

Rozwój metod statystycznych i algorytmicznych używanych w badaniach spektrometrii mas.

Jednym z podstawowych zastosowań spektrometrii mas (MS) jest diagnostyka w medycynie molekularnej. Instrumenty MS generują widma testowanych substancji (takich jak osocze krwi) które zawierają dane mogące być użyteczne do identyfikacji związków chemicznych występujących w próbce - a dalej, do wykrycia nieprawidłowości w składzie chemicznym próbki i do szybkiego postawienia diagnozy.

Szczególnie trudnym zagadnieniem jest identyfikacja białek na podstawie widma. Obserwacja sposobu fragmentacji białek wewnątrz instrumentu MS pozwala na wgląd w ich strukturę, a także na odkrycie tzw. modyfikacji posttranslacyjnych, co może być użyte w celach diagnostycznych, a także w badaniach naukowych, szczególnie w proteomice. Niestety komputerowa identyfikacja białek na podstawie spektrów wciąż pozostaje trudnym zagadnieniem, i bardzo często istniejące algorytmy okazują się być niewystarczające, co zmusza do ręcznego analizowania spektr - co jest zadaniem bardzo czasochłonnym.

Przedstawiony projekt ma na celu zmienić tę sytuację, wykorzystując (ignorowane przez dotychczasowe podejścia) dane o strukturze izotopowej widm, przy użyciu nowatorskich algorytmów pozwalających na dokonywanie szybkich obliczeń na tychże strukturach.

Należy nadmienić że zastosowania rozwijanych w ramach tego projektu metod statystycznych a także algorytmicznych wykorzystujących zjawisko koncentracji miary probabilistycznej wykraczają poza samą dziedzinę spektrometrii mas, i mogą znaleźć szersze zastosowanie także w innych dziedzinach nauk, szczególnie w sytuacjach wymagających algorytmu szybkiego próbkowania z dowolnego zadanego rozkładu dyskretnego, a także w symulacjach stochastycznych.