

Spektrometria mas jest techniką laboratoryjną, która umożliwia pomiar stosunku masy do ładunku związków chemicznych. Intuicyjnie możemy przyjąć, że pozwala ona na precyzyjne zważenie pojedynczych cząsteczek.

Spektrometria mas z każdym rokiem zyskuje na znaczeniu, zarówno w stosowanych naukach biomedycznych, jak i badaniach podstawowych. Coraz lepsze instrumenty pozwalają na bardzo dokładne zbadanie skomplikowanych próbek, takich jak płyny ustrojowe, próbki żywności, czy tkanki. Wyniki badań wykorzystywane są w diagnostyce medycznej, toksykologii i kryminalistyce. Nowe technologie stymulują rozwój całych gałęzi nauk obliczeniowych takich jak proteomika, lipidomika, czy metabolomika obliczeniowa, których zadaniem jest opracowanie algorytmów, modeli formalnych i metod statystycznych umożliwiających analizę danych spektrometrycznych.

Trzeba pamiętać, że współczesny rozwój wysoko-przepustowych technik eksperymentalnych w naukach biomedycznych prowadzi do pozyskania ogromnych ilości trudnych w interpretacji danych. Do ich efektywnej analizy niezbędna okazuje się współpraca interdyscyplinarnych zespołów składających się z chemików, biologów, lekarzy, matematyków i informatyków. Jedynie unikalne połączenie szerokiej wiedzy chemicznej, kultura matematyczna i umiejętności algorytmiczne mogą zaowocować efektywnymi rozwiązaniami zaakceptowanymi przez środowisko naukowe.

W niniejszym projekcie koncentrujemy się na danych otrzymywanych w spektrometrach masowych. Planowane w projekcie zadania badawcze dotyczą analizy widm spektrometrycznych o wysokiej rozdzielczości, gdyż w rozwoju tej technologii obserwuje się wyraźny trend polegający na upowszechnianiu się instrumentów oferujących coraz to wyższą rozdzielczość wyników.

Metody obliczeniowe w spektrometrii mas muszą nadążyć za postępem technologicznym. Często niezbędne okazuje się zaproponowanie nowych rozwiązań matematycznych i algorytmicznych. Analiza widm masowych o wysokiej rozdzielczości jest dziedziną, w której brakuje efektywnych rozwiązań algorytmicznych, a nasze plany w projekcie obejmują rozwiązania optymalizujące analizę danych na wszystkich etapach: począwszy od nowatorskiego podejścia wykorzystującego odległość Wassersteina do porównywania widm cząsteczek, poprzez algorytmy analizy nakładających się sygnałów, identyfikacji składu atomowego analizowanych substancji, aż do wysokopoziomowych analiz metabolomicznych.

Zaproponowane przez nas rozwiązania powinny okazać się przydane w przetwarzaniu masowych danych z obrazowania spektrometrycznego. Jest to nowa technika stosowana w diagnostyce medycznej, w której badaniu podlegają całe tkanki. Liczymy, że metoda automatycznej identyfikacji składu atomowego cząsteczek pozwoli na identyfikację metabolitów zawartych w badanej próbce. Najbardziej wyzywającym zadaniem jakie chcemy podjąć jest próba rekonstrukcji ścieżek metabolicznych na podstawie danych spektrometrycznych.