

TopSpin人工智能算法

mldcon: TopSpin中基于人工智能的反卷积算法

应用指南

Innovation with Integrity

本应用指南介绍了TopSpin人工智能算法家族的最新成员*mldcon*。*mldcon*提供了一种新颖的反卷积方法。这种方法兼具机器学习方法的灵活性与经典算法的准确性。

*mldcon*增强了TopSpin软件的分析能力，并且通过对一维核磁共振谱图进行全自动、无参数的反卷积，实现了更准确的核磁共振数据解释。

概述

从一堆信号重叠的核磁共振谱图中获取信号峰以及信号峰参数信息是许多核磁共振谱应用和分析的一个重要步骤。虽然由于其组合的复杂性，这项工作通常需要在计算机的帮助下进行，但许多算法仍然难以完全自动地提供令人满意的结果。这主要是由于反卷积是一个不适定问题。因此，算法很难找到满足人类需求的解决方案。

在布鲁克，我们致力于提供创新解决方案，以增强核磁共振的分析能力。随着客户对波谱工作流程自动化（包括自动分析核磁共振谱图）的兴趣日益增加，我们已开发出基于人工智能（AI）的算法*mldcon*对一维核磁共振谱图进行反卷积，为客户提供有力支持。

*mldcon*利用人工智能将核磁共振谱图分割为一个个对客户需求有意义的信号峰，同时结合使用经典算法获取信号峰参数的准确估算值。该算法可以用于布鲁克TopSpin软件4.2.0版及以上，可以在命令行中输入*mldcon*，或者在“Analyse”选项卡中点击Line Shapes > Deconvolution (Machine Learning Algorithm)。参考文献[1]提供了更多关于技术方面和性能的信息。

重叠信号的定量

对于核磁共振用户来说，计算核磁共振谱图中信号的面积是十分常见的做法。这是核磁共振应用中要求的步骤之一，比如结构验证和解析，使用内部标准进行分析物定量，或评估有机化学中的反应收率或聚合物分析中不同位点的比率等。当信号基线分离时，这可以简单地通过计算谱图中目标区域的积分来完成。如果目标信号与其他信号重叠，则必须进行反卷积。

*mldcon*问世——分析存在重叠信号的核磁共振谱图从未如此简单。

布鲁克TopSpin 4.2.0版本及以上将提供该算法。运行该算法仅需几秒钟——在命令行中输入*mldcon*即可使用该算法。



图1 显示了*mldcon*对400 MHz ¹H谱图的分析结果。图中右侧表格显示了*mldcon*确定的峰值参数示例。TopSpin *mldcon*可视化窗口中显示了*mldcon*分析结果，其中包括输入谱图（蓝色）、检测到的峰（灰色）、总和（重构谱图，红色），以及输入谱图和重构谱图之间的差值（残差，黑色）。该算法将分析结果存储为.csv文件，报告峰值化学位移、强度、线宽、线形类型、参数以及每个峰的面积。

在这些情况下，*mldcon*快速、准确对重叠区域进行重建。图1显示了该算法对布鲁克400 MHz核磁共振波谱仪一维¹H谱图上一个具有挑战性区域的分析结果。该算法可完全自动化运行，并且能够成功地识别该区域的宽峰和窄峰。在这种情况下，通过使用*mldcon*，我们可以计算出图1中显示为橙色的宽峰与显示为浅蓝色的四重峰的比率为1.4:1。

对Fourier 80谱图的分析结果

图2显示了*mldcon*对使用布鲁克台式核磁共振波谱仪Fourier 80所获得80 MHz ¹H核磁共振谱图的分析结果示例。由于台式系统本身的分辨率较低，由此产生的信号重叠程度较高，反卷积对这类谱图分析的效果通常比高场强核磁共振数据分析更好。

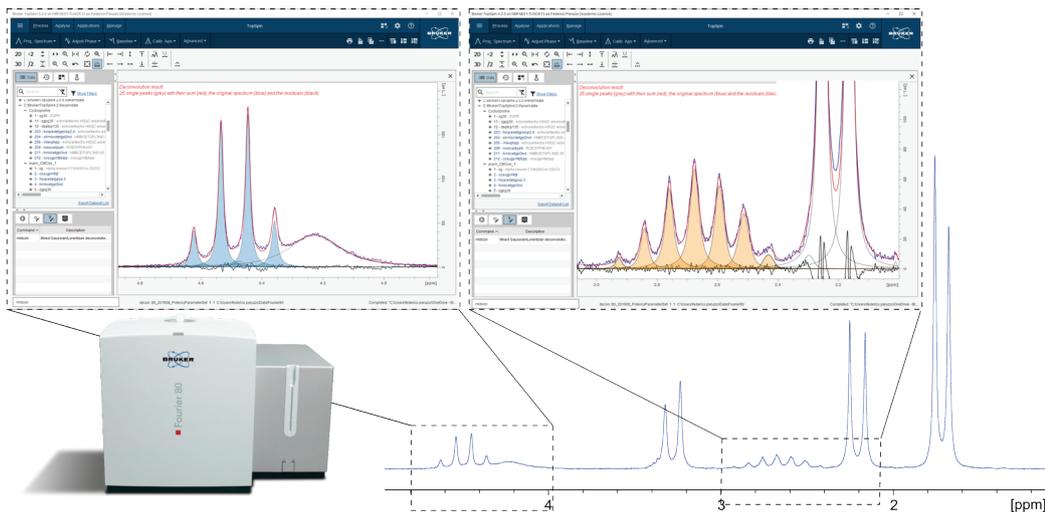


图2 mldcon对布鲁克Fourier 80所采集的80 MHz ¹H谱图的分析结果

在图2的例子中，我们使用mldcon将蓝色突出显示的四重峰与橙色七重峰之间的比例定量为1:1。

用法说明

mldcon需要输入相位和基线校正谱图。要想实现全自动校正，可以尝试使用布鲁克基于人工智能的相位和基线校正应用apbk。TopSpin 4.1.4版本及以上将提供该应用[2]。

虽然开发mldcon的目的是实现完全自动化运行，但有时用户需要定制分析结果。我们提供了很多可选功能，可以用来影响反卷积结果。比如，我们可以改变反卷积信号峰的数量，对信号峰参数设定约束条件，或对峰拟合程序进行完全自定义的初始值猜测。

关于上述和其他可用于定制mldcon分析结果的可选功能的更多信息，可参见TopSpin用户手册[3]，还可以通过在TopSpin命令行中输入“help mldcon”访问更多信息。

参考文献：

1. Schmid, N., Bruderer, S., Paruzzo, F., Fischetti, G., Toscano, G., Graf, D., Fey, M., Henrici, A., Ziebart, V., Heitmann, B. and Grabner, H., Wegner J.D., Sigel R.K.O., Wilhelm D.; Deconvolution of 1D NMR Spectra: A Deep Learning-Based Approach. Journal of Magnetic Resonance, p.107357, 2022.
2. Bruderer, S., Paruzzo, F., and Bolliger, C.; Deep learning-based phase and baseline correction of 1D 1H NMR Spectra, Bruker, URL: <https://www.bruker.com/en/products-and-solutions/mr/nmr-software/topspin.html>, 2021.
3. Processing Commands and Parameters - TopSpin User Manual, Bruker, 2022. Available in the TopSpin installation folder, at the path TopSpin4.2.0\prog\docu\English\topspin\pdf\processing-reference.pdf



布鲁克磁共振微信公众号

● 布鲁克 (北京) 科技有限公司

网址: www.bruker.com
E-mail: sales.bb.io.cn@bruker.com
布鲁克应用技术咨询:
400-898-5858
布鲁克售后技术支持:
400-898-1088

布鲁克 (北京) 科技有限公司
北京市海淀区西小口路66号
中关村东升科技园B-6号楼C座8层
邮编: 100192
电话: (010) 58333000
传真: (010) 58333299

上海办公室
上海市闵行区合川路
2570号1号楼9楼
邮编: 200233
电话: (021) 51720800
传真: (021) 51720810

广州办公室
广州市海珠区新港东路
618号南丰汇6楼A12单元
电话: (020) 22365885/
(020) 22365886