuten normalisoidut reflektanssikäyrät tekevät. Vertailun vuoksi molemmilla kuvantamismenetelmillä kuvattiin samat

väripaneelit (punainen, vihreä, sininen). Tulokset on esitetty kuviossa 28, jossa IQ:lla kuvatut kuvat ovat alimpana ja TLS-menetelmällä sen yläpuolella. Kuvat esitetty väärävärivina reflektanssidatasta. Kuviin merkityiltä alueilta keskiarvoina lasketut reflektanssikäyrät on piirretty ylärivin kaavioihin. Käyrät noudattelevat melko hyvin toisiaan, lukuun ottamatta sinisen väripaneelin kohdalla TLS:n reflektanssikäyrän tekemää hypähdystä. Hypähdysten taustalla on prototyypissä olevan optisen komponentin ominaisuudet, joita pystytään optimoimaan kaupalliseen TLS-versioon valikoimalla sopivimmat komponentit. Infrapuna-alueella näkyvä käyrien erkaantuminen saattaa johtua esimerkiksi TLS-menetelmän kanssa kuvantamisessa konenäkökameraan yhdistetystä linssistä, jota ei ole optimoitu NIR-kuvantamiseen. Tämäkin ongelma on laitelähtöinen ja helposti korjattavissa valitsemalla järkevät linssi ja konenäkösensori. Syitä reflektanssikäyrien eroille ei tämän perusteella löytynyt.

Lienee myös aiheellista pohtia, kuinka tarkat analyysitulokset ylipäätään ovat mahdollisia. Tutkimuksia, joissa olisi eritelty suolan ja sokerin spektrejä ei löytynyt yhtäkään, mutta vastaavanlaisia tilanteita löytyi. Esimerkiksi Lin ja Zhang (2017) erottelivat intiimisti sekoitettuja kirkkaita kristalleja (haliitti ja kipsi). Laboratorio-olosuhteissa kuvattu, epälineaarisesti käyttäytyvä reflektanssidata approksimoitiin Hapken mallilla lineaariseen muotoon ennen analysointia; tulosten keskimääräinen absoluuttinen virhe oli 4,24%. Oletettavasti siis paremmat tulokset myös suolan ja sokerin spektrien erottelussa ovat mahdollisia.

6.2 Jatkotutkimuksesta

Tässä tutkimuksessa käytetyn analyysimenetelmän tuloksia voisi todennäköisesti parantaa jatkamalla painokerroimen α parhaan arvon etsimistä pidemmälle, sekä optimoimalla myös regularisaattoritermin suuruutta.

Yllä kuvatun hienosäännön sijaan voisi olla hyödyllistä kokeilla erilaisia objektifunktioita, sillä esimerkiksi TLS-kuvien analyyseissa painokerroin α oli suhteellisen pieni, eli MSE:llä ei ollut kovin suurta vaikutusta, eikä se siten välttämättä tuo analyyseihin lisäarvoa. Koska esimerkiksi valaistus vaikuttaa spektrien intensiteetteihin, muttei niiden muotoihin, objektifunktion voi lisätä esimerkiksi laajasti käytetyt SID- ja SAD-funktiot (*Spectral Information Divergence* ja *Spectral Angle Distance*). Näillä funktioilla mitataan pikselin spektrin ja sen

approksimaation samanmuotoisuutta, eikä suoraan niiden arvojen välistä eroa, kuten MSE tekee.

Paremmen yleiskuvan saamiseksi analyysit kannattaa suorittaa useammalla eri metodilla. Neuroverkot, kuten autoenkooderit voisivat olla tehokas vaihtoehto perinteisten metodien rinnalle, sillä ne ovat monissa tapauksissa osoittautuneet perinteisiä spektrienerottelumeto-
deja paremmiksi. Nykyinen analyysi on melko hidaskäyttöinen; yhden TLS-datasetin analysointiin me-
ni datasetistä riippuen 2-3 tuntia. Mikäli halutaan nopeita tuloksia, kuten monissa sovelluk-
sissa on tarve, tulisi myös valittujen algoritmien nopeuteen kiinnittää huomiota.

Uusiin analyysiin kannattaa ottaa uudet kuvat, kiinnittäen huomiota erityisesti siihen, et-
tä reflektanssidatalkalibraatioissa käytetty valkoreferenssi on varmasti kohdistettu oikein IQ-
kuville. Myös tarkemmat kuvat TLS-menetelmällä saattaisivat olla hyödyllisiä parempien
analyysitulosten kannalta. Seosten määrää voisi myös tiputtaa ja kuvata vain esimerkiksi
puhtaat seokset, sekä suola-sokeriseokset suhteissa 25%/75%, 50%/50% ja 75%/25%. Näin
datan määrä vähenisi ja analysointi helpottuisi.

6.3 Tutkimuskysymyksiin vastaaminen

Ensimmäisenä tutkimuskysymyksenä oli "Miten merkittäviä eroja näiden kahden kuvanta-
mismenetelmän suoriutumisen välillä on?" Kuten aiemmassa luvussa kävi ilmi, menetelmien
suoriutumisten välillä on merkittäviä eroja: TLS-sensori-menetelmällä kuvattujen kuvasar-
jojen analyysitulokset ovat paljon lähempänä taustatotuutta. Havainnot siis konfirmoivat en-
simmäisessä luvussa esitettyä, hieman latteaa "eroja on" hypoteesia. Kuten aiemmin pohdit-
tiin, erot saattavat johtua TLS-menetelmän paremmasta spatiaaliresoluutiosta.

Toisena tutkimuskysymyksenä oli "Mitä heikkouksia ja vahvuuksia TLS-laitetta hyödyn-
täväällä kuvantamismenetelmällä on verrattuna kaupalliseen spektrikameraan?" Yksi TLS-
menetelmän vahvuus on sen joustavuus, sillä käyttäjä voi itse määrittää kuvantamisessa käy-
tettävät aallonpituudet sekä valita kuvantamislaitteen kohteen vaatimusten mukaisesti. Käyt-
täjä pystyy siis hyvinkin paljon vaikuttamaan kuvausasetelmaan, mikä ei olisi mahdollista
samassa mittakaavassa esimerkiksi Specim IQ-kameraa käytettäessä.

Heikkoutena TLS-menetelmälle mainittakoon sen käytön suhteellinen monimutkaisuus IQ-kameraan verrattuna. TLS-laitteen käytöstä jyvälle pääseminen vaatii hieman ohjelmointitaitoa ja perehtymistä, kun taas IQ-kameran peruskäytön oppii nopeasti. Lisäksi valonlähde on asetettava melko lähelle kuvauskohdetta parhaiden tulosten saavuttamiseksi, mikä saattaa rajoittaa sen käyttökohteita.

Kolmantena tutkimuskysymyksenä oli "Millaisiin sovelluksiin tämä uusi teknologia tehtyjen kokeiden perusteella saattaisi soveltua?" Tämän tutkimuksen perusteella valonlähdelaitteen voi todeta ainakin sopivan laboratorio-olosuhteisiin, pienehköjen näytteiden kuvaamiseen, esimerkiksi elintarviketeollisuudessa laadunvalvontaan. Lisäksi se voisi soveltua aallonpituussäädettävyytensä vuoksi esimerkiksi erilaisiin lääketieteellisiin sovelluksiin, joissa eri aallonpituuksilla kuvantaminen on todettu hyödylliseksi (Li ym. 2013, Bartczak ym. 2016), kuten leikkaussalikäyttöön ja haavojen tai palovammojen kuvantamiseen.

7 Yhteenveto

Tässä tutkielmassa selvitettiin VTT:n kehittämään PFPI-tekniologiapohjaiseen valonlähdelaitteeseen perustuvan uuden hyperspektrikuvantamismenetelmän suoriutumista epälineaarissa ongelmassa. Vertailukohtana toimi kaupallinen Specim IQ-hyperspektrikamera. Molemmilla menetelmillä kuvattiin samat suola-sokeriseokset ja kuvatulokset analysoitiin spektrienerottelualgoritmeilla, pyrkien määrittämään suolan ja sokerin pitoisuudet kuvista. Analyysien perusteella oli tavoitteena määrittellä, kuinka merkittäviä kuvantamismenetelmien väliset erot ovat, mitä heikkouksia ja vahvuuksia uudella menetelmällä on, sekä millaisiin sovelluksiin se saattaisi soveltua. Näihin kysymyksiin vastattiin laajemmin edellisessä luvussa.

Uusi hyperspektrikuvantamismenetelmä suoriutui analyyseista paremmin kuin vertailukohtana toiminut IQ-kamera. Tämä saattaa johtua esimerkiksi käytetyn konenäkökameran paremmasta spatiaalisesta resoluutiosta tai valonlähdelaitteen suuremmasta aallonpituuksien lukumäärästä. Uuden hyperspektrikuvantamismenetelmän vahvuus onkin aallonpituuksien erotteluun kykenevän valonlähdelaitteen käytön mukanaan tuoma joustavuus kuvantamisetelman rakentamiseen. Uusi kuvantamismenetelmä saattaisi sopia hyvin esimerkiksi elintarviketeollisuuden tai lääketieteen sovelluksiin.

Saadut analyysitulokset ovat lupaavia, vaikka ne tarjoavat vain suuntaa-antavan arvioinnin menetelmän suoriutumisesta epälineaarissa spektrienerotteluongelmassa. Analyysien tuloksia pystytään todennäköisesti parantamaan edellisessä luvussa esiteteyin keinoin. Kokonaiskuvan saaminen uuden hyperspektrikuvantamismenetelmän suoriutumiskyvystä vaatii lisätutkimusta.

Lähteet

Ahmad, Adnan ja Archana M Nair. 2024. “Spectral mixture analysis of intimate mixtures for lithological mapping”. *ISPRS Journal of Photogrammetry and Remote Sensing* 208:210–232. <https://doi.org/10.1016/j.isprsjprs.2023.12.014>.

Antila, Tapani, Jussi Mäkynen, Christer Holmlund, Jarkko Antila, Jyrki Ollila ja Heikki Saari. 2017. *Fabry-perot interferometer and a method for producing the same with decreased bending*. US Patent 9,588,334, maaliskuu.

Bartczak, Piotr, Ana Gebejes, Pauli Fält ja Markku Hauta-Kasari. 2016. “An LED-based tunable illumination for diverse medical applications”. Teoksessa *2016 IEEE 29th International Symposium on Computer-Based Medical Systems (CBMS)*, 292–293. IEEE. <https://doi.org/10.1109/CBMS.2016.33>.

Bhatt, Jignesh S ja Manjunath V Joshi. 2020. “Deep learning in hyperspectral unmixing: A review”. Teoksessa *IGARSS 2020-2020 IEEE International Geoscience and Remote Sensing Symposium*, 2189–2192. IEEE. <https://doi.org/10.1109/IGARSS39084.2020.9324546>.

Bioucas-Dias, José M, Antonio Plaza, Gustavo Camps-Valls, Paul Scheunders, Nasser Nasrabadi ja Jocelyn Chanussot. 2013. “Hyperspectral remote sensing data analysis and future challenges”. *IEEE Geoscience and remote sensing magazine* 1 (2): 6–36. <https://doi.org/10.1109/MGRS.2013.2244672>.

Borsoi, Ricardo Augusto, Tales Imbiriba, José Carlos Moreira Bermudez, Cédric Richard, Jocelyn Chanussot, Lucas Drumetz, Jean-Yves Tournet, Alina Zare ja Christian Jutten. 2021. “Spectral Variability in Hyperspectral Data Unmixing: A comprehensive review”. *IEEE Geoscience and Remote Sensing Magazine* 9 (4): 223–270. <https://doi.org/10.1109/MGRS.2021.3071158>.

Calamita, Federico, Hafiz Ali Imran, Loris Vescovo, Mohamed Lamine Mekhalfi ja Nicola La Porta. 2021. “Early identification of root rot disease by using hyperspectral reflectance: The case of pathosystem grapevine/armillaria”. *Remote Sensing* 13 (13): 2436. <https://doi.org/10.3390/rs13132436>.

- Edelman, Gerda J, Edurne Gaston, Ton G Van Leeuwen, PJ Cullen ja Maurice CG Aalders. 2012. "Hyperspectral imaging for non-contact analysis of forensic traces". *Forensic science international* 223 (1-3): 28–39. <https://doi.org/10.1016/j.forsciint.2012.09.012>.
- Faltynkova, Andrea ja Martin Wagner. 2023. "Developing and testing a workflow to identify microplastics using near infrared hyperspectral imaging". *Chemosphere* 336:139186. <https://doi.org/10.1016/j.chemosphere.2023.139186>.
- Garini, Yuval, Ian T. Young ja George McNamara. 2006. "Spectral imaging: Principles and applications". *Cytometry Part A* 69A (8): 735–747. <https://doi.org/10.1002/cyto.a.20311>.
- Green, Robert O, Michael L Eastwood, Charles M Sarture, Thomas G Chrien, Mikael Aronsson, Bruce J Chippendale, Jessica A Faust, Betina E Pavri, Christopher J Chovit, Manuel Solis ym. 1998. "Imaging spectroscopy and the airborne visible/infrared imaging spectrometer (AVIRIS)". *Remote sensing of environment* 65 (3): 227–248. [https://doi.org/10.1016/S0034-4257\(98\)00064-9](https://doi.org/10.1016/S0034-4257(98)00064-9).
- Gröhl, Janek, Thomas Kirchner, Tim J Adler, Lina Hacker, Niklas Holzwarth, Adrián Hernández-Aguilera, Mildred A Herrera, Edgar Santos, Sarah E Bohndiek ja Lena Maier-Hein. 2021. "Learned spectral decoloring enables photoacoustic oximetry". *Scientific reports* 11 (1): 6565. <https://doi.org/10.1038/s41598-021-83405-8>.
- Haaparanta, Leila ja Ilkka Niiniluoto. 2016. *Johdatus tieteelliseen ajatteluun*. Gaudeamus Oy.
- Hapke, Bruce. 2012. *Theory of reflectance and emittance spectroscopy*. Cambridge university press.
- Harris, Charles R., K. Jarrod Millman, Stéfan J. van der Walt, Ralf Gommers, Pauli Virtanen, David Cournapeau, Eric Wieser ym. 2020. "Array programming with NumPy". *Nature* 585, numero 7825 (syyskuu): 357–362. <https://doi.org/10.1038/s41586-020-2649-2>.
- Heinz, Daniel C ym. 2001. "Fully constrained least squares linear spectral mixture analysis method for material quantification in hyperspectral imagery". *IEEE transactions on geoscience and remote sensing* 39 (3): 529–545. <https://doi.org/10.1109/36.911111>.

Heylen, Rob ja Paul Gader. 2013. “Nonlinear spectral unmixing with a linear mixture of intimate mixtures model”. *IEEE Geoscience and Remote Sensing Letters* 11 (7): 1195–1199. <https://doi.org/10.1109/LGRS.2013.2288921>.

Heylen, Rob, Mario Parente ja Paul Gader. 2014. “A review of nonlinear hyperspectral unmixing methods”. *IEEE Journal of Selected Topics in Applied Earth Observations and Remote Sensing* 7 (6): 1844–1868. <https://doi.org/10.1109/JSTARS.2014.2320576>.

Howari, Fares M, Gheorge Acbas, Yousef Nazzal ja Fatima AlAydaros. 2018. “Hapke-based computational method to enable unmixing of hyperspectral data of common salts”. *Chemistry Central Journal* 12:1–15. <https://doi.org/10.1186/s13065-018-0460-z>.

Hunter, J. D. 2007. “Matplotlib: A 2D graphics environment”. *Computing in Science & Engineering* 9 (3): 90–95. <https://doi.org/10.1109/MCSE.2007.55>.

Jääskeläinen, Severi, Matti Eskelinen, Leevi Annala ja Anna-Maria Raita-Hakola. 2019. *Camazing Python library*. Machine vision library for GenICam-compliant cameras. Developed at the University of Jyväskylä, Spectral Imaging Laboratory. Released under MIT-licence. Accessed on 9.4.2022. <https://pypi.org/project/camazing/>.

Kamruzzaman, Mohammed, Yoshio Makino ja Seiichi Oshita. 2016. “Rapid and non-destructive detection of chicken adulteration in minced beef using visible near-infrared hyperspectral imaging and machine learning”. *Journal of Food Engineering* 170:8–15. <https://doi.org/10.1016/j.jfoodeng.2015.08.023>.

Khan, Muhammad Jaleed, Hamid Saeed Khan, Adeel Yousaf, Khurram Khurshid ja Asad Abbas. 2018. “Modern Trends in Hyperspectral Image Analysis: A Review”. *IEEE Access* 6:14118–14129. <https://doi.org/10.1109/ACCESS.2018.2812999>.

Knight, Randall D. 2017. *Physics for Scientists and Engineers: A Strategic Approach*. Pearson.

Lanjewar, Madhusudan G, Kamini G Panchbhai ja Lalchand B Patle. 2024. “Sugar detection in adulterated honey using hyper-spectral imaging with stacking generalization method”. *Food Chemistry* 450:139322. <https://doi.org/10.1016/j.foodchem.2024.139322>.

- Li, Qingli, Xiaofu He, Yiting Wang, Hongying Liu, Dongrong Xu ja Fangmin Guo. 2013. “Review of spectral imaging technology in biomedical engineering: achievements and challenges”. *Journal of biomedical optics* 18 (10): 100901–100901. <https://doi.org/10.1117/1.jbo.18.10.100901>.
- Lin, Honglei ja Xia Zhang. 2017. “Retrieving the hydrous minerals on Mars by sparse unmixing and the Hapke model using MRO/CRISM data”. *Icarus* 288:160–171. <https://doi.org/10.1016/j.icarus.2017.01.019>.
- Nascimento, J.M.P. ja J.M.B. Dias. 2005. “Vertex component analysis: a fast algorithm to unmix hyperspectral data”. *IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing* 43 (4): 898–910. <https://doi.org/10.1109/TGRS.2005.844293>.
- Palsson, Burkni, Jakob Sigurdsson, Johannes R Sveinsson ja Magnus O Ulfarsson. 2018. “Hyperspectral unmixing using a neural network autoencoder”. *IEEE Access* 6:25646–25656. <https://doi.org/10.1109/ACCESS.2018.2818280>.
- Radpour, Roxanne, John K Delaney ja Ioanna Kakoulli. 2022. “Acquisition of high spectral resolution diffuse reflectance image cubes (350–2500 nm) from archaeological wall paintings and other immovable heritage using a field-deployable spatial scanning reflectance spectrometry hyperspectral system”. *Sensors* 22 (5): 1915. <https://doi.org/10.3390/s22051915>.
- Raita-Hakola, Anna-Maria, Samuli Rahkonen ja Ilkka Pölönen. 2024. “Revealing Hidden Art: Authenticating And Unveiling Neolithic Rock Paintings Through Advanced Hyperspectral Imaging Techniques”. Teoksessa *IGARSS 2024-2024 IEEE International Geoscience and Remote Sensing Symposium*, 8064–8068. IEEE. <https://doi.org/10.1109/IGARSS53475.2024.10640641>.
- Rasti, Behnood, Bikram Koirala ja Paul Scheunders. 2022. “HapkeCNN: Blind nonlinear unmixing for intimate mixtures using hapke model and convolutional neural network”. *IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing* 60:1–15. <https://doi.org/10.1109/TGRS.2022.3202490>.

- Shaikh, Muhammad Saad, Keyvan Jaferzadeh, Benny Thörnberg ja Johan Casselgren. 2021. “Calibration of a hyper-spectral imaging system using a low-cost reference”. *Sensors* 21 (11): 3738. <https://doi.org/10.3390/s21113738>.
- Shannon, C.E. 1949. “Communication in the Presence of Noise”. *Proceedings of the IRE* 37 (1): 10–21. <https://doi.org/10.1109/JRPROC.1949.232969>.
- Shkuratov, Yu, V Kaydash, V Korokhin, Y Velikodsky, D Petrov, E Zubko, D Stankevich ja G Videen. 2012. “A critical assessment of the Hapke photometric model”. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer* 113 (18): 2431–2456. <https://doi.org/10.1016/j.jqsrt.2012.04.010>.
- Smith, Jason T, Marien Ochoa ja Xavier Intes. 2020. “UNMIX-ME: spectral and lifetime fluorescence unmixing via deep learning”. *Biomedical Optics Express* 11 (7): 3857–3874. <https://doi.org/10.1364/BOE.391992>.
- Themelis, Konstantinos, Athanasios A Rontogiannis ja Konstantinos Koutroumbas. 2010. “Semi-Supervised Hyperspectral Unmixing via the Weighted Lasso.” Teoksessa *ICASSP*, 1194–1197.
- Vermeulen, Marc, Kate Smith, Katherine Eremin, Georgina Rayner ja Marc Walton. 2021. “Application of Uniform Manifold Approximation and Projection (UMAP) in spectral imaging of artworks”. *Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy* 252:119547. <https://doi.org/10.1016/j.saa.2021.119547>.
- Virtanen, Pauli, Ralf Gommers, Travis E. Oliphant, Matt Haberland, Tyler Reddy, David Cournapeau, Evgeni Burovski ym. 2020. “SciPy 1.0: Fundamental Algorithms for Scientific Computing in Python”. *Nature Methods* 17:261–272. <https://doi.org/10.1038/s41592-019-0686-2>.
- Yoon, Jonghee. 2022. “Hyperspectral imaging for clinical applications”. *BioChip Journal* 16 (1): 1–12. <https://doi.org/10.1007/s13206-021-00041-0>.

Zahir, Siti Anis Dalila Muhammad, Ahmad Fairuz Omar, Mohd Faizal Jamlos, Mohd Azraie Mohd Azmi ja Jelena Muncan. 2022. "A review of visible and near-infrared (Vis-NIR) spectroscopy application in plant stress detection". *Sensors and Actuators A: Physical* 338:113468. <https://doi.org/10.1016/j.sna.2022.113468>.

Liitteet

A Optimointialgoritmi

```
# Function for estimating abundances of a pixel
def estimate_abundances(pixel, endmembers, alpha, tol):

    # The objective function to be minimized
    # Minimizing mean square error and SAM (+ L2 reg)
    def objective_function(abundances):
        # Calculating mean square error
        pix_modeled = np.dot(endmembers, abundances)
        difference = pixel - pix_modeled
        mse = (difference**2).mean()

        dot_product = np.dot(pixel, pix_modeled.T)
        norm_observed = np.linalg.norm(pixel)
        norm_model = np.linalg.norm(pix_modeled)
        sam = np.arccos(dot_product / (norm_observed * norm_model))

        l2_reg = 0.001 * np.sum(abundances**2)

        return alpha * mse + (1-alpha) * sam + l2_reg

    # abundances sum to one constraint
    constr = {'type': 'eq',
              'fun': lambda
                abundances: np.sum(abundances) - 1}
    # abundances must be between 0 and 1
    bounds = [(0, 1), (0, 1)]
    initial_guess = [0.5, 0.5] # initial guess
```

```
result = minimize(objective_function,  
                  initial_guess,  
                  method='SLSQP',  
                  bounds=bounds,  
                  constraints=constr,  
                  tol=tol)  
  
sugar_abundance = result.x[0]  
salt_abundance = result.x[1]  
  
return sugar_abundance, salt_abundance
```