

dr Krzysztof Kazimierczuk
Uniwersytet Warszawski
Centrum Nowych Technologii
Laboratorium Spektroskopii NMR
ul. Banacha 2C
02-089 Warszawa

**Autoreferat do wniosku o nadanie stopnia naukowego doktora
habilitowanego**

Warszawa, 17 maja 2016

1 Imię i nazwisko: Krzysztof Kazimierczuk

2 Informacje o posiadanych dyplomach i uzyskanych stopniach naukowych:

(a) **doktor nauk chemicznych (wyróżnienie)**, Wydział Chemii UW, Warszawa, 10.06.2009, Promotor: dr hab. Wiktor Koźmiński, prof. UW, tytuł rozprawy doktorskiej: “Metody szybkiej rejestracji widm NMR w badaniach strukturalnych”

(b) **magister fizyki (ocena: celujący)**, Wydział Fizyki UW, Warszawa, 5.04.2007, Promotorzy: dr hab. Ryszard Stolarski, prof. UW, i dr hab. Wiktor Koźmiński, prof. UW, tytuł pracy magisterskiej: “Transformata Fouriera dwóch zmiennych w pomiarach trójwymiarowych widm NMR”

(c) **magister chemii (ocena: bardzo dobry, wyróżnienie)**, Wydział Chemii UW, Warszawa, 16.06.2005, Promotor: dr hab. Wiktor Koźmiński, prof. UW, tytuł pracy magisterskiej: “Aktywna stabilizacja pola magnetycznego w spektrometrach NMR wysokiej zdolności rozdzielczej”

3 Informacje o dotychczasowym zatrudnieniu w jednostkach naukowych

(a) 1.11.2012-obecnie - Uniwersytet Warszawski, Centrum Nowych Technologii (adiunkt, kierownik Laboratorium Spektroskopii NMR)

(b) 1.02.2010 - 15.04.2011 - Post-doc w Szwedzkim Centrum NMR, Uniwersytet w Göteborgu, Szwecja.

(c) 1.11.2009-1.11.2012 - Uniwersytet Warszawski, Wydział Chemii (adiunkt)

4 Wskazanie osiągnięcia wynikającego z art. 16 ust. 2 ustawy z dnia 2003 r. o stopniach naukowych i tytule w zakresie sztuki (Dz.U. nr 65, poz. 595 ze zm.)

(a) **Tytuł osiągnięcia naukowego:** Monotematyczny cykl publikacji zatytułowany: “Rzadkie i prawie-rzadkie reprezentacje w problemach spektroskopii NMR”

(b) **Wykaz publikacji naukowych stanowiących podstawę osiągnięcia naukowego:**

(1) K. Kazimierczuk and V.Yu. Orekhov. Accelerated NMR spectroscopy by using compressed sensing. *Angewandte Chemie - International Edition*, 50(24):5556–5559, 2011

Mój wkład w powstanie tej pracy polegał na implementacji algorytmów IRLS i IST w środowisku MATLAB, wykonaniu symulacji, przetworzeniu danych z eksperymentów NMR i ich analizie statystycznej. Napisałem również część manuskryptu. Mój wkład oceniam na 70%. **IF(2011)=13,455 liczba cytowań=90**

(2) K. Kazimierczuk and V.Yu. Orekhov. A comparison of convex and non-convex compressed sensing applied to multidimensional NMR. *J. Magn. Reson.*, 223:1–10, 2012

Mój wkład w powstanie tej pracy polegał na opracowaniu koncepcji badań, wykonaniu symulacji, przetworzeniu danych z eksperymentów NMR i ich analizie statystycznej. Napisałem również 50% manuskryptu. Kierowałem projektem IUVENTUS PLUS, z którego współfinansowane były badania. Jestem autorem korespondencyjnym pracy. Mój wkład oceniam na 80%. **IF(2012)=2,300 liczba cytowań=13**

(3) M. Misiak, W. Koźmiński, K. Chmurski, and K. Kazimierczuk. Study of near-symmetric cyclodextrins by compressed sensing 2D NMR. *Magnetic Resonance in Chemistry*, 51(2):110–115, 2013

Mój wkład w powstanie tej pracy polegał na opracowaniu części koncepcji pracy, wykonaniu eksperymentów, przetworzeniu danych i analizie efektywności metody na ich podstawie. Napisałem również część manuskryptu. Kierowałem projektem IUVENTUS PLUS, z którego współfinansowane były badania. Jestem autorem korespondencyjnym pracy. Mój wkład oceniam na 40%. **IF(2013)=1,528 liczba cytowań=3**

(4) M. Urbańczyk, D. Bernin, W. Koźmiński, and K. Kazimierczuk. Iterative thresholding algorithm for multiexponential decay applied to PGSE NMR data. *Analytical Chemistry*, 85(3):1828–1833, 2013

Mój wkład w powstanie tej pracy polegał na opracowaniu części koncepcji pracy (pomysł użycia regularyzacji rzadkiej) i części analizy efektywności metody. Napisałem również część manuskryptu. Kierowałem projektem IUVENTUS PLUS, z którego współfinansowane były badania. Jestem autorem korespondencyjnym pracy. Mój wkład oceniam na 30%. **IF(2013)=5,825 liczba cytowań=2**

(5) K. Kazimierczuk, O. Lafon, and P. Lesot. Criteria for sensitivity enhancement by compressed sensing: Practical application to anisotropic NAD 2D-NMR spectroscopy. *Analyst*, 139(11):2702–2713, 2014

Mój wkład w powstanie pracy polegał na opracowaniu koncepcji teoretycznej części pracy, wykonaniu symulacji oraz przetworzeniu i analizie danych eksperymentalnych. Kierowałem projektem IUVENTUS PLUS i SONATA BIS 2 z których współfinansowane były badania. Jestem autorem korespondencyjnym pracy. Mój wkład oceniam na 60 %. **IF(2014)=4,107 liczba cytowań=8**

(6) Mateusz Urbańczyk and Krzysztof Kazimierczuk. A method for joint sparse sampling of time and gradient domains in diffusion-ordered NMR spectroscopy. In *Signal Processing Symposium (SPS), 2013*, pages 1–6. IEEE, 2013

Mój wkład w powstanie tej pracy polegał na opracowaniu części koncepcji pracy (pomysł użycia regularyzacji rzadkiej) i części analizy efektywności metody. Napisałem również część manuskryptu. Kierowałem projektem HARMONIA i SONATA BIS 2 z których współfinansowane były badania. Jestem autorem korespondencyjnym pracy. Mój wkład oceniam na 50%. **IF(2013)=0 liczba cytowań=0**

(7) M. Urbańczyk, W. Koźmiński, and K. Kazimierczuk. Accelerating diffusion-ordered NMR spectroscopy by joint sparse sampling of diffusion and time dimensions. *Angewandte Chemie - International Edition*, 53(25):6464–6467, 2014

Mój wkład w powstanie tej pracy polegał na opracowaniu części koncepcji pracy (pomysł użycia regularyzacji rzadkiej), wykonaniu części eksperymentów i części ana-

lize efektywności metody. Napisałem również część manuskryptu. Kierowałem projektem HARMONIA i SONATA BIS 2, z których współfinansowane były badania. Jestem autorem korespondencyjnym pracy. Mój wkład oceniam na 35%. **IF(2014)=11,261 liczba cytowań=2**

(8) W. Bermel, R. Dass, K.-P. Neidig, and K. Kazimierczuk. Two-dimensional NMR spectroscopy with temperature-sweep. *ChemPhysChem*, 15(11):2217–2220, 2014

Mój wkład w powstanie tej pracy polegał na opracowaniu koncepcji badań, wykonaniu symulacji i przygotowaniu algorytmów przetwarzania danych. Napisałem również dużą część manuskryptu. Kierowałem projektami IUVENTUS PLUS i SONATA BIS 2, z których współfinansowane były badania. Jestem autorem korespondencyjnym pracy. Mój wkład oceniam na 70%. **IF(2014)=3,419 liczba cytowań=2**

(9) M. Mayzel, K. Kazimierczuk, and V.Yu. Orekhov. The causality principle in the reconstruction of sparse NMR spectra. *Chemical Communications*, 50(64):8947–8950, 2014

Mój wkład w powstanie tej pracy polegał na opracowaniu części teorii, wykonaniu i analizie symulacji i przygotowaniu algorytmów przetwarzania danych z części pracy dotyczących compressed sensing. Kierowałem projektami IUVENTUS PLUS i SONATA BIS 2, z których współfinansowane były badania. Jestem autorem korespondencyjnym pracy. Mój wkład oceniam na 40%. **IF(2014)=6,834 liczba cytowań=8**

(10) K. Kazimierczuk and P. Kasprzak. Modified OMP algorithm for exponentially decaying signals. *Sensors (Switzerland)*, 15(1):234–247, 2014

Mój wkład w powstanie tej pracy polegał na opracowaniu części teorii dotyczącej bezpośrednio spektroskopii NMR oraz wykonaniu i analizie danych eksperymentalnych. Napisałem również część manuskryptu. Jestem autorem korespondencyjnym pracy. Mój wkład oceniam na 50%. **IF(2014)=2,245 liczba cytowań=2**

(11) Rupashree Dass, Wiktor Kozminski, and Krzysztof Kazimierczuk. Analysis of complex reacting mixtures by time-resolved 2D NMR. *Analytical Chemistry*, 87(2):1337–1343, 2015

Mój wkład w powstanie tej pracy polegał na opracowaniu koncepcji badań, wykonaniu części eksperymentów i przygotowaniu części algorytmów przetwarzania danych. Napisałem również część manuskryptu. Kierowałem projektami IUVENTUS PLUS i SONATA BIS 2, z których współfinansowane były badania. Jestem autorem korespondencyjnym pracy. Mój wkład oceniam na 50%.

IF(2014)=5,636 liczba cytowań=3

(12) A. Piai, L. Gonnelli, I. C. Felli, R. Pierattelli, K. Kazimierczuk, K. Grudziąż, W. Koźmiński, and A. Zawadzka-Kazimierczuk. Amino acid recognition for automatic resonance assignment of intrinsically disordered proteins. *Journal of Biomolecular NMR*, pages 1–15, 2016

Mój wkład w powstanie tej pracy polegał na przeprowadzeniu serii rekonstrukcji widm NMR za pomocą algorytmów CS. Wkład oceniam na 10%. **IF(2014)=3,141 liczba cytowań=0**

(13) R. Dass, P. Kasprzak, W. Koźmiński, and K. Kazimierczuk. Artifacts in time-resolved NUS: A case study of NOE build-up curves from 2D NOESY. *Journal of magnetic resonance*, 265:108–116, 2016

Mój wkład w powstanie tej pracy polegał na opracowaniu koncepcji badań, wykonaniu części eksperymentów i przygotowaniu części algorytmów przetwarzania danych. Napisałem również część manuskryptu. Kierowałem projektem SONATA BIS 2, z którego współfinansowane były badania. Jestem autorem korespondencyjnym pracy. Mój wkład oceniam na 40%. **IF(2014)=2,51 liczba cytowań=0**

(14) M. Urbańczyk, D. Bernin, A. Czuroń, and K. Kazimierczuk. Monitoring polydispersity by NMR diffusometry with tailored norm regularisation and moving-frame processing. *The Analyst*, 141(5):1745–1752, 2016

Mój wkład w powstanie tej pracy polegał na opracowaniu koncepcji badań (użycie regularyzacji “wygładzających”). Napisałem również część manuskryptu. Kierowałem projektami SONATA BIS 2 i HARMONIA, z których współfinansowane były badania. Jestem autorem korespondencyjnym pracy. Mój wkład oceniam na 30%. **IF(2014)=4,107 liczba cytowań=0**

Sumaryczny impact factor monotematycznego cyklu publikacji wchodzącego w skład rozprawy habilitacyjnej według listy Journal Citation Reports, zgodnie z rokiem opublikowania: 59,534

(c) **Omówienie celu naukowego w/w prac i osiągniętych wyników wraz z omówieniem ich ewentualnego wykorzystania**

Przez cały okres kariery naukowej związany byłem z Uniwersytetem Warszawskim (UW) i działającymi w jego ramach ośrodkami spektroskopii NMR. Studia magisterskie w Kolegium Międzywydziałowych Studiów Matematyczno-Przyrodniczych UW pozwoliły mi zdobyć wiedzę z dziedzin chemii i fizyki.

W 2005 roku obroniłem na Wydziale Chemii UW pracę magisterską dotyczącą opracowania układu stabilizacji pola magnetycznego w spektrometrach NMR (promotor: dr hab. Wiktor Koźmiński). Z czasem okazało się, że znalazł on zastosowanie nie tylko w laboratorium NMR WCh UW, ale także w kilku laboratoriach w Europie, m.in. na Politechnice w Bratysławie, w Instytucie Pasteura w Paryżu, Instytucie Chemii Organicznej w Madrycie czy laboratorium aplikacyjnym firmy Varian w Darmstadt. Ostatecznie w 2013 technologię kupiła firma Agilent.

W 2007 roku obroniłem na Wydziale Fizyki UW pracę magisterską z dziedziny biofizyki dotyczącą właściwości transformacji Fouriera niejednorodnie próbkowanych sygnałów NMR (promotorzy: prof. dr hab. Ryszard Stolarski i prof. dr hab. Wiktor Koźmiński).

W 2009 roku obroniłem na Wydziale Chemii UW pracę doktorską z dziedziny chemii fizycznej dotyczącą metod szybkiej spektroskopii NMR w badaniach strukturalnych (promotor: prof. dr hab. Wiktor Koźmiński). Praca opisywała sposób przyspieszenia czasochłonnych eksperymentów NMR w oparciu o podpróbkowanie sygnału w pośrednio mierzonych wymiarach eksperymentu wielowymiarowego. Na badania składały się: opracowanie teoretycznego związku pomiędzy kształtem linii widmowych, a próbkowaniem spiralnym, radialnym, koncentrycznym oraz losowym; optymalizacja tego ostatniego; opracowanie technik wysokowymiarowych w oparciu o losowe próbkowanie oraz zastosowania ich w badaniach białek. Szczególnie imponującym przykładem zastosowań była opublikowana w *JACS* metoda pomiaru niewielkich stałych sprzężenia w białkach za pomocą techniki HNCO- C_{α} -coupled. Z perspektywy czasu widać, że prowadzone w

tamtym czasie w grupie prof. Koźmińskiego prace (w tym moja) sprawiły, że UW jest obecnie rozpoznawalnym na świecie ośrodkiem tworzenia metodologii NMR.

Po obronie pracy doktorskiej w maju 2009 roku zostałem zatrudniony na stanowisku adiunkta na Wydziale Chemii UW i rozpocząłem starania o staż podoktorski. W lutym 2010 roku wyjechałem do Szwedzkiego Centrum NMR w Göteborgu, gdzie rozpocząłem pracę w grupie prof. Vladislava Orekhova. Mój pobyt był początkowo finansowany z grantu firmy Bruker (producenta spektrometrów NMR), a następnie z programu KO-LUMB Fundacji na rzecz Nauki Polskiej.

Prace, które prowadziłem w Szwecji, stanowiły początek serii badań składających się na przedstawiane tutaj osiągnięcie naukowe. Dotyczyły one możliwości wykorzystania w spektroskopii NMR tzw. skompresowanego próbkowania (ang. *compressed sensing*, *CS*). Ideą CS jest wykorzystanie faktu kompresowalności obiektu na etapie jego pomiaru (próbkowania), a nie dopiero na etapie zapisu i przechowywania danych. Ideę tę najłatwiej zrozumieć na przykładzie fotografii cyfrowej. Aparat cyfrowy dokonuje próbkowania obrazu za pomocą matrycy zawierającej miliony pikseli, co stanowi dość duży zbiór danych (min. kilka MB). Jednakże, fotografia rzadko jest zapisywana w surowym formacie, a częściej poddawana jest kompresji do pliku *png* lub *jpg*, który zawiera jedynie najważniejsze komponenty obrazu poddanego pewnej transformacji (np. falkowej) i zwykle nie przekracza setek kB. Oszczędne próbkowanie w fotografii polega na ograniczeniu pomiaru do zbioru danych o rozmiarze zbliżonym do rozmiaru skompresowanego obiektu. Pomiar wykonywany jest za pomocą układu optycznego dokonującego mieszania sygnału (światła) dochodzącego z losowo wybranych punktów mierzonego obiektu i detektora, którym może być matryca podobna do standardowej, ale składająca się z pojedynczego piksela (M. F. Duarte et al. IEEE Signal Processing Magazine (2008)).

W spektroskopii NMR również mamy do czynienia z obiektami kompresowalnymi, ponieważ widmo da się zazwyczaj jednoznacznie opisać przez podanie współrzędnych pików, ewentualnie również ich wysokości i szerokości połówkowych. Pików jest zwykle nie więcej niż kilkaset, a zatem zawarta w widmie informacja stanowi nie więcej niż kilka kB, podczas gdy surowe dane (sygnał swobodnego zaniku indukcji lub jego widmo) to zestawy danych o rozmiarach od kilku do setek MB. W miarę postępowania prac okazało się, że kompresja może znaleźć zastosowanie również w tzw. spektroskopii dyfuzyjnej (*diffusion-ordered spectroscopy*, *DOSY*), a także zostać ulepszona w celu lepszego dopasowania do właściwości widm NMR.

Prace wchodzące w skład niniejszego wniosku o nadanie stopnia doktora habilitowanego dotyczą implementacji rozwiązań z dziedziny CS w spektroskopii NMR i mogą być podzielone na pięć grup: (i) bezpośrednie zastosowanie metod CS znanych z innych dziedzin (prace (1) i (2)), (ii) zastosowania opracowanych rozwiązań w badaniach chemicznych (3)(12), (iii) wykorzystanie kompresowalności widm w pomiarach dyfuzyjnych (4)(6)(7)(14), (iv) opracowanie dedykowanych metod CS dla widm NMR (5),(9),(10), (v) techniki czasorozdzielcze oparte na przetwarzaniu danych za pomocą CS (8)(11)(13).

Głównym celem prowadzonych przeze mnie badań było:

- Zbadanie możliwości zastosowania w spektroskopii NMR algorytmów CS znanych z innych dziedzin i wykorzystujących fakt istnienia ściśle rzadkiej reprezentacji

sygnału. Istnienie takiej możliwości nie było oczywiste, ponieważ widmo NMR nie jest ściśle rzadkie (idealnie kompresowalne).

- Opracowanie możliwości dostosowania algorytmów CS do widm NMR, przez: wzmocnienie rzadkości widma, dopasowanie gęstości próbkowania do relaksacji sygnału NMR (i określenie granic stosowalności tego zabiegu w przypadku CS) oraz wykorzystanie Lorentzowskiego kształtu pików.
- Wykorzystanie kompresowalności widma w eksperymentach dyfuzyjnych przez regularyzację rzadką odwrotnej transformacji Laplace'a, jej modyfikację polegającą na dostosowaniu do próbek polidispersyjnych polimerów oraz łączoną transformację Fouriera i Laplace'a dla eksperymentów trójwymiarowych z wymiarem dyfuzyjnym.
- Opracowanie teorii i technik czasorozdzielczych opartych o niejednorodne, losowe próbkowanie połączone z rekonstrukcją CS. Przeniesienie idei do eksperymentów dyfuzyjnych.

Magnetyczne właściwości jąder o niezerowym spinie (np. ^1H , ^{13}C , ^{15}N , ^{31}P etc.) leżą u fizycznych podstaw spektroskopii NMR. W klasycznym eksperymencie NMR spiny są polaryzowane stałym polem magnetycznym o wysokiej indukcji i wzbudzone za pomocą promieniowania elektromagnetycznego o częstotliwości radiowej. Emisja sygnału, zwanego sygnałem Swobodnego Zaniku Indukcji (*ang. Free Induction Decay, FID*), następuje podczas powrotu do stanu równowagi. Sygnał FID tworzy suma gasnących oscylacji, o liczbie odpowiadającej liczbie grup jąder atomowych różniących się otoczeniem elektronowym (tzw. ekranowanie). Zatem, z analizy widma sygnału NMR można wyciągnąć informacje o budowie cząsteczki.

Pomiar sygnału FID następuje w sposób dyskretny tzn. jest on próbkowany przy użyciu przetwornika analogowo-cyfrowego. Wynikiem pomiaru jest wektor próbek \mathbf{s} , zaś jego widmo \mathbf{S} stanowi rozwiązanie układu równań.

$$\hat{\mathbf{F}}\mathbf{S} = \mathbf{s} \quad (1)$$

gdzie $\hat{\mathbf{F}}$ jest macierzą odwrotnej transformacji Fouriera, \mathbf{s} sygnałem FID, zaś \mathbf{S} jego widmem.

Układ równań (1) jest rozwiązywalny w sytuacji, gdy $\hat{\mathbf{F}}$ jest macierzą pełnego rzędu, co odpowiada próbkowaniu zgodnemu z teorematem o próbkowaniu sformułowanym niezależnie przez Nyquista, Shannona, Kotelnikova i innych. Teoremat ten głosi, że można odtworzyć sygnał o skończonym widmie z dyskretnego zestawu próbek, o ile częstotliwość próbkowania jest większa lub równa dwukrotności najwyższej częstotliwości tego sygnału. Drugim warunkiem rozwiązania równania (1) jest, aby liczba równań była równa liczbie niewiadomych. Warunek ten wiąże rozdzielczość widma z długością wektora \mathbf{s} (liczbą próbek sygnału).

Badanie skomplikowanych mieszanin i makromolekuł przy użyciu NMR stało się możliwe w latach siedemdziesiątych XX wieku, dzięki stworzeniu koncepcji spektroskopii wielowymiarowej. W eksperymentach wielowymiarowych rejestrowany jest sygnał par (2D), trójek (3D) itd. jąder, połączonych oddziaływaniem fizycznym (na przykład sprzężeniem dipolowym lub skalarnym). Dodatkowe wymiary zwiększają rozdzielczość widma -

każdemu pikowi odpowiada w nim co najmniej para częstości (w 2D), co czyni koordynaty bardziej unikatowymi, niż w przypadku 1D.

Wprowadzenie dodatkowych wymiarów prowadzi do znacznego wzrostu czasu eksperymentu, ponieważ na każdy punkt czasu w wymiarach pośrednio mierzonych przypada kilka sekund czasu “rzeczywistego”. W rezultacie czas ten wiąże się z rozdzielczością uzyskanego widma. Związek ten nazywa się czasem zasadą nieoznaczoności Fouriera. W efekcie, mimo długotrwałych eksperymentów rozdzielczość widma daleka jest od uwarunkowanej wyłącznie relaksacją (szerokością połówkową linii Lorentzowskiej).

Od połowy lat osiemdziesiątych stworzono wiele metod tzw. *fast NMR spectroscopy*, pozwalających przyspieszyć eksperyment wielowymiarowy. Najczęściej stosowanym podejściem jest tzw. niejednorodne próbkowanie (*non-uniform sampling*, NUS), znane również jako próbkowanie losowe lub oszczędne. W metodach NUS omija się w trakcie pomiaru znaczną liczbę punktów czasu, a następnie rekonstruuje je za pomocą algorytmów obliczeniowych.

Metody opisane w ramach referowanego tutaj cyklu prac oparte są na NUS i przetwarzaniu danych za pomocą najnowocześniejszej grupy algorytmów, zwanej skompresowanym próbkowaniem (*compressed sensing*, CS). Cechą tego podejścia jest solidna teoria matematyczna, co odróżnia CS od wielu stosowanych dawniej półempirycznych metod.

Główny teoremat CS głosi, że do dokładnej rekonstrukcji pominiętych w pomiarze punktów sygnału potrzebny jest znacznie mniejszy zestaw danych, niż określa to klasyczny teoremat o próbkowaniu oraz że NUS stanowi optymalny sposób uzyskania tych danych. Aby możliwa była rekonstrukcja przy użyciu CS, sygnał musi posiadać *rzadką* reprezentację, tj. taką, która składa się w dużej części z zer. Widmo NMR, jako obiekt kompresowalny do listy pików, stanowi taką właśnie reprezentację sygnału FID.

Działanie CS można zrozumieć rozważając układ równań (1) z wektorem \mathbf{s} będącym próbkami pośrednio mierzonych wymiarów N-wymiarowego sygnału FID. W podejściu NUS liczba równań jest mniejsza od liczby niewiadomych (elementów \mathbf{S}), a zatem rozwiązań układu równań jest nieskończenie wiele. Wybór jednego z nich możliwy jest po przyjęciu dodatkowych założeń. Teoria CS pokazuje, że założenie, że \mathbf{S} cechuje się minimalną normą ℓ_1 ¹ jest równoważne założeniu, że reprezentacja widmowa jest rzadka (tj. ma również minimalną normę ℓ_0 , której bezpośrednia minimalizacja jest jednakże bardzo złożonym zagadnieniem kombinatorycznym). W metodzie CS widmo \mathbf{S} znajduje się więc za pomocą minimalizacji funkcjonału:

$$\min_{\mathbf{S}} \|\hat{\mathbf{F}} \cdot \mathbf{S} - \mathbf{s}\|_{\ell_2} + \lambda \cdot \|\mathbf{S}\|_{\ell_p} \quad (2)$$

Norma w drugim członie równania jest zazwyczaj normą ℓ_1 , gdyż wtedy minimalizowana funkcja ma jedno globalne minimum. Użycie norm ℓ_p ($0 < p < 1$) teoretycznie pozwala uzyskać rekonstrukcję z mniejszej liczby próbek, ale minimalizowana funkcja staje się niewypukła.

W mojej pierwszej pracy o użyciu CS w spektroskopii NMR [1] zweryfikowałem metodę dla kilku przypadków dwuwymiarowych widm białek ubikwityny ludzkiej i azuryny.

¹normą ℓ_p w przestrzeni współrzędnych nazywamy funkcję postaci: $|\mathbf{x}|_p = (|x_1|^p + |x_2|^p + \dots + |x_n|^p)^{\frac{1}{p}}$

Użytymi technikami były: 2D ^{15}N HSQC, 2D DQF COSY, 2D NOESY. Pierwsza z nich, dająca najbardziej kompresowalne widma (zawierające najmniej pików), umożliwiła sprawdzenie zachowania algorytmu dla bardzo niskiego poziomu próbkowania oraz porównanie efektywności popularnych algorytmów: minimalizującego normę ℓ_1 (*iterative soft thresholding, IST*) oraz normę ℓ_p (*iteratively re-weighted least squares, IRLS*). Dla tak prostego widma obydwie metody dały podobny wynik. W przypadku widma 2D NOESY obserwowana była znaczna różnica w zbieżności, na korzyść IRLS. Widmo NOESY, charakteryzuje się dużym zakresem intensywności pików i stanowi duże wyzwanie dla metod *fast NMR*. Analiza dokładności odtworzenia intensywności pików, będących najważniejszymi danymi uzyskiwanymi z widm NOESY, pokazała dobrą zgodność z wynikami uzyskanymi z pełnego próbkowania. Widmo 2D DQF COSY posłużyło jako przykład pomiaru NMR o niestandardowym kształcie sygnału FID (zaczynającego się od zera) i linii widmowych (multiplety w antyfazie). Metoda IRLS doskonale poradziła sobie z jego rekonstrukcją z około 30% danych.

Praca [1] miała charakter komunikatu i stanowiła jedynie przyczynek do dalszych prac. Jasne stało się, że należy dokładniej przeanalizować wydajność badanych algorytmów, poprawić ich szybkość, rozszerzyć na widma o wyższej wymiarowości oraz sprawdzić działanie w mniej i bardziej standardowych przypadkach. Jako ciekawostkę warto dodać, że praca o niemal identycznym tytule (*Fast Multidimensional NMR Spectroscopy Using Compressed Sensing*) została wysłana przez grupę Daniela Hollanda z Cambridge do tego samego pisma zaledwie 3 dni po naszej (18.01.2011 vs 15.01.2011). Świadczy to, jak gorący był temat zastosowań CS w tamtym czasie.

Po sukcesie pierwszej pracy i powrocie do Polski zdecydowałem się aplikować o grant IUVENTUS PLUS na rozwój metody. Otrzymałem go i realizowałem w latach 2011-2014.

Druga praca z przedstawionego cyklu dotyczyła rozszerzonej analizy wydajności algorytmów IST i IRLS, czyli dwóch podejść do problemu CS - opartego na minimalizacji funkcjonału o jednym minimum (norma ℓ_1 , algorytm IST) i wielu minimach lokalnych (norma ℓ_p , algorytm IRLS). Ponadto, zawierała ona porównanie z niezwiązaną z CS metodą wielowymiarowej dekompozycji (*multidimensional decomposition, MDD*). Analizę przeprowadziłem w oparciu o widma: a) 2D ^{15}N HSQC, b) 3D ^{15}N -edited NOESY-HSQC i c) 3D HNC0, a także "bezszybowe" symulacje widm różniących się (podobnie jak wymienione widma eksperymentalne) rozkładem intensywności punktów widmowych (*distribution of spectral magnitude, DoSM*). Widmo a) charakteryzowało się szerokim *DoSM* i (zgodnie z obserwacjami poczynionymi w innych niż NMR dziedzinach) użycie algorytmów IST i IRLS dawało podobny rezultat, zaś niewielka kompresowalność (rzadkość) widma 2D nie pozwalała zejść nisko z poziomem próbkowania. W przypadku b), charakteryzującym się wąskim *DoSM*, ale dużym zakresem intensywności pików, IRLS wygrywał z IST zarówno pod względem zbieżności, jak i jakości wyniku dla niskiego poziomu próbkowania, choć metoda MDD wciąż dawała lepszy rezultat. Dla widma c), o wąskim *DoSM* i niewielkim zakresie intensywności pików, IRLS okazywało się być najlepszą i dostępną metodą przetwarzania danych, przewyższając IST zarówno zbieżnością jak i jakością rekonstrukcji przy niskich poziomach próbkowania. Wnioski z pracy pozwoliły wybrać optymalny algorytm dla przyszłych zastosowań. Został nim IRLS, poza przypadkami dużych zestawów danych 3D, gdzie okazał się być zbyt wymagający obliczeniowo.

W listopadzie 2012 roku, po ukazaniu się publikacji [2] rozpocząłem pracę w Centrum Nowych Technologii UW.

Wnioski z pracy [2] znalazły zastosowanie w badaniach chemicznych modyfikowanej cyklodekstryny, opisanych w pracy [3]. Badany związek, mono(6-deoxy-6-(1-1,2,3-triazo-4-yl)-1-propano-3-O-(fenylo))- β -CD, powstał przez modyfikację chemiczną (funkcjonalizację) jednej z reszt cukrowych cyklodekstryny i charakteryzował się “prawie-symetryczną cząsteczką”, tzn. łamiący symetrię “ogon” miał bardzo nieznaczny wpływ na zniesienie pełnej degeneracji przesunięć chemicznych charakterystycznej dla niefunkcjonalizowanej β -CD. Dlatego, przypisanie widma cząsteczki wymagało bardzo wysokiej rozdzielczości, która może być osiągnięta jedynie w bardzo długim (dwudziestogodzinnym) pomiarze widma 2D ^{13}C HSQC oraz równie długich 2D ^{13}C HSQC-TOCSY i 2D ^{13}C HSQC-NOESY. Przyczyny są czysto matematyczne - wymaganie gęstego próbkowania (duży zakres widmowy dla wymiaru ^{13}C) oraz “sięgnięcia” daleko w przestrzeń czasu ewolucji ^{13}C . Prowadzą one do konieczności pomiaru 10 000 punktów w wymiarze ^{13}C . W pracy pokazałem, że rekonstrukcja CS z zaledwie 512 punktów daje równie dobry wynik, pozwalając przeprowadzić niezbędne pomiary w jedną noc, zamiast w 60 godzin. Oprócz analizy liniowości odtworzenia intensywności, przeprowadziłem również analizę wierności odtworzenia położenia pików.

W maju 2013 roku otrzymałem grant SONATA BIS 2 na utworzenie zespołu rozwijającego teorię i zastosowania CS-NMR, ze szczególnym uwzględnieniem adaptacji metody do właściwości widm NMR (np. faktu, że widma NMR nie są ściśle rzadkie).

Praca [4] otwierała nowy kierunek zastosowań regularyzacji rzadkiej, tj. użycie jej w przetwarzaniu danych ze spektroskopii dyfuzyjnej oraz spektroskopii “dyfuzjo-rozdzielczej” (*diffusion-ordered spectroscopy*, *DOSY*). Eksperyment dyfuzyjny zawiera wymiar pośredni w którym sygnał zanika wykładniczo z szybkością proporcjonalną do szybkości dyfuzji własnej danej cząsteczki w próbce. Metoda ta jest czasem wykorzystywana do pomiaru wartości współczynnika dyfuzji, częściej jednak do rozdzielania widma mieszaniny związków na “pod-widma” każdego z nich z osobna. Problemem jest jednak odkodowanie wykładnika zaniku eksponencjalnego; odwrotna transformacja Laplace’a (ILT), którą stosuje się w tym celu, jest procedurą niezwykle niestabilną numerycznie i wymaga regularyzacji. W pracy (4) zaproponowałem użycie tutaj wymuszającego rzadkość rozwiązania wariantu ℓ_1 regularyzacji Tikhonova, dzięki któremu rozwiązywany problem przybierał postać podobną do opisywanej równaniem 2:

$$\min_{\mathbf{A}} \|\Phi\mathbf{A} - \Psi\|_{\ell_2}^2 + \tau\|\mathbf{A}\|_{\ell_1} \quad (3)$$

gdzie \mathbf{A} jest rozkładem współczynników dyfuzji, Φ operatorem ILT, zaś Ψ mierzonym sygnałem. Problem można rozwiązać za pomocą algorytmów identycznych z tymi stosowanymi dla transformacji Fouriera i NUS. Rozwiązania zaimplementował i porównał z innymi metodami mgr Mateusz Urbańczyk, pierwszy autor publikacji (4). Te i inne wyniki mgr Urbańczyk przedstawi w swojej pracy doktorskiej, której jestem promotorem pomocniczym. Badania doświadczalne przeprowadziliśmy na próbkach mieszanin polimerów politlenku etylenu o różnych masach cząsteczkowych. Wnioski z pracy były obiecujące - algorytm FISTA (szybszy wariant IST) dawał lepsze odtworzenie względnej wysokości pików w wymiarze dyfuzyjnym niż stosowane wcześniej regularyzacje normą

ℓ_2 czy maksymalizacją entropii. Jedyłą jego wadą była możliwość powstania fałszywych pików w przypadku próbek polidispersyjnych tzn. charakteryzujących się szerokim profilem rozkładu współczynników dyfuzji. Tym problemem zajęliśmy się później, w pracy [14].

Kolejna publikacja wykonana została we współpracy z francuskim zespołem, którą nawiązałem podczas sympozjum NMR w Instytucie Chemii Organicznej PAN. Dotyczyła często dyskutowanego aspektu NUS, mianowicie możliwości wzmocnienia czułości pomiaru dzięki próbkowaniu dopasowanemu do relaksacji sygnału, tj. gęstszemu w początkowej części FID. Istniał szereg prac pokazujących ten efekt (np. Rovnyak et al., Magn. Reson. Chem., 2011), jednak nie rozważały one ograniczeń algorytmów rekonstrukcyjnych w przypadku próbkowania o gęstości gasnącej wykładniczo ze zbyt dużą stałą zaniku. W pracy [5] wykorzystałem założenia teorii CS, aby sformalizować te ograniczenia. Teoria pokazuje, że najbardziej skuteczne jest próbkowanie czysto losowe, a wszelkie odchylenia od niego, takie jak próbkowanie gasnące wraz z sygnałem, mogą powodować problemy w rekonstrukcji. Własność podpróbkowanej macierzy $\hat{\mathbf{F}}$ znana jako *restricted isometry property* (RIP) pozwala ocenić, czy dane próbkowanie daje szansę na dokładne odtworzenie wszystkich K -rzadkich wektorów \mathbf{S} . Im mniejsze są stałe izometryczne δ_K^{min} i δ_K^{max} w nierówności spełnionej dla takich wektorów:

$$(1 - \delta_K^{min}) \|\mathbf{S}\|_{\ell_2}^2 \leq \|\hat{\mathbf{F}} \cdot \mathbf{S}\|_{\ell_2}^2 \leq (1 + \delta_K^{max}) \|\mathbf{S}\|_{\ell_2}^2 \quad (4)$$

tym większa jest szansa dokładnej rekonstrukcji za pomocą CS. Gwarancja rekonstrukcji wszystkich wektorów K -rzadkich jest bardzo niewielka, gdyż wymaga $(4\sqrt{2} - 3)\delta_{2K}^{min} + \delta_{2K}^{max} < 4(\sqrt{2} - 1)$. Jednak nawet jeśli ten warunek nie jest spełniony, wartości stałych izometrycznych dobrze odzwierciedlają "jakość" próbkowania. Pewną trudnością jest obliczenie ich, jednak jest to możliwe przy użyciu zaawansowanych algorytmów. Jeden z nich wykorzystano w pracy do pokazania, że schematy próbkowania o silnie zanikających gęstościach dają wysokie wartości stałych izometrycznych. Pokazałem również, jak wyglądają błędy rekonstrukcji przy użyciu takiego próbkowania (fałszywe rozszczepienia pików w widmie) oraz jak znaleźć optimum pomiędzy wzmocnieniem stosunku sygnału do szumu przy użyciu "gasnącego próbkowania", a zaburzeniami rekonstrukcji. Optymalne próbkowanie zostało wykorzystane w autokorelacyjnych eksperymentach dwuwymiarowych, w których współautorzy pracy rejestrowali sygnał deuteru ze związków chiralnych umieszczonych w chiralnym ciekłym kryształ PBLG, w celu rozdzielenia widm enancjomerów. Eksperymenty charakteryzowały się niską czułością, gdyż były prowadzone na związkach nie wzbogaconych w deuter. Zastosowanie optymalnego NUS i rekonstrukcji CS pozwoliło uzyskać widma lepsze niż otrzymane z klasycznego próbkowania.

W lipcu 2013 roku otrzymałem grant HARMONIA na współpracę z dr Dianą Bernin ze Szwedzkiego Centrum NMR w Göteborgu. Celem projektu było zbadanie możliwości stworzenia dyfuzyjnych technik NMR do badania mieszanin metabolitów.

W pracach [6] i [7] zajmowałem się realizacją koncepcji połączonego, jednoczesnego próbkowania niejednorodnego przestrzeni sygnału poddawanej ILT (np. zaniku dyfuzyjnego) i tej poddawanej FT. Rzut oka na równania 2 i 3 pozwala zaproponować następujące sformułowanie funkcjonału, którego minimalizacja pozwoli szybko i dokładnie uzyskać widmo w eksperymentach takich jak 3D HSQC-DOSY. Postać funkcjonału przedstawia

się następująco:

$$\min_{\mathbf{Q}} \|\mathbf{P}\mathbf{Q} - \mathbf{q}\|_{\ell_2}^2 + \tau \|\mathbf{Q}\|_{\ell_1}$$

gdzie \mathbf{P} jest kombinowaną transformatą FT-ILT:

$$\mathbf{P} = \mathbf{F} \otimes \Phi$$

\mathbf{q} jest wektorem próbek pośrednio mierzonego wymiaru sygnału:

$$q(t_1, g) = \sum_{i=1}^N s_i(t_1) \otimes \Psi_i(g)$$

a \mathbf{Q} jego widmem.

Praca [6] była krótkim komunikatem na konferencji dotyczącej przetwarzania sygnałów, przedstawionym z nadzieją, że koncepcja może znaleźć szersze zastosowania poza NMR.

W pracy [7] pokazaliśmy zastosowanie metody do uzyskania widma trójwymiarowego z pośrednio mierzonymi wymiarami częstości i dyfuzji (3D HSQC-iDOSY), w których niejednorodnie próbkowano przestrzeń gradientów i czasu ewolucji. Wierność rekonstrukcji przetestowaliśmy na widmie mieszaniny czterech związków, które występują w próbkach metabolitów (cytrynian, tauryna, alanina, 2,4,6-trimetyloalanina) oraz na dwuskładnikowej próbce rutyny i kwercetyny, która, ze względu na podobieństwo tych związków charakteryzowała się degeneracją częstości rezonansowych i dopiero wspomniane widmo trójwymiarowe mogło je rozdzielić. Dość zaskakującym rezultatem było uzyskanie precyzji odtworzenia współczynników dyfuzji znacznie przewyższającej klasyczne podejście oparte na jednorodnym próbkowaniu przestrzeni czasu ewolucji, powtarzanym przy kilku wartościach gradientu kodującego dyfuzję. Przedstawiona przez nas metoda dawała wyniki lepsze niż trwający nawet $2.5 \times$ dłużej klasyczny eksperyment. Obecnie trwają prace nad wykorzystaniem techniki w pomiarach relaksacji białek.

Publikacja [8] była pierwszą z cyklu prac omawiających teorię i możliwe zastosowania czasorozdzielczego próbkowania niejednorodnego z przetwarzaniem CS. Podstawą metody jest prowadzenie próbkowania pośrednio mierzonych wymiarów eksperymentu dwu- i więcej- wymiarowego równoległe do przebiegającego w próbce procesu (przemiany chemicznej lub fizycznej), który wpływa na widmo. Ponieważ schemat próbkowania jest "potasowany", można podzielić go na równocenne, przekrywające się podzbiory i przeprowadzić rekonstrukcję CS z każdego z nich. W rezultacie otrzymuje się zestaw widm przypominających klatki filmu i tworzących pseudowymiar czasowy obrazujący zmiany próbki.

W pracy [8], na którą składały się badania prowadzone we współpracy z firmą Bruker Biospin, pokazaliśmy zastosowania metody do śledzenia procesu termicznego rozwijania białka. Równoległe do losowego próbkowania pośrednio mierzonego sygnału w eksperymencie 2D ^{15}N HSQC, zmienialiśmy temperaturę próbki w tempie około 1 K/min (szybkość pozwalająca unikać znaczących gradientów temperatury). Podział danych na podzestawy pozwalał w sposób niemal ciągły zobrazować zmiany przesunięć chemicznych oraz intensywności pików wynikające ze zmian struktury białka w szerokim przedziale

temperatur (293 K \rightarrow 338 K). Dane uzyskane dla białka ubikwityny ludzkiej i domeny SH3 białka spektryny z mózgu kurzego dobrze pokrywały się z widmami z serii klasycznych, konwencjonalnie próbkowanych eksperymentów 2D ^{15}N HSQC wykonanych przy stałych temperaturach. Zgodność była niemal idealna dla przesunięć chemicznych, ale nieco gorsza w przypadku intensywności pików. Efekt ten, wywołany dodatkowymi artefaktami czasorozdzielczego NUS, zbadaliśmy dokładniej w pracy [13]. W publikacji opisałem również problemy jakie mogą wiązać się z niewłaściwym doбором wielkości podzbioru danych, czyli tzw. "klatki". W przypadku klatek zbyt małych, otrzymuje się widmo o niskim stosunku sygnału do szumu oraz artefaktach pochodzących z rekonstrukcji NUS. W przypadku klatek zbyt dużych, problemem może być uśrednianie efektów (przesunięć pików i zmiany ich intensywności) po czasie, jaki potrzebny jest do zarejestrowania jednego podzbioru.

Adaptacja metod CS do widm NMR jest potrzebna, ze względu na fakt, iż widmo NMR nie jest idealnie kompresowalne. Składa się ono z pików o kształcie Lorentzowskim, więc nawet pojedynczy pik jest, ściśle rzecz biorąc, nieskończenie szeroki - w szczególności zaś jego część dyspersyjna. Pomysł optymalizacji CS oparty na eliminacji części urojonej widma przez skombinowanie podpróbkowanego sygnału FID z jego własnym "wirtualnym echem" (*Virtual Echo, VE*) tj. odbiciem i sprzężeniem, został przetestowany i rozwinięty we współpracy z zespołem prof. Vladislava Orekhova z Uniwersytetu w Göteborgu. Ja zająłem się jego implementacją w metodach CS oraz wytłumaczeniem jego działania w oparciu o koncepcję minimalizacji rzadkości. Wyniki zostały opisane w pracy [9]. Użycie VE znacznie poprawiło efektywność metod CS i pokrewnego SIFT (również opartego na koncepcji rzadkości, ale ze ściśle zdefiniowanymi regionami bez pików, patrz Matsuki et al. JACS, 2009, (13) 4648–4656), zwłaszcza dla niskich poziomów próbkowania. Jest to zgodne z teorią CS, która wiąże liczbę punktów próbkowania potrzebnych do idealnej rekonstrukcji z liczbą znaczących punktów widma, przy czym "znaczący" oznacza charakteryzujący się dużą wartością sumy modułów części rzeczywistej i urojonej. Użycie VE posiada jedno ograniczenie, a mianowicie wymaga znajomości ewentualnej poprawki fazowej sygnału w wymiarach, w których VE jest stosowane. W przypadku wymiarów pośrednio mierzonych faza zawsze jest jednak dobrze znana, o ile sekwencja impulsowa eksperymentu została prawidłowo zaimplementowana. Co ciekawe, koncepcja VE pozwoliła wytłumaczyć efekt, który zauważyłem już przy pierwszych testach algorytmów CS, a mianowicie, że jakość rekonstrukcji jest o wiele lepsza, jeśli wejściowy sygnał FID przedłuży się dwukrotnie zerami w każdym z rekonstruowanych wymiarów (*zerofilling*). Okazuje się, że każdy z algorytmów rekonstrukcji rzadkiej, w którego minimalizowanym funkcjonale występuje człon $\|\mathbf{S}\|_{\ell_p}$ (a więc zawierający część *Re* i *Im*), próbuje wyzerować część urojoną "konstruując" VE. Dlatego też uzasadnionym wydaje się dokonanie tego przed rekonstrukcją i zmniejszenie liczby niewiadomych w problemie rekonstrukcyjnym. VE posiada jeszcze dodatkowy atut w przypadku widm 3D+, pozwala mianowicie na rekonstrukcję wszystkich modulacji kwadraturowych (np. cosinus-cosinus, cosinus-sinus, sinus-cosinus i sinus-sinus w przypadku 3D) w jednym problemie minimalizacyjnym, tzn. wszystkie one mogą być odtworzone z odpowiednich składowych VE. W przypadku klasycznego przetwarzania i użycia bibliotek liczb zespolonych (a nie hiperzespolonych), trzeba sygnał 3D przetwarzać w dwóch krokach, odtwarzając osobno sygnał cosinus i sinus w jednym z wymiarów.

Publikacja [10] dotyczyła adaptacji jednej z najbardziej klasycznych metod CS, mianowicie algorytmu zachłannego *orthogonal matching pursuit* (OMP) do sygnałów gasnących, takich jak sygnał NMR. Standardowy wariant OMP rozpoczyna rekonstrukcję widma od wektora uzyskiwanego z bezpośredniej FT danych NUS, a następnie w każdej iteracji odnajduje najwyższy punkt takiego wektora i odejmuje od niego splot tego punktu z tzw. funkcją odpowiedzi punktowej (*point spread function, PSF*), czyli FT schematu próbkowania. Sam punkt dodawany jest do wektora wyjściowego. Od znanego w spektroskopii NMR algorytmu CLEAN (Högböm, Astron. Astrophys. Suppl., 1974; Barna et al., Journ. Magn. Reson., 1988) odróżnia go ortogonalizacja wyjściowych komponentów w każdej iteracji. Zarówno CLEAN jak i OMP nie są szczególnie efektywne w przypadku sygnałów NMR. Liczne optymalizacje CLEAN były znane w literaturze, ale nie opierały się one na formalizmie CS (a konkretnie na opisie matematycznym *matching pursuit* bez ortogonalizacji). W naszej pracy zaproponowaliśmy modyfikację OMP dostosowującą metodę do widm NMR. Modyfikacja polegała na dodaniu dodatkowego kroku w algorytmie, w którym wyszukiwana jest optymalna szerokość pików i splocie znalezione maksimum nie tylko z PSF, ale także z odpowiednią krzywą Lorentza. Algorytm Lorentzian Peak Matching Pursuit (LPMP), opracowany przez współautora pracy dr. Pawła Kasprzaka i dostosowany przeze mnie do widm NMR, został porównany przez nas z innymi metodami CS, m. in. IST, StOMP, COSAMP, OMP. Wszystkie z nich przewyższył jakością rekonstrukcji w przypadku widm składających się z pików lorentzowskich.

Praca [11] była drugą (po [8]) publikacją dotyczącą zastosowań czasorozdzielczego CS. Tym razem zbadaliśmy możliwość monitorowania reakcji wieloskładnikowych, naturalnych mieszanin fermentującego mleka i mąki za pomocą czasorozdzielczego widma 2D ^{13}C HSQC. Reakcje chemiczne różnią się od omawianego w [8] procesu wymuszonego temperaturą - nie można ich w łatwy sposób zatrzymać w celu przeprowadzenia klasycznego pomiaru. W tej sytuacji, dwuwymiarowy pomiar CS jest jedyną alternatywą dla serii widm jednowymiarowych, które jednak (jak pokazano w pracy [11]) nie posiadają wystarczającej rozdzielczości by śledzić nawet podstawowe produkty reakcji. W publikacji pokazaliśmy, że intensywności pików w widmie czasorozdzielczym dobrze odzwierciedlają przebieg reakcji. Ponadto fakt, że profile czasowe intensywności pików należących do substratów tej samej reakcji są skorelowane, pozwala na rozdzielenie widma mieszaniny na "pod-widma" składników. Podejście takie może być zatem dobrą alternatywą dla widm DOSY. Potrzebna jest jedynie adaptacja narzędzi statystycznej spektroskopii korelacyjnej (STOCSY), tak aby można było przetwarzać wydajnie ogromne zestawy danych. W tym celu planowane jest stworzenie algorytmów STOCSY operujących na pikach, zamiast na punktach widma.

Rozwój metod spektroskopii czasorozdzielczej opartej na NUS/CS jest głównym zadaniem projektu OPUS 9 "Czasorozdzielcza N-wymiarowa spektroskopia do monitorowania procesów fizycznych i chemicznych", który będzie realizowany w latach 2016-2018.

Publikacja [12] stanowi przykład efektywnego zastosowania CS, odmienny nieco od przedstawionego w [3], gdyż dotyczący widm białek. Jest to jednocześnie przypadek, gdzie zastosowanie CS jest szczególnie efektywne, ze względu na dobrą kompresowalność widm. Przedstawione w pracy techniki dwuwymiarowe służą selektywnemu wzbudzeniu sygnałów jąder wybranych aminokwasów w cząsteczkach badanego białka. W rezultacie, liczba pików w widmie jest bardzo niewielka i można je skutecznie odtworzyć z niewielkiego

zestawu danych.

W pracy [13] zająłem się problemem artefaktów występujących w widmach czasorozdzielczych z przetwarzaniem CS. Przypominają one szum, a ich przyczyną jest zmiana parametrów sygnału w czasie pomiaru. Efekt ten był wcześniej dokładnie omówiony dla widm klasycznie próbkowanych, gdzie prowadzi do zmiany kształtu pików przez splot z FT funkcji opisującej zmianę. W przypadku próbkowania “potasowanego” funkcja ta (i jej FT), niezależnie od przebiegu w czasie rzeczywistym, przybierają w funkcji czasu ewolucji kształt szumu. W publikacji zaprezentowałem teorię pozwalającą przewidzieć stosunek wysokości pików do poziomu tego szumu (artefaktów). Jako przykład weryfikujący teorię wybrałem widma 2D NOESY, w których wierne odtworzenie intensywności pików jest szczególnie ważne, ponieważ niosą one informację o odległościach między skorelowanymi jądrami. W przedstawionej technice NOESY z czasorozdzielczym CS czas ewolucji t_1 poddawany był potasowanemu NUS, zaś długość czasu mieszania zmieniała się liniowo. W ten sposób każdemu podzbiorowi zestawu danych odpowiadał pewien średni czas mieszania, a intensywność pików w funkcji tegoż tworzyła krzywą nabudowania efektu Overhausera (*nOe build-up curve*). W klasycznym podejściu taką funkcję uzyskuje się przez pomiar przynajmniej dwóch eksperymentów 2D NOESY z pełnym próbkowaniem, każdego przy innym (lecz stałym w danym eksperymencie) czasie mieszania. Nachylenie prostej dopasowanej do zmierzonych punktów wykresu intensywności pików w funkcji czasu mieszania pozwala wyznaczyć odległość między jądrami. Problemem mogą być jednak odchylenia od liniowości wynikające z dyfuzji spinowej i relaksacji. Jeśli zestaw danych składa się z zaledwie dwóch punktów, odchylenie takie może być nieuchwytnie. Dlatego zaproponowany eksperyment CS pozwala na uzyskanie w szybkim czasie bardziej kompletnych danych. O ich przewadze świadczył fakt, że odległości międzyjądrowe z dobrą dokładnością udawało się dobrze odtworzyć z liczby próbek znacząco mniejszej niż odpowiadająca dwóm widmom z pełnym próbkowaniem. Przykładowo, eksperyment 2D NOESY czasorozdzielczym NUS przeprowadzony na próbce strychniny w CDCl_3 ze zmianą czasu mieszania od 300 ms do 700 ms i próbkowaniem przy użyciu zaledwie 340 punktów pozwolił wyznaczyć odległości międzyjądrowe z ponad trzykrotnie mniejszym błędem, niż dwa klasyczne eksperymenty przy stałym czasie mieszania 300 i 700 ms (512 punktów). Przyczyną mógł być fakt, że 700 ms leżało w obszarze nieliniowej krzywej nOe, gdyż użycie klasycznych widm 300 i 600 ms pozwoliło osiągnąć wynik o jakości porównywalnej do uzyskanego z NUS. Świadczy to o niewielkim błędzie pomiarowym zaproponowanej metody oraz mniejszej jej podatności na błędy grube, takie jak przeszacowanie wielkości obszaru liniowości krzywej nOe. Najważniejszym osiągnięciem omawianej pracy nie było jednak zaprezentowanie nowej techniki NOESY, ale zweryfikowanie przy jej pomocy przewidywań dotyczących poziomu artefaktów związanych z czasorozdzielczym NUS. Jak się okazało, tendencja przewidziana teoretycznie i wiążąca stosunek pików do artefaktów z szybkością zmiany intensywności pików wewnątrz klatki znalazła dobre potwierdzenie w eksperymentach.

Ostatnia publikacja z prezentowanego cyklu [14], dotyczyła analizy możliwości “kontrolowanego” odejścia od regularyzacji rzadkiej w widmach w których piki charakteryzują się znaczną szerokością. Choć tego typu problemy można znaleźć również w wymiarach częstotliwościowych (np. w eksperymentach w cieple stałym), to jednak ze względu na zagadnienia, z jakimi mieliśmy do czynienia we współpracujących grupach, zdecydowałem

o opracowaniu rozwiązania dla odwrotnej transformacji Laplace'a (ILT) używanej w widmach dyfuzyjnych. Z poprzedniej pracy nt. regularyzacji rzadkiej w ILT [4] wiedziałem, że może ona powodować problemy ze sztucznym podziałem pików w przypadku widm próbek polidispersyjnych, tzn. charakteryzujących się szerokim (i nieznanym) rozkładem współczynników dyfuzji związanym z dużym zakresem mas cząsteczkowych. W pracy [14] przypomniany został matematyczny dowód, iż użycie w członie regularyzacyjnym równania 3 norm wyższych niż 1 prowadzi do "wygładzania" wyniku. Zatem, w przypadku próbek polidispersyjnych użycie takiej regularyzacji może pozwolić na wierniejsze odtworzenie widma. Oczywiście, w przypadku gdy rzeczywisty rozkład współczynników dyfuzji nie jest znany, nie jest znana również optymalna norma ℓ_p ($1 \leq p \leq 2$). Zaproponowaliśmy prostą, lecz skuteczną metodę jej znalezienia przez powtórzenie rekonstrukcji dla różnych wartości normy i wybór tej, która dawała najlepsze dopasowanie po stronie sygnału. Dwa eksperymentalne testy nowego rozwiązania wykazały jego skuteczność. Pierwszy, opierał się na pomiarze widm serii syntetycznych próbek polimerów politlenku etylenu o różnych profilach dyfuzji - zarówno średnim współczynniku, jak i szerokości jego rozkładu. Okazało się, że wartość p dobrze koreluje się z tym ostatnim parametrem. Drugi test polegał na przeprowadzeniu reakcji, w której zmienia się polidispersyjność próbki i jej monitorowaniu za pomocą eksperymentu podobnego do czasorozdzielczego NUS, ale zawierającego potasowane próbkowanie gradientów kodujących dyfuzję. W eksperymencie tym heparyna o dużej masie cząsteczkowej ulegała wielogodzinnej reakcji rozkładu pod wpływem enzymu heparynazy. Rozkład powodował powstanie mniejszych fragmentów o dość przypadkowej wielkości, a przez to zmianę zarówno średniego współczynnika dyfuzji (zmniejszenie), jak również szerokości jego rozkładu (zwiększenie). W pracy pokazaliśmy, że szybkości zmian obu tych wielkości są skorelowane ze sobą, jak również z szybkością narastania w widmie ^1H NMR pików innego produktu reakcji tj. kwasu uronowego.

Podsumowanie najważniejszych osiągnięć związanych z zaprezentowanym cyklem publikacji:

- Udowodnienie możliwości zastosowań algorytmów CS w rekonstrukcji widm NMR z niepełnych danych oraz pokazanie ich zastosowań w badaniach małych cząsteczek oraz makromolekuł
- Opracowanie modyfikacji metod CS w celu dostosowania do sygnału NMR - próbkowanie dopasowane do relaksacji (ocena granic stosowalności), *virtual echo*, algorytm *LPMP*
- Zastosowanie regularyzacji rzadkiej w eksperymentach dyfuzyjnych oraz kombinowane próbkowanie w transformacie FT/ILT
- Opracowanie teorii i technik czasorozdzielczych dla eksperymentów korelacyjnych homo- i heterojądrowych oraz dyfuzyjnych.

Znaczenie osiągnięć dla rozwoju spektroskopii NMR:

- Powstałe algorytmy zostały zaimplementowane w darmowym programie MddNMR oraz stanowią moduł NUS programu TopSpin obsługującego spektrometrię firmy Bruker, największej na świecie firmy z branży NMR.
- Algorytmy są używane przez setki laboratoriów na świecie, przy czym spośród spektakularnych zastosowań warto wymienić:

- T. Wauer, M. Simicek, A. Schubert, and D. Komander. Mechanism of phospho-ubiquitin-induced parkin activation. *Nature*, 524(7565):370–374, 2015
- T. Didenko, A. Proudfoot, S.K. Dutta, P. Serrano, and K. Wüthrich. Non-Uniform Sampling and J-UNIO Automation for Efficient Protein NMR Structure Determination. *Chemistry - A European Journal*, 21(35):12363–12369, 2015
- J. Saurí, N. Marcó, R.T. Williamson, G.E. Martin, and T. Parella. Extending long-range heteronuclear NMR connectivities by HSQMBC-COSY and HSQMBC-TOCSY experiments. *Journal of Magnetic Resonance*, 258:25–32, 2015
- Christina M Thiele and Wolfgang Bermel. Speeding up the measurement of one-bond scalar (1J) and residual dipolar couplings (1D) by using non-uniform sampling (NUS). *J Magn Reson*, 216:134–143, 2012
- Stworzyłem zespół naukowy w Centrum Nowych Technologii zajmujący się tworzeniem dedykowanych rozwiązań NMR dla współpracujących z nami grup chemicznych i biologicznych
- Doprowadziłem do powstania spółki spin-off z udziałem UW Spektrino Sp. z o.o., w której jestem Prezesem Zarządu. Spółka zajmuje się komercjalizacją opracowywanych rozwiązań, np. w chwili obecnej współtworzy serwer umożliwiający przetwarzanie danych NUS w przyjazny użytkownikowi sposób.

5 Omówienie pozostałych osiągnięć naukowo-badawczych

Po ukończeniu studiów doktoranckich brałem jeszcze przez pewien czas udział w pracach nad rozwojem opracowanej w ich ramach metody opartej na bezpośredniej transformacji Fouriera sygnału NUS. Metoda ta, w przeciwieństwie do CS, nie próbowała rekonstruować niemierzonych punktów sygnału, ale zakładała, że są one równe zero. Zaletą metody jest duża wydajność obliczeniowa, co predestynuje ją do zastosowań w dużych zestawach danych, np. widmach wysokowymiarowych (4D+). Wadę zaś stanowią przypominające szum artefakty, których źródłem jest wspomniane zgrubne założenie o punktach sygnału pominiętych przy pomiarze. Każdy pik w widmie jest spleciony z wspomnianą powyżej funkcją odpowiedzi punktowej (PSF).

Powstające artefakty przypominają szum nie tylko wyglądem, ale również właściwościami, np. stosunek wysokości pojedynczego pików do poziomu “splecionych z nim” artefaktów skaluje się z pierwiastkiem liczby punktów próbkowania (patrz praca [i]). Oznacza to, że tak prosta metoda przetwarzania danych jest często w zupełności wystarczająca w przypadku eksperymentów wysokowymiarowych, w których i tak, ze względu na niską czułość, trzeba zebrać dużo punktów pomiarowych. Wyjątek stanowią widma typu TOCSY lub NOESY o dużym zakresie intensywności pików. Jednakże w przypadku widm służących np. przypisaniu sygnałów szkieletu białka bezpośrednia transformacja Fouriera daje duże możliwości. Nowe eksperymenty tego typu zostały opisane w pracach [i, iv, v]. Ponadto, że względu na fakt, że nie próbujemy rekonstruować pełnego sygnału, można ograniczyć widmo do obszarów w których spodziewamy się pików. Na takim zabiegu opiera się technika Sparse Multidimensional Fourier Transform (SMFT) opisana w pracy (iii).

Oprócz prac nad rozwojem technik wysokowymiarowych, byłem współautorem kilku prac przeglądowych dotyczących nowych metod przetwarzania sygnału NMR opartych

na oszczędnym próbkowaniu [iii,vi,vii,x,xi]. Realizowałem również standardowe pomiary NMR, np. opisane w pracy (vii).

W czasie pracy w Centrum Nowych Technologii UW zostałem zwolniony z obowiązków dydaktycznych, ale powierzono mi zadanie organizacji laboratorium NMR od podstaw, tzn. zdobycie funduszy na opłacanie zespołu, utrzymanie aparatury, urządzenie pomieszczeń w nowowypbudowanym budynku oraz re-instalację spektrometru Varian 700 MHz działającego wcześniej na Wydziale Chemii UW. Wszystkie te zadania realizowałem z sukcesem - zespół liczy obecnie sześć osób finansowanych z grantów, a zestaw aparatury wkrótce powiększy się o mini-spektrometr typu benchtop.

dr Krzysztof Kazimierczuk
Uniwersytet Warszawski
Centrum Nowych Technologii
Laboratorium Spektroskopii NMR
ul. Banacha 2C
02-089 Warszawa

**Wykaz opublikowanych prac naukowych lub twórczych prac
zawodowych oraz informacja o osiągnięciach dydaktycznych,
współpracy naukowej i popularyzacji nauki**

Warszawa, 17 maja 2016

1 Wykaz opublikowanych prac naukowych lub twórczych prac zawodowych oraz informacja o osiągnięciach dydaktycznych, współpracy naukowej i popularyzacji nauki

(a) Wykaz publikacji stanowiących osiągnięcie naukowe, o którym mowa w art.ust. 2 ustawy

(A) Tytuł osiągnięcia naukowego: “Rzadkie i prawie-rzadkie reprezentacje w problemach spektroskopii NMR”

(B) Publikacje wchodzące w skład osiągnięcia naukowego:

(1) K. Kazimierczuk and V.Yu. Orekhov. Accelerated NMR spectroscopy by using compressed sensing. *Angewandte Chemie - International Edition*, 50(24):5556–5559, 2011

Mój wkład w powstanie tej pracy polegał na implementacji algorytmów IRLS i IST w środowisku MATLAB, wykonaniu symulacji, przetworzeniu danych z eksperymentów NMR i ich analizie statystycznej. Napisałem również część manuskryptu. Mój wkład oceniam na 70%. **IF(2011)=13,455 liczba cytowań=90**

(2) K. Kazimierczuk and V.Yu. Orekhov. A comparison of convex and non-convex compressed sensing applied to multidimensional NMR. *J. Magn. Reson.*, 223:1–10, 2012

Mój wkład w powstanie tej pracy polegał na opracowaniu koncepcji badań, wykonaniu symulacji, przetworzeniu danych z eksperymentów NMR i ich analizie statystycznej. Napisałem również 50% manuskryptu. Kierowałem projektem IUVENTUS PLUS, z którego współfinansowane były badania. Jestem autorem korespondencyjnym pracy. Mój wkład oceniam na 80%. **IF(2012)=2,300 liczba cytowań=13**

(3) M. Misiak, W. Koźmiński, K. Chmurski, and K. Kazimierczuk. Study of near-symmetric cyclodextrins by compressed sensing 2D NMR. *Magnetic Resonance in Chemistry*, 51(2):110–115, 2013

Mój wkład w powstanie tej pracy polegał na opracowaniu części koncepcji pracy, wykonaniu eksperymentów, przetworzeniu danych i analizie efektywności metody na ich podstawie. Napisałem również część manuskryptu. Kierowałem projektem IUVENTUS PLUS, z którego współfinansowane były badania. Jestem autorem korespondencyjnym pracy. Mój wkład oceniam na 40%. **IF(2013)=1,528 liczba cytowań=3**

(4) M. Urbańczyk, D. Bernin, W. Koźmiński, and K. Kazimierczuk. Iterative thresholding algorithm for multiexponential decay applied to PGSE NMR data. *Analytical Chemistry*, 85(3):1828–1833, 2013

Mój wkład w powstanie tej pracy polegał na opracowaniu części koncepcji pracy (pomysł użycia regularyzacji rzadkiej) i części analizy efektywności metody. Napisałem również część manuskryptu. Kierowałem projektem IUVENTUS PLUS, z którego współfinansowane były badania. Jestem autorem korespondencyjnym pracy. Mój wkład oceniam na 30%. **IF(2013)=5,825 liczba cytowań=2**

(5) K. Kazimierczuk, O. Lafon, and P. Lesot. Criteria for sensitivity enhancement by compressed sensing: Practical application to anisotropic NAD 2D-NMR spectroscopy. *Analyst*, 139(11):2702–2713, 2014

Mój wkład w powstanie pracy polegał na opracowaniu koncepcji teoretycznej części pracy, wykonaniu symulacji oraz przetworzeniu i analizie danych eksperymentalnych. Kierowałem projektem IUVENTUS PLUS i SONATA BIS 2 z których współfinansowane

były badania. Jestem autorem korespondencyjnym pracy. Mój wkład oceniam na 60 %. **IF(2014)=4,107 liczba cytowań=8**

(6) Mateusz Urbańczyk and Krzysztof Kazimierczuk. A method for joint sparse sampling of time and gradient domains in diffusion-ordered NMR spectroscopy. In *Signal Processing Symposium (SPS), 2013*, pages 1–6. IEEE, 2013

Mój wkład w powstanie tej pracy polegał na opracowaniu części koncepcji pracy (pomysł użycia regularyzacji rzadkiej) i części analizy efektywności metody. Napisałem również część manuskryptu. Kierowałem projektem HARMONIA i SONATA BIS 2 z których współfinansowane były badania. Jestem autorem korespondencyjnym pracy. Mój wkład oceniam na 50%. **IF(2013)=0 liczba cytowań=0**

(7) M. Urbańczyk, W. Koźmiński, and K. Kazimierczuk. Accelerating diffusion-ordered NMR spectroscopy by joint sparse sampling of diffusion and time dimensions. *Angewandte Chemie - International Edition*, 53(25):6464–6467, 2014

Mój wkład w powstanie tej pracy polegał na opracowaniu części koncepcji pracy (pomysł użycia regularyzacji rzadkiej), wykonaniu części eksperymentów i części analizy efektywności metody. Napisałem również część manuskryptu. Kierowałem projektem HARMONIA i SONATA BIS 2, z których współfinansowane były badania. Jestem autorem korespondencyjnym pracy. Mój wkład oceniam na 35%. **IF(2014)=11,261 liczba cytowań=2**

(8) W. Bermel, R. Dass, K.-P. Neidig, and K. Kazimierczuk. Two-dimensional NMR spectroscopy with temperature-sweep. *ChemPhysChem*, 15(11):2217–2220, 2014

Mój wkład w powstanie tej pracy polegał na opracowaniu koncepcji badań, wykonaniu symulacji i przygotowaniu algorytmów przetwarzania danych. Napisałem również dużą część manuskryptu. Kierowałem projektami IUVENTUS PLUS i SONATA BIS 2, z których współfinansowane były badania. Jestem autorem korespondencyjnym pracy. Mój wkład oceniam na 70%. **IF(2014)=3,419 liczba cytowań=2**

(9) M. Mayzel, K. Kazimierczuk, and V.Yu. Orekhov. The causality principle in the reconstruction of sparse NMR spectra. *Chemical Communications*, 50(64):8947–8950, 2014

Mój wkład w powstanie tej pracy polegał na opracowaniu części teorii, wykonaniu i analizie symulacji i przygotowaniu algorytmów przetwarzania danych z części pracy dotyczących compressed sensing. Kierowałem projektami IUVENTUS PLUS i SONATA BIS 2, z których współfinansowane były badania. Jestem autorem korespondencyjnym pracy. Mój wkład oceniam na 40%. **IF(2014)=6,834 liczba cytowań=8**

(10) K. Kazimierczuk and P. Kasprzak. Modified OMP algorithm for exponentially decaying signals. *Sensors (Switzerland)*, 15(1):234–247, 2014

Mój wkład w powstanie tej pracy polegał na opracowaniu części teorii dotyczącej bezpośrednio spektroskopii NMR oraz wykonaniu i analizie danych eksperymentalnych. Napisałem również część manuskryptu. Jestem autorem korespondencyjnym pracy. Mój wkład oceniam na 50%. **IF(2014)=2,245 liczba cytowań=2**

(11) Rupashree Dass, Wiktor Kozminski, and Krzysztof Kazimierczuk. Analysis of complex reacting mixtures by time-resolved 2D NMR. *Analytical Chemistry*, 87(2):1337–1343, 2015

Mój wkład w powstanie tej pracy polegał na opracowaniu koncepcji badań, wykonaniu części eksperymentów i przygotowaniu części algorytmów przetwarzania danych. Napisa-

łem również część manuskryptu. Kierowałem projektami IUVENTUS PLUS i SONATA BIS 2, z których współfinansowane były badania. Jestem autorem korespondencyjnym pracy. Mój wkład oceniam na 50%.

IF(2014)=5,636 liczba cytowań=3

(12) A. Piai, L. Gonnelli, I. C. Felli, R. Pierattelli, K. Kazimierczuk, K. Grudziąż, W. Koźmiński, and A. Zawadzka-Kazimierczuk. Amino acid recognition for automatic resonance assignment of intrinsically disordered proteins. *Journal of Biomolecular NMR*, pages 1–15, 2016

Mój wkład w powstanie tej pracy polegał na przeprowadzeniu serii rekonstrukcji widm NMR za pomocą algorytmów CS. Wkład oceniam na 10%. **IF(2014)=3,141 liczba cytowań=0**

(13) R. Dass, P. Kasprzak, W. Koźmiński, and K. Kazimierczuk. Artifacts in time-resolved NUS: A case study of NOE build-up curves from 2D NOESY. *Journal of magnetic resonance*, 265:108–116, 2016

Mój wkład w powstanie tej pracy polegał na opracowaniu koncepcji badań, wykonaniu części eksperymentów i przygotowaniu części algorytmów przetwarzania danych. Napisałem również część manuskryptu. Kierowałem projektem SONATA BIS 2, z którego współfinansowane były badania. Jestem autorem korespondencyjnym pracy. Mój wkład oceniam na 40%. **IF(2014)=2,51 liczba cytowań=0**

(14) M. Urbańczyk, D. Bernin, A. Czuroń, and K. Kazimierczuk. Monitoring polydispersity by NMR diffusometry with tailored norm regularisation and moving-frame processing. *The Analyst*, 141(5):1745–1752, 2016

Mój wkład w powstanie tej pracy polegał na opracowaniu koncepcji badań (użycie regularyzacji “wygładzających”). Napisałem również część manuskryptu. Kierowałem projektami SONATA BIS 2 i HARMONIA, z których współfinansowane były badania. Jestem autorem korespondencyjnym pracy. Mój wkład oceniam na 30%. **IF(2014)=4,107 liczba cytowań=0**

Summary impact factor monotematycznego cyklu publikacji wchodzącego w skład rozprawy habilitacyjnej według listy Journal Citation Reports, zgodnie z rokiem opublikowania: 59,534

2 Wykaz innych (nie wchodzących w skład osiągnięcia wymienionego w pkt I) opublikowanych prac naukowych oraz wskaźniki dokonań naukowy

A Publikacje znajdujące się w bazie JCR

Prace opublikowane przed obroną pracy doktorskiej:

i. K. Kazimierczuk and W. Koźmiński. Efficient compensation of low-frequency magnetic field disturbances in NMR with fluxgate sensors. *Journal of Magnetic Resonance*, 174(2):287–291, 2005

Mój wkład w powstanie tej pracy polegał na opracowaniu części koncepcji badań oraz wykonaniu rozwiązania które zostało opisane w pracy. Mój wkład oceniam na 50%. **IF(2005)=2,418 liczba cytowań=13**

ii. K. Kazimierczuk, W. Koźmiński, and I. Zhukov. Two-dimensional Fourier transform of arbitrarily sampled NMR data sets. *Journal of Magnetic Resonance*, 179(2):323–328, 2006

Mój wkład w powstanie tej pracy polegał na opracowaniu idei metody oraz wykonaniu programów do przetwarzania danych wg metody opisanej w pracy. Mój wkład oceniam na 40%. **IF(2006)=2,076 liczba cytowań=96**

iii. K. Kazimierczuk and W. Koźmiński. On the influence of low-frequency magnetic field disturbances on basic high resolution NMR experiments. *Polish Journal of Chemistry*, 80(7):1119–1124, 2006

Mój wkład w powstanie tej pracy polegał na opisanu części obserwacji poczynionych przy implementacji rozwiązania z pracy (i). Mój wkład oceniam na 40%. **IF(2006)=0,491 liczba cytowań=0**

iv. K. Kazimierczuk, A. Zawadzka, W. Koźmiński, and I. Zhukov. Random sampling of evolution time space and Fourier transform processing. *Journal of Biomolecular NMR*, 36(3):157–168, 2006

Mój wkład w powstanie tej pracy polegał na opracowaniu części idei metody oraz udziale w wykonaniu programów do przetwarzania danych wg metody opisanej w pracy. Mój wkład oceniam na 35%. **IF(2006)=1,791 liczba cytowań=73**

v. K. Kazimierczuk, A. Zawadzka, W. Koźmiński, and I. Zhukov. Lineshapes and artifacts in Multidimensional Fourier Transform of arbitrary sampled NMR data sets. *Journal of Magnetic Resonance*, 188(2):344–356, 2007

Mój wkład w powstanie tej pracy polegał na opracowaniu części idei metody, przeprowadzeniu części eksperymentów oraz udziale w wykonaniu programów do przetwarzania danych wg metody opisanej w pracy. Mój wkład oceniam na 35%. **IF(2007)=2,253 liczba cytowań=52**

vi. K. Kazimierczuk, M. Misiak, A. Zawadzka, and W. Koźmiński. Progress in structural studies of proteins by nmr spectroscopy. *Polimery/Polymers*, 52(10):736–744, 2007

Mój wkład w powstanie tej pracy polegał na opisanu metod rekonstrukcji podpróbkowanych widm NMR. Napisałem również część manuskryptu. Mój wkład oceniam na 25%. **IF(2007)=1,376 liczba cytowań=2**

vii. K. Kazimierczuk, A. Zawadzka, W. Koźmiński, and I. Zhukov. Determination of spin-spin couplings from ultrahigh resolution 3D NMR spectra obtained by optimized random sampling and multidimensional Fourier transformation. *Journal of the American Chemical Society*, 130(16):5404–5405, 2008

Mój wkład w powstanie tej pracy polegał na opracowaniu części idei metody, przeprowadzeniu części eksperymentów oraz udziale w wykonaniu programów do przetwarzania danych wg metody opisanej w pracy. Mój wkład oceniam na 25%. **IF(2008)=8,091 liczba cytowań=24**

viii. K. Kazimierczuk, A. Zawadzka, and W. Koźmiński. Optimization of random time domain sampling in multidimensional NMR. *Journal of Magnetic Resonance*, 192(1):123–130, 2008

Mój wkład w powstanie tej pracy polegał na opracowaniu części idei metody, przeprowadzeniu części eksperymentów oraz udziale w wykonaniu programów do przetwarzania danych wg metody opisanej w pracy. Mój wkład oceniam na 45%. **IF(2008)=2,438 liczba cytowań=55**

ix. K. Kazimierczuk, A. Zawadzka, and W. Koźmiński. Narrow peaks and high dimensionalities: Exploiting the advantages of random sampling. *Journal of Magnetic Resonance*, 197(2):219–228, 2009

Mój wkład w powstanie tej pracy polegał na opracowaniu części teorii, przeprowadzeniu części eksperymentów oraz udziale w wykonaniu programów do przetwarzania danych wg metody opisanej w pracy. Mój wkład oceniam na 45%. **IF(2009)=2,531**
liczba cytowań=37

Prace opublikowane po obronie pracy doktorskiej:

i. A. Zawadzka-Kazimierczuk, K. Kazimierczuk, and W. Koźmiński. A set of 4D NMR experiments of enhanced resolution for easy resonance assignment in proteins. *Journal of Magnetic Resonance*, 202(1):109–116, 2010

Mój wkład w powstanie tej pracy polegał na opracowaniu części teorii, przeprowadzeniu części eksperymentów oraz udziale w wykonaniu programów do przetwarzania danych wg metody opisanej w pracy. Mój wkład oceniam na 35%. **IF(2010)=2,333**
liczba cytowań=21

ii. K. Kazimierczuk, A. Zawadzka-Kazimierczuk, and W. Koźmiński. Non-uniform frequency domain for optimal exploitation of non-uniform sampling. *Journal of Magnetic Resonance*, 205(2):286–292, 2010

Mój wkład w powstanie tej pracy polegał na opracowaniu części idei metody, przeprowadzeniu części eksperymentów oraz udziale w wykonaniu programów do przetwarzania danych wg metody opisanej w pracy. Mój wkład oceniam na 30%. **IF(2010)=2,333**
liczba cytowań=40

iii. K. Kazimierczuk, J. Stanek, A. Zawadzka-Kazimierczuk, and W. Koźmiński. Random sampling in multidimensional NMR spectroscopy. *Progress in Nuclear Magnetic Resonance Spectroscopy*, 57(4):420–434, 2010

Mój wkład w powstanie tej pracy polegał na opisaniu metody wielowymiarowej dekompozycji w rekonstrukcji widm NMR. Mój wkład oceniam na 25%. **IF(2010)=4,933**
liczba cytowań=47

iv. V. Motáčková, J. Nováček, A. Zawadzka-Kazimierczuk, K. Kazimierczuk, L. Žídek, H. Šanderová, L. Krásný, W. Koźmiński, and V. Sklenář. Strategy for complete NMR assignment of disordered proteins with highly repetitive sequences based on resolution-enhanced 5D experiments. *Journal of Biomolecular NMR*, 48(3):169–177, 2010

Mój wkład w powstanie tej pracy polegał na wykonaniu programów do przetwarzania danych wg metody opisanej w pracy. Mój wkład oceniam na 10%. **IF(2010)=3,047**
liczba cytowań=56

v. D. Lozhko, J. Stanek, K. Kazimierczuk, A. Zawadzka-Kazimierczuk, W. Kozminski, I. Zhukov, and A. Kornelyuk. ^1H , ^{13}C , and ^{15}N chemical shifts assignments for human endothelial monocyte-activating polypeptide EMAP II. *Biomolecular NMR Assignments*, pages 1–5, 2012

Mój wkład w powstanie tej pracy polegał na wykonaniu programów do przetwarzania danych wg metody opisanej w pracy. Mój wkład oceniam na 10%. **IF(2012)=0,82**
liczba cytowań=1

vi. K. Kazimierczuk, Misiak M., J. Stanek, A. Zawadzka-Kazimierczuk, and Koźmiński W. Generalized Fourier transform for non-uniform sampled data. *Top Curr Chem*, 316:79–124, 2012

Mój wkład w powstanie tej pracy polegał na opisanu właściwości uogólnionej transformacji Fouriera w oszczędnie próbkowanych widmach NMR. Mój wkład oceniam na 25%. **IF(2012)=8,456 liczba cytowań=14**

vii. L. Wu, A. Reymer, C. Persson, K. Kazimierczuk, T. Brown, P. Lincoln, B. Nordén, and M. Billeter. Initial DNA interactions of the binuclear threading intercalator Λ, Λ -[μ -bidppz(bipy) $_4$ Ru $_2$] $^{4+}$: An NMR study with [d(CGCGAATTCGCG)] $_2$. *Chemistry - A European Journal*, 19(17):5401–5410, 2013

Mój wkład w powstanie tej pracy polegał na przeprowadzeniu eksperymentów NO-ESY. Napisałem również fragmenty manuskryptu. Mój wkład oceniam na 10%. **IF(2012)=5,696 liczba cytowań=6**

viii. K. Kazimierczuk, J. Stanek, A. Zawadzka-Kazimierczuk, and W. Koźmiński. High-dimensional NMR spectra for structural studies of biomolecules. *ChemPhysChem*, 14(13):3015–3025, 2013 Mój wkład w powstanie tej pracy polegał na opisanu metod przetwarzania danych w oszczędnie próbkowanych wielowymiarowych widmach NMR. Mój wkład oceniam na 25%. **IF(2013)=3,36 liczba cytowań=13**

ix. Philippe Lesot, Krzysztof Kazimierczuk, Julien Trébosc, Jean-Paul Amoureux, and Olivier Lafon. Fast acquisition of multidimensional NMR spectra of solids and mesophases using alternative sampling methods. *Magnetic resonance in chemistry : MRC*, 53(11):927–39, nov 2015

Mój wkład w powstanie tej pracy polegał na opisanu metod rekonstrukcji rzadkiej widm NMR. Napisałem również część manuskryptu. Kierowałem projektem SONATA BIS 2 z którego współfinansowane były badania. Mój wkład oceniam na 10%. **IF(2014)=1,179 liczba cytowań=0**

x. Krzysztof Kazimierczuk and Vladislav Orekhov. Non-uniform sampling: post-Fourier era of NMR data collection and processing. *Magnetic resonance in chemistry : MRC*, 53(11):921–6, dec 2015 Mój wkład w powstanie tej pracy polegał na dokonaniu przeglądu i opisanu właściwości metod rekonstrukcji widm NMR w kontekście możliwego wzrostu czułości i poziomu artefaktów. Napisałem również ok. połowę manuskryptu. Kierowałem projektem SONATA BIS 2 z którego współfinansowane były badania. Mój wkład oceniam na 50%. **IF(2014)=1,179 liczba cytowań=1**

Sumaryczny impact factor powyższych publikacji według listy Journal Citation Reports, zgodnie z rokiem opublikowania: 61.104

B Wynalazki oraz wzory użytkowe i przemysłowe, które uzyskały ochronę i zostały wystawione na międzynarodowych lub krajowych wystawach lub targach

BRAK

C Monografie, publikacje naukowe w czasopismach naukowych międzynarodowych lub krajowych innych niż znajdujące się w bazie, o której mowa pkt 1 B

BRAK

D Opracowania zbiorowe, katalogi zbiorów, dokumentacja prac badawczych, ekspertyz, utworów i dzieł artystycznych

E Sumaryczny Impact Factor według listy JCR zgodnie z rokiem opublikowania: **120,638**

F Liczba cytowań wg bazy Web of Science (WoS): **593** (bez autocytowań); **703** (z autocytowaniami)

G Indeks Hirscha wg bazy Web of Science (WoS): **15; 13** (bez autocytowań)

H Kierowanie międzynarodowymi i krajowymi projektami badawczymi oraz udział w takich projektach:

Osobiście zarządzane projekty:

- Stypendium KOLUMB Fundacji na Rzecz Nauki Polskiej: "NMR toolbox for studying intrinsically disordered proteins"
- Grant IUVENTUS PLUS (nr IP2011 023171) Ministerstwa Nauki i Szkolnictwa Wyższego: "Rekonstrukcja widm NMR z niepełnych danych za pomocą algorytmów Compressed Sensing"
- SONATA-BIS 2 (nr 2012/07/E/ST4/01386) grant Narodowego Centrum Nauki: "Rzadkie i prawie-rzadkie reprezentacje w problemach spektroskopii NMR" (2013-2018)
- HARMONIA (nr 2013/08/M/ST4/00975) grant Narodowego Centrum Nauki: "Algorytmy regularyzacyjne w przetwarzaniu widm mieszanin metabolitów" (2013-2014)
- "Inkubator Innowacyjności" grant Ministerstwa Nauki i Szkolnictwa Wyższego: "Statusino-aplikacja mobilna do monitorowania spektrometrów NMR"
- OPUS 9 (nr 2015/17/B/ST4/04221) grant Narodowego Centrum Nauki, project: "Czasorozdzielcza N-wymiarowa spektroskopia dla monitorowania procesów fizycznych i chemicznych" (2016-2018)

Udział w projektach:

- N301 071 31/2159 "Opracowanie nowych metod spektroskopii NMR do badań strukturalnych białek", grant MNiSW for 2006-2009.
- Polish-Slovenian bilateral cooperation 2008-2009 (National Institut of Chemistry Ljubljana)
- Sieć naukowa 2008-2009: „Nowe zastosowania spektroskopii magnetycznego rezonansu jądrowego w chemii, biologii, farmacji i medycynie” MNiSW.
- EAST NMR, "Enhancing Access and Services To East European users towards an efficient and coordinated pan-European pool of NMR capacities to enable global collaborative research and boost technological advancements". Combination of a Collaborative Project & Coordination and Support Action. (Proj. 228461) FP7-Infrastructure project funded by the European Commission (2009-2013).
- "Towards new applications of NMR spectroscopy in chemical and biomolecular structural studies" TEAM project of the Foundation for Polish Science for 2010-2014.

I Międzynarodowe i krajowe nagrody za działalność naukową albo artystyczną

- 2005 - Dyplom magistra chemii obroniony z wyróżnieniem i I nagroda w sesji postero-owej magistrantów
- 2007 - Nagroda im. Grabowskiego dla doktoranta Wydziału Chemii UW
- 2008 - Stypendysta Fundacji na rzecz Nauki Polskiej (program START). Stypendium przedłużone na rok 2009.
- 2009 - Praca doktorska „Metody szybkiej rejestracji widm NMR w badaniach strukturalnych” wyróżniona przez Radę Wydziału Chemii UW.

- 2009 - Wybrany przez Fundację na rzecz Nauki Polskiej jako delegat („Young researcher”) na spotkanie z laureatami Nagrody Nobla z Chemii “Nobel Laureates Meeting” w Lindau.
- 2010 Nagroda W. Kołosa za wyróżnioną pracę doktorską.
- 2010 Stypendium KOLUMB ufundowane przez Fundację na rzecz Nauki Polskiej
- 2010 Nagroda Prezesa Rady Ministrów za pracę doktorską „Metody szybkiej rejestracji widm NMR w badaniach strukturalnych”
- 2014 Nagroda im. Świętosławskiego II stopnia przyznawana przez Polskie Towarzystwo Chemiczne
- 2015 Nagroda wydawnictwa Wiley za najlepszy wykład w dziedzinie NMR “Dynamic non-uniform sampling”

J Wygłoszenie referatów na międzynarodowych i krajowych konferencjach tematycznych

- 20-22 Sep 2007 NMR in Chemistry, Biology and Medicine, Warszawa, Poland (wykład, 1st Award in Young Scientist Contest) ”Practical aspects of Multidimensional Fourier Transform.” K. Kazimierczuk
- 18-23 May 2008, Computational Aspects - Biomolecular NMR II Ciocco, Italy (wykład) ”What can Multidimensional Fourier Transform do?” K. Kazimierczuk
- 2 Jun 2008, NMR School, Łódź, Poland (wykład zaproszony) “ Wprowadzenie do mechaniki kwantowej układów spinowych. Reguły ewolucji” K. Kazimierczuk
- 11-15 Feb 2009 ” Magnetic Moments in Central Europe”, Otočec, Slovenia , (wykład) “Narrow peaks and high dimensionalities: Exploiting the advantages of random sampling.” K. Kazimierczuk, A. Zawadzka, W. Koźmiński
- 3-7.05.2010, 24-28.05.2010 Fundamentals of Protein NMR, A hands-on PhD course on protein NMR Göteborg, Sweden (wykład zaproszony & organizacja) ”From FID signal to NMR spectrum” Krzysztof Kazimierczuk
- 1.20-23.09.2010 Advanced Course on New Methods of Data Acquisition and Analysis in Biomolecular NMR Göteborg, Sweden (wykład zaproszony & organizacja) ”How to (and how not to) apply Fourier transform to non-uniformly sampled NMR signals” Krzysztof Kazimierczuk
- 17-28.01.2011. Workshop ” Advanced protein NMR: structure and dynamics”, University of Gothenburg, wykład zaproszony: ”Non-uniform sampling – basic concepts” Krzysztof Kazimierczuk.
- 27.01.2011, ”Advances in biomolecular NMR”, University of Gothenburg, wykład zaproszony ”Accelerated NMR with compressed sensing” Krzysztof Kazimierczuk, Vladislav Orekhov.
- 27-30.04.2011 „Bio-NMR Workshop: Acquisition and processing of sparsely sampled NMR data”, Warsaw, wykład zaproszony: ” Introduction to sparse sampling” Krzysztof Kazimierczuk i ćwiczenia ”Determination of coupling constants”.
- 4-7.10.2011, Bio-NMR workshop, Vilnius, Lithuania, wykład zaproszony & ćwiczenia ” NMR signal processing“, Krzysztof Kazimierczuk
- 26-28 Sep 2012 NMR in Chemistry, Biology and Medicine, Warszawa , Poland . Wykład: ” Compressed sensing in NMR spectroscopy“. K. Kazimierczuk, M. Misiak, K. Chmurski, W. Koźmiński, V.Yu. Orekhov

- xii. 20-23 Nov 2012 Biomolecular NMR with Non-Uniform Sampling, Gothenburg, Sweden. Wykład zaproszony i ćwiczenia "CS in NMR spectroscopy". K. Kazimierczuk
- xiii. 21 Nov 2012 Workshop on Fast Methods in NMR, Gothenburg, Sweden. Wykład: "Compressed sensing in NMR spectroscopy". K. Kazimierczuk, M. Misiak, K. Chmurski, W. Koźmiński, V.Yu. Orekhov
- xiv. 5-7 Jun 2013 Signal Processing Symposium, Jachranka, Poland, Wykład: "A combined sparse sampling of time-gradient domain for NMR diffusometry and relaxometry". M. Urbańczyk, K. Kazimierczuk
- xv. 5 May - 8 May 2014 – The 4th Bio-NMR Annual User Meeting, Warsaw, Poland, Wykład zaproszony: "Sparse sampling in Non-frequency dimensions". K. Kazimierczuk
- xvi. 24-26 September 2014, 8th symposium on Nuclear Magnetic Resonance in Chemistry, Physics and Biological Sciences, Warszawa, wykład: "2D NMR with temperature-sweep". W. Bermel, R. Dass, K. Neidig, K. Kazimierczuk
- xvii. 20-23 November 2014, II Ogólnopolskie Sympozjum Interdyscyplinarne Inter-Mix 2014, Wykład zaproszony: "Oszczędna spektroskopia NMR", K. Kazimierczuk
- xviii. 25 Feb - 1 Mar 2015 "Magnetic Moments in Central Europe", Krynica Zdrój, Poland, wykład zaproszony "Sparsity in NMR and around" K. Kazimierczuk
- xix. 14-20 Jun 2015 AMPERE XII NMR School, Zakopane, Poland wykład zaproszony "Sparsity in NMR spectroscopy" K. Kazimierczuk
- xx. 5-10 Jul 2015 EUROMAR – Magnetic Resonance Meeting, Prague, Czech Republic, wykład: "Dynamic non-uniform sampling" Krzysztof Kazimierczuk, Rupashree Dass, Wiktor Koźmiński, Wolfgang Bermel, Klaus-Peter Neidig, Wojciech Bocian, Jerzy Sitkowski, Michał Nowakowski
- xxi. 20-24 Sep 2015 SMASH NMR, Baveno, Italy, wykład: "Dynamic non-uniform sampling" Krzysztof Kazimierczuk, Rupashree Dass, Wiktor Koźmiński
- xxii. 18-19 Jan 2016 Danish NMR meeting, Aarhus, Denmark, wykład zaproszony: "Sparse representations in NMR spectroscopy" Krzysztof Kazimierczuk
- xxiii. 18-21 Feb 2016 22nd Conference of National NMR Society of India, wykład zaproszony: "Sparse representations in NMR spectroscopy" Krzysztof Kazimierczuk

3 Dorobek dydaktyczny i popularyzatorski oraz informacja o współpracy międzynarodowej habilitanta

(A) Uczestnictwo w programach europejskich oraz innych programach międzynarodowych i krajowych
BRAK

(B) Aktywny udział w międzynarodowych i krajowych konferencjach naukowych Poza referatami wymienionymi w pkt. II J uczestniczyłem w niżej wymienionych konferencjach naukowych prezentując wyniki badań w formie posteru:

- i. 1-2 Dec 2004 XXXVII Ogólnopolskie Seminarium Zastosowań NMR, Kraków, Poland. Poster: "Aktywna stabilizacja pola magnetycznego w spektrometrach NMR wysokiej zdolności rozdzielczej" K. Kazimierczuk, W. Koźmiński

- ii. 5-10 Jun 2005 AMPERE XII NMR School, Zakopane, Poland. Poster: " Efficient compensation of magnetic field disturbances in high resolution NMR spectrometers" K. Kazimierzczuk, W. Koźmiński
- iii. 8-10 Sep 2005 NMR in Chemistry, Biology and Medicine, Warszawa , Poland . Poster: " Efficient compensation of magnetic field disturbances in high resolution NMR spectrometers" K. Kazimierzczuk, W. Koźmiński
- iv. 1-2 Dec 2005 XXXVIII Ogólnopolskie Seminarium Zastosowań NMR, Kraków, Poland, Poster: „ Uogólniona wielowymiarowa transformata Fouriera" K. Kazimierzczuk, W. Koźmiński
- v. 20-25 Aug 2006 International Conference on Magnetic Resonance in Biological Systems, Goettingen , Germany. Poster: " Multidimensional Fourier Transform of arbitrarily sampled multidimensional data sets." K. Kazimierzczuk, A. Zawadzka, W. Koźmiński
- vi. 11-13 Nov 2006 NMR in Chemistry, Biology and Medicine, Warszawa, Poland Poster: " New flavours of old Fourier transform", K. Kazimierzczuk, A. Zawadzka, W. Koźmiński, I. Zhukov
- vii. 1-6 Jul 2007 EUROMAR – Magnetic Resonance Meeting, Tarragona, Spain. Poster: " Lineshapes and artifacts in Multidimensional Fourier Transform of arbitrarily sampled NMR data sets." K. Kazimierzczuk, A. Zawadzka, W. Koźmiński, I. Zhukov
- viii. 6-11 Jul 2008 EUROMAR – Magnetic Resonance Meeting, St. Petersburg, Russia Poster: " Optimization of random time domain sampling in multidimensional NMR" K. Kazimierzczuk, A. Zawadzka, W. Koźmiński
- ix. 24-26 Sep 2008 „Nuclear Magnetic Resonance in Chemistry, Physics and Biological Sciences" Warszawa, Poland, Poster: " Optimization of random time domain sampling in multidimensional NMR" K. Kazimierzczuk, A. Zawadzka, W. Koźmiński
- x. 27-29 Oct 2008 " Extend-NMR Meeting" Joachimsthal, Germany. Poster: "Multidimensional NMR Spectroscopy beyond sampling limitations." K. Kazimierzczuk, A. Zawadzka, W. Koźmiński
- xi. 23-25 Oct 2009, 5th symposium on Nuclear Magnetic Resonance in Chemistry, Physics and Biological Sciences, Warszawa (poster presentation), Poland. Poster: " "Fast NMR" or " Accurate NMR? " Towards New applications of random sampling." K. Kazimierzczuk, A. Zawadzka, W. Koźmiński
- xii. 11-14 Jun 2010, The 14th annual Structural Biology Net Meeting, Tällberg, Sweden Poster: " Non-uniform frequency domain for optimal exploitation of non-uniform sampling." Krzysztof Kazimierzczuk, Anna Zawadzka-Kazimierzczuk, Wiktor Koźmiński
- xiii. 4-9 Jul 2010, Joint Euromar 2010 and 17th ISMAR conference „ A Worldwide Magnetic Resonance Conference ", Florence, Italy. Poster: " Non-uniform frequency domain for optimal exploitation of non-uniform sampling." Krzysztof Kazimierzczuk, Anna Zawadzka-Kazimierzczuk, Wiktor Koźmiński
- xiv. 10-15.04.2011 52nd Experimental NMR Conference Pacific Grove, California, USA (poster) " Accelerated NMR with compressed sensing" Krzysztof Kazimierzczuk, Vladislav Orekhov.
- xv. 25-30.06.2011 " FEBS Congress: Biochemistry for Tomorrow's Medicine", Torino, Italy, poster: " New high-dimensionality NMR experiments for efficient structural

studies of proteins in solution” Krzysztof Kazimierczuk, Maria Misiak, Jan Stanek, Anna Zawadzka-Kazimierczuk, Wiktor Koźmiński, Rafał Augustyniak, Lukaš Židek, Vladimír Sklenář, Libor Krásný

- xvi. 29 Jul - 1 Jul 2012 EUROMAR – Magnetic Resonance Meeting, Dublin, Ireland. Poster: ” A comparison of convex and non-convex compressed sensing applied in multidimensional NMR” K. Kazimierczuk, V.Yu. Orekhov
- xvii. 19-24 Aug 2012 International Conference on Magnetic Resonance in Biological Systems, Lyon, France. Poster: “ A comparison of convex and non-convex compressed sensing applied in multidimensional NMR” K. Kazimierczuk, V.Yu. Orekhov
- xviii. 10-13 Jun 2013 The 3rd Bio-NMR Annual User Meeting, Budapest, Hungary, Poster: ” A combined sparse sampling of time-gradient domain for NMR diffusometry and relaxometry“. M. Urbańczyk M. Nowakowski W. Koźmiński K. Kazimierczuk
- xix. 30 Jun -5 Jul 2013 EUROMAR – Magnetic Resonance Meeting, Hersonissos, Greece, Poster: ” Combination of Non-uniform Sampling and Compressed Sensing: An Efficient Way for enhancing Sensitivity of Natural Abundance Deuterium 2D-NMR Spectroscopy in Oriented Solvents “. K. Kazimierczuk, O. Lafon, P. Lesot
- xx. 29 Jun - 3 Jul 2014 EUROMAR – Magnetic Resonance Meeting, Zurich, Switzerland, Poster: ” Sparse sampling in Non-frequency dimensions“. M. Urbańczyk, W. Bermel, R. Dass, W. Koźmiński, K. Neidig, K. Kazimierczuk

(C) Udział w komitetach organizacyjnych międzynarodowych i krajowych konferencji naukowych Uczestniczyłem lub uczestniczę w komitetach organizacyjnych następujących konferencji:

- The 4th BioNMR Annual User Meeting, Warsaw, Poland
- Magnetic Moments in Central Europe, Krynica Zdrój , Poland,
- EUROMAR 2017, Warsaw, Poland
- Minisympozja sekcji NMR PTChem: 2014 i 2015.

(D) Otrzymane nagrody i wyróżnienia inne niż wymienione w pkt II-H
BRAK

(E) Udział w konsorcjach i sieciach badawczych

- Polish-Slovenian bilateral cooperation 2008-2009 (National Institut of Chemistry Ljubljana)
- Sieć naukowa 2008-2009: „Nowe zastosowania spektroskopii magnetycznego rezonansu jądrowego w chemii, biologii, farmacji i medycynie” MNiSW.

(F) Kierowanie projektami zrealizowanymi we współpracy z naukowcami z innych ośrodków polskich i zagranicznych oraz we współpracy z przedsiębiorcami, innymi niż wymienione powyżej
BRAK

(G) Udział w komitetach redakcyjnych i radach naukowych czasopism
BRAK

(H) Członkostwo w międzynarodowych i krajowych organizacjach oraz towarzystwach naukowych Członek Polskiego Towarzystwa Chemicznego

(I) Osiągnięcia dydaktyczne i w zakresie popularyzacji nauki lub sztuki
Lista prowadzonych zajęć:

- Ćwiczenia rachunkowe ze spektroskopii molekularnej,
- Laboratoria z przedmiotów: „Spektroskopii molekularna” , „Fizyka”, „Spektroskopia i właściwości cząsteczek”, „Pracownia specjalizacyjna z chemii fizycznej”, „Pracownia Chemii Fizycznej”.
- Wykład „Metody Biologii strukturalnej” dla makrokierunku „Bioinformatyka i biologia systemów”
- Prowadzenie kursów spektroskopii NMR na szkołach w Warszawie (2 czterodniowe kursy), Wilnie (1 czterodniowy kurs) i Göteborgu (3 tygodniowe kursy) organizowanych w ramach grantów UE: BioNMR i EAST-NMR.

Nowe programy zajęć, skrypty, etc:

- Przygotowałem ćwiczenie ”Widma EPR pochodnych hydrochinonu“ dla studenckich pracowni spektroskopii WCh UW.

Kierownictwo prac magisterskich:

- Zastosowanie metody compressed sensing w "podwójnie rzadkich "widmach NMR, Agata Jarzębowska

Recenzje prac licencjackich i magisterskich:

- Praca licencjacka: ”Compressive sensing methods in nuclear magnetic resonance“, Krzysztof Lis
- Praca magisterska: ”Implementacja algorytmu separacji sygnałów dla pięciowymiarowych widm NMR“, Krzysztof Kosiński

Popularyzacja nauki - wykłady i zajęcia dla młodzieży szkolnej, m.in.:

- Laboratoria NMR dla stypendystów fundacji ”Przyszłość w nauce“, 2011
- Laboratoria NMR dla Szkoły Młodego Chemika, 2011, Stowarzyszenie Klatrat
- Promocja Wydziału Chemii z miesięcznikiem ”Perspektywy“, 2011
- Laboratoria NMR w Dniu Otwartym Kampusu Ochota, 2016

Dwukrotnie gościłem w audycjach naukowych Programu I Polskiego Radia.

(J) Opieka naukowa nad doktorantami w charakterze opiekuna naukowego lub promotora pomocniczego

- Promotor pomocniczy: ”Zastosowanie regularyzacji rzadkiej w pomiarach dyfuzyjnych NMR“ mgr Mateusz Urbańczyk (przewód otwarty, obrona planowana na drugą połowę 2016)

(K) Staże w zagranicznych i krajowych ośrodkach naukowych lub akademickich Staż podoktorski w Szwedzkim Centrum NMR, Uniwersytet w Göteborgu, Szwecja. 15 miesięcy w latach 2010-2011

(L) Wykonane ekspertyzy lub inne opracowania na zamówienie
BRAK

(M) Udział w zespołach eksperckich i konkursowych
BRAK

(N) Recenzowanie projektów międzynarodowych i krajowych

- Narodowe Centrum Nauki, 1 projekt
- Swiss National Science Foundation, 1 projekt

(O) Recenzowanie publikacji w czasopismach międzynarodowych i krajowych

- Journal of Magnetic Resonance, 2 publikacje
- Journal of Biomolecular NMR, 3 publikacje
- Magnetic Resonance in Chemistry, 1 publikacja
- ChemPhysChem, 1 publikacja
- Digital Signal Processing, 1 publikacja
- Acta Physica Polonica, 1 publikacja

(P) Inne osiągnięcia

Stworzenie i zarządzanie spółką spin-off Spekrino Sp z o.o., zajmującą się wdrażaniem osiągnięć mojego zespołu badawczego.