

Mikrokrople zawiesin są wszechobecne – ostatnio stało się to oczywiste w szczególnie nieprzyjemny sposób, ponieważ wiele z nich przenosi materiał biologicznie aktywny, jakim są na przykład wirusy. Dlatego też, z zapałem poszukuje się efektywnych, szybkich i możliwie bezkontaktowych metod charakteryzowania/rozpoznawania mikrokropeł. Panuje powszechne przekonanie, że metody wykorzystujące rozpraszanie światła spójnego na mikrokroplach mogą stanowić doskonałe i elastyczne narzędzie. Obrazy rozproszeniowe pochodzące z mikrokropeł zawiesiny składają się z plamek. Przestrzenny rozkład plamek zależy od właściwości kropli (wielkość, kształt, współczynnik załamania światła) i jej struktury wewnętrznej. Niestety, metody rozproszeniowe wymagają zazwyczaj rozwiązywania tzw. odwrotnego zagadnienia rozpraszania, które jest trudne matematycznie. W przypadku złożonych, parujących lub kondensujących mikrokropeł, rozwiązywanie problemu odwrotnego w czasie rzeczywistym staje się wyjątkowo trudne. Możliwe wydaje się jednak zupełnie inne podejście – obrazy rozproszeniowe można klasyfikować w czasie rzeczywistym bezpośrednio za pomocą uczenia maszynowego – sztucznych sieci neuronowych. Oczywiście, należy najpierw zrozumieć dynamikę struktury wewnętrznej mikrokropki i powiązać ją ze zjawiskami rozpraszania.

Nadrzędnym celem projektu jest zbudowanie optyczno-numerycznego systemu, wykorzystującego uczenie maszynowe, do szybkiego rozpoznawania zawiesin w postaci mikrokropeł, co w przyszłości może umożliwić wykrywanie mikrokropeł aerozoli przenoszących określone patogeny. Celem pośrednim jest identyfikacja, metodami bezkontaktowymi i kontaktowymi, możliwych scenariuszy ewolucji rozkładu nanocząstek w mikrokropki i powiązanie ich z obrazami rozproszeniowymi obserwowanymi w eksperymentach.

Badano już możliwość zastosowania uczenia maszynowego do optycznej identyfikacji mikrocząstek aerozoli, ale jak dotąd liczba rozpoznawanych klas mikrocząstek była ograniczona do zaledwie kilku, co należy uznać za niewystarczające dla zamierzonego zastosowania. W naszych eksperymentach na zawiesinach nanocząstek w cienkiej kuwecie wykazaliśmy, że nawet ponad 100 typów zawiesin może być szybko zidentyfikowanych poprzez klasyfikację obrazów rozproszeniowych za pomocą tzw. konwolucyjnej sieci neuronowej. Wydaje się to bardzo obiecujące z punktu widzenia docelowego narzędzia, zatem opracowanie sieci neuronowej na potrzeby projektu będzie bazować na tym doświadczeniu. Należy jednak pamiętać, że rozkład nanocząstek w mikrokroplach jest zazwyczaj niejednorodny. Mikrokrople obserwowane w warunkach naturalnych zazwyczaj ewoluują – parują lub kondensują, co prowadzi do ewolucji rozkładu nanocząstek, a to z kolei może prowadzić do powstania nietrywialnej wewnętrznej (nano)struktury. Ponadto, mikrokropka stanowi optyczny mikrorezonator – wnękę rezonansową, która bardzo istotnie modyfikuje rozkład światła rozpraszane przez zawiesinę w porównaniu do próbki w objętości (kuwety). Wreszcie, wiadomo, że tworzenie głębokich sieci neuronowych jest samo w sobie pracą eksperymentalną – w dużym stopniu metodą prób i błędów. W związku z tym, w trakcie realizacji tego projektu należy zająć się trzema głównymi kwestiami: (i) ustalenie możliwych rozkładów nanocząstek w mikrokropki, (ii) jednoznaczne skojarzenie ich z klasami obrazów rozproszeniowych, (iii) skonstruowanie i wytrenowanie dedykowanej sieci neuronowej.

Zdalne, optyczne badanie złożonej mikrokropki jest trudnym zadaniem. W przypadku kropeł większych, szczególnie tam, gdzie optyka geometryczna lub fizyczna może coś podpowiedzieć, istnieją uznane techniki, takie jak (cyfrowa) holografia in-line lub refraktometria tęczowa, które mogą dostarczyć dość dokładnych informacji. Refraktometria tęczowa pozwala przy pewnych założeniach wyznaczyć średni radialny rozkład współczynnika załamania światła. Daje to z kolei podstawę do wnioskowania o rozkładzie składników.

Grupy z Instytutu Fizyki PAN oraz UKSW w Warszawie włączyły się w wysiłek naukowy w dziedzinie zdalnego optycznego badania cząstek, opracowując szereg metod badania powierzchni i częściowo struktury wewnętrznej mikrokropki zawiesiny. Nasze metody opierają się głównie na analizie przestrzennego rozkładu (ewolucji) obrazu interferencyjnego światła rozproszonego przez (jednorodną) kulę. Dzięki szczegółowej analizie ewolucji szybkości parowania (również w języku termodynamiki powierzchniowej) oraz rezonansów morfologicznych (mikrorezonatora optycznego) w wielu przypadkach byliśmy w stanie wywnioskować jak ewoluuje skład/struktura powierzchni kropli. W pułapkach elektrodynamicznych badaliśmy mikrokrople zawierające nanokulki krzemionkowe, surfaktanty i fulereny – naśladujące aerozole atmosferyczne zawierające pył pustynny, sadzę i detergenty. Dokonaliśmy również wielu spostrzeżeń przeprowadzając symulacje numeryczne agregacji nanocząstek w parującej kropli oraz wykorzystując skaningową mikroskopię elektro-nową końcowych produktów ewolucji mikrokropeł – suchych agregatów nanocząstek.

Trzeba jednak przyznać, że opracowane do tej pory metody są mało nieskuteczne, jeśli chodzi o rozkład nanocząstek w głębi (w objętości) mikrokropki. Aby temu zaradzić, zaczęliśmy eksperymentować z nanopróbnikami luminescencyjnymi oraz dynamicznym rozpraszaniem światła (DLS) w mikrokroplach i uzyskaliśmy obiecujące wyniki. Nanopróbniki luminescencyjne wydają się szczególnie atrakcyjne, ponieważ mogą oświetlać wnętrze mikrokropki, podczas gdy światło sprzężone z mikrokropką z zewnątrz pozostaje przeważnie tuż pod jej powierzchnią. W trakcie realizacji projektu planujemy rozwijanie tej metody, być może w połączeniu z DLS. Jeśli okaże się skuteczna, liczba zidentyfikowanych typów rozkładów nanocząstek w mikrokropki wzrośnie, a tym samym powiększy się liczba dostępnych klas obrazów rozproszeniowych do treningu sieci neuronowych.