

Algoritmusok és neurális hálók alkalmazása blokk kopolimer tömegspektrumok kiértékelésére

Application of algorithms and neural networks to evaluate block copolymer mass spectra

RÓTH Gergő¹, KUKI Ákos¹, ROP Aron Kipyegon^{1,2}, NAGY Lajos¹, KALDYBEK Zuura Kyzy^{1,2}, BENEDEK Máté^{1,2}, ZSUGA Miklós¹, NAGY Tibor¹, KÉKI Sándor¹

¹Alkalmazott Kémiai Tanszék, Természettudományi és Technológiai kar, Debreceni Egyetem, Egyetem tér 1, H-4032 Debrecen, Magyarország, +36 52 512 900/22454

²Kémiai Doktori Iskola, Debreceni Egyetem, Egyetem tér 1, H-4032 Debrecen, Magyarország, +36 52 512 900/22454

ABSTRACT

One of the major challenges in polymer chemistry is to elucidate the relationship between the structure and the physical properties. To achieve this, precise structural determination and detailed compositional analysis are indispensable. In our previous work, we developed an algorithm for the analysis of copolymer mass spectra, which, however, proved to be highly time- and computation-intensive. To overcome these limitations, we have developed a new approach. We implemented the MAss Remainder Analysis (MARA) into our method, which enables the analysis of overlapping peaks without the separation of the peaks, thereby reducing the required computational performance. We generated a large number of simulated mass spectra, which served as training data. The essence of the new algorithm is to condense the necessary amount of information contained in the mass spectra through simple mathematical procedures and render it interpretable via one or more functions. To identify the appropriate functions, we applied empirical methods and, in parallel, neural networks were constructed. The trained network and the fitted functions were tested on experimental MALDI-TOF-MS spectra and validated using ¹H-NMR measurements.

Keywords: copolymer, mass spectrum, MARA, neural network, data processing

ÖSSZEFOGLALÓ

A polimerkémia egyik legnagyobb kihívását a kopolimerek szerkezete és fizikai tulajdonságai közötti kapcsolat feltárása jelenti. Ennek megértéséhez elengedhetetlen a szerkezet pontos meghatározása. Kutatócsoportunk a korábbi munkája során már fejlesztett algoritmust a kopolimerek tömegspektrumának elemzésére, amely azonban jelentős idő- és számításgigényűnek bizonyult. Ezen korlátok leküzdésére új megközelítést dolgoztunk ki. Az új eljárás során a korábban is használt tömegmaradék analízist (MARA) implementáltuk. Ezáltal az összeolvadó csúcsok felbontás nélküli analízisére nyílt lehetőség, csökkentve a szükséges számítási teljesítményt. Az algoritmus fejlesztéséhez nagyszámú szimulált tömegspektrumot generáltunk, amelyeket alapadatként használtunk. Az új algoritmus lényege, hogy egyszerű matematikai eljárásokkal összesűrítsa a tömegspektrumban lévő információhalmazt és ezt értelmezhetővé tegye egy-vagy több függvényen keresztül. Ezen függvények meghatározásához tapasztalati módszert alkalmaztunk, valamint, ezzel párhuzamosan neurális hálózatokat készítettünk. A betanított hálót, illetve az illesztett függvényeket valós MALDI-TOF-MS-el mért tömegspektrumokon teszteltük, melyeket ¹H-NMR-el validáltuk.

Kulcsszavak: kopolimer, tömegspektrum, MARA, neurális hálózat, adatfeldolgozás

Köszönetnyilvánítás: Köszönjük a következő pályázatoknak a munka során nyújtott anyagi segítséget: Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs Hivatal (NKFIH) K-147503 és RRF-2.3.1-21-2022-00009 azonosítószámú, Megújuló Energiák Nemzeti Laboratórium megnevezésű projekt, mely a Széchenyi Terv Plusz program keretében, az Európai Unió Helyreállítási és Ellenállóképességi Eszközének támogatásával valósult meg. Köszönjük továbbá a MOL Petrolkémia Zrt. által nyújtott anyagi támogatást.