

Hiperspektrogramy - nowy sposób opisu, wizualizacji i interpretacji chemicznej niehomogeniczności próbek stałych

Obrazowanie hiperspektralne w bliskiej podczerwieni (*hyperspectral imaging in the near-infrared range*, HSI-NIR), to technika instrumentalna pozwalająca na szybki, nieinwazyjny pomiar i charakteryzację głównego składu chemicznego powierzchni próbek. Pomiar prowadzi do pozyskania przestrzennych obrazów spektralnych, w których pojedynczy piksel reprezentuje widmo spektroskopowe fragmentu badanej próbki. Najnowsze publikacje dowodzą, że technika HSI-NIR z powodzeniem może być stosowana w analizie chemicznej m.in. do badania autentyczności dzieł sztuki, poszukiwania poszlak i śladów na miejscu zdarzenia na potrzeby chemii sądowej, a także do identyfikacji fałszowanych leków.

Pełne wykorzystanie zasobu informacji zawartej w złożonych i wielowymiarowych danych HSI-NIR wymaga użycia nowoczesnych narzędzi statystycznych i metod chemometrycznych. Podczas analizy danych hiperspektralnych, powszechnie stosowanym podejściem jest zawężenie obrazu do zbioru widm, które charakteryzują jedynie pewne obszary próbki. Ich wybór jest równoważny wyborowi reprezentatywnej próbki w laboratorium i ma znaczący wpływ na dalsze etapy analizy. Należy nadmienić, iż wiedza o sposobach próbkowania obrazu, jak i określania stopnia homogeniczności badanego materiału, w technikach obrazowania hiperspektralnego, jest niekompletna i wymaga zasadniczego udoskonalenia. Reprezentatywną próbką może być zbiór widm, fragment obrazu, a nawet cały obraz hiperspektralny. Mimo to, w badaniach przeważnie wykorzystuje się pojedyncze widmo lub średnie widmo sąsiadujących ze sobą pikseli. W efekcie, informacja o dystrybucji składników chemicznych na powierzchni próbki jest zaniebywana. Stosowana redukcja oryginalnych zmiennych związana jest z ograniczeniami obliczeniowymi komputerów i trudnościami metodologicznymi w stosowaniu algorytmów bazujących na danych mających trójwymiarową strukturę (takich jak obrazy hiperspektralne). Nowym, obiecującym sposobem opisu próbki z wykorzystaniem techniki obrazowania hiperspektralnego, uwzględniającym jednocześnie zredukowaną informację wizualną i spektralną, jest hiperspektrogram.

Niniejszy projekt koncentruje się na koncepcji pojedynczej próbki definiowanej zbiorem widm pochodzących ze ściśle określonego fragmentu obrazu hiperspektralnego. Tak zdefiniowaną próbkę można opisać hiperspektrogramem. Jest to jednowymiarowy sygnał zbudowany z kilku krzywych opisujących częstość występowania danego rodzaju zredukowanych widm w obrębie wybranej próbki. W ten sposób informacja spektralna o badanym materiale może zostać wzbogacona o informację nt. niejednorodności chemicznej próbki. Sama koncepcja hiperspektrogramu otwiera również nowe możliwości związane z wizualizacją, kwantyfikacją i interpretacją zmian chemicznych zachodzących na powierzchni badanego materiału.

Celem projektu jest zbadanie i rozwinięcie koncepcji hiperspektrogramu uwzględniającej niejednorodność chemiczną próbki. W oparciu o hiperspektrogramy planowane jest skonstruowanie obiektywnych miar niejednorodności chemicznej (deskryptorów), które zostaną przetestowane na próbkach wybranych ziaren zbóż i wyprodukowanych tabletek. Zaproponowane deskryptory i nowa metodyka analizy próbek mogą mieć szeroki zakres stosowalności, który znacząco wykracza poza technikę HSI-NIR. Ich użycie będzie możliwe również w przypadku obrazów konstruowanych z użyciem spektroskopii Ramana, spektrometrii mas czy rentgenowskiej spektroskopii fluorescencyjnej. Nowy sposób opisu próbek może znacząco wspomóc rozwiązywanie rozmaitych problemów analitycznych obejmujących m.in. ocenę autentyczności leków czy żywności, badania monitorujące zmiany w próbce obserwowane w czasie, czy szeroko pojętą kontrolę jakości. Niniejszy projekt ma charakter interdyscyplinarny. Łączy badania spektroskopowe z wykorzystaniem nowoczesnych metod chemometrycznych i statystycznych, a także metod analizy obrazów. Zaproponowane podejście będzie można wykorzystać do szczegółowej charakteryzacji próbek w formie stałej. Opracowanie sposobu ich efektywnego porównywania w przyszłości pozwoli na rozwinięcie nowych, zaawansowanych podejść klasyfikacyjnych i kalibracyjnych, możliwych do stosowania w różnych działach chemii analitycznej.