

Zaawansowane podejścia obrazowania i charakteryzacji złożonych próbek wykorzystujące zalety wybranych metod spektroskopowych, chromatograficznych i chemometrycznych

Łukasz Pieszczek

W pracy doktorskiej zaproponowano i opisano kilka strategii, umożliwiających rozwiązanie złożonych problemów analitycznych poprzez łączenie tanich, szybkich i nieinwazyjnych metod analitycznych z nowoczesnymi podejściami uczenia maszynowego. Techniki uczenia maszynowego, mimo swego dużego potencjału, nadal nie są powszechne w laboratoriach i grupach badawczych. Badania prowadzone w ramach doktoratu koncentrowały się na opracowaniu nowych, nieinwazyjnych metod charakteryzacji heterogenicznych próbek, będących złożoną mieszaniną różnorodnych związków chemicznych. W badaniach użyto nowoczesnej techniki obrazowania hiperspektralnego, która rejestruje widma w zakresie bliskiej podczerwieni (NIR-HSI), standardowej techniki spektroskopowej z zakresu bliskiej podczerwieni (NIR) i metody chromatografii cienkowarstwowej (TLC). Korzystając z synergii tych technik, jak również projektując nowatorskie chemometryczne sposoby interpretacji danych instrumentalnych, wprowadzono rozwiązania ułatwiające badania wieloskładnikowych, heterogenicznych chemicznie próbek.

Materiałem badawczym były między innymi próbki mięsa, próbki odpadów z tworzyw polimerowych i surowców polimerowych oraz próbki tuszy barwnych. Próbki o różnym pochodzeniu i charakterystyce pozwoliły potwierdzić nie tylko skuteczność, ale również uniwersalność zaproponowanych strategii analitycznych. Wybrane próbki i im podobne regularnie trafiają do laboratoriów, w których są szczegółowo analizowane lub kontrolowane pod kątem jakości w taki sposób, aby wykryć partie produktu niezgodne z oczekiwaniami producenta lub konsumenta.

Prace badawcze realizowane w ramach doktoratu miały dwa cele. Pierwszym z nich było opracowanie bardziej efektywnych sposobów charakteryzowania złożonych próbek. Przy czym poprzez zwiększenie efektywności rozumie się obniżenie zarówno kosztów, czasu pomiaru oraz analizy, jak i rozszerzenie możliwości, jakie oferuje dostępne wyposażenie laboratoryjne, jeśli zostanie wsparte proponowanymi przeze mnie nowoczesnymi metodami przetwarzania i interpretacji danych. Drugim celem było zniwelowanie niektórych wad wybranych metod i procesów analitycznych. Sam proces przetwarzania próbek (między innymi roztwarzanie, oczyszczanie, homogenizacja, ekspozycja próbki na działanie analitycznych odczynników chemicznych) jest często głównym źródłem błędów laboratoryjnych. Uproszczenie lub usunięcie etapu przygotowania próbki może prowadzić do większej skuteczności wielu analiz laboratoryjnych. Jednocześnie samo przetwarzanie próbki prowadzi do usunięcia części informacji, która bywa kluczowa do identyfikacji materiału laboratoryjnego i rozwiązania problemu analitycznego. Zaproponowane podejścia ograniczają te problemy, a także wykorzystują część danych instrumentalnych, które są powszechnie ignorowane w toku procesu analitycznego, do bardziej szczegółowej charakteryzacji próbki laboratoryjnej.