

Комарова Марина Валериевна, к.б.н., доцент кафедры ЛБС, E-mail marinakom@yandex.ru

Трупакова Анна Андреевна врач акушер-гинеколог, соискатель кафедры акушерства и гинекологии Института педиатрии СамГМУ, E-mail anantru@mail.ru

Рустянова Дарья Рафиковна врач акушер-гинеколог, ассистент кафедры акушерства и гинекологии Института педиатрии СамГМУ, E-mail d.g.rustyanova@samsmu.ru

УДК 535.3; 51-73; 616-006

## АНАЛИЗ РАМАНОВСКИХ СПЕКТРОВ КОЖИ МЕТОДОМ РАЗРЕШЕНИЯ МНОГОМЕРНЫХ КРИВЫХ

И.А. Матвеева

«Самарский национальный исследовательский университет  
имени академика С.П. Королева», г. Самара

**Ключевые слова:** новообразования, метод разрешения многомерных кривых, рамановский спектр, рамановская спектроскопия.

В последние годы для исследования различных новообразований кожи все чаще применяют рамановскую спектроскопию [1]. Во время развития новообразования происходят биохимические изменения, которые приводят к изменению измеренных рамановских спектров [2].

Однако, несмотря на развитие технических средств для регистрации рамановского рассеяния света, анализ зарегистрированных спектров все еще остается сложной задачей, так как спектры содержат чрезвычайно большой объем информации обо всех химических веществах, которые могут быть в коже.

Среди существующих методов анализа рамановских спектров можно отметить метод главных компонент (РСА) и нейронные сети. Однако, эти методы имеют существенное ограничение в применении к реальным данным – нефизичность, то есть невозможность физической интерпретации результатов. Актуальным является поиск новых методов анализа рамановских спектров, которые смогли бы преодолеть этот недостаток.

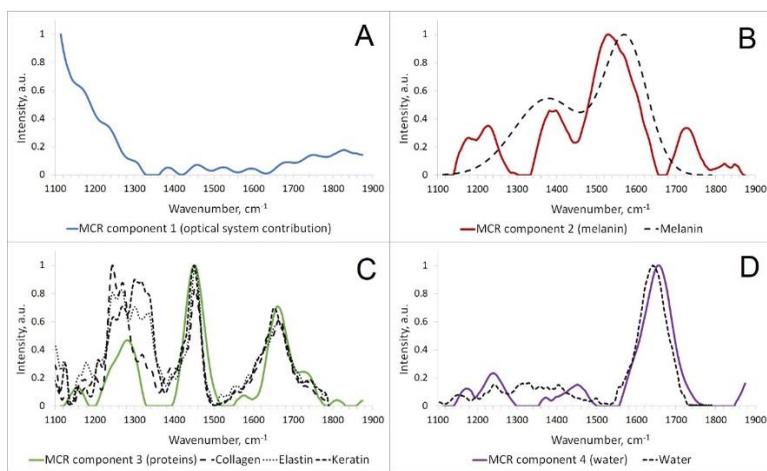
В этом исследовании предлагается использовать метод разрешения многомерных кривых (MCR) для анализа рамановских спектров кожи. В последнее время этот метод нашел широкое применение в биологии и медицине для анализа спектральных данных [3].

Суть метода MCR состоит в разделении оптимальным образом матрицы рамановских спектров  $D$  на две меньшие матрицы  $C$  и  $S^T$ , где  $C$  – матрица концентраций компонентов образца кожи,  $S$  – матрица спектров этих компонентов. Уравнение, иллюстрирующее этот подход, можно записать в следующем виде:

$$D = C \cdot S^T + E \quad , \quad \text{где } E \text{ – матрица ошибок [3].}$$

В работе использовано 1000 *in vivo* рамановских спектров: 540 спектров здоровой кожи (NS), 113 – кератоза (K), 122 – базальноклеточной карциномы (BCC), 67 – злокачественной меланомы (MM) и 158 – пигментного невуса (PN). Спектры регистрировались с помощью портативной спектроскопической установки (источник излучения 785 нм) в диапазоне 1114-1874  $\text{cm}^{-1}$  [4]. Затем спектры подвергались предварительной обработке с удалением базовой линии и сглаживанием методом Савицкого-Голея.

Для разделения спектров с помощью анализа MCR мы использовали графический интерфейс MCR-ALS, разработанный *Jaumot et al.* [3]. В результате анализа получены спектры ряда компонентов кожи и их вклад в рамановские спектры. Этот вклад, по сути, напрямую связан с реальными концентрациями веществ (компонентов) в кожной ткани. Некоторые из полученных спектров представлены на рисунке 1.



А – компонент 1 (вклад оптической системы), В – компонент 2 (меланин),  
 С – компонент 3 (смесь различных белков), D – компонент 4 (вода)  
 (сплошные линии – спектры, полученные в данной работе,  
 штриховые линии – спектры, полученные в [2])

Рисунок 1 – Некоторые рамановские спектры, полученные с помощью анализа *in vivo* рамановских спектров кожи методом MCR

Полученные в этой работе спектры компонентов кожи соответствуют спектрам, полученным другими исследователями, в частности [2]. Результаты демонстрируют возможность разделения нескольких спектрально подобных компонентов с помощью метода MCR даже в условиях зашумленных рамановских спектров. Это дает смелость говорить о возможном эффективном использовании метода MCR в портативных

приборах для диагностики новообразований, когда скорость и простота использования прибора важнее высокого спектрального разрешения.

Более того, помимо первоначальной проблемы анализа путем разделения рамановских спектров на компоненты, обнаружена возможность использования метода MCR для выделения паразитного сигнала, связанного с вкладом оптической системы. Другими словами, метод MCR может использоваться как часть программного обеспечения для спектроскопической установки для минимизации влияния систематической погрешности. Устранение влияния оптического оборудования может быть чрезвычайно полезным в многоцентровых и транснациональных исследованиях, когда для записи спектров рамановского рассеяния используется различное оборудование с разными техническими характеристиками.

Разделение спектрально схожих компонентов по-прежнему является проблемой. В этом исследовании не удалось выделить отдельные виды белков, получилось только выделить их как единую группу веществ. Будущие исследования планируется посвятить расширению методологии другими методами анализа спектров рамановского рассеяния, например, с помощью нейронных сетей.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФ № 21-75-10097.

#### Список использованных источников

1. Popp J., Krafft C., Mayerhöfer T. Modern Raman spectroscopy for biomedical applications: A variety of Raman spectroscopical techniques on the threshold of biomedical applications // *Optik & Photonik*. – 2011. – Т. 6. – №. 4. – С. 24-28.

2. Feng X. et al. Raman active components of skin cancer // *Biomedical optics express*. – 2017. – Т. 8. – №. 6. – С. 2835-2850.

3. Jaumot J., de Juan A., Tauler R. MCR-ALS GUI 2.0: New features and applications // *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*. – 2015. – Т. 140. – С. 1-12.

4. Khristoforova Y. A. et al. Portable spectroscopic system for in vivo skin neoplasms diagnostics by Raman and autofluorescence analysis // *Journal of biophotonics*. – 2019. – Т. 12. – №. 4. – С. e201800400.

Матвеева Ирина Александровна, ассистент кафедры ЛБС, м. н. с. НИЛ-96 (НИЛ "Фотоника"), E-mail: matveeva.ia@ssau.ru.

УДК 616-71; 616-72

### **АВТОМАТИЗИРОВАННАЯ ИНСУЛИНОВАЯ ПОМПА**

А.В. Мурзина, И.А. Матвеева

«Самарский национальный исследовательский университет  
имени академика С.П. Королева», г. Самара

**Ключевые слова:** диабет, инсулинотерапия, инсулиновая помпа.