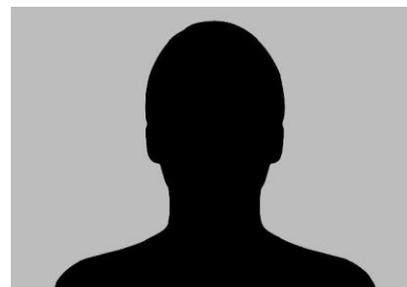


Estimating the Processing Quality of a ^1H NMR Spectrum with Deep Learning

NMR-Spektroskopie ist eine Methode für die Analyse der molekularen Struktur von Atomkernen und deren Verhalten in liquiden Medien. Damit Aussagen über einzelne Atomkerne und deren Wechselwirkungen möglich sind, werden eindimensionale NMR-Spektren aufgenommen und analysiert. Solche Aufnahmen von Spektren können jedoch erhebliche Phasen- und Grundlinienartefakte aufweisen, welche nur bedingt korrigiert werden können. Damit solche Artefakte erkannt werden können, soll ein Qualitätsmass entwickelt werden, welches die Qualität eines Spektrums quantifiziert.

Für die Entwicklung eines Qualitätsmasses wurden Methoden aus dem Deep Learning angewandt, namentlich neuronale Netzwerke. Für das Training des Netzwerks stehen jedoch nicht genügend experimentelle Spektren zur Verfügung, weshalb in einem ersten Schritt eine grosse Menge an künstlichen Spektren generiert wurde. Für das Training wurden unterschiedliche Netzwerkarchitekturen getestet und evaluiert, wobei Basislinien- und Phasenartefakte getrennt betrachtet wurden. Bezüglich der Basislinienartefakte wurde festgestellt, dass ein neuronales Netz die Qualität der Basislinie akkurat quantifizieren kann. Erstaunlicherweise ist es auch in der Lage, den Verlauf der Basislinie zu rekonstruieren, wodurch Basislinienartefakte korrigiert werden können. Die Schätzung des Phasenfehlers gestaltet sich jedoch schwieriger: Das neuronale Netzwerk konnte den Phasenfehler nur für konstante Phasen gut schätzen; für Spektren mit einer linearen Phase hingegen misslingt die Schätzung öfters. Mögliche Ansätze zur Verbesserung der Vorhersage linearer Phasen wurden abschliessend diskutiert.



Diplomierende

Luis Barth
Daniel Lam

Dozierende

Thomas Haller
Flavio De Lorenzi

Bild klein 1.

Bild klein 2.