

Pontifícia Universidade Católica de Goiás
Escola Politécnica e de Artes
Graduação em Ciência da Computação



**TRIAGEM ESPECTRAL DE *STAPHYLOCOCCUS SPP.* EM IMAGENS
HIPERESPECTRAIS COM YOLO26 E APRENDIZAGEM POSITIVA-NÃO ROTULADA**

João Henrique Silva de Miranda

Goiânia
2026/1

João Henrique Silva de Miranda

**TRIAGEM ESPECTRAL DE *STAPHYLOCOCCUS SPP.* EM IMAGENS
HIPERESPECTRAIS COM YOLO26 E APRENDIZAGEM POSITIVA-NÃO ROTULADA**

Trabalho de Conclusão de Curso
apresentado à Escola Politécnica e de
Artes, da Pontifícia Universidade Católica
de Goiás, como parte dos requisitos para a
obtenção do título de Bacharel em Ciência
da Computação.

Orientador: Prof. Dr. Clarimar José Coelho

João Henrique Silva de Miranda

**TRIAGEM ESPECTRAL DE *STAPHYLOCOCCUS SPP.* EM IMAGENS
HIPERESPECTRAIS COM YOLO26 E APRENDIZAGEM POSITIVA-NÃO ROTULADA**

Trabalho de Conclusão de Curso pela Escola Politécnica e de Artes, da Pontifícia Universidade Católica de Goiás, para obtenção do título de Bacharel em Ciência da Computação, em 09/06/2026.

Prof. Dr. Clarimar José Coelho
Orientador

Prof. Me. Daniel Corrêa da Silva

Prof. Me. Eugênio Júlio Messala Cândido Carvalho

RESUMO

Este trabalho aborda o problema de construir uma triagem computacional para amostras de *Staphylococcus spp.* em imagens hiperespectrais (*HyperSpectral Imaging*, HSI) no infravermelho de ondas curtas (*Short Wave InfraRed*, SWIR). A triagem espectral é definida como a priorização de amostras por proximidade entre assinaturas espectrais, entendidas como curvas representativas da resposta da amostra ao longo dos comprimentos de onda analisados. A base experimental contém 19 amostras bacterianas, sendo 3 referências ATCC e 16 amostras UNKNOWN. A proposta combina calibração radiométrica, remoção de janelas espectrais associadas à absorção de água, normalização *Standard Normal Variate* (SNV), geração de pseudoimagem *Red, Green and Blue* (RGB), proposta de regiões de interesse (*Region of Interest*, ROI) com YOLO26, geração sintética controlada de assinaturas positivas e classificação por protótipo espectral com aprendizagem positiva-não rotulada. A saída operacional do sistema é composta pelas chamadas ATCC_LIKE e UNKNOWN, definidas por um escore de proximidade ao protótipo ATCC e por um limiar selecionado em validação *Leave-One-Image-Out* (LOIO). O sistema detectou 170 ROIs, com média de 8,95 ROIs por imagem e cobertura em todas as amostras. O limiar final foi $\tau = 0,9951$, com sensibilidade igual a 1,0 sobre as três referências ATCC, precisão operacional de 0,60, F1 operacional de 0,75 e taxa de sinalização UNKNOWN de 12,5%. As amostras UNKNOWN priorizadas foram 503B_240506-160006 e 539_240506-160131. Os resultados indicam que a combinação entre HSI na faixa SWIR, detecção de ROI, geração sintética controlada e modelagem PU é adequada para triagem espectral exploratória e para organização de amostras por prioridade de investigação.

Palavras-chave: imagem hiperespectral, *Staphylococcus spp.*, YOLO, aprendizagem positiva-não rotulada, dados sintéticos, triagem espectral.

ABSTRACT

This work addresses the problem of building a computational screening pipeline for *Staphylococcus spp.* samples in hyperspectral images (Hyperspectral Imaging, HSI) acquired in the short wave infrared range (SWIR). Spectral screening is defined as sample prioritization based on similarity between spectral signatures, understood as representative curves of the sample response across the analyzed wavelengths. The experimental dataset contains 19 bacterial samples, including 3 ATCC references and 16 UNKNOWN samples. The proposed pipeline combines radiometric calibration, removal of water absorption spectral windows, Standard Normal Variate (SNV) normalization, pseudo Red, Green and Blue (RGB) image generation, region of interest (ROI) proposal using YOLO26, controlled synthetic positive signature generation, and prototype-based classification with positive-unlabeled learning. The operational output consists of ATCC_LIKE and UNKNOWN calls, defined by a similarity score to the ATCC prototype and by a threshold selected under Leave-One-Image-Out (LOIO) validation. The system detected 170 ROIs, with an average of 8.95 ROIs per image and coverage across all samples. The final threshold was $\tau = 0.9951$, achieving 1.0 sensitivity over the three ATCC references, 0.60 operational precision, 0.75 operational F1 score, and a 12.5% UNKNOWN signaling rate. The prioritized UNKNOWN samples were 503B_240506-160006 and 539_240506-160131. The results indicate that combining HSI in the SWIR range, ROI detection, controlled synthetic generation, and PU modeling is suitable for exploratory spectral screening and for organizing samples by investigation priority.

Keywords: hyperspectral imaging, *Staphylococcus spp.*, YOLO, positive-unlabeled learning, synthetic data, spectral screening.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1:	Distribuição das imagens por grupo conhecido.	14
Figura 2:	Visão geral das bandas HSI utilizadas no pré-processamento.....	15
Figura 3:	Distribuição dos escores no nível de amostra.	21
Figura 4:	Variação das métricas em função do limiar de decisão.....	22
Figura 5:	Ranking dos escores por amostra.....	24
Figura 6:	Escore no nível de imagem ao longo das partições LOIO.	24
Figura 7:	Quantidade de ROIs detectadas por imagem.	26
Figura 8:	Distribuição das confianças de ROIs propostas pelo detector.	26
Figura 9:	Assinaturas espectrais medianas de amostras seleccionadas.	27

LISTA DE TABELAS

Tabela 1:	Composição da base experimental	13
Tabela 2:	Parâmetros principais do pipeline experimental	19
Tabela 3:	Contingência operacional entre grupo conhecido e chamada da triagem	20
Tabela 4:	Métricas operacionais da triagem no nível de amostra	20
Tabela 5:	Resumo dos escores por grupo conhecido	21
Tabela 6:	Resultado final por amostra	22
Tabela 7:	Resumo de detecções de ROI por grupo conhecido	25
Tabela 8:	Parâmetros principais do pipeline experimental utilizados no apêndice	32
Tabela 9:	Manifesto das amostras utilizadas no experimento	33
Tabela 10:	Resultado final completo por amostra	34

LISTA DE ABREVIATURAS

ATCC American Type Culture Collection

ATCC_LIKE Chamada operacional de proximidade ao padrão ATCC

ENVI Environment for Visualizing Images

F1 Média harmônica entre precisão e sensibilidade

HSI HyperSpectral Imaging

LOIO Leave-One-Image-Out

PLS-DA Partial Least Squares Discriminant Analysis

PU Positive-Unlabeled Learning

RGB Red, Green and Blue

ROI Region of Interest

SNV Standard Normal Variate

SWIR Short Wave InfraRed

TCC Trabalho de Conclusão de Curso

UNKNOWN Grupo de amostras bacterianas avaliadas por proximidade espectral

YOLO You Only Look Once

SUMÁRIO

1. INTRODUÇÃO	9
1.1 Motivação	10
1.2 Histórico e revisão bibliográfica	10
1.3 Descrição do trabalho	12
2. MATERIAIS E MÉTODOS	13
2.1 Problema operacional e saída do sistema	13
2.2 Dados disponíveis e rastreabilidade	13
2.3 Pré-processamento	14
2.4 Proposta de ROIs com YOLO26	16
2.5 Aprendizagem positiva-não rotulada e escore	17
2.6 Geração sintética controlada	18
2.7 Validação e métricas	18
3. RESULTADOS	20
3.1 Resultado geral da triagem	20
3.2 Distribuição dos escores e limiar de decisão	21
3.3 Resultados por amostra e ranking	22
3.4 Resultados ao longo das partições LOIO	23
4. DISCUSSÃO	25
5. CONCLUSÃO	28
REFERÊNCIAS	29
APÊNDICE A: CONFIGURAÇÃO DO PIPELINE	32
APÊNDICE B: LISTA DE AMOSTRAS	33
APÊNDICE C: RESULTADOS COMPLETOS	34

1 INTRODUÇÃO

A triagem espectral de *Staphylococcus spp.* consiste em organizar amostras bacterianas por proximidade entre suas assinaturas espectrais e o padrão observado nas referências da *American Type Culture Collection* (ATCC). As assinaturas são extraídas de cubos de imagens hiperespectrais (*HyperSpectral Imaging*, HSI) adquiridos no infravermelho de ondas curtas (*Short Wave InfraRed*, SWIR). Em HSI, cada pixel reúne posição espacial e curva espectral em vários comprimentos de onda, o que permite captar variações físico-químicas de materiais biológicos e sustenta aplicações em inspeção não destrutiva, alimentos, saúde e análise de materiais, conforme discutem Manley (2014), Wakholi et al. (2018), de Juan e Oliveira (2026) e Wolk e Wolk (2025). No contexto bacteriano e microbiológico, Galvão Filho et al. (2024) mostram o uso de HSI na faixa SWIR em amostras de *Staphylococcus spp.*, enquanto Fulladosa et al. (2025) mostram o uso de HSI associada à microbiologia preditiva em problema envolvendo *Staphylococcus aureus*. Esses estudos indicam que a imagem hiperespectral pode fornecer evidência útil para análise e priorização de amostras relacionadas a esse gênero bacteriano.

Para que essa triagem seja computável, a assinatura espectral é tratada como a curva representativa de uma região da amostra ao longo dos comprimentos de onda mantidos após o pré-processamento, e o protótipo espectral ATCC é definido como a curva de referência calculada a partir das assinaturas ATCC disponíveis no treino. O pipeline trabalha com duas tarefas conectadas: localizar regiões de interesse (*Region of Interest*, ROI) e comparar suas curvas com esse protótipo. A localização usa YOLO26, detector da família *You Only Look Once* (YOLO), introduzida por Redmon et al. (2016) e implementada por Jocher et al. (2026). A decisão espectral usa aprendizagem positiva-não rotulada (*Positive-Unlabeled Learning*, PU Learning), abordagem adequada para positivos conhecidos e amostras de rótulo aberto, conforme discutem Bekker e Davis (2020) e Saunders e Freitas (2024). Essa combinação segue a separação entre detecção espacial e modelagem espectral indicada por Xu e Mishra (2022) e aparece em aplicações com HSI e YOLO, como Zhang et al. (2023) e Huang et al. (2025).

O problema tratado neste Trabalho de Conclusão de Curso (TCC) é construir e avaliar um pipeline computacional que transforma 19 cubos HSI na faixa SWIR de *Staphylococcus spp.* em escores de proximidade ao padrão ATCC e em chamadas operacionais no nível da imagem. A base contém 3 referências ATCC e 16 amostras UNKNOWN, todas bacterianas. A chamada ATCC_LIKE designa a imagem cujo escore atinge o limiar do experimento, entendido como o valor de corte usado para separar as amostras priorizadas das demais amostras avaliadas. A chamada UNKNOWN

designa a imagem mantida no grupo de rótulo aberto. O pipeline executa calibração radiométrica, seleção e normalização espectral, geração de pseudoimagem *Red, Green and Blue* (RGB), proposta de ROIs com YOLO26, extração de assinaturas medianas, geração sintética restrita ao treino, protótipo ATCC com ajuste PU e decisão por limiar. A combinação entre HSI na faixa SWIR, proposta automática de ROI, protótipo ATCC e PU Learning constitui o tema técnico deste trabalho.

1.1 Motivação

A utilidade central deste trabalho está na priorização de amostras bacterianas por evidência espectral. A caracterização de *Staphylococcus spp.* envolve procedimentos laboratoriais cuidadosos, infraestrutura adequada e interpretação especializada. Nesse contexto, uma ferramenta computacional de triagem agrega valor ao transformar cubos HSI na faixa SWIR em escores, chamadas e ranking, permitindo que as amostras com maior proximidade ao padrão ATCC sejam destacadas para investigação posterior. Essa função de priorização aproxima o trabalho de aplicações de HSI em saúde, alimentos e materiais biológicos, nas quais a imagem hiperespectral apoia inspeção, organização de amostras e tomada de decisão baseada em medidas reprodutíveis, como discutem Manley (2014), Wolk e Wolk (2025) e Fulladosa et al. (2025).

A relevância computacional do problema também está na natureza dos dados. Cubos hiperespectrais contêm muitas bandas e poucos exemplos independentes, situação que aumenta a importância de pré-processamento, validação e modelos parcimoniosos. Li et al. (2019) e Jia et al. (2021) destacam que a classificação HSI com poucos rótulos requer cuidado especial, pois a alta dimensionalidade favorece modelos instáveis quando a validação é feita de forma inadequada. Neste trabalho, essa questão é tratada com validação *Leave-One-Image-Out* (LOIO), preservando a imagem como unidade experimental.

A proposta é importante para a Ciência da Computação porque integra visão computacional, processamento espectral, modelagem estatística e engenharia de software reprodutível em um mesmo fluxo. O YOLO26 concentra a etapa espacial de proposta de ROIs. O modelo espectral concentra a decisão por proximidade ao padrão ATCC. A formulação PU organiza o uso das ATCC e das amostras UNKNOWN de acordo com a informação disponível. Essa divisão de responsabilidades produz um pipeline auditável desde o arquivo HSI bruto até a chamada final da amostra.

1.2 Histórico e revisão bibliográfica

A literatura recente em HSI consolidou o uso de cubos espectrais para inspeção de materiais biológicos e análise não destrutiva. Manley (2014) apresenta a integração entre espectroscopia no infravermelho próximo e imagem hiperespectral para análise de

materiais biológicos. A quimiometria, entendida como o uso de métodos matemáticos e estatísticos para extrair informação de dados químicos e espectrais, é recorrente nesse tipo de análise. Nessa linha, Wakholi et al. (2018) aplicaram HSI na faixa SWIR e quimiometria em avaliação rápida de viabilidade de sementes, mostrando a utilidade da faixa SWIR em matrizes orgânicas. Mais recentemente, Wolk e Wolk (2025) revisaram aplicações de HSI em saúde, e de Juan e Oliveira (2026) discutiram a relação entre HSI e quimiometria em ferramentas analíticas baseadas em processo.

O pré-processamento espectral é uma etapa recorrente nessa literatura, pois espectros brutos carregam variações de iluminação, espalhamento, resposta instrumental e regiões de baixa confiabilidade. Jiao et al. (2020) revisam métodos de pré-processamento para calibração em espectroscopia no infravermelho próximo. Witteveen et al. (2022) comparam técnicas de pré-processamento em imagens hiperespectrais biomédicas. Yun et al. (2019) sintetizam métodos de seleção de variáveis em espectros no infravermelho próximo. Esses trabalhos fundamentam as escolhas deste trabalho: calibração por branco e escuro, recorte espectral, remoção de janelas de água e normalização *Standard Normal Variate* (SNV).

Na microbiologia, Galvão Filho et al. (2024) aproximam diretamente este trabalho do domínio experimental ao utilizar HSI na faixa SWIR e aprendizado de máquina em amostras de *Staphylococcus spp.*, com foco em dados bacterianos obtidos em contexto hospitalar. O estudo de Fulladosa et al. (2025) amplia esse cenário ao empregar HSI com microbiologia preditiva, área que utiliza modelos para estimar comportamento microbiano em condições observadas ou simuladas, em um problema envolvendo esse microrganismo em alimento curado. Em conjunto, esses trabalhos mostram que a assinatura espectral pode ser usada como evidência computacional para triagem, priorização e organização de amostras bacterianas ou relacionadas a risco microbiológico.

A integração entre visão computacional e dados espectrais ganhou força com detectores de objetos, que são modelos usados para localizar e delimitar regiões candidatas em imagens bidimensionais derivadas do cubo. A família YOLO foi proposta por Redmon et al. (2016) como detector de estágio único. A versão YOLOv26 é descrita por Jocher et al. (2026), com contextualização arquitetural em Sapkota e Karkee (2025) e Hidayatullah e Tubagus (2026). Em aplicações espectrais, Xu e Mishra (2022) defendem a combinação entre aprendizado profundo, entendido como o uso de redes neurais com múltiplas camadas, para localização e quimiometria para modelagem espectral. Zhang et al. (2023) combinam HSI, mínimos quadrados parciais com análise discriminante (*Partial Least Squares Discriminant Analysis*, PLS-DA) e YOLOv5s em ginseng vermelho, e Huang et al. (2025) apresentam outro exemplo de integração entre informação hiperespectral e detectores YOLO.

A aprendizagem positiva-não rotulada completa o arcabouço metodológico porque permite usar positivos conhecidos junto com amostras de rótulo aberto. Bekker

e Davis (2020) revisam os fundamentos do PU Learning, e Saunders e Freitas (2024) discutem sua integração com aprendizado automatizado. Para bases pequenas, o aumento de dados também é relevante. Shorten e Khoshgoftaar (2019) revisam estratégias de aumento de dados, entendido como a geração de variações controladas dos exemplos de treino para melhorar a robustez do modelo, e Zhang et al. (2018) apresentam a interpolação entre exemplos como forma de regularização. Esses elementos sustentam a solução adotada neste trabalho: proposta automática de ROI, extração de assinatura espectral, protótipo ATCC, ajuste PU e geração sintética controlada no treino.

1.3 Descrição do trabalho

Este trabalho propõe e avalia um pipeline reproduzível para triagem espectral de *Staphylococcus spp.* em HSI na faixa SWIR. O fluxo começa com a organização da base e a leitura dos arquivos *Environment for Visualizing Images* (ENVI). Em seguida, realiza calibração radiométrica com referência escura e branca, recorte espectral de 950 nm a 2450 nm, remoção das janelas de 1350 nm a 1460 nm e de 1800 nm a 1960 nm, normalização SNV e geração de pseudoimagem RGB a partir de bandas SWIR representativas. A pseudoimagem alimenta o YOLO26, que propõe ROIs para extração das assinaturas espectrais medianas no cubo calibrado.

A etapa de decisão opera no nível da imagem. Em cada partição de validação LOIO, também chamada de fold, as assinaturas ATCC disponíveis no treino formam o protótipo espectral. O conjunto positivo é ampliado por variações sintéticas controladas geradas a partir das ATCC da própria partição. O ensemble PU, entendido como um conjunto de modelos treinados por reamostragem para ajustar a ordenação dos escores, refina a leitura do protótipo. A chamada final é definida por um limiar escolhido para preservar sensibilidade sobre as referências ATCC. Assim, cada amostra recebe escore, margem em relação ao limiar, posição no ranking e chamada operacional.

A contribuição computacional está em integrar esses componentes em um fluxo auditável, que separa localização espacial e decisão espectral, preserva a imagem como unidade de validação e trata as amostras UNKNOWN como conjunto avaliado por proximidade.

Os resultados finais mostram que o sistema detectou 170 ROIs nas 19 imagens, com média de 8,95 ROIs por imagem e cobertura em todas as amostras. O limiar final foi $\tau = 0,9951$. Com esse limiar, as 3 referências ATCC foram sinalizadas como ATCC_LIKE, a sensibilidade ATCC foi 1,0, a precisão operacional foi 0,60, o F1 operacional foi 0,75 e a taxa de sinalização UNKNOWN foi 12,5%. Entre as 16 amostras UNKNOWN, duas foram priorizadas por proximidade espectral, 503B_240506-160006 e 539_240506-160131. Esse conjunto de resultados sustenta a triagem por prioridade espectral.

2 MATERIAIS E MÉTODOS

2.1 Problema operacional e saída do sistema

A metodologia foi organizada para responder uma pergunta operacional: como transformar cada imagem HSI de *Staphylococcus spp.* em um escore de proximidade ao padrão ATCC e em uma chamada interpretável no nível da amostra. Para cada imagem m , o pipeline calcula um escore S_m , compara esse valor ao limiar τ e atribui uma chamada pertencente ao conjunto

$$\hat{y}_m \in \{\text{ATCC_LIKE}, \text{UNKNOWN}\}. \quad (2.1)$$

A regra de decisão atribui ATCC_LIKE quando $S_m \geq \tau$ e mantém UNKNOWN quando $S_m < \tau$.

O conjunto total de imagens é representado por

$$\mathcal{M} = \mathcal{A} \cup \mathcal{U}, \quad (2.2)$$

em que $\mathcal{A}$ é o conjunto de referências ATCC e $\mathcal{U}$ é o conjunto UNKNOWN. Neste trabalho, $|\mathcal{A}| = 3$, $|\mathcal{U}| = 16$ e $|\mathcal{M}| = 19$. Essa formulação segue o princípio do PU Learning, no qual exemplos positivos conhecidos orientam a modelagem junto com amostras de rótulo aberto em relação ao padrão positivo, conforme Bekker e Davis (2020) e Saunders e Freitas (2024).

2.2 Dados disponíveis e rastreabilidade

A base experimental contém 19 imagens HSI na faixa SWIR de amostras bacterianas, sendo 3 referências ATCC e 16 amostras UNKNOWN. Essa composição define o desenho do experimento e pode ser observada na Tabela 1 e na Figura 1.

Tabela 1: Composição da base experimental

Grupo	Quantidade	Interpretação
ATCC	3	Referências positivas conhecidas
UNKNOWN	16	Amostras bacterianas avaliadas por proximidade
Total	19	Conjunto completo avaliado

Cada amostra m contém um cubo bruto $I_m(x, y, \lambda_b)$, uma referência escura $D_m(x, y, \lambda_b)$, uma referência branca $W_m(x, y, \lambda_b)$ e metadados ENVI. A referência escura registra a resposta de base do sensor, e a referência branca registra uma condição de alta reflectância. Esses arquivos permitem converter a intensidade bruta em reflectância relativa antes da extração das assinaturas. A lógica de aquisição HSI na faixa SWIR

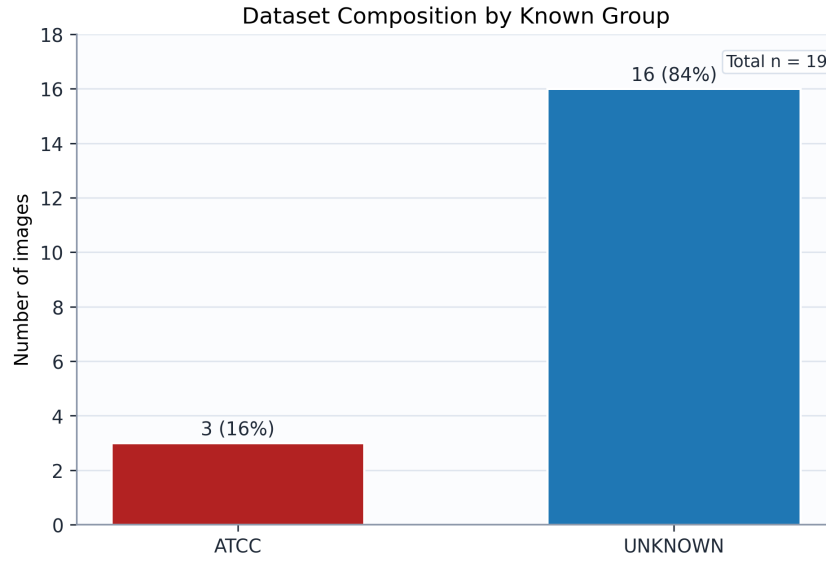


Figura 1: Distribuição das imagens por grupo conhecido.

Fonte: autoria própria, gerada pelo pipeline.

em amostras de *Staphylococcus spp.* acompanha o domínio experimental apresentado por Galvão Filho et al. (2024).

A rastreabilidade foi mantida por imagem. O manifesto do pipeline registra amostra, grupo conhecido e identificação de aquisição. Na validação, quando uma imagem é reservada para teste, as ROIs, assinaturas e variações sintéticas usadas no treino pertencem às demais imagens da partição. Esse controle preserva a imagem como unidade experimental e evita mistura entre treino e teste.

A amostra m é representada por

$$I_m(x, y, \lambda_b), \quad (2.3)$$

em que (x, y) são coordenadas espaciais e λ_b é o comprimento de onda da banda b . Após a inferência do detector, o conjunto de ROIs da imagem é

$$\mathcal{R}_m = \{R_{m,1}, R_{m,2}, \dots, R_{m,n_m}\}. \quad (2.4)$$

A assinatura da ROI j é calculada pela mediana dos pixels da região:

$$s_{m,j} = \text{mediana}_{(x,y) \in R_{m,j}} \mathbf{z}_{m,xy}. \quad (2.5)$$

O vetor $\mathbf{z}_{m,xy}$ corresponde ao espectro do pixel após calibração, seleção de bandas e normalização. A mediana foi adotada porque reduz o efeito de pixels extremos, bordas e pequenos ruídos locais.

2.3 Pré-processamento

O pré-processamento prepara os cubos para a detecção espacial e para a comparação espectral. Em dados HSI, essa etapa é necessária porque o sinal medido combina

resposta da amostra, iluminação, geometria de aquisição, espalhamento e resposta do sensor. Em espectroscopia no infravermelho próximo e em HSI, estratégias de pré-processamento e avaliação por validação cruzada são discutidas por Jiao et al. (2020). Em imagens hiperespectrais médicas, Witteveen et al. (2022) comparam métodos como SNV, normalização e correções de espalhamento.

A calibração radiométrica transforma o cubo bruto em reflectância relativa por meio de referências escura e branca:

$$R_m(x, y, \lambda_b) = \frac{I_m(x, y, \lambda_b) - D_m(x, y, \lambda_b)}{W_m(x, y, \lambda_b) - D_m(x, y, \lambda_b) + \varepsilon}, \quad (2.6)$$

em que ε evita divisão por zero. Essa correção reduz efeitos da corrente escura, da iluminação e da resposta instrumental.

A faixa inicial foi limitada de 950 nm a 2450 nm. Em seguida, foram removidas as janelas de 1350 nm a 1460 nm e de 1800 nm a 1960 nm, associadas à absorção de água e à instabilidade espectral. Regiões próximas de 1400 nm e 1900 nm são tratadas na literatura como faixas relevantes de água no infravermelho próximo e no SWIR por Manley (2014) e Witteveen et al. (2022). A seleção final é

$$\Lambda = \{\lambda \mid 950 \leq \lambda \leq 2450\} \setminus ([1350, 1460] \cup [1800, 1960]). \quad (2.7)$$

Ao final desse recorte, o pipeline preservou 195 bandas. As janelas removidas e as bandas usadas para a pseudoimagem aparecem destacadas na Figura 2.

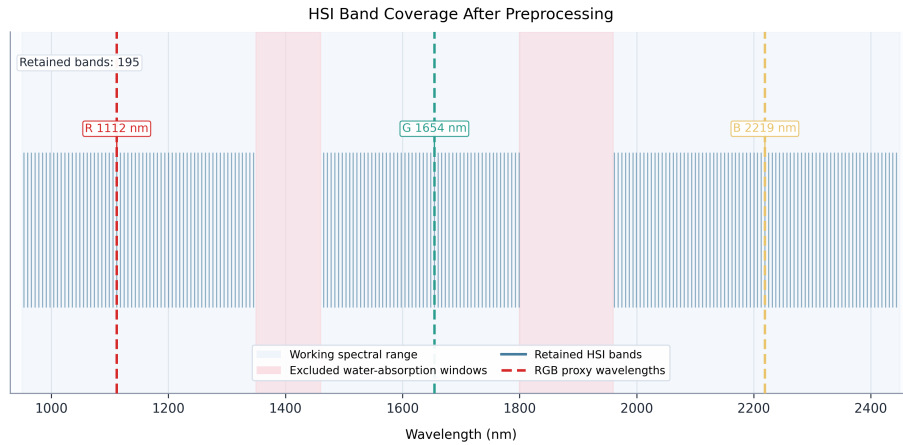


Figura 2: Visão geral das bandas HSI utilizadas no pré-processamento.

Fonte: autoria própria, gerada pelo pipeline.

Cada espectro de pixel foi normalizado por SNV. Seja $\mathbf{r}_{m,xy}$ o vetor calibrado. A normalização é dada por

$$z_{m,xy,b} = \frac{r_{m,xy,b} - \mu_{m,xy}}{\sigma_{m,xy} + \varepsilon}, \quad (2.8)$$

em que $\mu_{m,xy}$ e $\sigma_{m,xy}$ são a média e o desvio padrão do espectro do pixel. A normalização SNV reduz deslocamentos e variações de escala entre espectros,

comportamento alinhado às práticas de pré-processamento em espectroscopia no infravermelho próximo discutidas por Jiao et al. (2020).

Para alimentar o detector, o cubo tratado foi convertido em uma pseudoimagem RGB com bandas próximas de $\lambda_R = 1110$ nm, $\lambda_G = 1655$ nm e $\lambda_B = 2220$ nm. O índice da banda mais próxima é

$$b^*(\lambda) = \arg \min_b |\lambda_b - \lambda|. \quad (2.9)$$

A pseudoimagem é calculada por

$$P_m(x, y, c) = \phi_c(Z_m(x, y, b^*(\lambda_c))), \quad (2.10)$$

em que $c \in \{R, G, B\}$ e ϕ_c é uma escala robusta por percentis. A escolha de bandas representativas também se relaciona ao problema de seleção de variáveis em espectros no infravermelho próximo, discutido por Yun et al. (2019).

2.4 Proposta de ROIs com YOLO26

O YOLO26 foi usado como etapa de localização. Sua entrada é a pseudoimagem RGB, e sua saída é um conjunto de caixas candidatas. Essa função é compatível com a família YOLO, proposta por Redmon et al. (2016) como detecção de objetos em estágio único. A implementação operacional adotada segue Jocher et al. (2026), com o contexto arquitetural descrito por Sapkota e Karkee (2025) e Hidayatullah e Tubagus (2026).

A separação entre localização espacial e análise espectral é apoiada por trabalhos que combinam aprendizado profundo e quimiometria. Xu e Mishra (2022) apresentam essa divisão em imagens espectrais com poucas amostras, Zhang et al. (2023) combinam HSI, PLS-DA e YOLOv5s em ginseng vermelho, e Huang et al. (2025) exploram modelos YOLO com informação hiperespectral em detecção dermatológica. No pipeline proposto, o detector localiza ROIs e a decisão de triagem usa o score espectral agregado.

O bootstrap fraco é o procedimento que cria caixas iniciais por regras automáticas a partir das evidências do próprio cubo. Neste trabalho, essas caixas foram produzidas por saliência espectral, isto é, por um mapa que destaca pixels cuja resposta difere do fundo estimado. Primeiro, a assinatura de fundo é estimada pela mediana das bordas:

$$\mathbf{b}_m = \text{mediana}_{(x,y) \in \mathcal{B}_m} \mathbf{z}_{m,xy}. \quad (2.11)$$

Em seguida, calcula-se o ângulo espectral de cada pixel em relação ao fundo:

$$\theta_m(x, y) = \arccos \left(\frac{\mathbf{z}_{m,xy}^\top \mathbf{b}_m}{\|\mathbf{z}_{m,xy}\|_2 \|\mathbf{b}_m\|_2 + \varepsilon} \right). \quad (2.12)$$

O mapa de saliência combina ângulo espectral e textura local, em que a textura resume variações espaciais da pseudoimagem em uma vizinhança pequena:

$$S_m^{sal}(x, y) = rz(\theta_m(x, y)) + \alpha rz(T_m(x, y)), \quad (2.13)$$

em que rz é um escore robusto, $T_m(x, y)$ é a textura local e $\alpha = 0,35$. Os componentes conectados acima do quantil configurado são convertidos em caixas candidatas.

O detector foi configurado como classe única ROI. O modelo base foi `models/yolo26n.pt`, com imagem de entrada de 640 pixels, 60 épocas, *batch* 4, confiança mínima 0,007 e máximo de 10 detecções por imagem. Esses parâmetros privilegiam cobertura de regiões candidatas para a etapa espectral.

2.5 Aprendizagem positiva-não rotulada e escore

Na formulação PU usada neste trabalho, as ATCC compõem o conjunto positivo e as amostras UNKNOWN compõem o conjunto avaliado por proximidade. Essa abordagem segue o princípio de aprender com positivos conhecidos e dados não rotulados, conforme Bekker e Davis (2020) e Saunders e Freitas (2024).

O protótipo ATCC é a assinatura de referência calculada com as assinaturas ATCC disponíveis no treino de cada partição. Com pesos w_i derivados do ensemble PU, o protótipo ponderado é

$$\mathbf{p}^{(f)} = \frac{\sum_i w_i \mathbf{s}_i}{\sum_i w_i + \varepsilon}. \quad (2.14)$$

A proximidade entre uma ROI e o protótipo é dada pela similaridade de cosseno reescalada:

$$q_{m,j}^{proto} = \frac{1}{2} \left(\frac{\mathbf{s}_{m,j}^\top \mathbf{p}^{(f)}}{\|\mathbf{s}_{m,j}\|_2 \|\mathbf{p}^{(f)}\|_2 + \varepsilon} + 1 \right). \quad (2.15)$$

O ensemble PU é um conjunto de modelos ajustados por reamostragem das assinaturas de treino para reduzir dependência de uma única partição dos dados avaliados. Ele produz $q_{m,j}^{PU}$, usado como correção leve de ranking. O escore final da ROI combina protótipo e ajuste PU:

$$q_{m,j} = (1 - \beta) q_{m,j}^{proto} + \beta q_{m,j}^{PU}, \quad (2.16)$$

em que β é pequeno para manter o protótipo como eixo principal da decisão.

A imagem pode conter várias ROIs. Por isso, o escore da imagem é a média das k maiores pontuações:

$$S_m = \frac{1}{k} \sum_{q \in \text{TopK}(\{q_{m,j}\}_{j=1}^{n_m}, k)} q. \quad (2.17)$$

No experimento, $k = 5$. O limiar é escolhido a partir dos escores fora do treino, preservando sensibilidade ATCC igual a 1,0:

$$\tau = \max \left\{ t : \frac{|\{a \in \mathcal{A} : S_a \geq t\}|}{|\mathcal{A}|} \geq r \right\}, \quad (2.18)$$

em que $r = 1, 0$. A regra final é

$$\hat{y}_m = \begin{cases} \text{ATCC_LIKE}, & \text{se } S_m \geq \tau, \\ \text{UNKNOWN}, & \text{se } S_m < \tau. \end{cases} \quad (2.19)$$

2.6 Geração sintética controlada

A geração sintética foi restrita ao treino de cada partição. Ela cria variações locais de assinaturas ATCC reais para estabilizar o conjunto positivo, seguindo o princípio de aumento de dados descrito por Shorten e Khoshgoftaar (2019) e a ideia de interpolação entre exemplos discutida por Zhang et al. (2018).

Sejam s_a e s_b duas assinaturas ATCC reais do treino. Sorteia-se $\alpha \sim U(0, 1)$ e calcula-se

$$\tilde{s}_{mix} = \alpha s_a + (1 - \alpha) s_b. \quad (2.20)$$

Depois, adiciona-se ruído gaussiano pequeno, escalado pela variabilidade positiva por banda:

$$\tilde{s} = \tilde{s}_{mix} + \gamma \sigma_A^{(f)} \odot \epsilon, \quad \epsilon \sim \mathcal{N}(\mathbf{0}, \mathbf{I}). \quad (2.21)$$

No experimento, $\gamma = 0,05$ e foram geradas 12 assinaturas sintéticas positivas por partição. As métricas finais permanecem calculadas sobre as 19 imagens reais.

2.7 Validação e métricas

A validação foi feita por LOIO. Com 19 imagens, foram executadas 19 partições. Em cada partição, uma imagem foi reservada para teste, e geração sintética, protótipo ATCC e ajuste PU usaram apenas as demais imagens. Essa separação por imagem é coerente com recomendações para bases HSI com poucos rótulos, nas quais a unidade experimental precisa ser preservada durante a avaliação, conforme Li et al. (2019) e Jia et al. (2021). Os principais parâmetros do pipeline foram mantidos em configuração única, como pode ser observado na Tabela 2.

Tabela 2: Parâmetros principais do pipeline experimental

Bloco	Configuração
Pré-processamento	Recorte espectral de 950 nm a 2450 nm. Remoção das janelas 1350 nm a 1460 nm e 1800 nm a 1960 nm. Normalização SNV com $\varepsilon = 10^{-6}$.
Pseudoimagem RGB	Bandas alvo próximas de 1110 nm, 1655 nm e 2220 nm.
YOLO26	Modelo base models/yolo26n.pt. Imagem 640. 60 épocas. <i>Batch</i> 4. Confiança mínima 0,007. Máximo de 10 detecções por imagem.
Bootstrap fraco	Quantil de saliência 98. Área mínima 0,002. Área máxima 0,08. Preenchimento de 2 pixels.
Geração sintética	augment_positives ativado. 12 assinaturas sintéticas positivas por partição. Escala de ruído 0,05. Geração restrita ao treino de cada partição.
Triagem	LOIO. Sensibilidade alvo 1,0. Agregação Top-K com 5 ROIs. 64 estimadores PU. Razão não rotulado/positivo 3. Peso PU de ranking 0,0025.

As métricas foram calculadas no nível de imagem. Na contagem operacional, TP representa ATCC sinalizadas, FN representa ATCC abaixo do limiar, UP representa amostras UNKNOWN sinalizadas e UN representa amostras UNKNOWN abaixo do limiar. Como as positivas de referência são as ATCC, a sensibilidade é

$$\text{Sensibilidade} = \frac{TP}{TP + FN}. \quad (2.22)$$

A precisão operacional mede a proporção de chamadas sinalizadas que correspondem às referências ATCC dentro da leitura operacional do experimento. Ela é

$$\text{Precisão operacional} = \frac{TP}{TP + UP}, \quad (2.23)$$

em que UP é o número de amostras UNKNOWN sinalizadas como ATCC_LIKE. O F1 operacional é a média harmônica entre sensibilidade e precisão operacional:

$$F1 = \frac{2 \cdot \text{Precisão operacional} \cdot \text{Sensibilidade}}{\text{Precisão operacional} + \text{Sensibilidade}}. \quad (2.24)$$

A taxa de sinalização UNKNOWN mede a fração de amostras de rótulo aberto que recebeu prioridade espectral. Ela é

$$\rho_U = \frac{|\{u \in \mathcal{U} : S_u \geq \tau\}|}{|\mathcal{U}|}. \quad (2.25)$$

3 RESULTADOS

Este capítulo apresenta as saídas finais da triagem espectral no nível de amostra. A base, o pré-processamento e os parâmetros do pipeline foram definidos no Capítulo 2. A análise concentra-se em limiar, escores, chamadas finais, ranking e métricas operacionais.

3.1 Resultado geral da triagem

A triagem sinalizou 5 amostras como ATCC_LIKE: as 3 referências ATCC e 2 amostras UNKNOWN. As outras 14 amostras UNKNOWN ficaram abaixo do limiar. Essa contingência operacional pode ser observada na Tabela 3.

Tabela 3: Contingência operacional entre grupo conhecido e chamada da triagem

Grupo conhecido	ATCC_LIKE	UNKNOWN
ATCC	3	0
UNKNOWN	2	14

O resultado principal foi preservar as três referências positivas no grupo sinalizado e reduzir as 16 amostras UNKNOWN a uma lista curta de 2 candidatas prioritárias. Na prática do pipeline, essas duas amostras formam o grupo que apresentou maior proximidade espectral ao padrão ATCC disponível.

A sensibilidade ATCC foi igual a 1,0, a precisão operacional foi 0,60, o F1 operacional foi 0,75 e a taxa de sinalização UNKNOWN foi 0,1250. Esses valores podem ser conferidos na Tabela 4.

Tabela 4: Métricas operacionais da triagem no nível de amostra

Métrica	Valor	Métrica	Valor
Sensibilidade ATCC	1,0000	Precisão operacional	0,6000
F1 operacional	0,7500	Taxa UNKNOWN sinalizada	0,1250
ATCC sinalizadas	3	UNKNOWN sinalizadas	2
UNKNOWN abaixo do limiar	14	Total sinalizado	5
Taxa total sinalizada	0,2632	Referências ATCC	3
Amostras UNKNOWN	16	Total de amostras	19

A leitura conjunta das métricas mostra que o pipeline favoreceu a sensibilidade das referências ATCC e manteve a sinalização UNKNOWN seletiva. Entre as 5 amostras sinalizadas, 3 eram ATCC conhecidas e 2 eram UNKNOWN priorizadas pelo escore.

3.2 Distribuição dos escores e limiar de decisão

As ATCC apresentaram escore médio de 0,9967, mediana de 0,9957 e mínimo de 0,9951. As amostras UNKNOWN apresentaram escore médio de 0,9881, mediana de 0,9906 e máximo de 0,9967. Esses valores indicam que a região de decisão ficou próxima ao menor escore ATCC e aos maiores escores UNKNOWN, como pode ser observado na Tabela 5.

Tabela 5: Resumo dos escores por grupo conhecido

Grupo	n	Score médio	Mediana	Mínimo	Máximo
ATCC	3	0,9967	0,9957	0,9951	0,9994
UNKNOWN	16	0,9881	0,9906	0,9608	0,9967

As três ATCC ficaram concentradas na região superior dos escores. A maior parte das UNKNOWN ficou abaixo da linha de decisão, enquanto duas amostras alcançaram a região de sinalização. Essa distribuição pode ser vista na Figura 3.

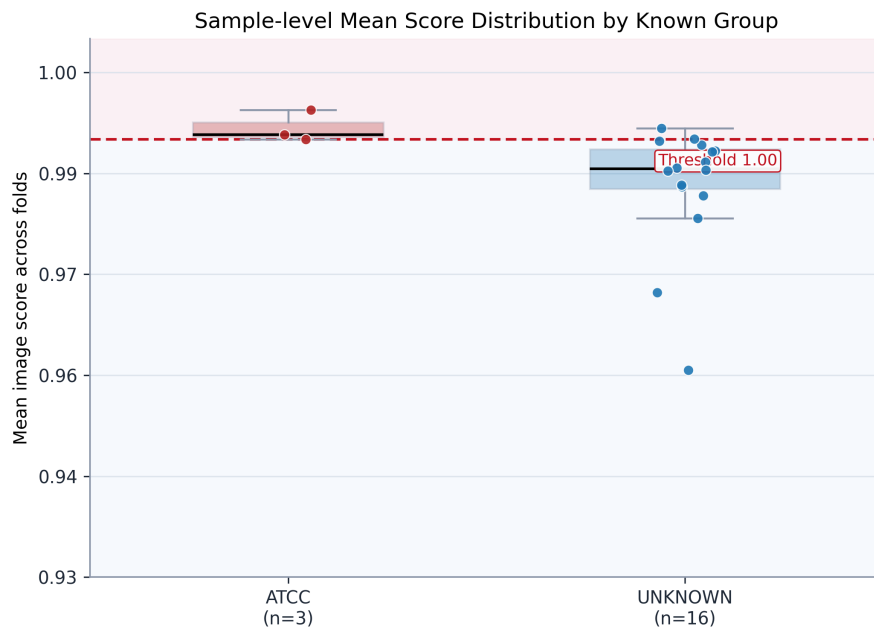


Figura 3: Distribuição dos escores no nível de amostra.

Fonte: autoria própria, gerada pelo pipeline.

O limiar final foi

$$\tau = 0,9951. \quad (3.1)$$

Esse valor preservou sensibilidade ATCC igual a 1,0, pois coincidiu com o menor escore ATCC observado fora do treino. A região próxima a τ concentrou as decisões mais sensíveis, nas quais pequenas mudanças no limiar alteram a sensibilidade ATCC e a taxa de sinalização UNKNOWN, como pode ser observado na Figura 4.

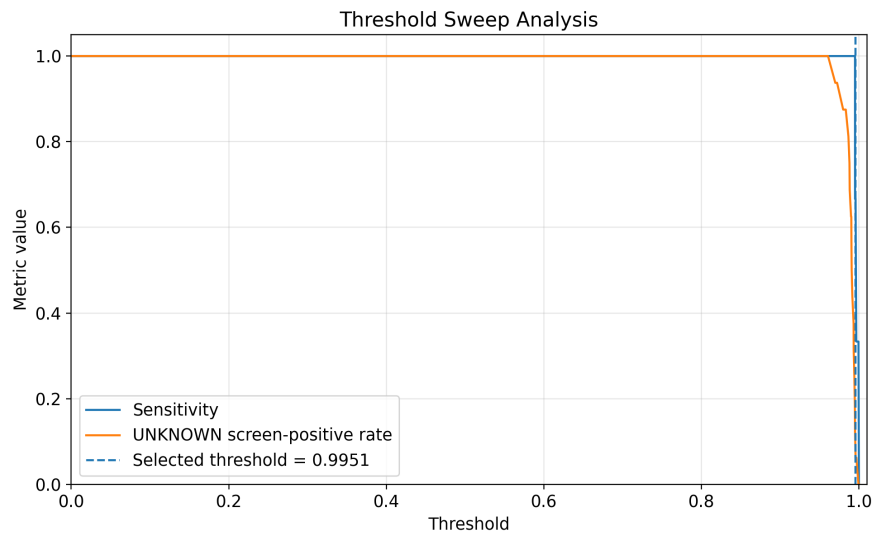


Figura 4: Variação das métricas em função do limiar de decisão.

Fonte: autoria própria, gerada pelo pipeline.

Por esse motivo, o limiar foi interpretado junto com escore e margem. A chamada final resume a decisão, enquanto o escore contínuo indica a força da proximidade espectral.

3.3 Resultados por amostra e ranking

A margem foi calculada por

$$\Delta_m = S_m - \tau. \quad (3.2)$$

Valores maiores ou iguais a zero geraram chamada ATCC_LIKE. Valores menores que zero mantiveram a chamada UNKNOWN. Os escores, as margens e as chamadas finais de cada imagem podem ser observados na Tabela 6.

Tabela 6: Resultado final por amostra

Amostra	Grupo	ROIs	Score	τ	Δ	Chamada
ATCC13_240506-161053	ATCC	10	0,9951	0,9951	0,0000	ATCC_LIKE
ATCC16_240506-161158	ATCC	10	0,9957	0,9951	0,0007	ATCC_LIKE
ATCC27_240506-161129	ATCC	10	0,9994	0,9951	0,0044	ATCC_LIKE
3491B_240506-155911	UNKNOWN	10	0,9833	0,9951	-0,0118	UNKNOWN
351_1_240506-160920	UNKNOWN	10	0,9948	0,9951	-0,0003	UNKNOWN
420_240506-160205	UNKNOWN	10	0,9933	0,9951	-0,0017	UNKNOWN
426_1_240506-160058	UNKNOWN	10	0,9942	0,9951	-0,0009	UNKNOWN
491_240506-160846	UNKNOWN	10	0,9866	0,9951	-0,0084	UNKNOWN

Amostra	Grupo	ROIs	Score	τ	Δ Chamada
503B_240506-160006	UNKNOWN	5	0,9967	0,9951	0,0016 ATCC_LIKE
508_240506-160326	UNKNOWN	10	0,9880	0,9951	-0,0071 UNKNOWN
534_240506-160510	UNKNOWN	10	0,9908	0,9951	-0,0043 UNKNOWN
537_240506-160651	UNKNOWN	10	0,9932	0,9951	-0,0018 UNKNOWN
539_240506-160131	UNKNOWN	10	0,9951	0,9951	0,0000 ATCC_LIKE
548A_240506-160359	UNKNOWN	10	0,9917	0,9951	-0,0034 UNKNOWN
549_240506-160758	UNKNOWN	10	0,9883	0,9951	-0,0068 UNKNOWN
553_240506-160724	UNKNOWN	10	0,9903	0,9951	-0,0047 UNKNOWN
554A_240506-160433	UNKNOWN	3	0,9608	0,9951	-0,0343 UNKNOWN
559_240506-160951	UNKNOWN	2	0,9723	0,9951	-0,0228 UNKNOWN
560B_240506-160251	UNKNOWN	10	0,9905	0,9951	-0,0046 UNKNOWN

As referências ATCC13_240506-161053, ATCC16_240506-161158 e ATCC27_240506-161129 foram sinalizadas como ATCC_LIKE. Entre as UNKNOWN, as amostras 503B_240506-160006 e 539_240506-160131 foram priorizadas. A amostra 503B apresentou margem positiva de 0,0016. A amostra 539 ficou praticamente sobre o limiar, com margem arredondada igual a zero.

A ordenação dos escores coloca as ATCC e as UNKNOWN sinalizadas na região superior da lista. Essa ordenação pode ser vista na Figura 5 e representa uma das saídas mais úteis do pipeline, pois transforma as 19 amostras em um ranking de prioridade.

A base inferior do ranking também informa a priorização. Amostras como 554A_240506-160433 e 559_240506-160951 ficaram mais distantes do limiar e receberam menor prioridade dentro do critério espectral adotado.

3.4 Resultados ao longo das partições LOIO

Nas 19 partições LOIO, cada imagem foi avaliada fora do próprio treino. As ATCC permaneceram acima do limiar e a maioria das UNKNOWN permaneceu abaixo. Essa distribuição dos escores por partição pode ser observada na Figura 6.

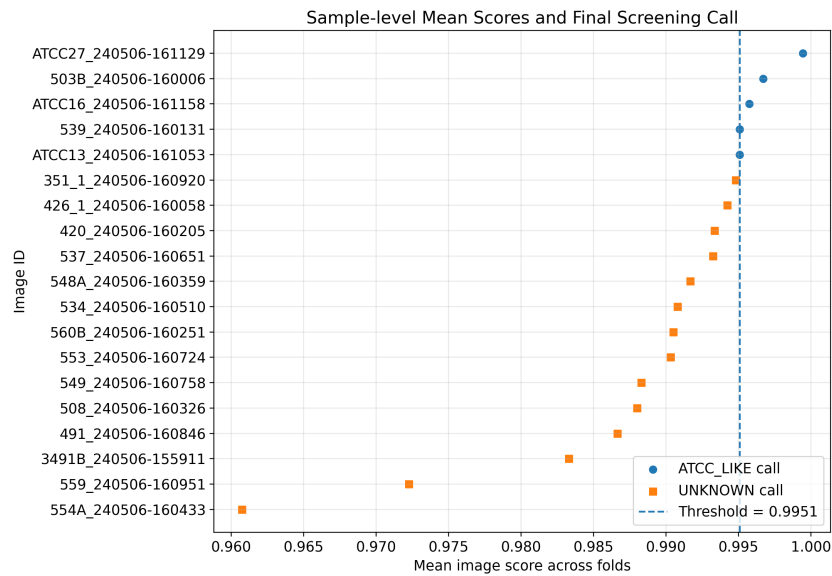


Figura 5: Ranking dos escores por amostra.

Fonte: autoria própria, gerada pelo pipeline.

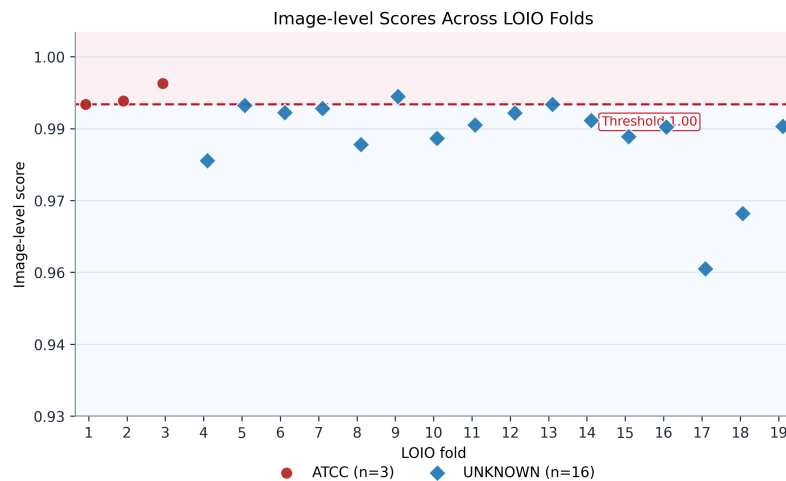


Figura 6: Escores no nível de imagem ao longo das partições LOIO.

Fonte: autoria própria, gerada pelo pipeline.

A dispersão das UNKNOWN foi maior que a das ATCC. Esse comportamento é coerente com o uso do grupo UNKNOWN como conjunto avaliado por proximidade, pois suas amostras ocupam diferentes posições em relação ao protótipo ATCC.

Em síntese, os resultados principais foram 3 ATCC sinalizadas, nenhuma ATCC abaixo do limiar, 2 UNKNOWN sinalizadas e 14 UNKNOWN mantidas abaixo do limiar. Esses valores levaram a sensibilidade de 1,0, precisão operacional de 0,60, F1 de 0,75 e $\rho_U = 0,125$. A proposta atingiu o objetivo operacional definido ao preservar as referências ATCC e produzir uma lista reduzida de amostras UNKNOWN prioritárias.

4 DISCUSSÃO

Os resultados mostram que o pipeline cumpriu a função definida para a triagem espectral: transformar os 19 cubos HSI na faixa SWIR em escores por amostra, manter as três referências ATCC acima do limiar e destacar duas amostras UNKNOWN como prioridades. A leitura principal é operacional, centrada na proximidade ao padrão ATCC observado. Essa interpretação é coerente com o uso de HSI em materiais biológicos e com a formulação PU para positivos conhecidos e amostras avaliadas por proximidade, como discutem Manley (2014) e Bekker e Davis (2020).

O limiar $\tau = 0,9951$ manteve sensibilidade ATCC igual a 1,0. Com esse limiar, as amostras ATCC13_240506-161053, ATCC16_240506-161158 e ATCC27_240506-161129 foram sinalizadas, junto com as UNKNOWN 503B_240506-160006 e 539_240506-160131. A margem da 503B foi mais clara, enquanto a margem da 539 ficou praticamente sobre a fronteira. Essa diferença reforça que chamada, score, margem e ranking devem ser lidos em conjunto.

A etapa YOLO26 forneceu cobertura para a análise espectral. O detector retornou 170 ROIs, com média de 8,95 ROIs por imagem, mediana de 10 ROIs e detecção em todas as imagens. A distribuição por grupo mostra 30 ROIs nas ATCC e 140 nas UNKNOWN, como pode ser observado na Tabela 7. O uso do detector como etapa espacial e do score espectral como etapa de decisão acompanha a estratégia híbrida descrita por Xu e Mishra (2022) e aplicada em contextos HSI com YOLO por Zhang et al. (2023) e Huang et al. (2025).

Tabela 7: Resumo de detecções de ROI por grupo conhecido

Grupo	Imagens	ROIs	ROIs/imagem	Conf. média	Conf. mediana
ATCC	3	30	10,00	0,0193	0,0130
UNKNOWN	16	140	8,75	0,0361	0,0225

A maioria das imagens atingiu o limite máximo de 10 detecções configurado no pipeline. Esse comportamento aparece na Figura 7 e é coerente com a configuração permissiva adotada para priorizar cobertura de regiões candidatas.

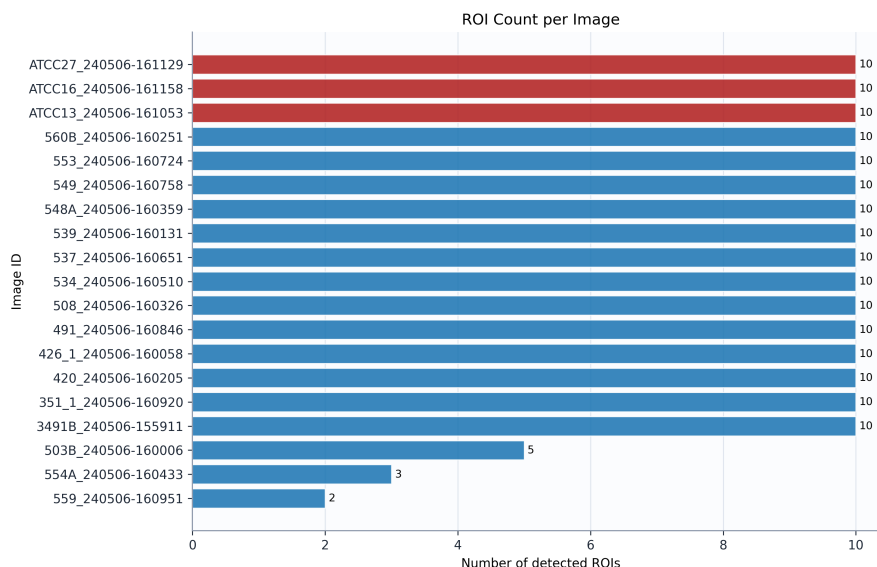


Figura 7: Quantidade de ROIs detectadas por imagem.

Fonte: autoria própria, gerada pelo pipeline.

As confianças do detector ficaram concentradas em valores baixos. Esse padrão é compatível com o treinamento a partir de caixas fracas e com o limiar de inferência permissivo. A distribuição dessas confianças pode ser vista na Figura 8. No fluxo proposto, a confiança caracteriza a proposta espacial, e a decisão final é dada pelo escore espectral agregado.

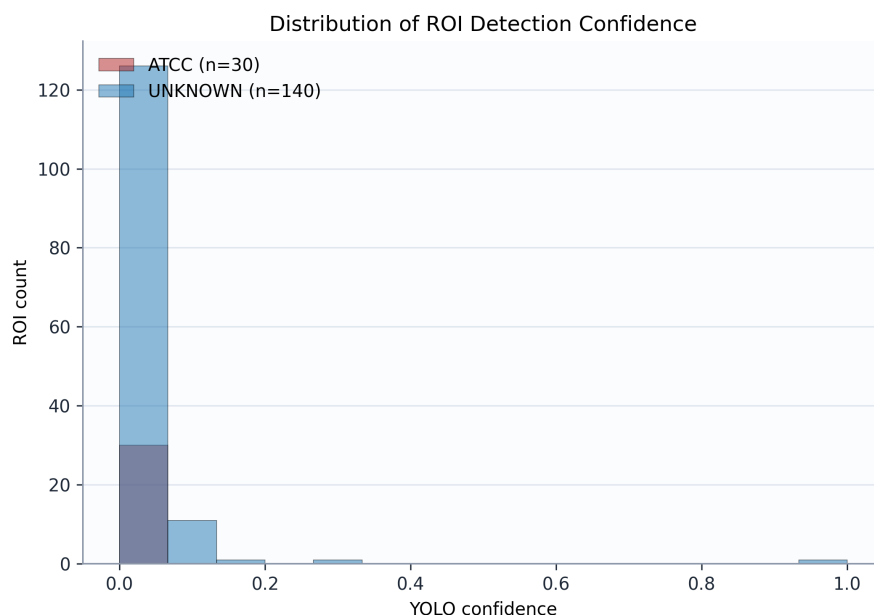


Figura 8: Distribuição das confianças de ROIs propostas pelo detector.

Fonte: autoria própria, gerada pelo pipeline.

As assinaturas medianas mantidas após o pré-processamento exibem variações

ao longo da faixa SWIR preservada. Essas curvas sustentam a comparação com o protótipo ATCC e explicam por que o escore contínuo é mais informativo que a chamada isolada. A leitura espectral após calibração, remoção de janelas instáveis e normalização segue práticas de infravermelho próximo e HSI discutidas por Jiao et al. (2020) e Witteveen et al. (2022). Os perfis espectrais usados para essa interpretação podem ser observados na Figura 9.

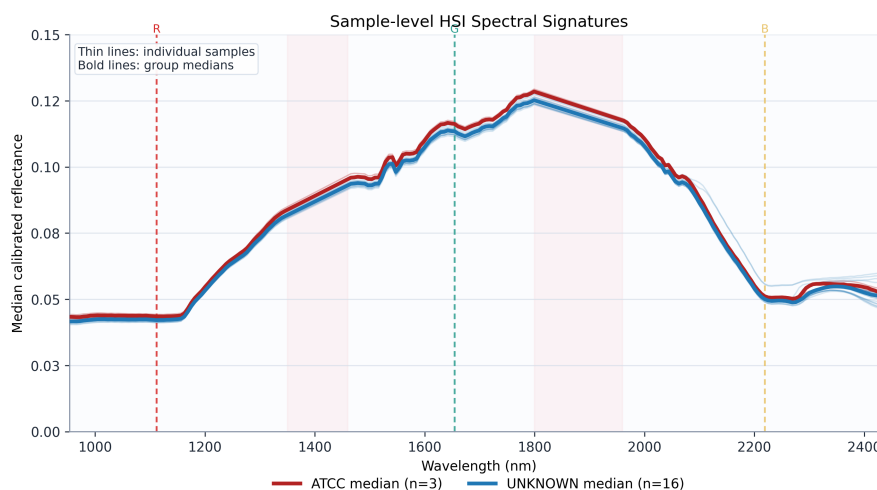


Figura 9: Assinaturas espectrais medianas de amostras selecionadas.

Fonte: autoria própria, gerada pelo pipeline.

A geração sintética controlada contribuiu para estabilizar o treino em uma base com três referências ATCC. As assinaturas sintéticas foram produzidas somente dentro do treino de cada partição, por interpolação e ruído pequeno aplicados às assinaturas ATCC reais. Esse desenho segue o princípio de aumento de dados como regularização do treinamento, descrito por Shorten e Khoshgoftaar (2019), e a interpolação entre exemplos proposta por Zhang et al. (2018). Assim, o conjunto de avaliação permaneceu composto pelas 19 imagens reais, e a etapa sintética atuou apenas como apoio ao ajuste do componente PU.

A formulação PU foi adequada ao desenho da base. As ATCC funcionaram como referências positivas, e as UNKNOWN foram ordenadas por proximidade espectral. O protótipo ATCC forneceu o eixo principal da decisão, enquanto o componente PU ajustou levemente a ordenação dos escores. Essa combinação manteve o modelo simples, interpretável e alinhado à escala da coleção.

A contribuição computacional está na rastreabilidade do fluxo. O pipeline parte de cubos, referências e metadados ENVI, gera pseudoimagens, caixas, assinaturas, escores, limiar, tabelas e figuras, e conecta cada chamada final aos artefatos intermediários. Essa organização facilita auditoria, reprodução dos resultados e ampliação do estudo em bases futuras com mais referências e anotações de ROI.

5 CONCLUSÃO

Este trabalho abordou o problema de triar espectralmente amostras de *Staphylococcus spp.* em imagens HSI na faixa SWIR, usando três referências ATCC como padrão positivo e dezesseis amostras UNKNOWN como grupo avaliado por proximidade. Para isso, foi desenvolvido um pipeline que localiza ROIs, extrai assinaturas espectrais e calcula um escore por imagem.

A proposta combinou calibração radiométrica, seleção espectral, normalização SNV, pseudoimagem RGB, proposta de ROIs com YOLO26, geração sintética controlada de assinaturas positivas, protótipo espectral e aprendizagem positiva-não rotulada. Essa sequência transformou cubos brutos, referência escura, referência branca e metadados ENVI em tabelas, figuras, escores, margens e chamadas operacionais.

A base experimental teve 19 imagens. O sistema detectou 170 ROIs, com média de 8,95 ROIs por imagem e cobertura em todas as amostras. O limiar final foi $\tau = 0,9951$. Com esse limiar, as três referências ATCC foram sinalizadas como ATCC_LIKE, resultando em sensibilidade ATCC de 1,0. A precisão operacional foi 0,60, o F1 operacional foi 0,75 e a taxa de sinalização UNKNOWN foi 12,5%.

O resultado final gerou uma lista de cinco amostras sinalizadas: três ATCC e duas UNKNOWN. As UNKNOWN priorizadas foram 503B_240506-160006 e 539_240506-160131. A primeira apresentou margem positiva mais clara, enquanto a segunda ficou praticamente na fronteira do limiar. Esse comportamento confirma a importância de analisar chamada, escore, margem e ranking em conjunto.

A principal contribuição do trabalho está na formulação computacional do problema. A triagem foi construída para o contexto da base: três referências ATCC, grupo UNKNOWN avaliado por proximidade, ROIs propostas por detector e decisão final baseada em assinatura espectral. O fluxo resultante é reproduzível e auditável, pois cada etapa produz artefatos intermediários que conectam a amostra bruta à chamada final.

Conclui-se que a combinação entre HSI na faixa SWIR, YOLO26, assinaturas espectrais, geração sintética controlada e PU Learning é adequada como prova de conceito para triagem espectral exploratória de *Staphylococcus spp.* na coleção avaliada. Como continuidade, recomenda-se ampliar a coleção, incorporar rótulos laboratoriais complementares, produzir anotação manual de ROIs, comparar versões da família YOLO, avaliar seleção automática de bandas e acompanhar as amostras UNKNOWN sinalizadas em análise posterior.

REFERÊNCIAS

- BEKKER, J., DAVIS, J. Learning from positive and unlabeled data: a survey. *Machine Learning*, v. 109, p. 719 a 760, 2020. DOI: 10.1007/s10994-020-05877-5.
- DE JUAN, A., DE OLIVEIRA, R. R. Hyperspectral image and chemometrics: a step beyond classical spectroscopic PAT tools. *Analytical and Bioanalytical Chemistry*, v. 418, n. 1, p. 23 a 34, 2026. DOI: 10.1007/s00216-025-06154-x.
- FULLADOSA, E., TORRES-BAIX, E., MUÑOZ, I., OLMOS, A., GOU, P., BOVER-CID, S. Hyperspectral imaging and predictive microbiology for the non-invasive evaluation of the growth probability of *Staphylococcus aureus* in sliced dry-cured ham. *Meat Science*, v. 229, p. 109915, 2025. DOI: 10.1016/j.meatsci.2025.109915.
- GALVÃO FILHO, A. R., ANDRADE, C. R., GOMES, R. P., CARNEIRO, L. C., AVELINO, M. A. G., COELHO, C. J. Detection of hospital super bacteria MRSA from the hands of healthcare professionals using machine learning and hyperspectral imaging. In: *2024 46th Annual International Conference of the IEEE Engineering in Medicine and Biology Society (EMBC)*. 2024. DOI: 10.1109/EMBC53108.2024.10781695.
- HIDAYATULLAH, P., TUBAGUS, R. YOLO26: a comprehensive architecture overview and key improvements. *arXiv preprint*, arXiv:2602.14582, 2026. Disponível em: <https://arxiv.org/abs/2602.14582>. Acesso em: 5 jun. 2026.
- HUANG, N.-C., MUKUNDAN, A., KARMAKAR, R., SYNA, S., CHANG, W.-Y., WANG, H.-C. Novel snapshot-based hyperspectral conversion for dermatological lesion detection via YOLO object detection models. *Bioengineering*, v. 12, n. 7, p. 714, 2025. DOI: 10.3390/bioengineering12070714.
- JIA, S., JIANG, S., LIN, Z., LI, N., XU, M., YU, S. A survey: deep learning for hyperspectral image classification with few labeled samples. *Neurocomputing*, v. 448, p. 179 a 204, 2021. DOI: 10.1016/j.neucom.2021.03.035.
- JIAO, Y., LI, Z., CHEN, X., FEI, S. Preprocessing methods for near-infrared spectrum calibration. *Journal of Chemometrics*, v. 34, n. 11, e3306, 2020. DOI: 10.1002/cem.3306.
- JOCHER, G., QIU, J., LIU, M., LYU, S., AKYON, F. C., KALFAOGLU, M. E. Ultralytics YOLO26: unified real-time end-to-end vision models. *arXiv preprint*, arXiv:2606.03748, 2026. DOI: 10.48550/arXiv.2606.03748. Disponível em: <https://arxiv.org/abs/2606.03748>.

48. Acesso em: 5 jun. 2026.

LI, S., SONG, W., FANG, L., CHEN, Y., GHAMISI, P., BENEDIKTSSON, J. A. Deep learning for hyperspectral image classification: an overview. *IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing*, v. 57, n. 9, p. 6690 a 6709, 2019. DOI: 10.1109/TGRS.2019.2907932.

MANLEY, M. Near-infrared spectroscopy and hyperspectral imaging: non-destructive analysis of biological materials. *Chemical Society Reviews*, v. 43, p. 8200 a 8214, 2014. DOI: 10.1039/C4CS00062E.

REDMON, J., DIVVALA, S., GIRSHICK, R., FARHADI, A. You only look once: unified, real-time object detection. In: *2016 IEEE Conference on Computer Vision and Pattern Recognition (CVPR)*. Las Vegas: IEEE, 2016. p. 779 a 788. DOI: 10.1109/CVPR.2016.91.

SAPKOTA, R., KARKEE, M. Ultralytics YOLO evolution: an overview of YOLO26, YOLO11, YOLOv8 and YOLOv5 object detectors for computer vision and pattern recognition. *arXiv preprint*, arXiv:2510.09653, 2025. Disponível em: <https://arxiv.org/abs/2510.09653>. Acesso em: 5 jun. 2026.

SAUNDERS, J. D., FREITAS, A. A. Automated machine learning for positive-unlabelled learning. *arXiv preprint*, arXiv:2401.06452, 2024. Disponível em: <https://arxiv.org/abs/2401.06452>. Acesso em: 5 jun. 2026.

SHORTEN, C., KHOSHGOFTAAR, T. M. A survey on image data augmentation for deep learning. *Journal of Big Data*, v. 6, n. 1, p. 60, 2019. DOI: 10.1186/s40537-019-0197-0.

WAKHOLI, C., KANDPAL, L. M., LEE, H., BAE, H., PARK, E., KIM, M. S., MO, C., LEE, W.-H., CHO, B.-K. Rapid assessment of corn seed viability using short wave infrared line-scan hyperspectral imaging and chemometrics. *Sensors and Actuators B: Chemical*, v. 255, p. 498 a 507, 2018. DOI: 10.1016/j.snb.2017.08.036.

WITTEVEEN, M., STERENBORG, H. J., VAN LEEUWEN, T. G., AALDERS, M. C., RUERS, T. J., POST, A. L. Comparison of preprocessing techniques to reduce nontissue-related variations in hyperspectral reflectance imaging. *Journal of Biomedical Optics*, v. 27, n. 10, p. 106003, 2022. DOI: 10.1117/1.JBO.27.10.106003.

WOLK, K., WOLK, A. Hyperspectral imaging system applications in healthcare.

Electronics, v. 14, n. 23, p. 4575, 2025. DOI: 10.3390/electronics14234575.

XU, J., MISHRA, P. Combining deep learning with chemometrics when it is really needed: a case of real time object detection and spectral model application for spectral image processing. *Analytica Chimica Acta*, v. 1202, p. 339668, 2022. DOI: 10.1016/j.aca.2022.339668.

YUN, Y.-H., LI, H.-D., DENG, B.-C., CAO, D.-S. An overview of variable selection methods in multivariate analysis of near-infrared spectra. *TrAC Trends in Analytical Chemistry*, v. 113, p. 102 a 115, 2019. DOI: 10.1016/j.trac.2019.01.018.

ZHANG, H., Cissé, M., DAUPHIN, Y. N., LOPEZ-PAZ, D. mixup: beyond empirical risk minimization. In: *International Conference on Learning Representations*. 2018. Disponível em: <https://openreview.net/forum?id=r1Ddp1-Rb>. Acesso em: 5 jun. 2026.

ZHANG, H., PAN, Y., LIU, X., CHEN, Y., GONG, X., ZHU, J., YAN, J., ZHANG, H. Recognition of the rhizome of red ginseng based on spectral-image dual-scale digital information combined with intelligent algorithms. *Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy*, v. 297, p. 122742, 2023. DOI: 10.1016/j.saa.2023.122742.

APÊNDICE A : CONFIGURAÇÃO DO PIPELINE

Este apêndice resume os principais parâmetros utilizados no pipeline experimental.

Tabela 8: Parâmetros principais do pipeline experimental utilizados no apêndice

Bloco	Configuração
Pré-processamento	Recorte espectral de 950 nm a 2450 nm. Remoção das janelas 1350 nm a 1460 nm e 1800 nm a 1960 nm. Normalização SNV com $\varepsilon = 10^{-6}$.
Pseudoimagem RGB	Bandas alvo próximas de 1110 nm, 1655 nm e 2220 nm.
YOLO26	Modelo base models/yolo26n.pt. Imagem 640. 60 épocas. <i>Batch</i> 4. Confiança mínima 0,007. Máximo de 10 detecções por imagem.
Bootstrap fraco	Quantil de saliência 98. Área mínima 0,002. Área máxima 0,08. Preenchimento de 2 pixels.
Geração sintética	augment_positives ativado. 12 assinaturas sintéticas positivas por partição. Escala de ruído 0,05. Geração restrita ao treino de cada partição.
Triagem	LOIO. Sensibilidade alvo 1,0. Agregação Top-K com 5 ROIs. 64 estimadores PU. Razão não rotulado/positivo 3. Peso PU de ranking 0,0025.

Esses parâmetros definem as etapas de calibração, geração de pseudoimagem, proposta de ROIs, geração sintética, validação e decisão final usadas no experimento.

APÊNDICE B : LISTA DE AMOSTRAS

A Tabela 9 apresenta o manifesto das amostras processadas no experimento, separando referências ATCC e amostras UNKNOWN.

Tabela 9: Manifesto das amostras utilizadas no experimento

Amostra	Grupo conhecido	Data/hora de aquisição
3491B_240506-155911	UNKNOWN	2024-05-06 15:59:11
351_1_240506-160920	UNKNOWN	2024-05-06 16:09:20
420_240506-160205	UNKNOWN	2024-05-06 16:02:05
426_1_240506-160058	UNKNOWN	2024-05-06 16:00:58
491_240506-160846	UNKNOWN	2024-05-06 16:08:46
503B_240506-160006	UNKNOWN	2024-05-06 16:00:06
508_240506-160326	UNKNOWN	2024-05-06 16:03:26
534_240506-160510	UNKNOWN	2024-05-06 16:05:10
537_240506-160651	UNKNOWN	2024-05-06 16:06:51
539_240506-160131	UNKNOWN	2024-05-06 16:01:31
548A_240506-160359	UNKNOWN	2024-05-06 16:03:59
549_240506-160758	UNKNOWN	2024-05-06 16:07:58
553_240506-160724	UNKNOWN	2024-05-06 16:07:24
554A_240506-160433	UNKNOWN	2024-05-06 16:04:33
559_240506-160951	UNKNOWN	2024-05-06 16:09:51
560B_240506-160251	UNKNOWN	2024-05-06 16:02:51
ATCC13_240506-161053	ATCC	2024-05-06 16:10:53
ATCC16_240506-161158	ATCC	2024-05-06 16:11:58
ATCC27_240506-161129	ATCC	2024-05-06 16:11:29

APÊNDICE C : RESULTADOS COMPLETOS

Este apêndice apresenta novamente a tabela completa de resultados por amostra, incluindo escore, limiar, margem e chamada operacional.

Tabela 10: Resultado final completo por amostra

Amostra	Grupo	ROIs	Score	τ	Δ	Chamada
ATCC13_240506-161053	ATCC	10	0,9951	0,9951	0,0000	ATCC_LIKE
ATCC16_240506-161158	ATCC	10	0,9957	0,9951	0,0007	ATCC_LIKE
ATCC27_240506-161129	ATCC	10	0,9994	0,9951	0,0044	ATCC_LIKE
3491B_240506-155911	UNKNOWN	10	0,9833	0,9951	-0,0118	UNKNOWN
351_1_240506-160920	UNKNOWN	10	0,9948	0,9951	-0,0003	UNKNOWN
420_240506-160205	UNKNOWN	10	0,9933	0,9951	-0,0017	UNKNOWN
426_1_240506-160058	UNKNOWN	10	0,9942	0,9951	-0,0009	UNKNOWN
491_240506-160846	UNKNOWN	10	0,9866	0,9951	-0,0084	UNKNOWN
503B_240506-160006	UNKNOWN	5	0,9967	0,9951	0,0016	ATCC_LIKE
508_240506-160326	UNKNOWN	10	0,9880	0,9951	-0,0071	UNKNOWN
534_240506-160510	UNKNOWN	10	0,9908	0,9951	-0,0043	UNKNOWN
537_240506-160651	UNKNOWN	10	0,9932	0,9951	-0,0018	UNKNOWN
539_240506-160131	UNKNOWN	10	0,9951	0,9951	0,0000	ATCC_LIKE
548A_240506-160359	UNKNOWN	10	0,9917	0,9951	-0,0034	UNKNOWN
549_240506-160758	UNKNOWN	10	0,9883	0,9951	-0,0068	UNKNOWN
553_240506-160724	UNKNOWN	10	0,9903	0,9951	-0,0047	UNKNOWN
554A_240506-160433	UNKNOWN	3	0,9608	0,9951	-0,0343	UNKNOWN
559_240506-160951	UNKNOWN	2	0,9723	0,9951	-0,0228	UNKNOWN
560B_240506-160251	UNKNOWN	10	0,9905	0,9951	-0,0046	UNKNOWN