

0.1. Пименова И.А., Матвеева И.А. Применение методов машинного обучения к рамановским спектрам сыворотки крови

Рамановская спектроскопия является перспективным методом достижения повышения прогностической значимости при исследовании комплекса изменений компонентного состава крови [1]. Это неинвазивный оптический метод, который использует взаимодействие света с молекулами для получения информации об их структуре и состоянии.

Целью данного исследования является изучение возможности применения метода разрешения многомерных кривых с использованием метода чередующихся наименьших квадратов (MCR-ALS) для анализа *in vitro* рамановских спектров образцов сыворотки крови. В этой работе анализируются *in vitro* рамановские спектры сыворотки крови 100 людей. Из них 50 имели сердечную недостаточность, а 50 – контрольная группа (добровольцы без сердечной недостаточности). Образцы сыворотки крови отбирали у пациентов утром натощак и помещали в стерильные пробирки с последующим замораживанием при температуре -16°C . Непосредственно перед спектральным анализом образцы размораживали при комнатной температуре.

Запись рамановских спектров проводилась по технологии поверхностно-усиленной рамановской спектроскопии (SERS), подробно описанной в [2]. Спектры возбуждались в ближнем инфракрасном диапазоне с помощью лазерного модуля с центральной длиной волны 785 нм. В данной работе для спектрального анализа использован метод разрешения многомерных кривых методом чередующихся наименьших квадратов (MCR-ALS), который уже показал свою эффективность при выделении биохимических компонентов кожи [3]. В результате MCR-анализа из исследуемых рамановских спектров сыворотки крови выделено восемь компонентов и рассмотрены основные пики получившихся спектров. Также, получена матрица концентраций.

К профилям полученных концентраций компонентов были применены различные методы машинного обучения. Они использовались для классификации контрольной группы и людей с сердечной недостаточностью.

Для проверки стабильности моделей классификации была проведена 5-кратная кросс-валидация. Прогнозируемые значения были представлены с помощью диаграмм типа «ящик с усами» для концентраций и ROC-кривых. Используемые методы машинного обучения, диаграммы типа «ящик с усами» и ROC-кривые реализованы на языке программирования Python.

В результате, площадь под ROC-кривой для случая использования логистической регрессии составила 0.92, метод опорных векторов показал площадь под ROC-кривой на уровне 0.92, случайный лес –

0.99, перцептрон 0.89. Таким образом, в исследовании подтверждена эффективность применения методов машинного обучения для анализа спектральных данных рамановского рассеяния образцов сыворотки крови и диагностики на основании этого сердечной недостаточности.

Список литературы

- [1] ATKINS C.G., BUCKLEY K., BLADES M.W., TURNER R.F. Raman spectroscopy of blood and blood components // *Applied spectroscopy*. 2017. Vol. 71. N. 5. P. 767–793.
- [2] AL-SAMMARRAIE S.Z., BRATCHENKO L.A., ТУРКОВА E.N., LEBEDEV P.A., ZAKHAROV V.P., BRATCHENKO I.A. Silver nanoparticles-based substrate for blood serum analysis under 785 nm laser excitation // *J-BPE*. 2022. Vol. 8. N. 1. P. 010301.
- [3] MATVEEVA I., BRATCHENKO I., KHRISTOFOROVA Y., BRATCHENKO L., MORYATOV A., KOZLOV S., KAGANOV O., ZAKHAROV V. Multivariate curve resolution alternating least squares analysis of *in vivo* skin Raman spectra // *Sensors*. 2022. Vol. 22. N. 24. P. 9588.