

Ulepszanie wyznaczania orientacji 3D makromolekuł na podstawie spolaryzowanego obrazowania chemicznego IR poprzez optymalizację algorytmów usuwania rozpraszania

Paulina Koziół

Streszczenie

Obrazowanie spektroskopowe w podczerwieni (FT-IR) jest potężną techniką z szerokim zakresem stosowalności w biomedycynie. Wynika to z bogactwa informacji o składzie chemicznym próbki, zdeterminowanym jej zdolnością do absorpcji światła z zakresu podczerwieni. W ciągu ostatniej dekady nastąpił ogromny postęp w kierunku wprowadzenia tej techniki do kliniki, a w szczególności połączenia obrazowania w podczerwieni z metodami uczenia maszynowego w celu wspomaganego wykrywania i diagnostyki nowotworów. Jednym z ostatnich odkryć jest również możliwość wyznaczania orientacji molekuł w trzech wymiarach poprzez wykorzystanie polaryzacji światła podczerwonego. Polaryzacja jest jedną z charakterystyk światła, która w tym przypadku zmienia jego właściwości absorpcyjne, przez co dostarcza dodatkowych informacji o strukturze badanej próbki. Niestety jak każda technika pomiarowa, FT-IR nie jest wolna od efektów wpływających na pogorszenie wydajności i dokładności. Zjawisko rozpraszania gra tutaj ogromną rolę, powodując zmianę kierunku światła przechodzącego przez próbkę. Rozproszone światło nie wpada do detektora i jest tym samym traktowane jako zaabsorbowane przez próbkę dając przez to fałszywy sygnał. Jedną z możliwości zredukowania wpływu tego efektu na prowadzone analizy jest wprowadzenie metod przetwarzania danych, korygujących zafałszowany sygnał. Metody korygujące rozpraszanie noszą nazwę Extended Multiplicative Signal Correction (EMSC) i są dobrze rozwinięte dla próbek o kształcie sferycznym (np. komórek), ale są na wczesnym etapie rozwoju jeśli chodzi o stosowalność w przypadku tkanek. Jest to spowodowane ich niejednorodnością, która sprawia, że profil rozpraszania staje się bardzo skomplikowany. Kolejnym powodem jest złożoność algorytmów EMSC, co sprawia, że czas potrzebny na wykonanie korekty jest zbyt długi.

Głównym celem tego projektu jest optymalizacja oraz implementacja nowych algorytmów opartych o EMSC, w celu korekty rozpraszania światła podczas obrazowania w podczerwieni, co usprawni proces wyznaczania orientacji makromolekuł w przestrzeni w oparciu o absorpcję światła spolaryzowanego. W tym celu, zaimplementowana niedawno w formie otwartego kodu nowa wersja EMSC, dostosowana zostanie do obliczeń na wielordzeniowych platformach, takich jak procesory graficzne oraz superkomputery Cyfronetu AGH. Te zabiegi powinny znacznie skrócić czas obliczeń dla próbek tkanek. Dodatkowo zaimplementowany zostanie algorytm EMSC do korekty próbek o cylindrycznym kształcie, co sprawdzi się idealnie w przypadku tkanki włóknistej. Tkanka włóknista jest bogata we włókna kolagenowe, które mają cylindryczny kształt i perfekcyjnie nadają się do wyznaczenia orientacji molekuł stosując absorpcję światła o różnej polaryzacji.