

[人工智能 NMR 综述]

厦门大学屈小波教授发表深度学习磁共振波谱特邀综述

近日，厦门大学电子科学系/福建省等离子体与磁共振重点实验室受邀在化学顶级期刊《*Chemistry - A European Journal*》(Impact Factor 5.2)上发表综述论文“Review and Prospect: Deep Learning in Nuclear Magnetic Resonance Spectroscopy” (Dicheng Chen#, Zi Wang#, Di Guo, Vladislav Orekhov, Xiaobo Qu*, DOI: 10.1002/chem.202000246, 2020)。

核磁共振波谱能够提供分子结构的原子水平的信息，是分析分子动力学和相互作用不可缺少的工具，在化学、生命科学等领域应用十分广泛。深度学习提供了一种前所未有的分析和处理数据的方法，鉴于它的成功，核磁共振领域的研究人员开始关注深度学习技术，并尝试用它来解决传统方法的不足之处。

该论文首次系统地综述了深度学习在核磁共振波谱重建、去噪、化学位移预测和自动选峰等方面的应用，并展望了深度学习作为该领域的一种全新方法的前景，以期望将核磁共振波谱转化为化学和生命科学中更有效、更强大的工具。

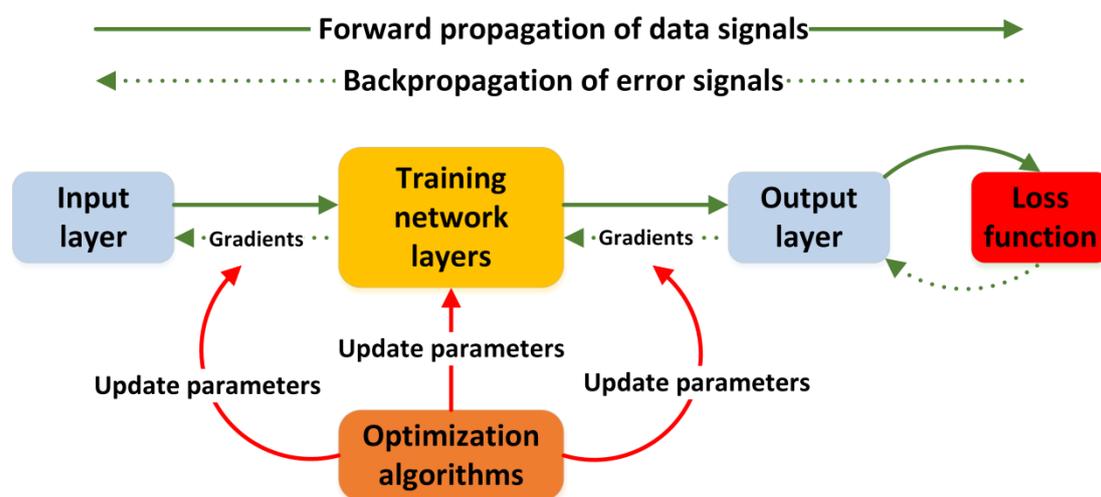


图 1. 深度学习神经网络训练流程图。

首先，深度学习已被证明可以非均匀欠采样数据中快速重建高质量波谱。该论文分别评述了基于卷积神经网络和长短时记忆网络的两种深度学习方法，同时两种方法都只需使用仿真的指数信号进行网络训练。结果表明，其波谱重建的性能不仅可以与目前最前沿的迭代方法相媲美，还在重建时间上具有突出的优势。

其次，深度学习已被有效应用于核磁共振波谱的去噪。该论文介绍了一种基于卷积神经网络的方法，它只需使用仿真的脑部谱信号进行网络训练，就可以得到具有大量干扰的频谱与高信噪比频谱之间的映射关系。鉴于其对低信噪比的鲁棒性，有望将促进临床应用的发展。

第三, 该论文总结了多种用来建立化合物信息与其化学位移之间的关系的神经网络方法。结果表明, 这些方法在化学位移预测方面明显接近经验方法的极限, 同时其精度可与量子化学计算方法相媲美。

最后, 深度学习还可用于自动选峰, 展现了其在自动化复杂数据分析方面的巨大潜力。该论文主要关注基于卷积神经网络和全连接网络的两种深度学习方法。研究结果显示, 自动谱峰选取的精度很高, 与通过专家人工选取的信号区域基本一致。

此外, 针对核磁共振波谱领域的现状, 该论文提出了深度学习未来面临的挑战: 模型可解释性不强、训练数据集不充足等, 并展望了未来可解决的问题: 高维波谱重建、新化合物结构预测、功能性波谱应用等。

该项工作由厦门大学电子科学系屈小波教授及其领导的计算感知实验室成员陈棣成、王孜, 以及厦门理工学院郭迪副教授、瑞典哥德堡大学 Vladislav Orekhov 教授合作完成。厦门大学电子科学系的屈小波教授担任通讯作者。

这项工作得到了国家自然科学基金 (61971361、61871341、U1632274), 国家自然科学基金国际合作与交流项目 (61811530021), 国家重点研发计划 (2017YFC0108703), 福建省自然科学基金 (2018J06018), 中央高校基本科研基金 (20720180056), 厦门大学南强拔尖人才计划, 厦门市科学技术计划 (3502Z20183053)、瑞典研究委员会基金 (2015-04614) 和瑞典战略研究基金 (ITM17-0218) 的资助。

这项工作是屈小波教授及其领导的计算感知实验室一系列人工智能、磁共振波谱重建工作中的一部分, 这也是继 2019 年在顶级期刊 《*Angewandte Chemie International Edition*》发表论文 《*Accelerated nuclear magnetic resonance spectroscopy with deep learning*》 (DOI: 10.1002/anie.201908162) 之后, 在人工智能、磁共振波谱重建领域发表的又一篇高水平论文。相关论文及代码均可在计算感知实验室网站上下载。

相关链接:

论文链接: <http://dx.doi.org/10.1002/chem.202000246>

计算感知实验室: <http://csrc.xmu.edu.cn>

福建省等离子体与磁共振研究重点实验室: <http://pmr.xmu.edu.cn/>