



Sieci neuronowe w spektroskopii jądrowego rezonansu magnetycznego

Krzysztof Kazimierczuk, Centrum Nowych Technologii UW

Ewa Nawrocka, Centrum Nowych Technologii UW

Daniel Dahan, Wydział Fizyki UW

Przemysław Olbratowski, Wydział Fizyki UW

- Jądrowy rezonans magnetyczny
- Widmo Radona
- Sieć neuronowa i wykrywanie pików
- Przykłady działania

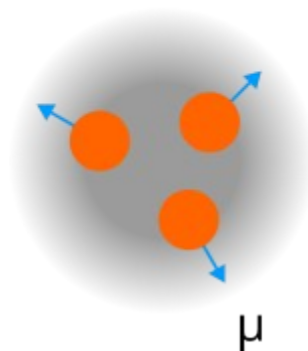


CeNT





Substancja zawierająca jądra obdarzone dipolowym momentem magnetycznym



- Przykładowo protony aromatyczne jądra H w pierścieniu benzenowym
- Momenty magnetyczne są ustawione losowo
- Wypadkowa magnetyzacja wynosi zero

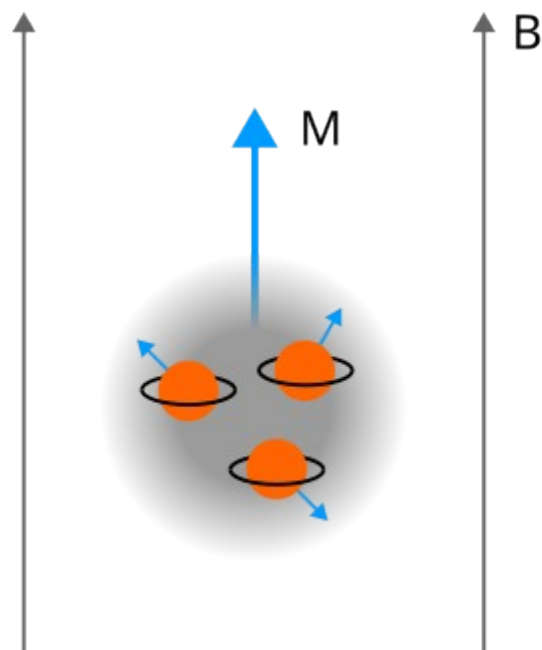


CeNT





Zewnętrzne pole magnetyczne

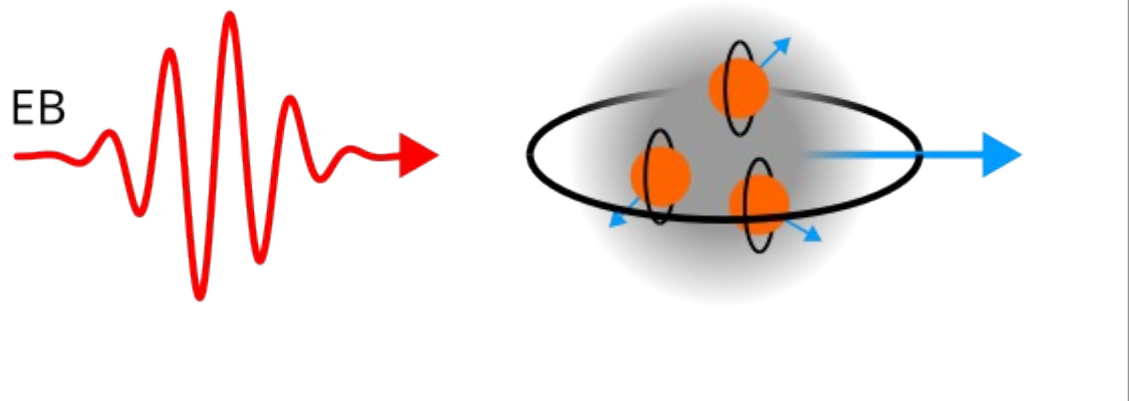


- Momenty magnetyczne ustawiają się bardziej wzdłuż pola
- Pojawia się wypadkowa magnetyzacja wzdłuż pola
- Momenty magnetyczne wykonują precesję z częstością Larmora
- Częstość Larmora zależy od natężenia pola





Wzbudzenie rezonansowe

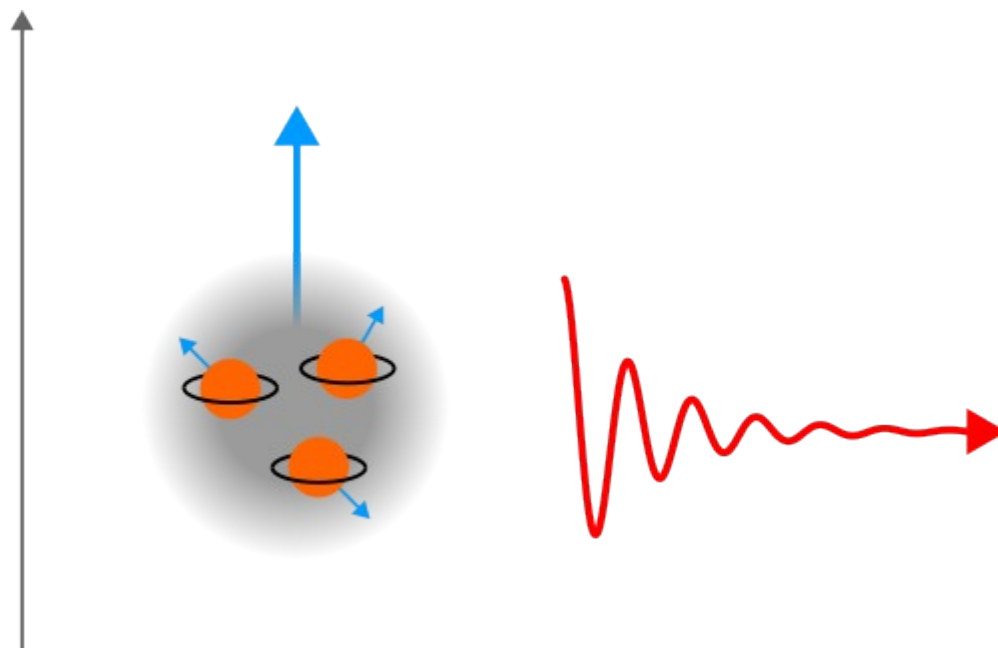


- Próbkę absorbuje impuls o częstotliwości rezonansowej Larmora
- Magnetyzacja zmienia kierunek
- Magnetyzacja wykonuje precesję z częstotliwością Larmora





Powrót do równowagi



- Magnetyzacja stopniowo ustawia się ponownie wzdłuż pola
- Próbkę emituje gasnący impuls o częstotliwości Larmora
- Impuls ten indukuje w cewkach prąd który mierzymy
- Wyznaczając częstotliwość impulsu odczytujemy natężenie pola

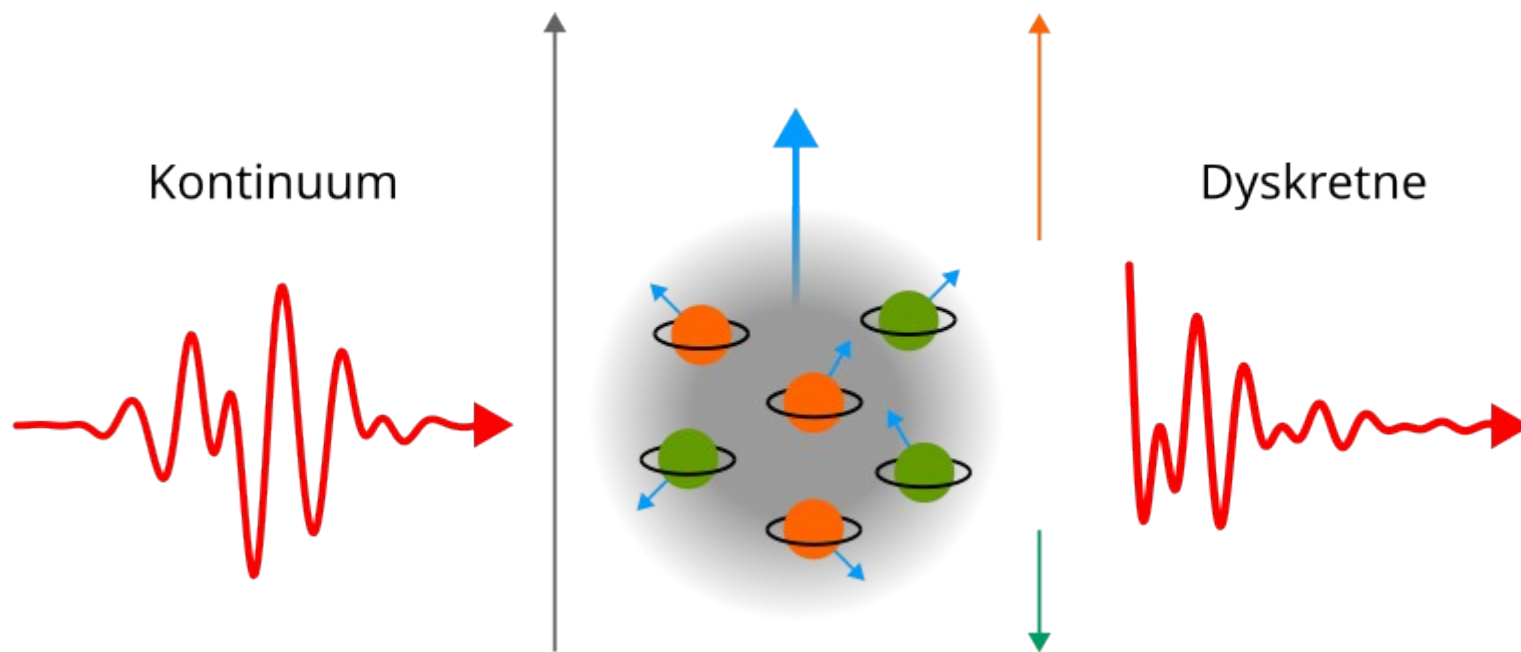


CeNT





Spektroskopia jądrowego rezonansu magnetycznego



- Różne grupy jąder przykładowo protony aromatyczne i alifatyczne
- Każda grupa w innym polu lokalnym związanym z budową cząsteczki
- Wzbudzenie impulsem o dostatecznie szerokim widmie ciągłym
- W odpowiedzi tylko częstotliwości rezonansowe poszczególnych grup
- Mierząc te częstotliwości wyznaczamy lokalne pola dla różnych grup

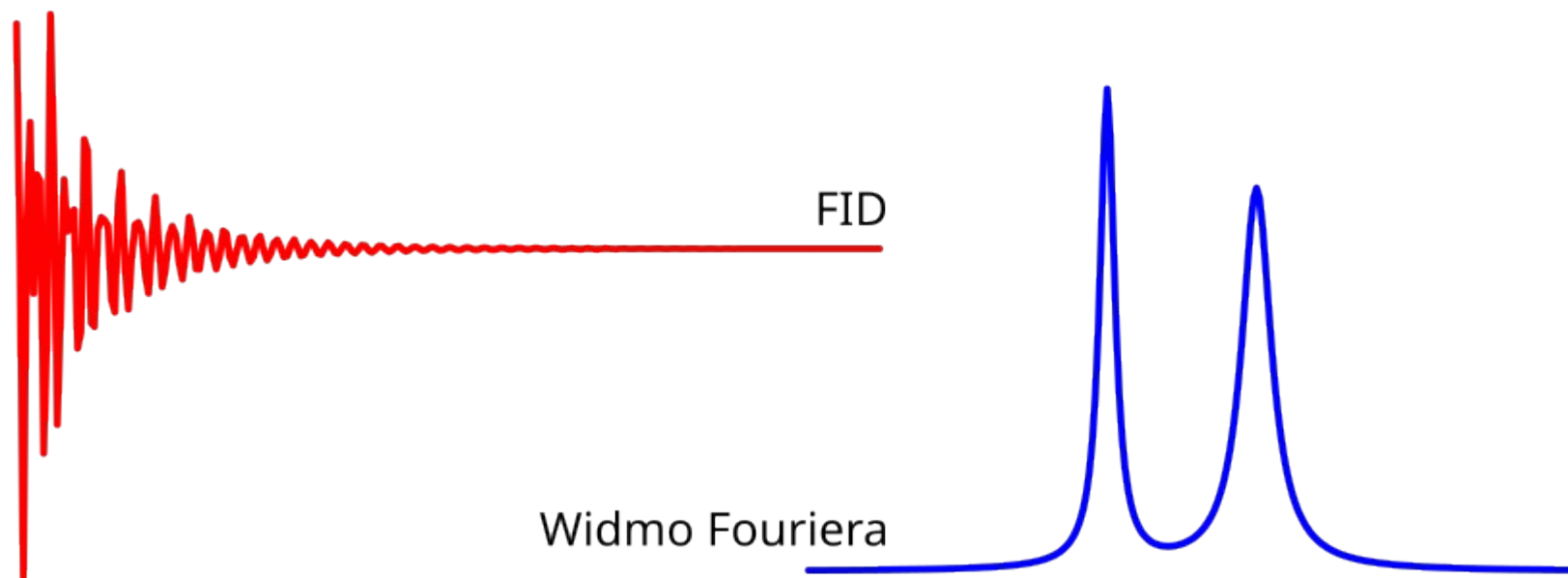


C_eNT





Mierzony sygnał i jego widmo Fouriera



- Mierzony sygnał elektryczny Free Induction Decay czyli FID
- Jest on wykładniczo gasnącą sinusoidą
- Wykonujemy transformację i otrzymujemy widmo Fouriera
- Piki w widmie Fouriera mają kształt krzywej Lorentza
- Oprócz częstości interesujące są ich szerokości i wysokości

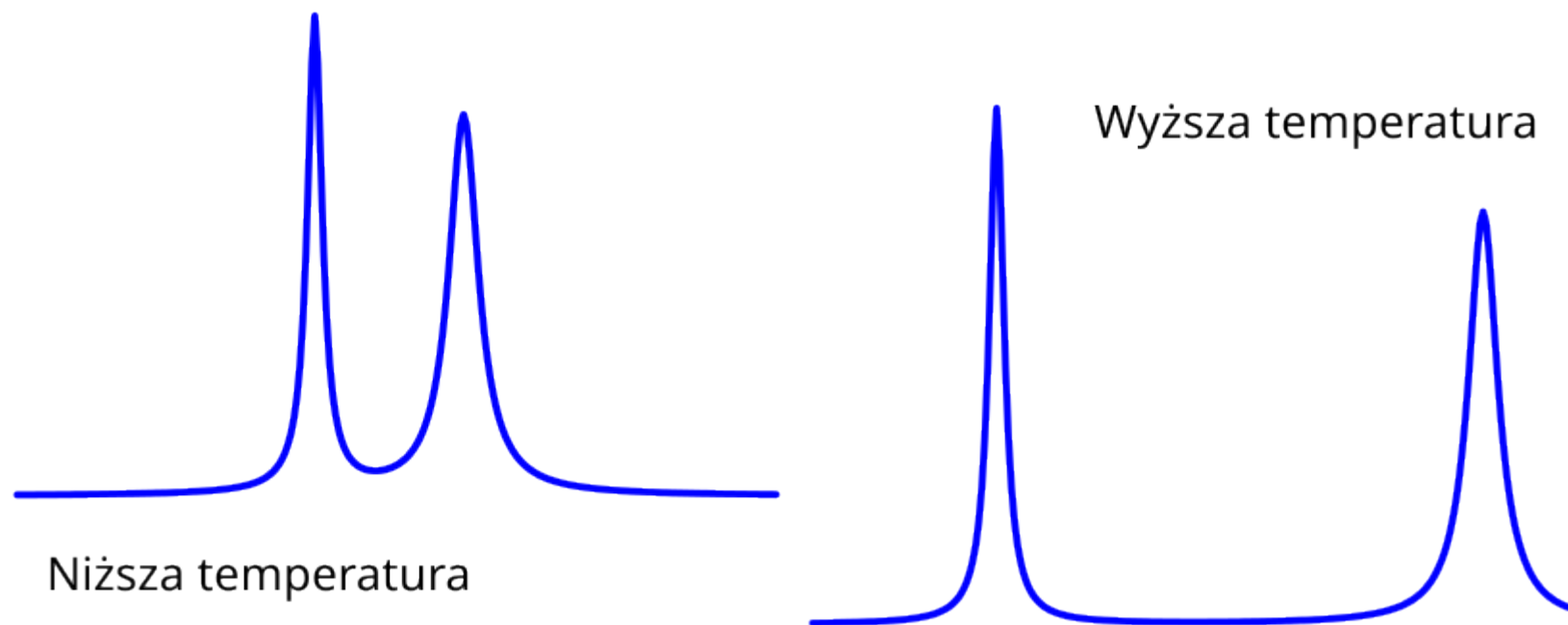


CeNT





Zależność od czynników zewnętrznych



- Częstości rezonansowe zależą od różnych czynników zewnętrznych
- Zależność od temperatury niesie informację o konformacjach
- W dostatecznie małym przedziale jest ona liniowa
- Chcemy wyznaczyć szybkości zmiany częstości z temperaturą
- Wykonujemy serię pomiarów przy różnych temperaturach

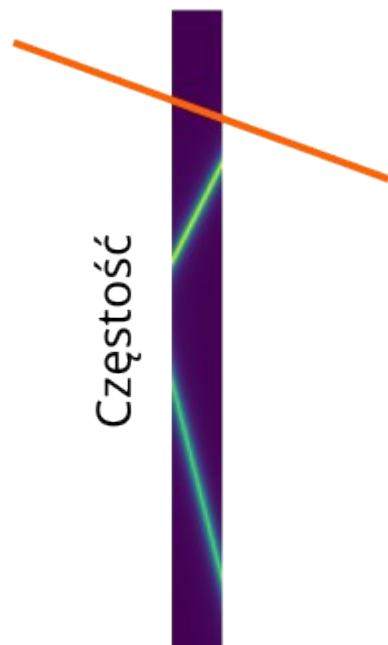


CeNT

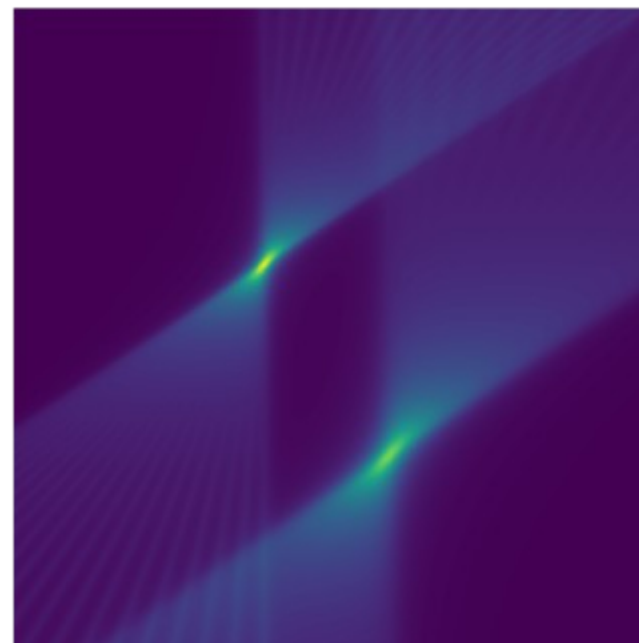




Transformata i widmo Radona



Temperatura



Częstość

- Widma Fouriera dla różnych temperatur stanowią macierz 2D
- Całkujemy wzdłuż prostych o zadanej częstotliwości i szybkości
- Otrzymujemy widmo Radona zależne od częstotliwości i szybkości
- Chcemy wyznaczyć położenia pików w tym widmie

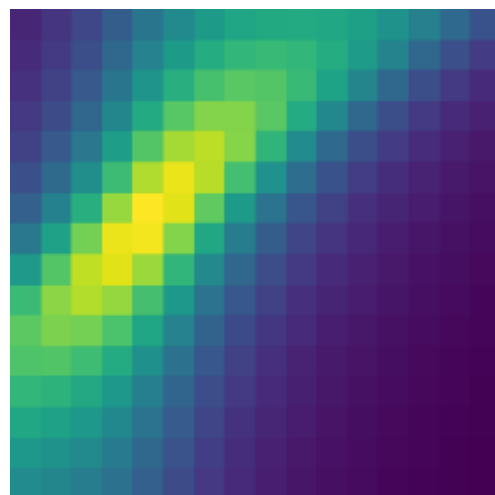


CeNT

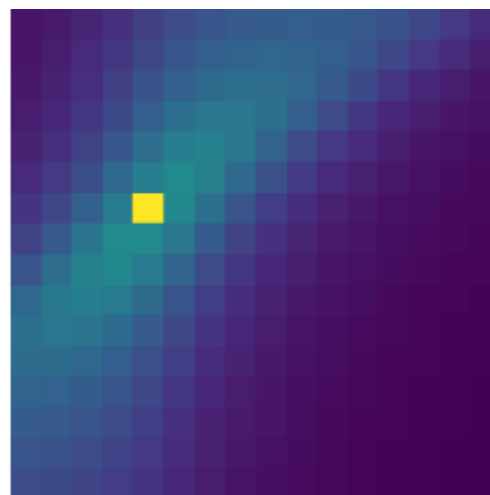




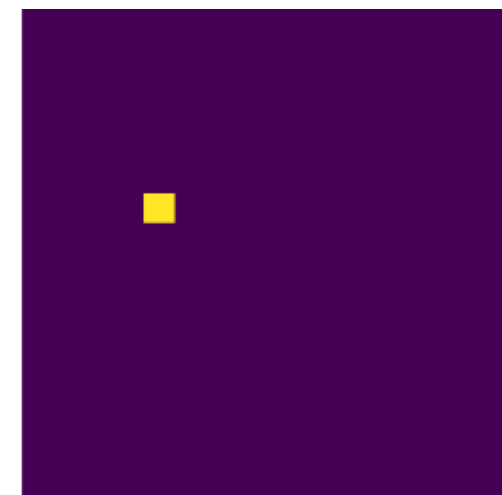
Wyszukiwanie pików przez sieć neuronową



Widmo Radona



Prawdopodobieństwa



Labelki 0 lub 1

- Sieć przyjmuje dyskretne widmo Radona 256 na 256 pikseli
- Zwraca 256 na 256 prawdopodobieństw że dany piksel jest pikiem
- Piksele z prawdopodobieństwem większym od 0.5 uznajemy za piki
- Dostajemy 256 na 256 zero-jedynkowych labelek

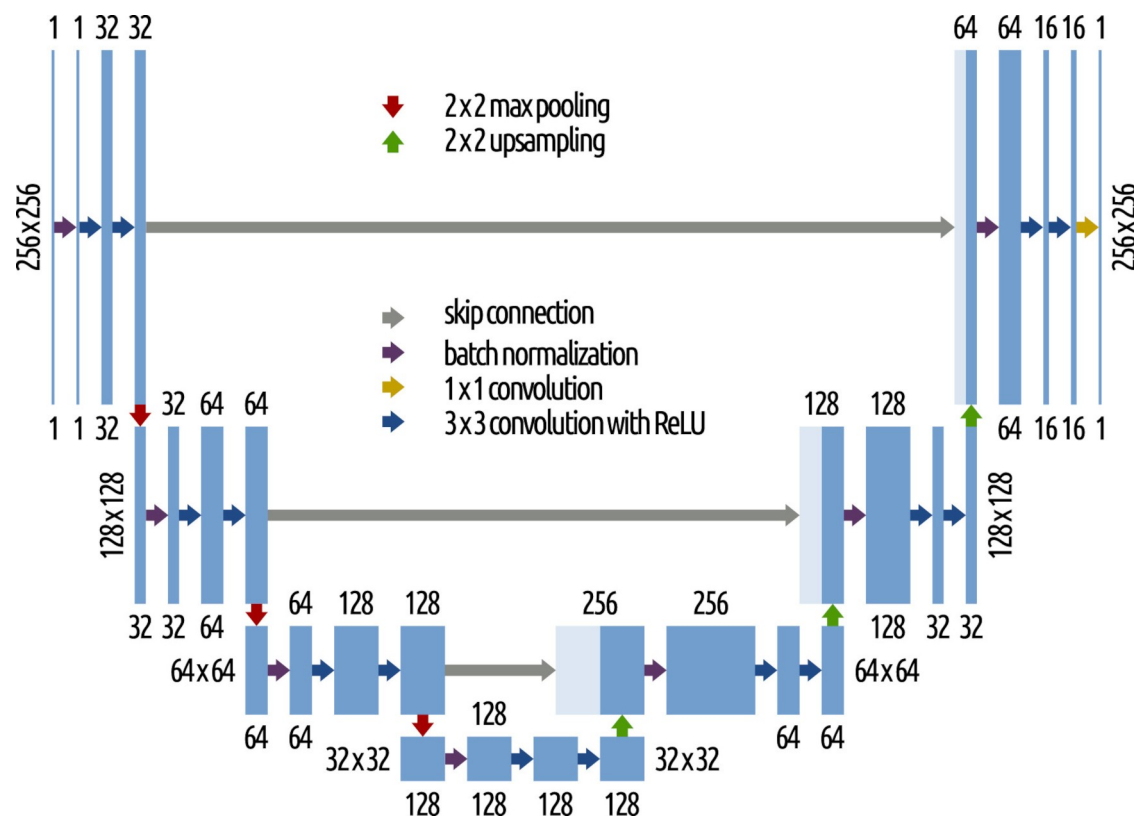


CeNT





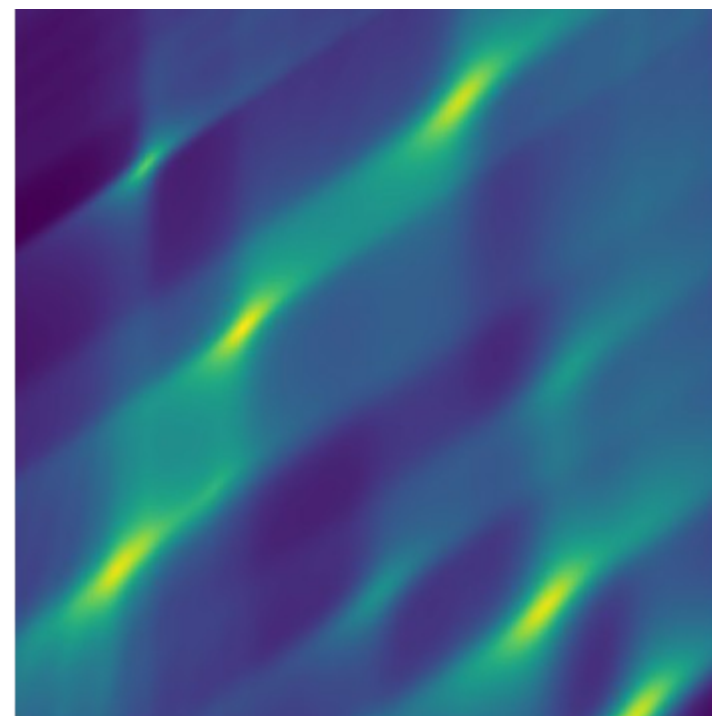
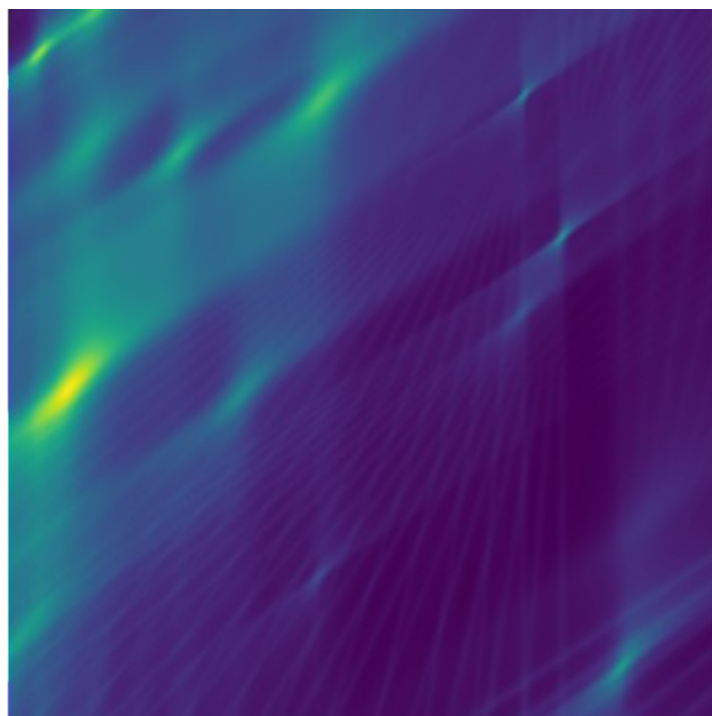
Architektura U-Net



- W 2015 najlepsza sieć do segmentacji obrazów biomedycznych
- Autokoder z wąskim gardłem oraz połączenia boczne
- W pełni konwolucyjna z polem recepcyjnym 100 na 100 pikseli
- Uczy się i działa na obrazach dowolnej wielkości



Dane syntetyczne



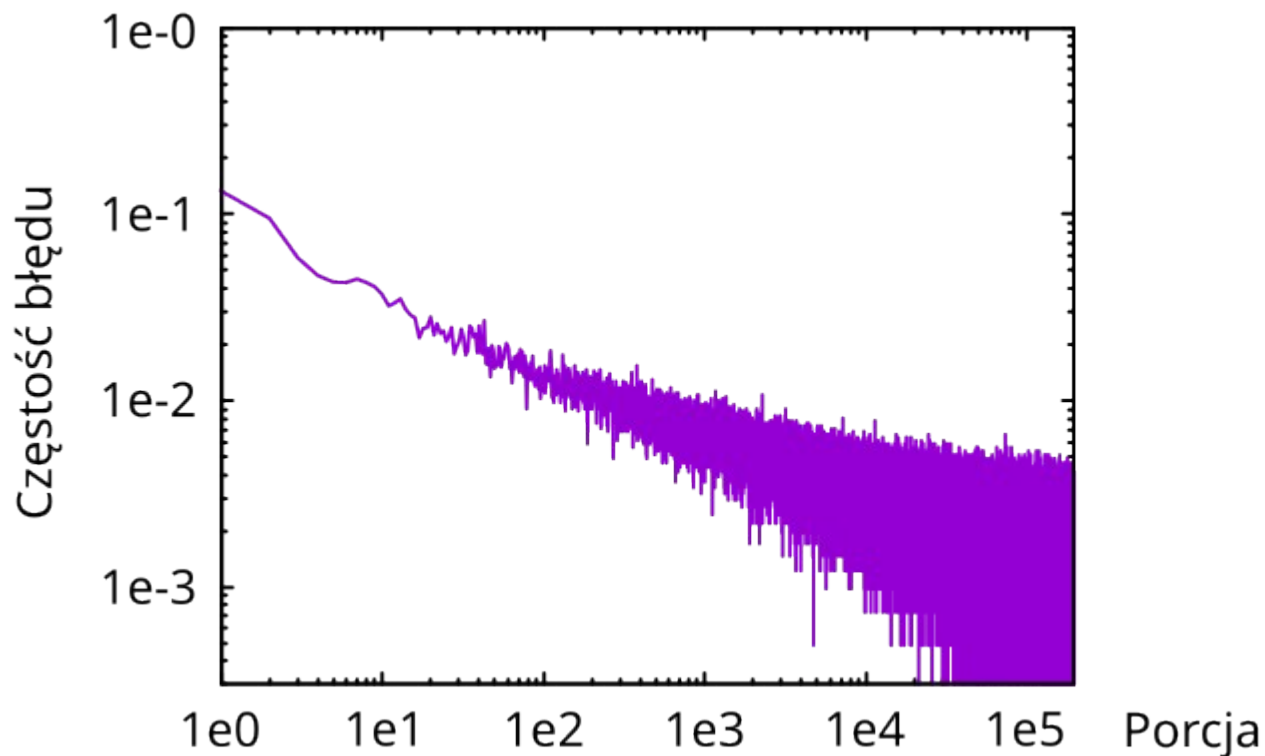
CeNT



- Mieliśmy za mało danych doświadczalnych do uczenia sieci
- Uczyliśmy na widmach syntetycznych bo podobne do doświadczalnych
- Składowa lorentzowska i gaussowska plus szum
- W jednym widmie od 1 do 15 pików o losowych parametrach
- Do uczenia tylko 64 piksele w tym wszystkie piki



Uczenie sieci



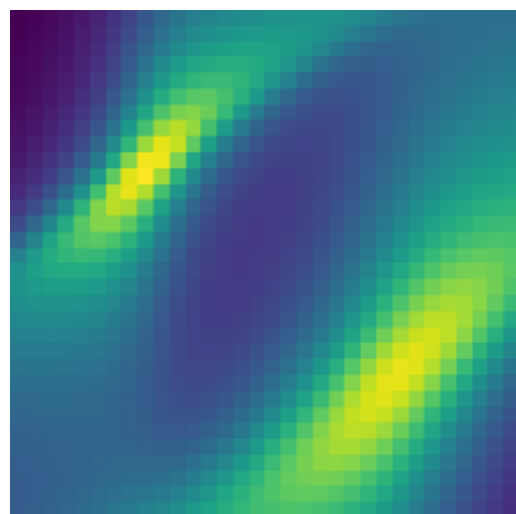
CeNT



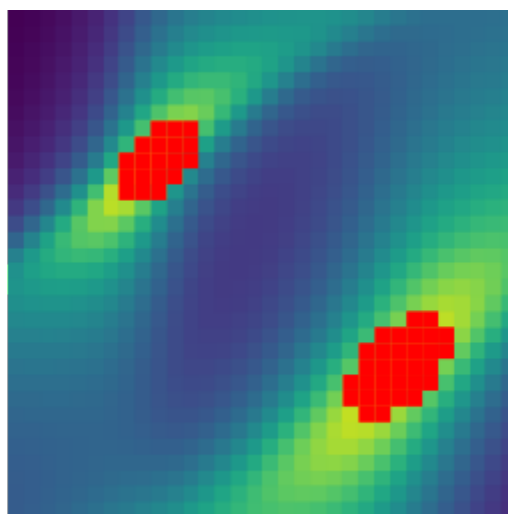
- 196608 porcji po 64 widma Radona czyli ponad 12 milionów widm
- Porcje widm generowane na bieżąco więc zaniechane przeuczenie
- Entropia krzyżowa uśredniona po pikselach i optymalizator Adam
- Trzy doby na karcie graficznej 24GB



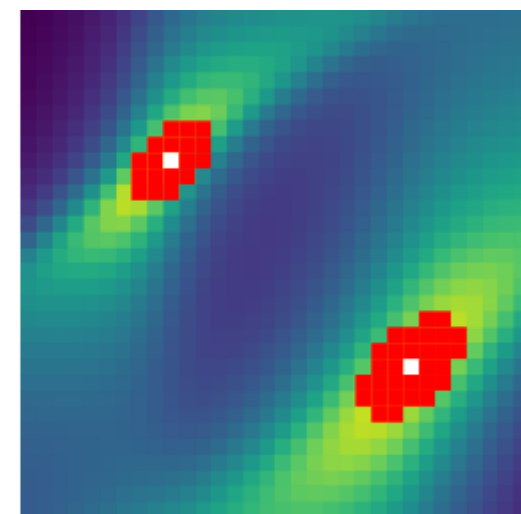
Wykrywanie plam i maksymalnych prawdopodobieństw



Widmo Radona



Sieć



Maks Prawd.

- Sieć wykrywa plamę pikseli wokół pików
- Identyfikujemy wszystkie takie plamy w widmie
- Z każdej wybieramy piksel o największym prawdopodobieństwie
- Na danych syntetycznych dokładność niemal idealna
- Dane doświadczalne trochę inne więc nieco gorzej
- Działanie zależy od wysokości, zagęszczenia i zaszumienia pików

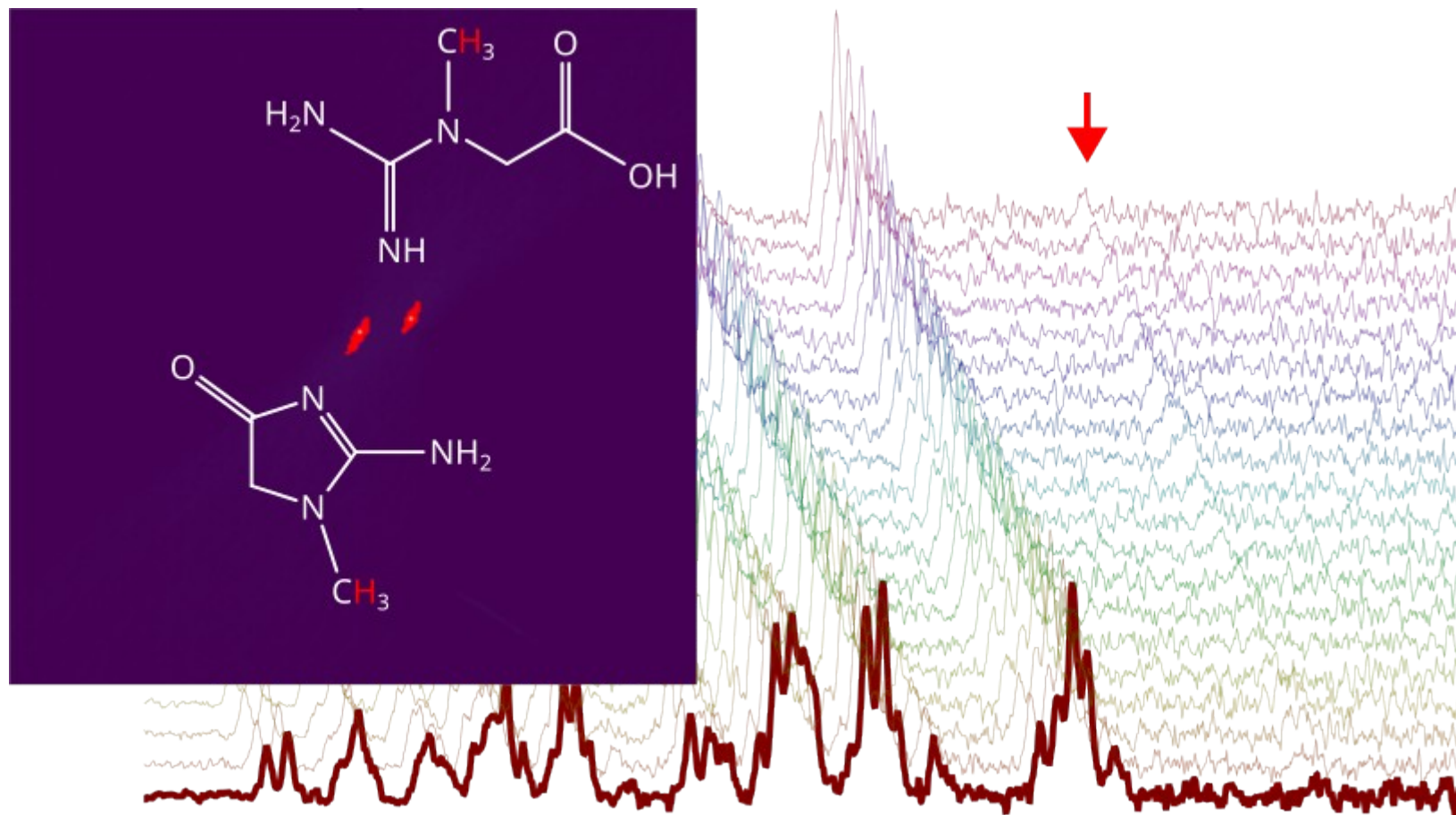


CeNT





Kreatyna i kreatynina w osoczu



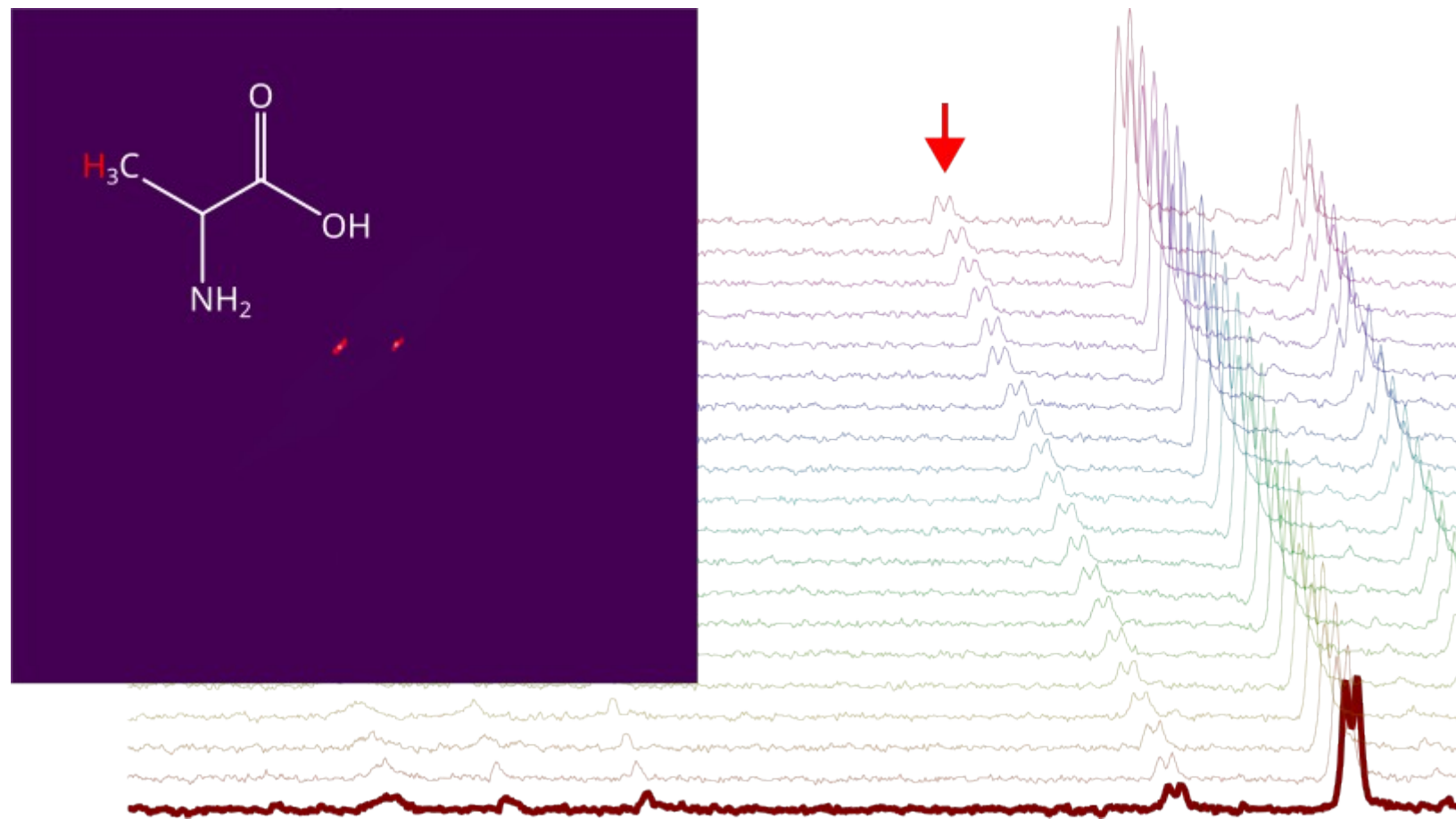
CeNT



- Widoczne piki pochodzą od jąder H z grupy CH₃
- W widmie Radona piki są oddzielone lepiej niż w widmie Fouriera



Alanina w osoczu



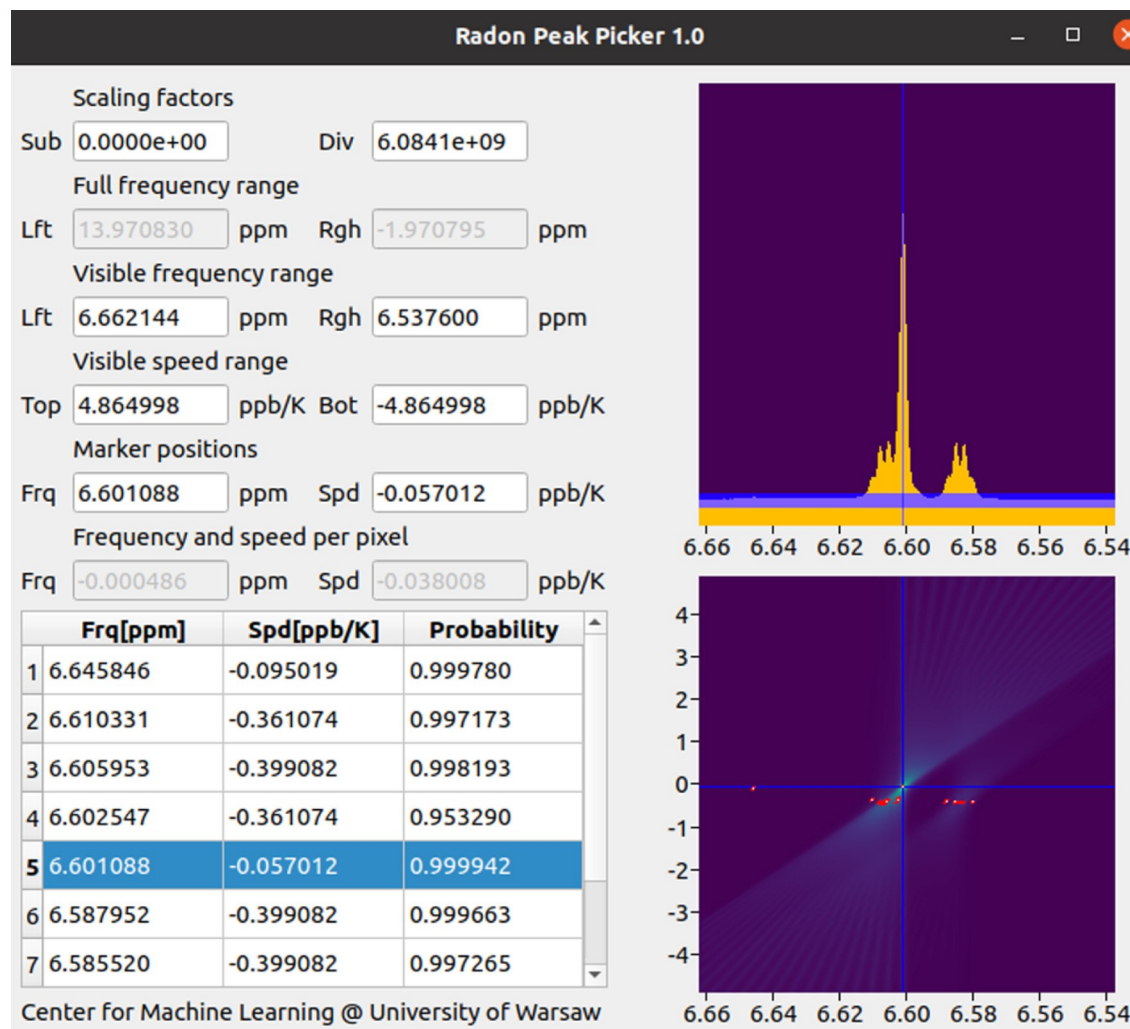
CeNT



- Dublet pochodzi od sprzężenia z jądrem H z grupy OH
- Piki dubletu mają równe szybkości co łatwo widać w widmie Radona



Graficzny interfejs użytkownika



- Python, Tensorflow bez GPU, PyQt



Udostępnienie i publikacja

Journal of Magnetic Resonance Open 12-13 (2022) 100083



Contents lists available at [ScienceDirect](#)

Journal of Magnetic Resonance Open

journal homepage: www.sciencedirect.com/journal/journal-of-magnetic-resonance-open



Research article

Radon peak-picker based on a neural network

Ewa K. Nawrocka^a, Daniel Dahan^a, Krzysztof Kazimierczuk^{a,*}, Przemysław Olbratowski^{b,c,*}

^a Centre of New Technologies, University of Warsaw, Banacha 2C, Warsaw, 02-097, Poland

^b Faculty of Physics, University of Warsaw, Pasteura 5, Warsaw, 02-093, Poland

^c Warsaw School of Information Technology WIT, Nowelska 6, Warsaw, 01-447, Poland



- nmr.cent.uw.edu.pl/downloads
- Journal of Magnetic Resonance Open, Volumes 12-13, December 2022, 100083

CeNT

