

Weniger ist mehr: Neue Messkonzepte in der Chemie durch Compressed Sensing

Daniel J. Holland* und Lynn F. Gladden

Compressed Sensing · Elektronentomographie ·
Kernspintomographie · NMR-Spektroskopie

Die Mathematik hat einen tiefgreifenden Einfluss auf die Wissenschaft, und sie gibt den Wissenschaftlern einzigartige Instrumente an die Hand, um die Welt um uns herum zu erklären. Mit dem Anbruch des digitalen Zeitalters gewann auch die Bedeutung der Informationstheorie enorm an Bedeutung. Insbesondere führten Entwicklungen der letzten zwanzig Jahre im Datensampling und der Funktionsrekonstruktion zum Konzept des Compressed Sensing. Was zunächst nach einer abstrakten Idee klang, hat heute einen maßgeblichen Einfluss auf die Wissenschaft, z. B. in der klinischen Medizin, wo das Compressed Sensing die hochauflösende Bildgebung von Patienten ermöglicht, sowie in der 3D-Elektronentomographie von Katalysator-Nanopartikeln und der mehrdimensionalen NMR-Spektroskopie von Proteinen. Der Kurzaufsatz fasst diese Anwendungen zusammen und wirft einen Blick in die Zukunft des Compressed Sensing in der physikalischen, biologischen und medizinischen Metrologie.

1. Einleitung

Die Entwicklung von Signalverarbeitungsverfahren war stets ein zentraler Bestandteil der Metrologie. Eines dieser Verfahren ist das Compressed Sensing, das sich als zunehmend wirkungsvoll erweist, um bislang unzugängliche Systeme oder Übergangszustände (z. B. strahlungsempfindliche) zu untersuchen. Verfahren der Datenkompression kennen wir im Zusammenhang mit der Speicherung von Digitalphotos und digitaler Musik (jpeg, mpeg usw.). Eine Datenkompression ermöglicht es uns, das „Signal“ – also ein Bild, ein Musikstück oder eben auch ein chemisches Spektrum – aus weit weniger Informationen als ursprünglich vorhanden zu reproduzieren. Das Verfahren des Compressed Sensing erweitert nun dieses Konzept auf die Datenaufnahme. Die Logik dahinter ist einfach: Wenn es möglich ist, ein Bild zu komprimieren, z. B. in einen Datensatz mit viel weniger Datenpunkten, können dann diese „redundanten“ Daten nicht

schon bei der Aufnahme wegfallen? Da die Datenaufnahme zeitintensiv ist, kann man sich leicht vorstellen, dass weniger Datenpunkte pro Bild die Akquisition stark beschleunigen. Umgekehrt sollte bei gegebener Akquisitionszeit die räumliche Auflösung der Messung steigen. Bestimmte Bereiche wie die Astronomie, für die Datenverarbeitungskonzepte gut etabliert sind, ziehen bereits in großem Umfang Nutzen aus Compressed Sensing. Wie sich Compressed Sensing auf die chemischen und biologischen Wissenschaften auswirken wird, beginnt sich gerade erst abzuzeichnen. Sicher ist jedoch, dass diese neue Form der Datenaufnahme und Bildrekonstruktion Möglichkeiten für den gezielten Entwurf völlig neuartiger Messungen eröffnen wird.

Die meisten Phänomene, die wir beobachten, lassen sich meist durch eine kontinuierliche Funktion oder ein „Signal“ beschreiben. Um dieses Signal, das für ein bestimmtes System charakteristisch ist, zu erfassen, muss man am System diskrete Messungen vornehmen („Sampling“). Die Sampling-Theorie^[1,2] besagt, dass solche diskreten Messungen ein kontinuierliches bandbegrenztes Signal perfekt beschreiben können, wenn sie auf einer Frequenz vorgenommen werden, die doppelt so hoch ist wie die höchste Bandfrequenz. In vielen Fällen reichen auch weniger als die von der Sampling-Theorie geforderten Proben aus, um ein Signal akkurat zu rekon-

[*] Dr. D. J. Holland, Prof. Dr. L. F. Gladden
Department of Chemical Engineering and Biotechnology
University of Cambridge
Cambridge CB2 3RA (UK)
E-Mail: djh79@cam.ac.uk

struieren.^[3-8] Wie genau das Signal rekonstruiert werden kann, wenn weniger Proben gezogen werden als von der klassischen Sampling-Theorie gefordert, wird durch den mathematischen Formalismus des Compressed Sensing klar definiert und quantifiziert.^[9,10] Dieser rigorose theoretische Formalismus lässt sich leicht auch auf andere Anwendungen übertragen und bietet somit eine Grundlage für neue methodische Konzepte und experimentelle Ansätze. Eine Übersicht reicht kaum mehr aus, um das gesamte Gebiet zu erfassen, so stark sind das theoretische und praktische Interesse in sehr kurzer Zeit angestiegen. Daher beschränken wir uns auf eine Einführung in dieses spannende Gebiet der Informationstheorie und Signalverarbeitung und erläutern insbesondere, wie sich Compressed Sensing auf Standardtechniken der Spektroskopie und Bildgebung auswirken kann.

2. Was ist Compressed Sensing?

Compressed Sensing ist ein Abtasttheorem, das die Zahl an Messungen definiert, die für die sichere Rekonstruktion eines Signals nötig sind, und es bietet eine praktische Anleitung, wie die erforderlichen Messwerte aufzunehmen sind. Der zentrale Punkt beim Compressed Sensing ist, dass das zu untersuchende Signal nur eine geringe Menge an „Information“ enthält. Im mathematischen Sinne charakterisiert der Informationsgehalt, wie viele Daten erforderlich sind, um ein Signal präzise zu rekonstruieren. Daher lässt sich der Informationsgehalt eines Signals durch die Anzahl der von null verschiedenen Elemente beschreiben, die man für die Charakterisierung des Signals benötigt. Daraus ergibt sich die zunächst wenig intuitiv erscheinende Konsequenz, dass „Rauschen“, wie etwa auf einem nicht eingestellten Fernseher, eine große Menge Information enthält; umgekehrt wiederum enthalten die Signalreihen beim Empfang eines Senders nur relativ wenig Information. Der entscheidende Grund hierfür ist, dass Signale von Interesse normalerweise viel „Struktur“ enthalten, z.B. sind Pixel in einem Bild stark mit benachbarten Pixeln korreliert. Komprimiert man nun das Signal, so nutzt man die Signalstruktur, um die Anzahl der für die Beschreibung des Ursprungssignals notwendigen Datenpunkte zu reduzieren. Auf diesem Konzept basieren die gängigen Bildkompressionsalgorithmen wie jpeg. Die entsprechenden Kompressionsprotokolle nehmen zunächst das vollständige Bild auf und transformieren es auf eine neue Basis. Die großen Koeffizienten dieser neuen Basis werden

gespeichert, die kleinen werden verworfen. Wenn mehr kleinen als große Koeffizienten vorhanden sind, reduziert sich der Informationsgehalt des Bildes, das Bild wird „komprimiert“. Compressed Sensing geht noch einen Schritt weiter, indem es die für die Messung des Signals notwendige Zahl der Datenpunkte reduziert. Im Grunde läuft es darauf hinaus, dass Compressed Sensing das Signal schon in komprimierter Form zu erfassen sucht.

Die Mathematik des Compressed Sensing ist gut erforscht und in mehreren Übersichten beschrieben.^[9-13] Die wichtigsten Ergebnisse sind nachfolgend zusammengefasst.

Wir wollen ein Signal \mathbf{x} aufnehmen (geschrieben als Spaltenvektor mit n Einträgen oder Werten) und benutzen dafür einen Satz von Messungen \mathbf{y} (geschrieben als Spaltenvektor mit m Einträgen oder Werten) und ein lineares Messsystem, das durch die Matrix \mathbf{A} beschrieben wird. Mit anderen Worten wollen wir den folgenden Satz linearer Gleichungen lösen:

$$\mathbf{y} = \mathbf{Ax} + \boldsymbol{\sigma}, \quad (1)$$

wobei der Vektor $\boldsymbol{\sigma}$ das Rauschen beschreibt. Wenn wir das Rauschen zunächst außer Acht lassen, so besagt die klassische Sampling-Theorie, dass $m = n$ Messungen nötig sind, um \mathbf{x} zu rekonstruieren. Manche Situationen erfordern es aber, dass wir \mathbf{x} aus $m \ll n$ Messungen wiedergewinnen wollen. In dem Fall gibt es unendlich viele Lösungen, die Gleichung (1) erfüllen. Die Theorie des Compressed Sensing besagt nun, dass \mathbf{x} auch aus $m \ll n$ Messungen rekonstruiert werden kann. Darüber hinaus gibt uns die Theorie Auskunft über 1) die Zahl der Messungen, 2) die Merkmale der Matrix \mathbf{A} und 3) die Art der zu verwendenden Algorithmen, um eine stabile Rekonstruktion von \mathbf{x} zu erreichen.

In der Theorie des Compressed Sensing legt der Grad, zu dem ein Signal komprimiert werden kann, die Zahl der erforderlichen Messungen fest. Ein Signal \mathbf{x} ist komprimierbar, wenn wir es mit $s \ll n$ von null verschiedenen Koeffizienten gut beschreiben können (ein Signal wird als spärlich („sparse“) bezeichnet, wenn diese Näherung exakt ist). Welchen Informationsgehalt das Signal hat, beschreiben die Position und Größe der s von null verschiedenen Koeffizienten. Viele Signale lassen sich direkt komprimieren. In der Spektroskopie z.B. sind die nützlichen Signalinformationen die Größe und Position der Peaks. Weil aber die Anzahl der Peaks meistens um Größenordnungen kleiner ist als die Gesamtzahl aller möglichen Positionen, ist das Spektrum direkt komprimierbar.



Daniel Holland studierte Chemical Engineering an der University of Canterbury. Seit 2002 forscht er an der University of Cambridge, wo er bei Professor Lynn Gladden und Professor Anton Middelberg promoviert. 2011 erhielt er eine Dozentur am Department of Chemical Engineering and Biotechnology.



Lynn Gladden CBE, FRS, FREng ist Shell Professor of Chemical Engineering und ehemals Head of the Department of Chemical Engineering and Biotechnology. Derzeit hat sie die Position des Pro-Vice-Chancellor for Research an der University of Cambridge inne und leitet dort das Magnetic Resonance Research Centre.

mierbar. Wenn nun ein Signal durch lediglich s Koeffizienten dargestellt werden kann, lässt sich \mathbf{x} durch m Messungen rekonstruieren, wobei m gegeben ist durch:

$$m \propto s \log(n/s) \ll n. \quad (2)$$

Dieses bedeutsame Ergebnis besagt, dass die Gewinnung des Signals bei höherer Auflösung (d. h. bei größerem n) keinen linearen Anstieg bei der Zahl der Messungen erfordert – vielmehr ist die Auflösung hauptsächlich durch den Informationsgehalt des Signals (die Zahl der von null verschiedenen Elemente) gegeben.

Die Theorie des Compressed Sensing gilt nur dann, wenn die Messungen und die komprimierbare Basis „inkohärent“ sind. Das Konzept der Inkohärenz ist ungewöhnlich; im Wesentlichen stellt es sicher, dass jede Messung die Information aus vielen Koeffizienten von \mathbf{x} enthält und dass die Kodierung der Koeffizienten von \mathbf{x} für jede Messung unterschiedlich ist. Eine andere Interpretation der Inkohärenzbedingung ist, dass in einem inkohärenten Abtastregime Artefakte, die aus Unterabtastung (d. h. Abtastung eines Signalverlaufs mit weniger als der doppelten Bandbreite) hervorgehen, als Rauschen-ähnliche Interferenz beitragen. Dies ermöglicht ein Rekonstruieren der echten Signalkoeffizienten, die sich von der Interferenz abheben. Eine wichtige Rolle in der Entwicklung des Compressed Sensing spielte das statistische Sampling, da es eine sehr hohe Inkohärenz gewährleistet. Empirische Studien haben aber gezeigt, dass komplett statistisches Sampling wahrscheinlich keine optimalen Ergebnisse erbringt.^[14-17] Andererseits gibt uns die Natur Hinweise, dass statistisches Sampling mit Poisson-Verteilung zu bevorzugen ist.^[18] Praktische Anwendung im Compressed Sensing findet zumeist eine gewichtete Sampling-Verteilung, wobei sich die Wichtung nach der jeweiligen Anwendung richtet. Tatsächlich haben neuere Theorien bestätigt, dass eine solche halbstatistische Sampling-Strategie optimal ist.^[19]

Schließlich sind auch gewisse Vorkenntnisse über das Signal wichtig, um \mathbf{x} aus dem unterdeterminierten Gleichungssystem (1) rekonstruieren zu können. Im Zusammenhang mit Compressed Sensing muss bekannt sein, dass die echte Lösung komprimierbar ist. Anders ausgedrückt suchen wir die Lösung mit den wenigsten von null verschiedenen Elementen, die mit den Messdaten konsistent ist. Die Zahl der von null verschiedenen Elemente wird als l_0 -Pseudonorm bezeichnet, geschrieben $\|\mathbf{x}\|_0$. Also suchen wir die Lösung, bei der die l_0 -Norm minimal wird. Leider gibt es keine direkte Lösung (die Aufgabe gehört zur Klasse der NP-schweren Probleme). Es ist aber möglich, und dies ist ein maßgebliches Ergebnis der Theorie des Compressed Sensing, die Lösung durch Minimierung der l_1 -Norm anzunähern, die definiert ist als:

$$\|\mathbf{x}\|_1 = \sum |x_i|. \quad (3)$$

Dieses erstaunliche Ergebnis kann man relativ leicht verstehen, wenn man die Lösung als eine l_p -Kugel beschreibt. Die l_p -Kugel ist derjenige Satz von Werten, die eine konstante l_p -Norm haben. Der Sachverhalt ist in Abbildung 1 für ein einfaches, durch zwei Koeffizienten x_1 und x_2 beschriebenes

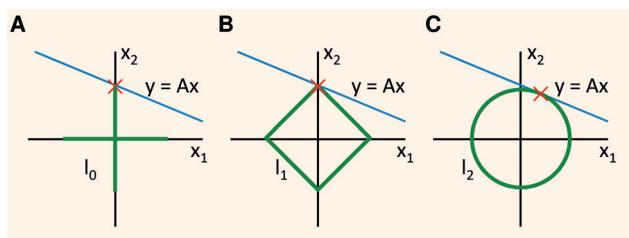


Abbildung 1. Alle gültigen Lösungen der Gleichung $\mathbf{y} = \mathbf{A}\mathbf{x}$ sind als blaue Linie dargestellt. Wenn die zugrundeliegende Lösung spärlich („sparse“) ist, ergibt das Minimum der l_0 -Norm die echte Lösung. Die grünen Linien in (A) beschreiben die l_0 -Kugel von Lösungen mit äquivalenter l_0 -Norm. Das rote Kreuz markiert ein l_0 -Minimum als Lösung. Für Probleme mit einer realistischen Zahl von Dimensionen kann diese Lösung jedoch nicht gefunden werden. In vielen Fällen kann die „Eckigkeit“ der l_1 -Kugel eine äquivalente Lösung bieten, wie in (B) dargestellt. Das Auffinden des Minimums der l_1 -Norm ist ein einfaches konkaves Optimierungsproblem und daher leicht lösbar. Im Gegensatz dazu liefert das konventionellere l_2 -Minimum (kleinste Fehlerquadrate) fast immer eine nicht-spärliche (non-sparse) Lösung, wie in (C) dargestellt. Dieses Beispiel stellt eine leichte Übervereinfachung dar, da \mathbf{x} nur ein zweidimensionaler Vektor ist. In diesem Fall ist das Minimum der l_0 -Norm keine eindeutige Lösung. Für realistische Probleme und bei genügend Messungen (d. h. $m > s \log(n/s)$) liefert die l_0 -Norm eine eindeutige Lösung, und die l_1 -Norm wird eine äquivalente Lösung liefern. Übernommen aus Lit. [13].

Signal dargestellt. Das l_0 -Minimum entspricht stets dem Punkt, an dem eine der beiden möglichen Variablen nicht null ist. Im Gegensatz dazu steht die bekannte Methode der Minimierung der kleinsten Fehlerquadrate, bei der die l_2 -Norm (definiert durch $\|\mathbf{x}\|_2 = (\sum_i |x_i|^2)^{0.5}$) auf den Regularisierungsterm angewendet wird. Diese Methode beseitigt große Koeffizienten und führt daher allgemein zu Lösungen, bei denen beide Variablen von null verschieden sind. Die Minimierung der l_1 -Norm ergibt eine spärliche Lösung, weil die „Eckigkeit“ der l_1 -Kugel bedeutet, dass das l_1 -Minimum mit großer Wahrscheinlichkeit auf einer der Achsen liegt; in diesem Fall sind die kleinen Koeffizienten unterdrückt, während die größeren Koeffizienten mit den Informationen über das spärliche Signal erhalten bleiben. Deshalb führt die Minimierung der l_1 -Norm mit sehr hoher Wahrscheinlichkeit zur gleichen Lösung wie die minimierte l_0 -Norm. Dass die l_0 - und l_1 -Minima äquivalent sind, ist ein wichtiges Ergebnis, denn die zuvor unlösbare l_0 -Minimierung ergibt sich dann leicht aus der Lösung des l_1 -Minimierungsproblems:

$$\text{Minimiere } \|\hat{\mathbf{x}}\|_1, \text{ wende an auf } \|\mathbf{A}\hat{\mathbf{x}} - \mathbf{y}\|_2 \leq \varepsilon \quad (4)$$

wobei $\hat{\mathbf{x}}$ die Rekonstruktion des echten Signals \mathbf{x} aus den Messdaten \mathbf{y} ist und ε durch die Standardabweichung des Hintergrundrauschen charakterisiert ist. Gleichung (4) beschreibt ein konkaves Optimierungsproblem und ist daher mit verschiedenen Standardalgorithmen leicht zu lösen (siehe z. B. Lit. [20]). Darüber hinaus kann gezeigt werden, dass die Lösung von Gleichung (4) eine Abschätzung der echten Lösung \mathbf{x} ergibt, sogar in der Gegenwart von Hintergrundrauschen in den Messdaten. Die Genauigkeit ergibt sich aus

$$\|\mathbf{x} - \hat{\mathbf{x}}\|_2 \leq C_1 s^{-1/2} \|\mathbf{x} - \mathbf{x}_s\|_1 + C_2 \varepsilon, \quad (5)$$

wobei \mathbf{x}_s die beste s -spärliche Näherung von \mathbf{x} ist und C_1 und C_2 kleine positive Konstanten sind.^[21] Gleichung (5) bedeutet, dass die Lösung von Gleichung (4) eine Abschätzung von \mathbf{x} ergibt, die fast so genau wie die beste s -spärliche Näherung von \mathbf{x} ist. Dieses Ergebnis hat zwei wichtige Auswirkungen: Erstens, wenn \mathbf{x} s -spärlich ist (d.h. $\mathbf{x} = \mathbf{x}_s$), ist in Abwesenheit von Rauschen die Rekonstruktion exakt. Zweitens werden selbst in Gegenwart von Rauschen Fehler in der Rekonstruktion nicht dramatisch amplifiziert.

Überall, wo Compressed Sensing implementiert werden kann, gewährt die nun mögliche Unterabtastung („undersampling“) eine deutliche Reduktion der Akquisitionszeit im Vergleich zum klassischen bandbreitenlimitierten Ansatz nach Shannon und Nyquist.^[1,2] Bei letzterem Verfahren muss das Signal mit ausreichender Auflösung aufgenommen werden, um die Peaks über die gesamte Bandbreite des Spektrums unterscheiden zu können. Man stelle sich z.B. ein Spektrum mit fünf Peaks vor, die eine Bandbreite von 1000 Hz abdecken, zwischen den Peaks aber nur jeweils ein Abstand von 1 Hz liegt. Der bandbreitenlimitierte Ansatz würde die Aufnahme von 2000 Datenpunkten erfordern, um die Intensität des Spektrums an jeder Frequenz bestimmen zu können. Mit Compressed Sensing würden vielleicht 30 Datenpunkte genügen, um Auskunft über Intensität und Position der fünf von null verschiedenen Peaks zu erhalten. Für die Basis, die die komprimierte Darstellung definiert, gibt es viele Wahlmöglichkeiten – dies macht die Compressed-Sensing-Theorie zu einem äußerst leistungsfähigen Werkzeug. Beispiele für spärliche Basen umfassen die diskrete Kosinus-Transformation, die diskrete Wavelet-Transformation und die Totalvariation. Jüngste Arbeiten haben diese Konzepte weiter ausgedehnt; sie umfassen nun auch Signale, die eine konzise Darstellung haben oder strukturiert-spärlich sind,^[22,23] z.B. die meisten spektroskopischen Daten.^[24]

Wir veranschaulichen das Konzept des Compressed Sensing in Abbildung 2 anhand eines der klassischen Bilder der Bildkompressionstheorie – des Kameramanns. Stellen wir uns ein Gerät vor, mit dem wir Datenpunkte des Kameramann-Bildes in der Fourier-Domäne aufnehmen können. Auf klassischem Wege benötigten wir für jeden Pixel im fertigen Bild einen Datenpunkt und würden daraus das Bild durch einfache Fourier-Transformation gewinnen. Wenn wir weniger Messpunkte aufnehmen, würde die fehlenden Information das rekonstruierte Bild verschwimmen lassen, oder es würden Interferenzen oder verrauchte Artefakte auftreten. Die Theorie des Compressed Sensing sagt uns nun aber, dass wir das Bild auch aus unvollständigen Daten exakt rekonstruieren können, wenn wir es spärlich darstellen können. Das Bild des Kameramanns kann mithilfe einer Wavelet-Transformation spärlich dargestellt werden und lässt sich somit aus einem Bruchteil der Messungen rekonstruieren wie sie die konventionelle Sampling-Theorie verlangen würde. Der Hauptvorteil des Compressed Sensing gegenüber konventionellen Methoden liegt darin, dass durch Reduktion der Zahl an Datenpunkten, die zur Erhaltung der gewünschten Information nötig sind, Datensätze – ob nun Spektren oder Bilder – sehr viel schneller aufgenommen werden können als derzeit möglich ist. Obwohl die Mathematik des Compressed Sensing erst in jüngerer Zeit ausgearbeitet wurde, reichen die Ideen

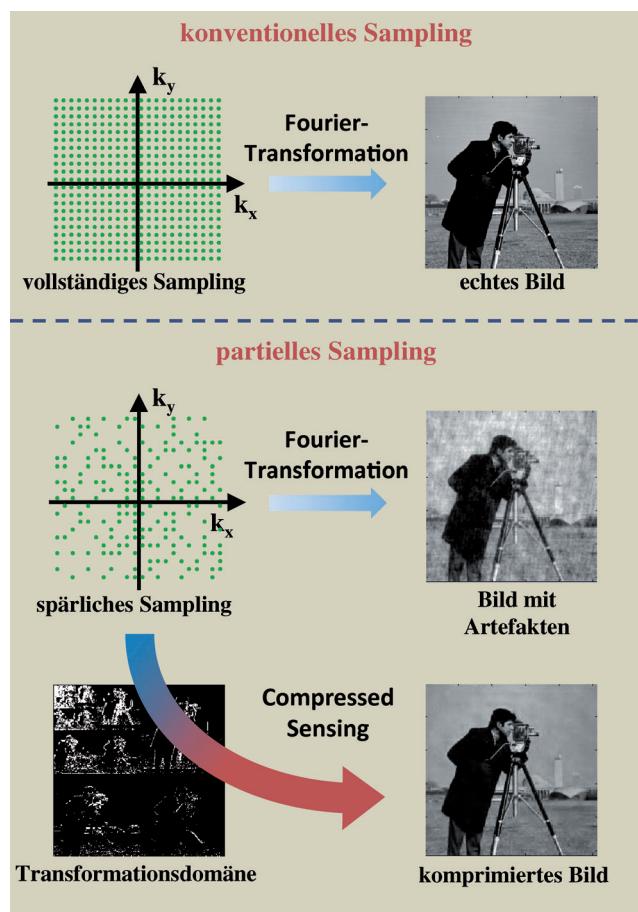


Abbildung 2. Die konventionelle Datenaufnahme erfordert die Messung eines Datenpunktes pro Bildpixel. Bei spärlicher Datenaufnahme erhält man mit konventionellen Techniken wie der Fourier-Transformation Artefakte im Endbild. Compressed Sensing überwindet dieses Problem und rekonstruiert das Originalbild mit hoher Genauigkeit, indem es die spärliche Besetzung in die Transformationsdomäne einrechnet. Die hier verwendete Transformation war eine separierbare zweidimensionale Coiflet-Transformation.^[25] Große Koeffizienten in der Transformationsdomäne erscheinen weiß, kleine Koeffizienten (oder Nullwerte) schwarz; nur wenige Koeffizienten (< 10%) in der Transformationsdomäne sind weiß, was zeigt, dass das Bild spärlich dargestellt ist.

bis in die 1970er Jahre zurück, als man nach Bildverarbeitungsmethoden für Radiointerferometriemessungen suchte. Diese frühen Arbeiten wollen wir im Folgenden kurz schließen.

3. Astronomie und Radioastronomie

Astronomische Daten (insbesondere aus Erkundungen) sind in der Bilddomäne oft schon von Natur aus spärlich, und Methoden für die Rekonstruktion spärlicher Bilder sind daher gut etabliert, vor allem im Gebiet der Radioastronomie. Ein Radiointerferometer (wie das Jansky Very Large Array, JVLA) misst die Komponenten der Helligkeitsverteilung des Himmels in der Fourier-Domäne, wobei jedes Antennenpaar für eine einzige Fourier-Komponente zuständig ist. Moderne Arrays besitzen ein paar Dutzend Antennen und nehmen

deshalb deutlich weniger Messungen vor als Pixel im rekonstruierten Bild vorhanden sind. Die Entwicklung des CLEAN-Algorithmus im Jahr 1974 lieferte ein leistungsstarkes Werkzeug für die Rekonstruktion solcher Interferometriedaten mit synthetischer Apertur (Abbildung 3).^[3]

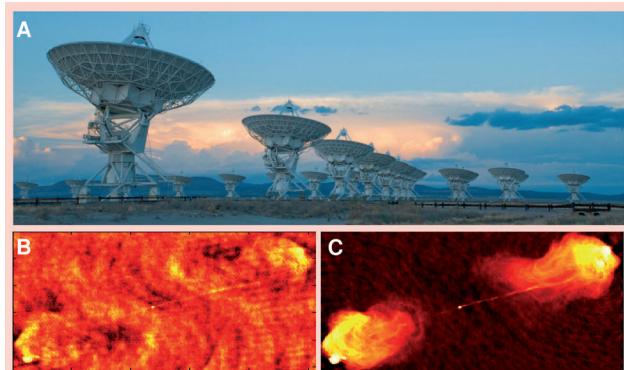


Abbildung 3. A) Radiointerferometer wie das Jansky Very Large Array (JVLA) haben begrenzte Beobachtungszeiten und fest eingestellte Antennengeometrien. Bildquelle: NRAO/AUI und NRAO. B) Diese Einschränkungen führen dazu, dass direkte Fourier-Rekonstruktionen schwach aufgelöste Bilder liefern. C) Im Gegensatz dazu ermöglicht der CLEAN-Algorithmus, der ähnlich dem Compressed Sampling auf dem Konzept der spärlichen Datenaufnahme basiert, eine genaue Rekonstruktion des Bildes. Bildquelle: NRAO/AUI und NRAO.

CLEAN wurde in der Radioastronomie extrem erfolgreich eingesetzt,^[26] und eine Variante des CLEAN-Algorithmus ist heute Standard in der Datenverarbeitung moderner Synthearrays. Erst mit dem Compressed Sensing stand jedoch eine Theorie zur Verfügung, welche die für die Anwendung von CLEAN erforderlichen Bedingungen vollständig beschreiben konnte. Man kann davon ausgehen, dass der mathematische Formalismus von Compressed Sensing zu stärker automatisierten Algorithmen für die Bildrekonstruktion sowie besseren Empfindlichkeiten und Auflösungen führen wird.^[27]

Eine besonders interessante Anwendung des Compressed Sensing in der Astronomie ist die Optimierung der Bildübertragung von Satelliten, wie z.B. des Herschel-Satelliten der Europäischen Raumfahrtagentur (ESA). Weil die ungeheure Datenflut aus dessen Instrumenten (4 Gbps) die Datenübertragungsrate weit übersteigt (120 kbps), müssen vor der Datenübertragung Bildkomprimierungstechniken angewendet werden. Komplexe Algorithmen sind hierfür nicht möglich, da auch die Prozessorzeit auf dem Satelliten begrenzt ist. Die ursprüngliche Idee der ESA war es, das Datenaufkommen durch Mittelung von Mehrfachframes zu reduzieren.^[28] Diese Methode ging aber zu Lasten der Auflösung. Im Vergleich dazu brachte das Compressed Sensing eine 30%ige Verbesserung der Auflösung ohne Verlust von Empfindlichkeit und bei gleichwertiger Rechenlast.^[29]

Es ist bemerkenswert, dass Compressed Sensing einen derart beträchtlichen Einfluss auf einem Gebiet hat, in dem die Signalrekonstruktion aus unvollständigen Daten gängig ist. Das bedeutet auch, dass Disziplinen wie die Biologie, Chemie, Physik und Medizin, für die solche Konzepte noch relativ neu sind, erst recht profitieren sollten. Um dies an

Beispielen zu erläutern, werden im Folgenden drei Fallstudien vorgestellt. Als erstes betrachten wir die Kernspintomographie (MRI; magnetic resonance imaging). Zweitens untersuchen wir, wie in der Computertomographie (CT) Compressed Sensing die Möglichkeit bietet, die Einstrahlung von ionisierender Strahlung zu limitieren, was wiederum neue Perspektiven für die Elektronentomographie im Nanometerbereich eröffnet. Als drittes verlassen wir den Bereich der Bildgebung und untersuchen die Anwendung von Compressed Sensing in der mehrdimensionalen Spektroskopie am Beispiel der NMR-Spektroskopie.

4. Kernspintomographie

Die Kernspintomographie (MRI) ist eines der wichtigsten Diagnoseinstrumente in der modernen Medizin und wird eingesetzt, um Gewebe- und Rückenmarksverletzungen sowie Krebs- und Gefäßerkrankungen nachzuweisen und die Struktur und Funktion des Gehirns zu untersuchen. Die Aufnahmezeiten sind lang – bis zu mehrere Minuten –, was eine unbewegte Bildaufnahme des Patienten erschwert. Es ist daher nicht überraschend, dass die medizinische MRI zu den ersten praktischen Anwendungen des Compressed Sensing außerhalb der Astrophysik gehörte.^[11] MRI in Kombination mit Compressed Sensing wurde zuerst in der Kernspintomographie und der schnellen Bildgebung des Gehirns eingesetzt. Die aufgenommene Datenmenge wurde um den Faktor 2 bis 10 verringert, ohne einen merklichen Abfall der Bildqualität. In diesem Beispiel wurde ein Standardprotokoll für die Bildgebung angewendet, und die Datenreduktion ergab eine entsprechende Zeiteinsparung um den Faktor 2 bis 10. Die wahre Stärke des Compressed Sensing zeigte sich vor allem in Kombinationen mit komplexeren MRI-Techniken und der dadurch möglichen Einzelschuss-Bildgebung, welche die Aufnahme von 3D-Bildern des Gehirns in nur 32 ms ermöglichte.^[30] Andere Anwendungsbeispiele sind die zeitaufgelöste Bildgebung am Herzen,^[31] spektroskopisches MRI,^[32] funktionales MRI (fMRI)^[30,33] und einige andere. Trotz seiner noch recht jungen Geschichte spielt das Compressed Sensing in der klinischen Pädiatrie bereits eine wichtige Rolle^[34] und hilft dort, Artefakte durch Patientenbewegung zu reduzieren (Abbildung 4). In den kommenden Jahren erwarten wir eine immer wichtiger werdende Rolle, da abzusehen ist, dass Compressed-Sensing-Algorithmen auch in kommerzielle Software implementiert werden.^[35]

Auch in anderen Disziplinen als der Medizin profitiert die Kernspintomographie zunehmend von Compressed Sensing, z.B. bei der Bildgebung von Strömungen in Mikrokanälen, Mikrofluidikinstrumenten^[36–38] und chemischen Reaktoren.^[39] Die Mikrofluidik ist ein hochinteressantes Gebiet, das einmal die chemische Synthese und die chemische und biologische Analytik revolutionieren könnte.^[40] Der Hauptvorteil der Mikrofluidik ist ihr kleiner Maßstab, der sie einerseits so interessant macht, andererseits aber Studien erschwert.^[38] Bajaj et al. haben gezeigt, dass Compressed Sensing in Kombination mit geeigneten Detektionsmethoden gute Möglichkeiten für die Untersuchung von mikrofluidischen Bauelementen bietet, da diese Systeme inhärent einfache

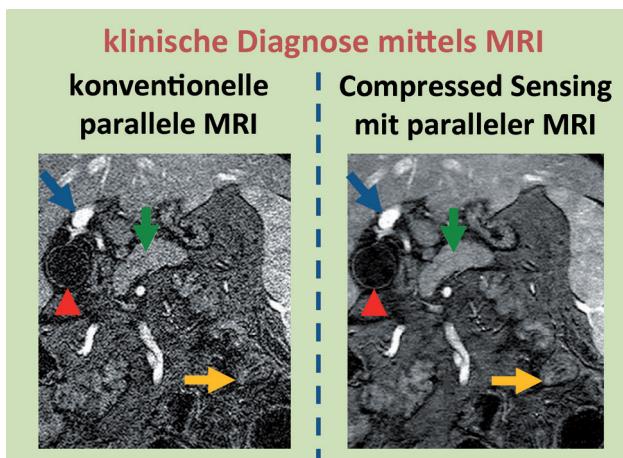


Abbildung 4. In der klinischen Pädiatrie sind Bildgebungsverfahren problematisch, denn die Patienten können während der Aufnahmezeit kaum still liegen. Das Compressed Sensing bietet bessere klinische Diagnosen, indem es die Aufnahmezeit verkürzt und gleichzeitig die räumliche Auflösung der Bilder verbessert. Es resultieren eine klarere Auszeichnung von Pankreasgang (grüner Pfeil), Darm (orangebicolorer Pfeil) und Gallblasenwand (rote Pfeilspitze) bei äquivalenter Definition der Pfortader im Vergleich zu konventioneller paralleler MRI. Übernommen aus Lit. [34].

(d.h. spärliche) Strukturen sind.^[37] Auch für die Charakterisierung von mehrphasigen Strömungen sind Compressed-Sensing-Methoden überaus vielversprechend.^[41] Mehrphasige Strömungen treten überall in der Natur und in industriellen Prozessen auf, ob bei granularen Dynamiken in der Sahara, bei der Produktion von Kraftstoffen aus Biomasse oder bei der Sequestrierung von Kohlenstoff. Allerdings sind diese Systeme optisch trüb, sodass es nur wenige tomographische Methoden gibt, insbesondere chemisch spezifische, die zur Untersuchung geeignet sind. MRI in Kombination mit Compressed Sensing bietet die Möglichkeit, in ausreichend kurzer Zeit komplexe, optisch trübe mehrphasige Strömungen nichtinvasiv auf ihre grundlegenden physikalischen Eigenschaften hin zu überprüfen. Mittlerweile kann man Bilder von mehrphasigen Strömungen mit nur 5 ms zeitlicher und 300 μ m räumlicher Auflösung aufnehmen; damit lassen sich Phänomene auf einer Zeitskala beobachten, auf der sich die Hydrodynamik des zu untersuchenden Phänomens nicht signifikant ändert. So wurden die Fluidfelder um eine aufsteigende Blase vermessen, und man fand einen Zusammenhang zwischen seitwärts driftenden Wirbeln unterhalb der Blase und der Flackerbewegung der Blase beim Aufsteigen.^[41] Solche Messungen sind mit anderen Techniken nicht durchführbar und wären auch mit einfacher MRI ohne Compressed Sensing nicht möglich.

5. Computertomographie

Die CT ist vielleicht die bekannteste Untersuchungstechnik für optisch trübe Systeme, und ihre Anwendungen reichen von der medizinischen Bildgebung bis zur Verfahrenstechnik, Physik und Biologie. Für verschiedene CT-Anwendungen erwies sich das Compressed Sensing als geeignet,

um genaue Rekonstruktionen aus einer kleinen Anzahl Projektionen zu erhalten. Anwendungsgebiete sind unter anderem die Mikroröntgen-CT von Kleintieren^[42] und medizinische CTs.^[43] Compressed Sensing wurde aber auch mit exotischen Anwendungen wie der Elektronentomographie kombiniert, die für die Chemie und die Materialwissenschaften von Interesse ist.^[44–50] Die Elektronentomographie nutzt beschleunigte Elektronen, um Bilder mit Sub-Angstrom-Genauigkeit zu erzeugen.^[51,52] Eingesetzt wird sie wegen ihrer hohen räumlichen Auflösung für die Charakterisierung von Katalysatoren, Viren und Nanoplasmonen. Die Anwendung der Elektronentomographie ist allerdings schwierig, da durch den fokussierten Ionenstrahl der Bereich an akquirierbaren Kippwinkeln begrenzt ist und der Strahl außerdem stark ionisierend wirkt, was die Zahl der akquirierbaren Projektionen einschränkt. Durch die Anwendung von Compressed Sensing lassen sich diese Einschränkungen überwinden.

Abbildung 5 veranschaulicht den positiven Effekt von Compressed Sensing auf die Strukturbestimmung von GaPd-Katalysatorpartikeln.^[47] GaPd gilt als vielversprechender Ersatz für AgPd in hochselektiven Hydrierungen unter Umwandlung von sp- in sp²-gebundenen Kohlenstoff.^[53–55] Diese Reaktion ist wichtig in vielen pharmazeutischen und agrochemischen Prozessen, oder auch zur Entfernung von Verunreinigungen aus olefinischen Monomeren vor der Polymerisation. Dass die Nanostruktur des Katalysators Selektivität und Umsatz entscheidend mitbestimmt, tritt immer klarer zu Tage. Mit elektronentomographischen Verfahren kann man diese Strukturen identifizieren. Allerdings produzieren konventionelle Verfahren wie die simultane iterative Rekonstruktionstechnik (SIRT) Artefakte und verschwom-

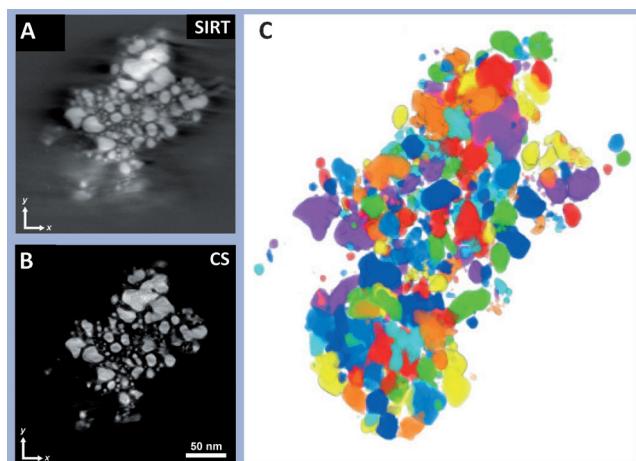


Abbildung 5. Elektronentomographische Rekonstruktion von GaPd-Nanokatalysatoren. A) Die konventionelle SIRT-Rekonstruktion zeigt deutliche Artefakte durch Kippwinkelbeschränkung und die begrenzte Projektionszahl. B) Mit Compressed Sensing wird das Tomogramm deutlich klarer. Die einzelnen Körnchen des Nanopartikels sind deutlich voneinander abgegrenzt, und das Bild lässt sich leicht segmentieren. Individuelle Körnchen können identifiziert und quantifiziert werden. Die Segmentierung des Bildes (B) ist in (C) dargestellt. Jedes Nanopartikel oder Agglomerat von Nanopartikeln erhält eine Farbe, die es von seinen direkten Nachbarn unterscheidet. Übernommen aus Lit. [47].

mene Tomogramme und erschweren somit die quantitative Analyse der Nanostruktur (Abbildung 5A).^[56] Klarere Tomogramme bringt eine Analyse durch Compressed Sensing. Die Nanopartikel sind viel besser voneinander und vom Hintergrund abgegrenzt (Abbildung 5B). Dementsprechend einfach werden Identifizierung und Quantifizierung individueller Körnchen des Nanoclusters (Abbildung 5C).^[47]

Einer der Hauptvorzüge von Compressed Sensing in der CT besteht darin, dass neben der präzisen Lokalisierung von Spezies auch die quantitative Rekonstruktion der Signalintensitäten möglich ist. Da die Intensität des projizierten Bildes mit der Atomzahl Z zunimmt, gibt die Elektronentomographie Auskunft über die chemische Zusammensetzung der Probe, und Intensitätsänderungen ermöglichen die Identifizierung verschiedener atomarer Spezies. Mit diesem Ansatz gelang erst jüngst eine Elementkartierung der Struktur von dimetallischen Kern-Schale-Nanopartikeln.^[57] Dimetallische Nanostrukturen sind im Allgemeinen stabiler und können auch eine höhere katalytische Aktivität haben als monometallische Strukturen.^[58,59] Um die Nanopartikel herzustellen, muss deren chemische Zusammensetzung in atomarer Größenordnung bekannt und zugänglich sein. Durch Elektronentomographie mit Compressed Sensing wurden Strukturänderungen an der Gold-Silber-Grenzfläche in einem Kern-Schale-Nanopartikel ermittelt.^[57] Solche Messungen dienen dazu, die Kenntnisse über den Einfluss der atomaren Struktur z.B. auf die katalytische Leistung zu erweitern, und sie geben uns ein Mittel an die Hand, die gezielte Entwicklung von Katalysatoren zu optimieren.

Wie bereits erwähnt, ist ein Hauptproblem bei der Elektronentomographie die ionisierende Strahlung, welche die Zahl an Projektionen (oder Daten) einschränkt. Dieses Problem gilt für fast alle CT-basierten Bildgebungstechniken. Daher versucht man intensiv, die Gesamtdosis der ionisierenden Strahlung zu senken, der Patienten oder Proben wie Nanokatalysatoren oder Viruspartikel ausgesetzt sind. Besonders problematisch wird dieses Problem bei biologischem Material, da hier die zu leistende Gesamtexposition die Zahl der möglichen Projektionsmessungen und deren Signal-Rausch-Verhältnis begrenzt. So fordert der Extremfall der elektronentomographischen Untersuchung von biologischem Gewebe bis zu 1000 Projektionen, um eine hohe räumliche Auflösung zu gewährleisten (ca. 2 nm). Das Problem ist, dass dann das Signal-Rausch-Verhältnis der einzelnen Messungen ca. 1 beträgt! Beim Compressed Sensing steigt der zu erwartende Fehler bei der Bildrekonstruktion mit der Zahl der Messungen an, wenn die Dosis gleichgehalten wird.^[60] Daher kann es sinnvoller sein, eine eher kleine Zahl an Messungen durchzuführen, von denen jede ein höheres Signal-Rausch-Verhältnis aufweist. In einer neueren Studie lieferte Compressed Sensing mit nur 9 Projektionen eine höhere Qualität der elektronentomographischen Bildrekonstruktion als konventionelle Algorithmen.^[44] Denkbar sind auch alternative Protokolle bei der Datenakquisition durch Compressed Sensing, um die Bestrahlungsdauer und -intensität in der Elektronentomographie noch weiter zu senken.^[61–63] Dies könnte die Elektronentomographie von strahlungsempfindlichen Proben im Nanogrößenbereich revolutionieren. Beispiele sind die Untersuchung von Viruspartikeln^[64] sowie die

zeitaufgelöste (4D)^[65] und spektral und atomar aufgelöste Elektronentomographie,^[49,57] die hochinteressante Techniken sind. Unlängst wurde z.B. die Elektronenenergieverlust-Spektrometrie (EELS) als elektronentomographische Technik mit Compressed Sensing kombiniert, um die Oberflächenplasmonenresonanz auf einem 100 nm großen Ag-Nanowürfel zu kartieren.^[48] Nur fünf spektral aufgelöste Kippprojektionen konnten aufgenommen werden, bevor der Elektronenstrahl die Probe zerstörte. Diese fünf Bilder reichten jedoch, um die Kanten-, Flächen- und Eckmoden der Oberflächenplasmonenresonanz sichtbar zu machen.

6. NMR-Spektroskopie

In der NMR-Spektroskopie gibt es noch keine allgemein anerkannte und verbreitete Anwendung für Compressed Sensing – Potenzial ist jedoch hinreichend vorhanden, insbesondere mit Blick auf die Geschwindigkeit der Datenakquisition. So benötigen Chemiker für die Proteinstrukturanalyse mit konventionellen Techniken bis zu vier Wochen für die Aufnahme eines dreidimensionalen (3D) Spektrums.^[66] Aufgrund dieser langen Zeiträume ist es üblich, mehrdimensionale NMR-Spektren aus weniger Messungen zu rekonstruieren als im Nyquist-Sampling eigentlich vorgesehen wäre;^[6–8] diese Art des Sampling wird allgemein als nichtuniformes Sampling (NUS) bezeichnet. Da solche NUS-Daten durch konventionelle Fourier-Transformation nicht rekonstruierbar sind, wurden verschiedene Datenverarbeitungsmethoden entwickelt, z.B. Linear-Prediction-, Maximum-Entropy- und Projection-Reconstruction-NMR.^[67] Ziel ist es immer, Geschwindigkeit, Empfindlichkeit (bei vorgegebener Zeitdauer) und die Auflösung der NMR-Spektren zu erhöhen.^[68,69] Oftmals sind die Ergebnisse beeindruckend, aber sie ließen sich nicht mit der nötigen Robustheit implementieren und fanden deshalb noch keine weite Verbreitung.^[70] Compressed Sensing liefert das mathematische Rüstzeug für eine Vereinheitlichung von Signalrekonstruktionstechniken über unterschiedliche Disziplinen, weshalb Algorithmen, die sich für Anwendungen wie die Astronomie als robust und zweckmäßig erwiesen haben, ohne Weiteres auch in der NMR-Spektroskopie implementiert werden können. Es ist daher zu erwarten, dass sich die Sparse-Sampling-Techniken in allen spektroskopischen Bereichen durchsetzen werden; erst kürzlich wurde eine 2D-Fourier-Transform-Infrarotspektroskopietechnik mit Compressed Sensing vorgestellt.^[71]

Zum ersten Mal wurde das Compressed Sensing mit mehrdimensionaler NMR-Spektroskopie kombiniert, um Biomoleküle zu charakterisieren (Abbildung 6).^[72–74] Später kamen auch schwierigere biomolekulare Anwendungen hinzu, wie die NOE-Spektroskopie (NOESY), die Informationen über die 3D-Konformation von Proteinen liefert.^[74–76] Die Kombination von Compressed Sensing mit mehrdimensionaler NMR-Spektroskopie bietet den Vorteil, dass eine sehr hohe spektrale Auflösung in realistischen Aufnahmezeiten erreicht werden kann. Feinste Unterschiede in den Spektren werden zugänglich, so im Fall von nahezu symmetrischen Cyclodextrinen.^[77] Klassisch aufgenommen hätte ein solches

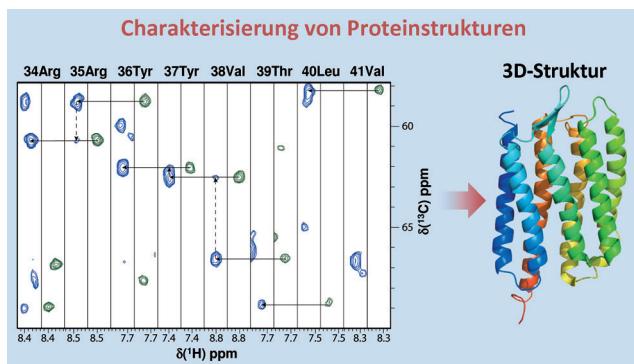


Abbildung 6. NMR-Spektren von Rhodopsin II, rekonstruiert durch Compressed Sensing. Das Spektrum ist aus Streifen von 3D-HNCA-(blau) und HN(CO)CA-Spektren (grün) zusammengefügt, mit denen die Zuordnung des Proteinrückgrats vorgenommen wurde. Obwohl für die Rekonstruktion nur 16% des vollständigen Datensatzes verwendet wurden, reichte die Qualität der Daten für die Zuordnung des Proteinrückgrats aus. Damit werden 3D-Strukturen von Proteinen in Lösung leichter zugänglich, wie das Bänderdiagramm rechts veranschaulicht. Übernommen aus Lit. [72].

2D-HSQC-Spektrum 20h benötigt, aber mit Compressed Sensing ließ sich diese Dauer auf 1h reduzieren. Da eine vollständige Zuordnung drei unterschiedliche Experimente erfordert, reicht mit Compressed Sensing eine Nacht Messzeit aus.

Besonders interessant im Bereich der mehrdimensionalen NMR-Spektroskopie sind die sogenannten „ultraschnellen“ oder Einzelschuss-Techniken.^[78] Durch Bildgradienten wird mit einer einzigen Anregung ein mehrdimensionales Spektrum erfasst. Obwohl die Technik sehr leistungsstark ist, verhindern steile Gradienten und ein notwendigerweise hohes Signal-Rausch-Verhältnis eine breitere Anwendung. Shrot et al. konnten zeigen,^[73] dass mit Compressed Sensing die Gradientenstärke um den Faktor 5 verringert werden kann. Der schwächere Gradient verkleinert ebenfalls die spektrale Bandbreite, was wiederum proportional das Signal-Rausch-Verhältnis erhöht. Durch diese Entwicklungen erweitert sich der Kreis möglicher Systeme, die sich durch die ultraschnelle NMR-Spektroskopie untersuchen lassen. Möglicherweise werden in Zukunft Experimente mit noch höheren Dimensionen zugänglich.

Höherdimensionale Messungen sind äußerst interessant, denn nur diese bieten die Möglichkeiten, noch größere Proteinstrukturen zu charakterisieren.^[79] Hier liegt die vielleicht attraktivste Möglichkeit für das Compressed Sensing. Die Theorie besagt, dass die Anzahl der benötigten Messungen zur Rekonstruktion eines Signals hauptsächlich von der Zahl der von null verschiedenen Daten im Signal abhängt, aber kaum von der Zahl der Datenpunkte im Endspektrum [Gl. (2)]. Erhöht man also die Zahl an Dimensionen, steigt die Zahl benötigter Messungen nur wenig. Um z.B. einem 2D-Experiment mit n_2 Punkten in der ersten indirekten Dimension und n_3 Punkten in der zweiten indirekten Dimension eine dritte Dimension zuzufügen, benötigt man auf konventionellem Wege einen Faktor von n_3 zusätzlichen Messungen. Mit Compressed Sensing sind es jedoch nur $[1 + \log(n_3)] / \log(n_2)$ zusätzliche Messungen. Angenommen, jede Dimen-

sion besitzt 32 Datenpunkte, so erhält man eine bis zu 16-fache Zeitersparnis; und für höher aufgelöste Spektren wäre die Ersparnis noch größer. Empirische Studien unterstützen diese theoretische Analyse. Demnach benötigen 2D-NMR-Spektren 20 % des Bedarfs eines Nyquist-Samplings, 3D-Spektren 4 % und 4D-Spektren nur 0.8 %.^[70] Um auf konventionellem Wege höherdimensionale Spektren aufzunehmen, muss man normalerweise mit erheblichen Aliaseffekten rechnen, wenn die zusätzliche Datenakquisitionszeit klein bleiben soll. Mit Compressed Sensing benötigt man dagegen nur wenig mehr Messungen, um die Daten in der zusätzlichen Dimension aufzunehmen, und Aliaseffekte treten nicht auf – mit der Folge, dass die effektive spektrale Auflösung deutlich steigt. Insbesondere für NOESY-Experimente hat sich die zusätzlich gewonnene Auflösung durch Compressed Sensing als vorteilhaft erwiesen, um die Überlappung von benachbarten Peaks zu reduzieren.^[74-76]

Ein sehr wichtiger Punkt sind auch die Auswirkungen des Compressed Sensing auf die apparetive Empfindlichkeit des NMR-Experiments. Empfindlichkeitsanalysen in der NMR-Spektroskopie sind noch sehr uneinheitlich und nicht klar definiert. Häufig wird die Empfindlichkeit als Signal-Rausch-Verhältnis angegeben, manchmal auch als Signalintensität selbst. Am sinnvollsten ist möglicherweise die Angabe über die Möglichkeit, ein Signal überhaupt nachzuweisen. Nach dieser Definition wurde unlängst gezeigt, dass Compressed Sensing die Empfindlichkeit von NMR-Experimenten erheblich verbessert, insbesondere bei Experimenten mit mehreren indirekten Dimensionen.^[68] Auch die Peakintensität wird durch Compressed Sensing quantitativ zugänglich.^[75] Quantitative Rekonstruktion und höhere Empfindlichkeit zahlen sich insbesondere bei der Untersuchung von biologischen Makromolekülen aus, bei denen gerade die schwachen Peaks wichtig sind, um die Struktur genau wiederzugeben. Abbildung 7 zeigt den Vergleich einer Datenrekonstruktion mit konventioneller Fourier-Transformation und mit Compressed Sensing.^[76] Ergebnis des konventionellen Ansatzes sind sehr schwache Peaks, die vom Hintergrundrauschen nur schwer zu differenzieren sind. Aus dem Compressed-Sensing-Ansatz gehen dagegen viel schärfere und intensivere Peaks hervor, die sich vom Hintergrundrauschen klar unterscheiden. Drei Peaks in dieser Ebene können sogar nur durch Compressed Sensing charakterisiert werden, im konventionell verarbeiteten Spektrum sind sie nicht zu bestimmen.

Eine neuere Übersicht hebt das große Potenzial der Compressed-Sensing-Technologie in der mehrdimensionalen NMR-Spektroskopie hervor und gibt Richtlinien für die praktische Implementierung.^[70] Daher ist zu erwarten, dass bald auch die gesamte NMR-Community vom Compressed Sensing profitieren wird und sie nicht nur Spezialisten in der Signalverarbeitung vorbehalten bleibt. Einige grundlegende Studien zur Proteinstruktur enthalten bereits Compressed-Sensing-Techniken,^[80-84] so auch Studien mit vier- und höherdimensionalen NMR-Experimenten.^[76, 85, 86] Besser zugängliche Implementierungen werden die weitere Verbreitung des Compressed Sensing zusätzlich beschleunigen. Insofern rückt die Charakterisierung von noch größeren und komplexeren Proteinen durch die dann möglichen Experimente mit noch höheren Dimensionen zunehmend in Reichweite. Solche

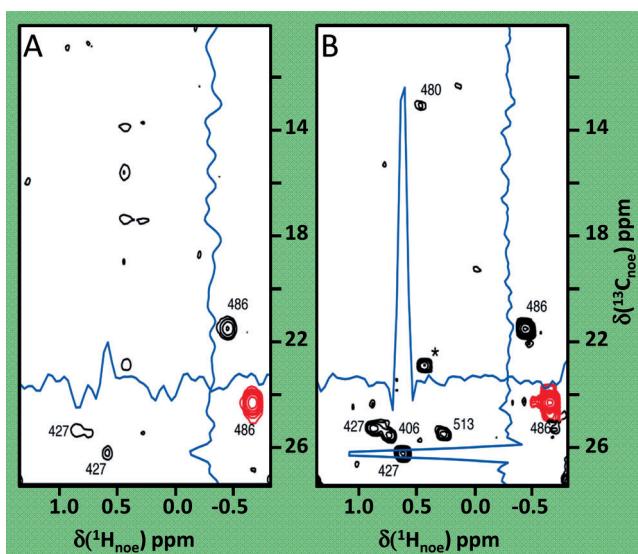


Abbildung 7. Ausschnitte aus 4D-NOESY-NMR-Spektren der MED25-Komponente des humanen Mediatorkomplexes mit der Transaktivierungsdomäne des Transkriptionsaktivators VP16 aus *Herpes simplex*. Die Methylgruppen von Isoleucin, Leucin und Valin sind besonders gekennzeichnet. Die Spektren wurden aus den gleichen experimentellen Daten A) durch diskrete Fourier-Transformation und B) mit einem Compressed-Sensing-Algorithmus rekonstruiert (Harvard Medical School-Implementierung des Iterative Soft Thresholding). Die blauen Linien geben die 1D-Spuren durch die 486/427-Kreuzpeaks wieder. Die hauptsächliche Strukturinformation tragen in diesem Fall die Kreuzpeaks niedriger Intensität. Diese sind in (A) von Artefakten infolge zu geringer Datenaufnahme verschleiert. Die Compressed-Sensing-Rekonstruktion in (B) eliminiert die Artefakte und ermöglicht somit eine genaue und quantitative Bestimmung der Intensität der Kreuzpeaks. Übernommen von Lit. [76]; die Originalabbildung enthält zusätzlich einen Vergleich mit dem Forward Maximum Entropy-Algorithmus.

Charakterisierungen beträfen z.B. die G-Protein-gekoppelten Rezeptoren (GPCRs), die aktuell Target von ungefähr 25 % der Arzneimittel sind,^[87] oder intrinsisch ungeordnete Proteine, die für viele Signalübertragungswege unerlässlich sind.^[88]

7. Grenzen von Compressed Sensing

In vielen Situationen bringt Compressed Sensing fabelhafte Ergebnisse, universell einsetzbar ist es aber nicht. Es gibt einige ernstzunehmende Einschränkungen. Vor allem müssen die in Abschnitt 2 erläuterten Kriterien für die Messungen gelten, um die Theorie anwenden zu können. Hauptschwierigkeit sind die geforderte Inkohärenz der Sensing-Matrix und die Identifizierung einer komprimierbaren Basis. So eignen sich Messsysteme, die Punktquellendaten anbieten, nicht für die direkte Anwendung von Compressed Sensing. Beispiel für ein solches Messsystem ist die konventionelle Digitalkamera. Für jedes Pixel, das das Bild einfängt, besitzt sie einen eigenen Detektor, und es gibt keine Inkohärenz zwischen Detektoranordnung und dem aufgenommenen Bild. Trotzdem kann Compressed Sensing hier nütz-

lich sein, wenn es Leistungseinschränkungen oder Limitationen in der Datenübertragung gibt.

Auch für die Rauschmessung kann Compressed Sensing interessant sein. Um zu verstehen, wie sich hier die Theorie verhält, denke man sich folgende zwei Szenarien: 1) Es gibt m unabhängige Rauschmessungen, aber jede Messung wird wiederholt, um ein hohes Signal-Rausch-Verhältnis zu erhalten. Insgesamt werden n Beobachtungen gemacht. 2) Es gibt n unabhängige Messungen, von denen jede ein niedriges Signal-Rausch-Verhältnis aufweist. Beide Szenarien führen zur gleichen Gesamtzahl an Messungen, aber nicht notwendigerweise zum gleichen Ergebnis. Intuitiv könnte man meinen, dass n unabhängige Messungen die beste Signalrekonstruktion ergeben. Empirische Studien zeigen jedoch, dass dies nicht immer so ist.^[39, 68] Der Grund für die Diskrepanz liegt vermutlich in der Energieverteilung im Signal, und derzeit wird versucht, die empirischen Ergebnisse auch theoretisch zu belegen.^[19] Interessant sind in diesem Zusammenhang die Ergebnisse von Willet et al. Demnach führen weniger Messungen, jede aber mit höherem Signal-Rausch-Verhältnis, zu einer merklichen Verbesserung der Qualität des Endbildes, wenn das Rauschen eine Poisson-Verteilung hat.^[60]

8. Zusammenfassung und Ausblick

Compressed Sensing wurde als Methode entwickelt, um die scheinbar unnötige Prozedur einer vollständigen Bildaufnahme und der anschließenden Komprimierung zu umgehen. Wo stehen wir mit diesen Bemühungen? In bestimmte Disziplinen, z.B. in der Astronomie (Herschel-Satellit), hat sich die gleichzeitige Messungen und Komprimierung von Daten exzellent bewährt. In anderen Fällen wird Compressed Sensing wahrscheinlich nicht das konventionelle Vorgehen, d.h. vollständiges Sampling und anschließende Komprimierung, ganz ersetzen können. Dazu wird es nur dann kommen, wenn die Messungen selbst oder aber die Übertragung der Messungen sehr kostenintensiv sind. Andererseits bietet Compressed Sensing die Möglichkeit, instabile (z.B. Proteine in der NMR-Spektroskopie)^[72] oder strahlungsempfindliche Systeme (z.B. unter ionisierender Strahlung) zu vermessen.^[43] Darüber hinaus stellt Compressed Sensing einen neuartigen mathematischen Formalismus zur Verfügung, um vollkommen neue Messsysteme zu entwerfen. Auf diesem Gebiet gibt es derzeit vielleicht die spannendsten Entwicklungen.

Das berühmteste Beispiel für ein solches vollkommen neues Sensing-Protokoll ist die „Ein-Pixel“-Kamera.^[12] Diese besitzt anstelle eines das Bild aufnehmenden Sensorarrays (wie in einer CCD) nur einen einzelnen Sensor; rekonstruiert wird das Bild durch Mehrfachmessungen mit diesem Sensor. Die räumliche Kodierung läuft über ein Array von Mikrospiegeln, wie in Abbildung 8 veranschaulicht. Wiederhergestellt wird das Bild durch Compressed Sensing der Messungen und aus der Kenntnis über die Orientierung der Spiegel. Eine ähnliche Apparatur ist die Einzelschuss-Anordnung, in der eine kodierte Blende inkohärente Bilddaten auf einen Sensor niedriger Auflösung projiziert; mit einer einzigen Aufnahme kann das gesamte Geschehen abgebildet werden.^[89] Beide

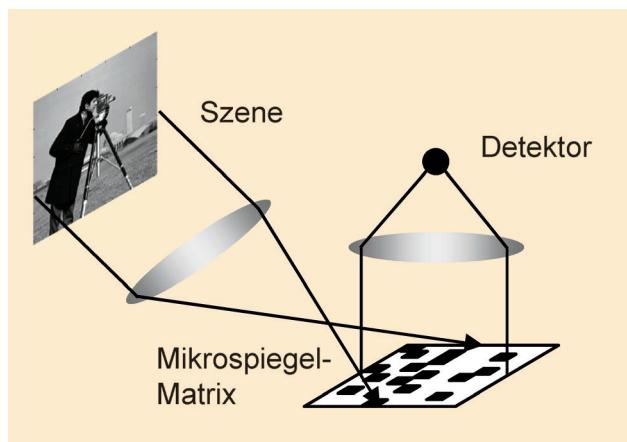


Abbildung 8. Funktionsweise der Ein-Pixel-Kamera. Das aufzunehmende Bild wird auf eine Mikrospiegel-Matrix projiziert, die immer nur einen Teil des Ursprungsbildes abdeckt. Von dort erfolgt die Fokussierung des gesamten Lichts auf einen Ein-Pixel-Detektor. Durch Änderungen in der Mikrospiegel-Matrix werden andere Aspekte des Ursprungsbildes beleuchtet. Das vollständige Bild kann nach mehreren Messungen rekonstruiert werden, für jede Messung wurde nur ein einziger Ein-Pixel-Detektor benötigt. Übernommen aus Lit. [13].

Ansätze haben gemein, dass sie die komplexen Anforderungen bei der Bildaufnahme von der Hardware (Aufnahme der Daten) auf die Software (Rekonstruktion) übertragen. Daher bietet sich das Compressed Sensing für ein schnelles Bildgebungsverfahren an, wenn Sensorarrays teuer oder für die gewünschte Frequenz nicht verfügbar sind. Solche Frequenzen liegen im Terahertz-Bereich.^[90] Indem das Compressed Sensing die Bildkompression bereits in die Datenakquisition integriert, kann es hochauflösende Bildgebungsverfahren verbilligen und sie energieeffizienter gestalten. Das kann wichtige Konsequenzen für die Entwicklung von Sensoren der nächsten Generation haben, die in alltäglichen Gegenständen eingesetzt werden – z. B. in Mobiltelefonen.

Ebenfalls als sehr nützlich hat sich das Compressed Sensing für die ultraschnelle optische Bildgebung bei Auflösungen unterhalb der eingesetzten Wellenlänge erwiesen.^[91,92] Normalerweise liegt die Auflösung von optischen Bildgebungsverfahren bei Werten bis zur halben Wellenlänge des eingestrahlten Lichts. Eine Rekonstruktion nach dem Vorbild des Compressed Sensing ermöglichte jetzt ein ultraschnelles Verfahren für das Coherent Diffraction Imaging (CDI) im Subwellenlängenbereich. Mit einem 532-nm-Laser ließen sich Objekte mit einer Auflösung von 100 nm und kleiner vermessen.^[92] Ziel der Arbeiten war es, die Bildauflösung von CDI zu verbessern und somit Moleküle strukturell charakterisieren zu können, die sich nicht kristallisieren lassen. Noch bessere Auflösungen brachte eine Methode namens Stochastic Optical Reconstruction Microscopy (STORM).^[92] Mit 42 nm räumlicher und sekundengenauer zeitlicher Auflösung wurden hierbei Mikrotubuli einer lebenden *Drosophila*-S2-Zelle beobachtet. Diese Ergebnisse zeigen, dass Vorgänge und Strukturen im Nanogrößenbereich heutzutage durch optische Bildgebungstechniken im lebenden Gewebe und in Echtzeit erfassbar sind.

Was einst aus der Informationstheorie heraus entwickelt wurde, dient nun interessanterweise als Instrument, um die Bandbreite bei der Übertragung von Information zu erhöhen.^[93] Viele Anwendungen von Analog-Digital-Konvertern (ADCs) im Radiofrequenzbereich haben inzwischen eine Bandbreite, die mit der derzeitigen ADC-Technologie nicht mehr abgedeckt werden kann. Weil das Sampling für die ADCs abhängig von der Nyquist-Rate ist, überfordert es durch die schiere Menge Festplatten und Datentransfersysteme. Wird z. B. ein 1-GHz-Signal noch mit einer Auflösung von 16 Bit aufgenommen, so produziert dies Daten von 4 GBs^{-1} , womit selbst moderne Festplatten binnen Minuten voll wären. Compressed Sensing ermöglicht hingegen die Datenaufnahme bei viel kleinerer Rate. Darüber hinaus kann man je nach Größe, Gewicht und verfügbarer Leistung die Genauigkeit des ADC einstellen. Von einer vollständig digitalisierten Datenaufnahme kann auch der gesamte Bereich der Spektroskopie profitieren.

Die Rekonstruktion von spärlichen („sparse“) Signalen ist ein Konzept aus den 1960er Jahren. Damals gab es dafür jedoch nur wenige Anwendungen in ein paar wissenschaftlichen Spezialgebieten. Heute liefert Compressed Sensing den Formalismus, um die komplexen Konzepte von Spärlichkeit und Informationstheorie aus einem mathematischen Spezialgebiet der Informationstheorie herauszuholen und auf reale Anwendungen zu übertragen. Diese Transmission hat zur Folge, dass nur noch etwa ein Drittel aller Artikel, die die Basisarbeiten zum Compressed Sensing zitieren, aus der Mathematik und Informatik stammen. Alle anderen werden von Akustikern, Astronomen, Biologen, Chemikern, Geophysikern, Medizinern und Ozeanographen geschrieben, und täglich werden es mehr.

Wir danken dem Engineering and Physical Sciences Research Council (Grant No. EP/K039318/1) und Microsoft Research für finanzielle Unterstützung. Paul Alexander danken wir für die Weitergabe seines großen Wissens über die Anwendung von Compressed Sensing in der Astrophysik. Siemens Healthcare stellte uns freudlicherweise das MRI-Bild im grafischen Inhaltsverzeichnis zur Verfügung.

Eingegangen am 17. Januar 2014,
veränderte Fassung am 2. Juni 2014
Online veröffentlicht am 27. Oktober 2014

Übersetzt von Dr. Roswitha Harrer, Otterberg

- [1] H. Nyquist, *Trans. A. I. E.* **1928**, 617–644.
- [2] C. E. Shannon, *Proc. IRE* **1949**, 37, 10–21.
- [3] J. A. Hogbom, *Astron. Astrophys. Suppl. Ser.* **1974**, 15, 417–426.
- [4] H. L. Taylor, S. C. Banks, J. F. McCoy, *Geophysics* **1979**, 44, 39–52.
- [5] S. Gull, G. Daniell, *Nature* **1978**, 272, 686–690.
- [6] A. J. Shaka, J. Keeler, R. Freeman, *J. Magn. Reson.* **1984**, 56, 294–313.
- [7] J. C. Hoch, *J. Magn. Reson.* **1985**, 64, 436–440.
- [8] S. Sibisi, *Nature* **1983**, 301, 134–136.
- [9] E. J. Candès, J. K. Romberg, T. Tao, *Commun. Pure Appl. Math.* **2006**, 59, 1207–1223.
- [10] D. L. Donoho, *IEEE Trans. Inf. Theory* **2006**, 52, 1289–1306.

- [11] M. Lustig, D. L. Donoho, J. M. Pauly, *Magn. Reson. Med.* **2007**, *58*, 1182–1195.
- [12] M. F. Duarte, M. A. Davenport, D. Takhar, J. N. Laska, T. Sun, K. F. Kelly, R. G. Baraniuk, *IEEE Signal Process. Mag.* **2008**, *25*, 83–91.
- [13] R. G. Baraniuk, *IEEE Signal Process. Mag.* **2007**, 118–124.
- [14] J. C. Barna, E. D. Laue, *J. Magn. Reson.* **1987**, *75*, 384–389.
- [15] K. Kazimierczuk, A. Zawadzka, W. Koźmiński, *J. Magn. Reson.* **2008**, *192*, 123–130.
- [16] S. G. Hyberts, K. Takeuchi, G. Wagner, *J. Am. Chem. Soc.* **2010**, *132*, 2145–2147.
- [17] R. L. Cook, *ACM Trans. Graph.* **1986**, *5*, 51–72.
- [18] J. I. Yellott, *Science* **1983**, *221*, 382–385.
- [19] B. Adcock, A. C. Hansen, C. Poon, B. Roman, arXiv:1302.0561, **2013**, 1–44.
- [20] J. A. Tropp, S. J. Wright, *Proc. IEEE* **2010**, *98*, 948–958.
- [21] E. J. Candès, *C. R. Math.* **2008**, *346*, 589–592.
- [22] R. G. Baraniuk, V. Cevher, M. B. Wakin, *Proc. IEEE* **2010**, *98*, 959–971.
- [23] M. F. Duarte, Y. C. Eldar, *IEEE Trans. Signal Process.* **2011**, *59*, 4053–4085.
- [24] M. F. Duarte, R. G. Baraniuk, *Appl. Comput. Harmon. Anal.* **2013**, *35*, 111–129.
- [25] I. Daubechies, *SIAM J. Math. Anal.* **1993**, *24*, 499–519.
- [26] K. I. Kellermann, J. M. Moran, *Annu. Rev. Astron. Astrophys.* **2001**, *39*, 457–509.
- [27] Y. Wiaux, L. Jacques, G. Puy, A. M. M. Scaife, P. Vandergheynst, *Mon. Not. R. Astron. Soc.* **2009**, *395*, 1733–1742.
- [28] A. N. Belbachir, C. Reimers, *EURASIP J. Appl. Signal Processing* **2005**, 2585–2594.
- [29] J. Bobin, J.-L. Starck, R. Ottensamer, *IEEE J. Sel. Top. Signal Process.* **2008**, *2*, 718–726.
- [30] T. Hugger, B. Zahneisen, P. LeVan, K. J. Lee, H.-L. Lee, M. Zaitsev, J. Hennig, *PLoS One* **2011**, *6*, e28822.
- [31] S. G. Lingala, Y. Hu, E. DiBella, M. Jacob, *IEEE Trans. Med. Imaging* **2011**, *30*, 1042–1054.
- [32] T. Kampf, A. Fischer, T. C. Basse-Lüsebrink, G. Ladewig, F. Breuer, G. Stoll, P. M. Jakob, W. R. Bauer, *J. Magn. Reson.* **2010**, *207*, 262–273.
- [33] D. J. Holland, C. Liu, X. Song, E. L. Mazerolle, M. T. Stevens, A. J. Sederman, L. F. Gladden, R. C. N. D'Arcy, C. V. Bowen, S. D. Beyea, *Magn. Reson. Med.* **2013**, *70*, 1634–1643.
- [34] S. S. Vasanawala, M. T. Alley, B. A. Hargreaves, R. A. Barth, J. M. Pauly, M. Lustig, *Radiology* **2010**, *256*, 607–616.
- [35] C. M. Thiele, W. Bermel, *J. Magn. Reson.* **2012**, *216*, 134–143.
- [36] J. L. Paulsen, H. Cho, G. Cho, Y.-Q. Song, *J. Magn. Reson.* **2011**, *213*, 166–170.
- [37] V. S. Bajaj, J. Paulsen, E. Harel, A. Pines, *Science* **2010**, *330*, 1078–1081.
- [38] E. Paciok, B. Blümich, *Angew. Chem.* **2011**, *123*, 5367–5369; *Angew. Chem. Int. Ed.* **2011**, *50*, 5258–5260.
- [39] D. J. Holland, D. M. Malioutov, A. Blake, A. J. Sederman, L. F. Gladden, *J. Magn. Reson.* **2010**, *203*, 236–246.
- [40] G. M. Whitesides, *Nature* **2006**, *442*, 368–373.
- [41] A. B. Tayler, D. J. Holland, A. J. Sederman, L. F. Gladden, *Phys. Rev. Lett.* **2012**, *108*, 264505.
- [42] B. E. Nett, R. Brauweiler, W. Kalender, H. Rowley, G.-H. Chen, *Phys. Med. Biol.* **2010**, *55*, 2333–2350.
- [43] E. Y. Sidky, X. Pan, I. S. Reiser, R. M. Nishikawa, R. H. Moore, D. B. Kopans, *Med. Phys.* **2009**, *36*, 4920–4932.
- [44] Z. Saghi, D. J. Holland, R. Leary, A. Falqui, G. Bertoni, A. J. Sederman, L. F. Gladden, P. A. Midgley, *Nano Lett.* **2011**, *11*, 4666–4673.
- [45] B. Goris, W. Van den Broek, K. J. Batenburg, H. H. Mezerji, S. Bals, *Ultramicroscopy* **2012**, *113*, 120–130.
- [46] J. M. Thomas, R. Leary, P. A. Midgley, D. J. Holland, *J. Colloid Interface Sci.* **2013**, *392*, 7–14.
- [47] R. Leary, Z. Saghi, P. A. Midgley, D. J. Holland, *Ultramicroscopy* **2013**, *131*, 70–91.
- [48] O. Nicoletti, F. de La Pena, R. K. Leary, D. J. Holland, C. Ducati, P. A. Midgley, *Nature* **2013**, *502*, 80–84.
- [49] B. Goris, S. Bals, W. Van den Broek, E. Carbó-Argibay, S. Gómez-Graña, L. M. Liz-Marzán, G. Van Tendeloo, *Nat. Mater.* **2012**, *11*, 930–935.
- [50] I. Arslan, E. A. Stach, *Nat. Mater.* **2012**, *11*, 911–912.
- [51] P. A. Midgley, M. Weyland, *Ultramicroscopy* **2003**, *96*, 413–431.
- [52] J. M. Thomas, P. A. Midgley, C. Ducati, R. K. Leary, *Prog. Nat. Sci. Mater. Int.* **2013**, *23*, 222–234.
- [53] A. Ota, M. Armbrüster, M. Behrens, D. Rosenthal, M. Friedrich, I. Kasatkin, F. Girsieds, W. Zhang, R. Wagner, R. Schlögl, *J. Phys. Chem. C* **2011**, *115*, 1368–1374.
- [54] M. Armbrüster, K. Kohnir, M. Behrens, D. Teschner, Y. Grin, R. Schlögl, *J. Am. Chem. Soc.* **2010**, *132*, 14745–14747.
- [55] F. Studt, F. Abild-Pedersen, T. Bligaard, R. Z. Sørensen, C. H. Christensen, J. K. Nørskov, *Science* **2008**, *320*, 1320–1322.
- [56] R. Leary, Z. Saghi, M. Armbruster, G. Wowsnick, R. Schlogl, J. M. Thomas, P. A. Midgley, *J. Phys. Chem. C* **2012**, *116*, 13343–13352.
- [57] B. Goris, A. De Backer, S. Van Aert, S. Gómez-Graña, L. M. Liz-Marzán, G. Van Tendeloo, S. Bals, *Nano Lett.* **2013**, *13*, 4236–4241.
- [58] K. Tedsree, T. Li, S. Jones, C. W. A. Chan, K. M. K. Yu, P. A. J. Bagot, E. A. Marquis, G. D. W. Smith, S. C. E. Tsang, *Nat. Nanotechnol.* **2011**, *6*, 302–307.
- [59] M. B. Cortie, A. M. McDonagh, *Chem. Rev.* **2011**, *111*, 3713–3735.
- [60] M. Raginsky, R. M. Willett, Z. T. Harmany, R. F. Marcia, *IEEE Trans. Signal Process.* **2010**, *58*, 3990–4002.
- [61] A. Stevens, H. Yang, L. Carin, I. Arslan, N. D. Browning, *Reprod. Syst. Sex. Disord.* **2013**, *0*, 1–11.
- [62] P. Binev, W. Dahmen, R. Devore, P. Lamby, D. Savu, R. Sharpley in *Modeling Nanoscale Imaging in Electron Microscopy* (Hrsg.: T. Vogt, W. Dahmen, P. Binev), Springer, US, **2012**, Kap. 4, S. 73–126.
- [63] H. S. Anderson, J. Ilic-Helms, B. Rohrer, J. Wheeler, K. Larson, *Proc. SPIE-IS&T Electron. Imaging* (Ed.: C. A. Bouman), **2013**, p. 86570C.
- [64] R. I. Koning, A. J. Koster, *Ann. Anat.* **2009**, *191*, 427–445.
- [65] A. H. Zewail, *Science* **2010**, *328*, 187–193.
- [66] D. P. Frueh, A. C. Goodrich, S. H. Mishra, S. R. Nichols, *Curr. Opin. Struct. Biol.* **2013**, *23*, 734–739.
- [67] R. Freeman, E. Kupce in *Advanced Techniques in Biophysics* (Hrsg.: J. L. R. Arrondo, A. Alonso), **2006**, Kap. 6, S. 129–146.
- [68] S. G. Hyberts, S. A. Robson, G. Wagner, *J. Biomol. NMR* **2013**, *55*, 167–178.
- [69] D. Rovnyak, J. C. Hoch, A. S. Stern, G. Wagner, *J. Biomol. NMR* **2004**, *30*, 1–10.
- [70] S. G. Hyberts, H. Arthanari, S. A. Robson, G. Wagner, *J. Magn. Reson.* **2014**, *241*, 60–73.
- [71] J. A. Dunbar, D. G. Osborne, J. M. Anna, K. J. Kubarych, *J. Phys. Chem. Lett.* **2013**, *4*, 2489–2492.
- [72] D. J. Holland, M. J. Bostock, L. F. Gladden, D. Nietlispach, *Angew. Chem.* **2011**, *123*, 6678–6681; *Angew. Chem. Int. Ed.* **2011**, *50*, 6548–6551.
- [73] Y. Shrot, L. Frydman, *J. Magn. Reson.* **2011**, *209*, 352–358.
- [74] K. Kazimierczuk, V. Y. Orekhov, *Angew. Chem.* **2011**, *123*, 5670–5673; *Angew. Chem. Int. Ed.* **2011**, *50*, 5556–5559.
- [75] M. J. Bostock, D. J. Holland, D. Nietlispach, *J. Biomol. NMR* **2012**, *54*, 15–32.
- [76] S. G. Hyberts, A. G. Milbradt, A. B. Wagner, H. Arthanari, G. Wagner, *J. Biomol. NMR* **2012**, *52*, 315–327.
- [77] M. Misiak, W. Koźmiński, K. Chmurski, K. Kazimierczuk, *Magn. Reson. Chem.* **2013**, *51*, 110–115.

- [78] L. Frydman, T. Scherf, A. Lupulescu, *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **2002**, *99*, 15858–15862.
- [79] G. M. Clore, A. M. Gronenborn, *Science* **1991**, *252*, 1390–1399.
- [80] A. J. Wommack, S. A. Robson, Y. A. Wanniarachchi, A. Wan, C. J. Turner, G. Wagner, E. M. Nolan, *Biochemistry* **2012**, *51*, 9624–9637.
- [81] A. S. Maltsev, J. Ying, A. Bax, *Biochemistry* **2012**, *51*, 5004–5013.
- [82] J. Roche, J. Ying, A. S. Maltsev, A. Bax, *ChemBioChem* **2013**, *14*, 1754–1761.
- [83] F. Hagn, M. Etzkorn, T. Raschle, G. Wagner, *J. Am. Chem. Soc.* **2013**, *135*, 1919–1925.
- [84] L. K. Regula, R. Harris, F. Wang, C. D. Higgins, J. F. Koellhoffer, Y. Zhao, K. Chandran, J. Gao, M. E. Girvin, J. R. Lai, *Biochemistry* **2013**, *52*, 3393–3404.
- [85] K. Kazimierczuk, J. Stanek, A. Zawadzka-Kazimierczuk, W. Koźmiński, *ChemPhysChem* **2013**, *14*, 3015–3025.
- [86] B. E. Coggins, J. W. Werner-Allen, A. Yan, P. Zhou, *J. Am. Chem. Soc.* **2012**, *134*, 18619–18630.
- [87] J. P. Overington, B. Al-Lazikani, A. L. Hopkins, *Nat. Rev. Drug Discovery* **2006**, *5*, 993–996.
- [88] L. Isaksson, M. Mayzel, M. Saline, A. Pedersen, J. Rosenlöw, B. Brutscher, B. G. Karlsson, V. Y. Orekhov, *PLoS One* **2013**, *8*, e62947.
- [89] J. Romberg, *SIAM J. Imaging Sci.* **2009**, *2*, 1098.
- [90] W. L. Chan, M. L. Moravec, R. G. Baraniuk, D. M. Mittleman, *Opt. Lett.* **2008**, *33*, 974–976.
- [91] A. Szameit, Y. Shechtman, E. Osherovich, E. Bullkitch, P. Sidorenko, H. Dana, S. Steiner, E. B. Kley, S. Gazit, T. Cohen-Hyams, S. Shoham, M. Zibulevsky, I. Yavneh, Y. C. Eldar, O. Cohen, M. Segev, *Nat. Mater.* **2012**, *11*, 455–459.
- [92] L. Zhu, W. Zhang, D. Elnatan, B. Huang, *Nat. Methods* **2012**, *9*, 721–723.
- [93] J. A. Tropp, J. N. Laska, M. F. Duarte, J. K. Romberg, R. G. Baraniuk, *IEEE Trans. Inf. Theory* **2010**, *56*, 520–544.



GESELLSCHAFT DEUTSCHER CHEMIKER

Ausschreibung Klaus-Grohe-Preis 2015

Kontakt

Gesellschaft

Deutscher Chemiker e.V.

Preise und Auszeichnungen

Postfach 90 04 40

60444 Frankfurt a.M.

E-Mail: b.koehler@gdch.de

Telefon: +49 (0)69 7917-323

Fax: +49 (0)69 7917-1323

Die „Klaus-Grohe-Stiftung“, eingerichtet bei der Gesellschaft Deutscher Chemiker, zeichnet hervorragende junge Wissenschaftler sowie Wissenschaftlerinnen an deutschen und europäischen Forschungsstätten (Doktoranden/innen sowie Postdoktoranden/innen bis zu drei Jahre nach Abschluss der Promotion), die auf dem Gebiet der Medizinischen Chemie/Wirkstoffforschung tätig sind, mit dem „Klaus-Grohe-Preis“ aus. Die Preisträger sollten in der Regel einen Bezug zur Medizinischen Chemie/Wirkstoffforschung in Deutschland aufweisen.

Zwei Preise werden vergeben. Sie sind mit jeweils 2.000,- Euro dotiert.

Die Preise werden im Rahmen des GDCh-Wissenschaftsforum Chemie verliehen, das vom 30. August bis 2. September 2015 in Dresden stattfindet. Die Preisträger werden über ihre wissenschaftlichen Arbeiten in einem Vortrag berichten.

Bitte senden Sie Ihre Kandidatenvorschläge (Eigenbewerbungen sind möglich) inklusive Begründung, Curriculum Vitae und Publikationsliste bis zum **15. Februar 2015** an b.koehler@gdch.de oder per Post an die Geschäftsstelle der GDCh, Barbara Köhler, Preise und Auszeichnungen, Varrentrappstraße 40 - 42, 60486 Frankfurt am Main.