

Список использованных источников

1. Bratchenko L. A. et al. Analyzing the serum of hemodialysis patients with end-stage chronic kidney disease by means of the combination of SERS and machine learning // *Biomedical Optics Express*. – 2022. – Т. 13. – №. 9. – С. 4926-4938.

2. Евстифорова В. В. и др. Исследование поверхностно-усиленного рамановского рассеяния плазмы крови // XX Всероссийский молодежный Самарский конкурс-конференция научных работ по оптике и лазерной физике, посвященный 100-летию со дня рождения НГ Басова. – 2022. – С. 328-336.

3. Matveeva I. A. et al. The Effect of Noise in Raman Spectra on the Reconstruction of the Concentration of Amino Acids in the Mixture by Multivariate Curve Resolution (MCR) Analysis // *Journal of Biomedical Photonics & Engineering*. – 2021. – Т. 7. – №. 2. – С. 020309.

4. Matveeva I. et al. Multivariate curve resolution alternating least squares analysis of in vivo skin Raman spectra // *Sensors*. – 2022. – Т. 22. – №. 24. – С. 9588.

Горбачева Полина Владимировна, студентка гр. 6464-120304D каф. лазерных и биотехнических систем, polinag63@mail.ru.

Матвеева Ирина Александровна, ассистент каф. лазерных и биотехнических систем, matveeva.ia@ssau.ru.

УДК 004.891.3:543.424.2:616-71

ПРОГРАММНЫЙ МОДУЛЬ КЛАССИФИКАЦИИ РАМАНОВСКИХ СПЕКТРОВ МЕТОДАМИ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ

К.М. Гуськова, И.А. Матвеева

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

Ключевые слова: рамановская спектроскопия, машинное обучение, новообразования кожи, классификация.

В настоящее время оптические методы анализа приобретают большую популярность в разных областях науки [1]. В работе исследуются рамановские спектры кожи человека. Развитие кожных заболеваний может возникать из-за воздействия внешних факторов или внутренних патогенных сред в организме. Грибковые, паразитические и вирусные инфекции могут повредить кожные покровы и клетки. Анализ кожных заболеваний осуществляется следующими методами: биопсия, диаскопия, дерматоскопия, флуоресцентная диагностика и др. Наиболее широкое распространение получила рамановская спектроскопия, которая используется для анализа компонентного состава участков биологических тканей на основе изменения частоты неупруго рассеянного исследуемым участком биоткани света [2, 3, 4]. Помимо скорости анализа и неинвазивности этот метод имеет ряд преимуществ: 1) высокая информативность: можно получать информацию о структуре и составе исследуемого образца, что позволяет идентифицировать соединения,

определять концентрации и проводить качественный анализ в жидкой, твердой и газообразных фазах; 2) данный метод обладает высокой разрешающей способностью, что позволяет определять структуру и конформацию молекул.

Однако рамановские спектры сложны в интерпретации, поэтому необходимо применять различные компьютерные методы для их анализа.

Среди методов анализа рамановских спектров можно отметить традиционные методы машинного обучения (метод главных компонент, метод опорных векторов, деревья решений, дискриминантный анализ с проекцией на латентные структуры, метод k-ближайших соседей, логистическая регрессия и т.д.) [5, 6], методы, основанные на использовании нейронных сетей [7], а также методы, основанные на разложении рамановских спектров на физически интерпретируемые компоненты, например, метод разложения многомерных кривых [8, 9].

Целью настоящей работы стала разработка алгоритмов для классификации рамановских спектров новообразований различными методами машинного обучения. Разработанная программа позволяет строить модели бинарной классификации различными методами и сравнивать их эффективность для той или иной классификационной задачи. Кроме того, реализована возможность проводить анализ загруженного рамановского спектра с помощью уже обученных моделей и делать вывод о диагнозе.

Разработанные алгоритмы могут применяться в составе ансамбля классификаторов в системе помощи принятия диагностических решений.

Список использованных источников

1. Maniewski R. et al. Selected applications of near infrared optical methods in medical diagnosis //OPTOELECTRONICS REVIEW. – 2004. – №. 3. – С. 255-262.
2. 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.
3. Mahadevan-Jansen A., Richards-Kortum R. R. Raman spectroscopy for the detection of cancers and precancers //Journal of biomedical optics. – 1996. – Т. 1. – №. 1. – С. 31-70.
4. Khristoforova Y., Bratchenko L., Bratchenko I. Raman-Based Techniques in Medical Applications for Diagnostic Tasks: A Review //International Journal of Molecular Sciences. – 2023. – Т. 24. – №. 21. – С. 15605.
5. Blake N. et al. Machine learning of Raman spectroscopy data for classifying cancers: a review of the recent literature //Diagnostics. – 2022. – Т. 12. – №. 6. – С. 1491.
6. Bratchenko I. A. et al. In vivo diagnosis of skin cancer with a portable Raman spectroscopic device //Experimental Dermatology. – 2021. – Т. 30. – №. 5. – С. 652-663.
7. Bratchenko I. A. et al. Classification of skin cancer using convolutional neural networks analysis of Raman spectra //Computer Methods and Programs in Biomedicine. – 2022. – Т. 219. – С. 106755.
8. Feng X. et al. Raman active components of skin cancer //Biomedical optics express. – 2017. – Т. 8. – №. 6. – С. 2835-2850.

9. Multivariate Curve Resolution Alternating Least Squares Analysis of In Vivo Skin Raman Spectra / I. Matveeva, I. Bratchenko, Y. Khristoforova, L. Bratchenko, A. Moryatov, S. Kozlov, O. Kaganov, V. Zakharov // Sensors. – 2022. – Т. 22. – №. 24. – С. 9588.

Гуськова Карина Михайловна, студентка гр. 6464-120304D каф. лазерных и биотехнических систем, karinaguskova2002@mail.ru.

Матвеева Ирина Александровна, ассистент каф. лазерных и биотехнических систем, matveeva.ia@ssau.ru.

УДК 543.424.2:616-71

ПРОГРАММНЫЙ МОДУЛЬ С GUI ДЛЯ ПРЕДВАРИТЕЛЬНОЙ ОБРАБОТКИ РАМАНОВСКИХ СПЕКТРОВ

Д.А. Фунтов, И.А. Матвеева

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

Ключевые слова: рамановская спектроскопия, коррекция базовой линии, аппроксимация полиномом, фильтрация Савицкого-Голея, графический пользовательский интерфейс.

В современной клинической практике немаловажная роль отводится диагностическим мероприятиям. В последнее десятилетие в связи с прогрессом в развитии медицины и смежных с ней дисциплин широкое распространение получили высокоинформативные методы диагностики, которые не требуют временных затрат и длительной дополнительной подготовки пациента, а также не вызывают изменений в функционировании отдельных органов и систем. Наибольший интерес в связи с атравматичностью и удобством проведения представляют неинвазивные оптические методы, применение которых не сопровождается нарушением целостности тканей и не связано с внедрением в полости исследуемых органов [1]. К таким методам относится рамановская спектроскопия [2, 3]. Это метод молекулярной спектроскопии, основанный на изучении неупруго рассеянного света молекулами образца. Однако помимо полезного рамановского сигнала могут записываться дополнительные паразитные сигналы, связанные со вкладом флуоресценции, оптико-электронного тракта [4] и т.д. Для приведения спектра рамановского рассеяния к стандартному виду и повышения соотношения сигнал-шум требуется предварительная обработка, включающая обрезку спектра в информативном диапазоне, сглаживание фильтром Савицкого-Голея и удаление базовой линии, вызванной фоном флуоресценции [5].

На рисунке 1 приведен пример предварительной обработки рамановского спектра из работы [6].