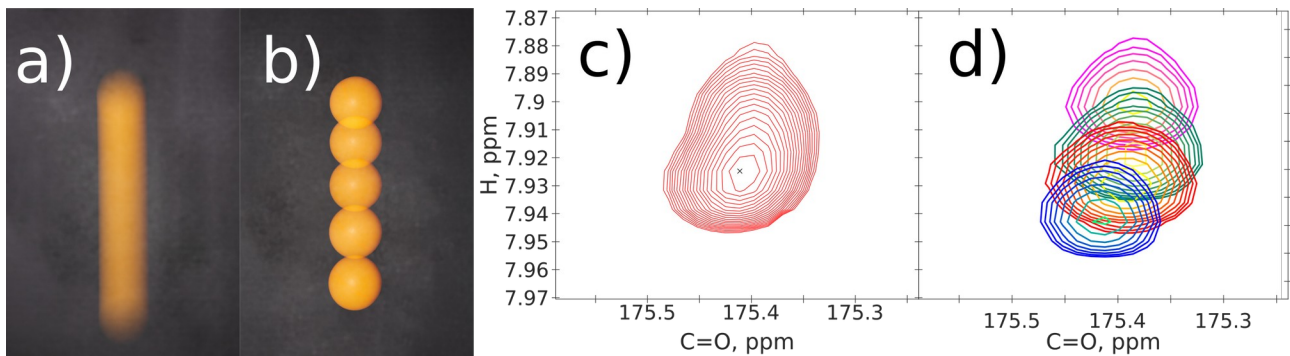


Istoty żywe odkrywają otaczającą je rzeczywistość za pomocą różnorodnych zmysłów, od wzroku po detektory pola magnetycznego. Ludzie posługują się w tym celu coraz bardziej zaawansowanymi sztucznymi narzędziami – do uzyskiwania obrazu służą nam mikroskopy, do badania stanu zdrowia - różnorakie testy chemiczne i skanery, nawet parkowanie samochodu ułatwiają piszczące czujniki ultradźwiękowe. Wszystkie wymienione urządzenia opierają się na rejestracji pewnego *sygnału* pośrednio związanego z wielkościami, które chcemy zmierzyć. Co ważne, gdy chcemy badać szybkie procesy, sygnał musi być szybko rejestrowany i przetwarzany. Jest to duży problem ograniczający możliwości zastosowania wielu precyzyjnych, choć czasochłonnych technik. Należy do nich spektroskopia jądrowego rezonansu magnetycznego (NMR).

NMR wykorzystuje magnetyczne właściwości niektórych jąder atomowych, np. jądra atomu wodoru, i możliwość wzbudzenia tych jąder za pomocą promieniowania elektromagnetycznego, gdy znajdują się one w silnym polu magnetycznym. Sygnałem NMR są fale radiowe wysyłane przez próbkę, gdy wraca ona do stanu równowagi po wzbudzeniu. Częstości rezonansowe zakodowane w sygnale są związane ze strukturą cząsteczek i mogą stanowić ich „odcisk palca”. Niestety, sygnał NMR jest stosunkowo słaby i często trzeba mierzyć go przez wiele godzin, aby uzyskać odpowiedni stosunek sygnału do szumu. To zupełnie jak w fotografii, gdzie przy słabym świetle musimy rejestrować obraz dłużej. Podobnie jak w fotografii, problem czułości ogranicza zastosowanie metody w monitorowaniu szybkich procesów gdzie „migawki” muszą być krótkie – długie naświetlanie powoduje „rozmazanie” obrazu w fotografii i analogiczną deformację widm NMR.



Obrazy i piki widmowe w kontekście niestacjonarnym i stacjonarnym (szeregowym): a) zdjęcie spadającej kuli wykonane z długim czasem ekspozycji; b) seria szybkich obrazów stroboskopowych tej samej kuli; c) pik A66N-H-L65C w widmie 3D HNCOCY ludzkiej osteopontyny uzyskany przy wzroście temperatury próbki podczas akwizycji; oraz d) ten sam pik w serii szybkich widm 3D HNCOCY.

Szczególnie cennym źródłem informacji jest wielowymiarowa spektroskopia NMR, w której rejestruje się sygnał będący funkcją kilku zmiennych czasowych. Niestety, jest ona jeszcze bardziej czasochłonna, ze względu na długotrwały proces próbkowania „dodatkowych” wymiarów. Choć wielowymiarowy NMR pozwala badać strukturę i dynamikę bardzo dużych cząsteczek, takich jak białka czy kwasy nukleinowe, to zastosowanie go do rejestracji „migawek” w monitorowaniu procesów jest bardzo utrudnione. Próba zarejestrowania takiego sygnału NMR dla próbki, w której np. przebiega reakcja chemiczna lub następują dynamiczne zmiany cząsteczki makromolekuły, da nam wynik bardzo niezadowolający – obraz zmian będzie „rozmazany” jeszcze bardziej niż w klasycznych pomiarach.

Warto jednak zwrócić uwagę, że rozmazany obraz zawiera kompletną informację o ruchu fotografowanego obiektu. W ostatnich latach, dzięki metodom uczenia maszynowego, demonstrowane są coraz bardziej spektakularne przykłady „odkodowywania” filmu z rozmazanych zdjęć o stosunkowo długim czasie naświetlania. Zastosowanie podobnych technik w spektroskopii NMR pozwoliłoby używać jej w nowatorskich badaniach szybkich procesów – na przykład dynamiki białek, przebiegu reakcji chemicznych czy procesów zachodzących w bateriach. Niniejszy projekt proponuje rozwój metod takiego „niestacjonarnego NMR” w oparciu o nowoczesne sieci neuronowe i nieszablonowe sposoby rejestracji sygnału. Jego powodzenie pozwoliłoby na szersze niż obecnie użycie NMR jako narzędzia w badaniach procesów chemicznych i fizycznych.