

ИНТЕЛЛЕКТУАЛЬНЫЙ АНАЛИЗ SERS-СПЕКТРОВ СЫВОРОТКИ КРОВИ ДЛЯ ДИАГНОСТИКИ СИСТЕМНОЙ КРАСНОЙ ВОЛЧАНКИ НА ОСНОВЕ MCR-ALS И МЕТОДОВ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ

И.А. Пименова

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

Ключевые слова: чередующиеся наименьшие квадраты, метод разрешения многомерных кривых, рамановская спектроскопия, сыворотка крови, системная красная волчанка, машинное обучение.

Системная красная волчанка (СКВ) является хроническим аутоиммунным заболеванием, характеризующимся многообразием клинических проявлений и поражением различных органов и систем, включая кожу, суставы, почки, сердечно-сосудистую и нервную системы. Заболевание отличается волнообразным течением и высокой вариабельностью симптомов, что существенно осложняет его своевременное выявление. В связи с этим ранняя и точная диагностика системной красной волчанки имеет важнейшее значение для назначения своевременной терапии, предотвращения необратимого поражения органов и снижения риска развития тяжёлых осложнений.

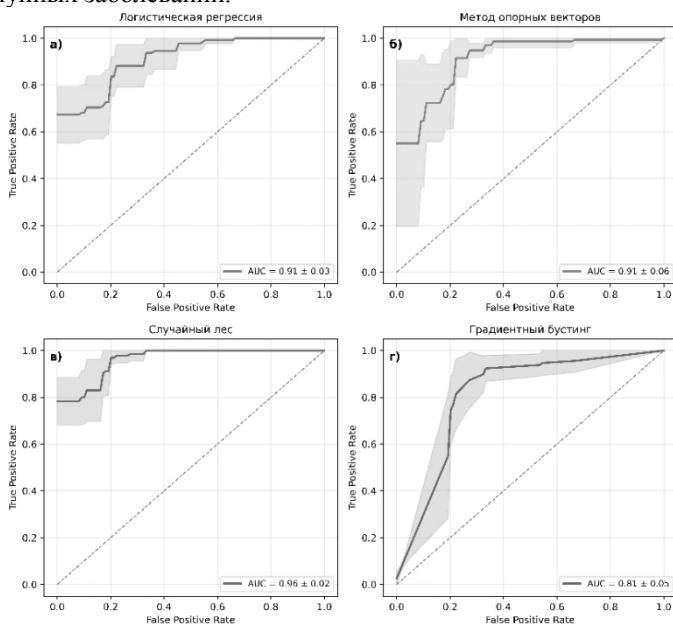
Существующие методы диагностики СКВ основаны на сочетании клинических критериев и лабораторных показателей. Однако такие методы не всегда позволяют выявить заболевание на ранних стадиях и могут требовать комплексных и дорогостоящих исследований. Поэтому актуальным направлением современной медицины является поиск новых высокочувствительных и неинвазивных методов диагностики, позволяющих обнаруживать биохимические изменения в биологических жидкостях на ранних этапах развития заболевания. В этом контексте перспективным инструментом может выступать рамановская спектроскопия, способная выявлять молекулярные изменения в составе биологических образцов и потенциально использоваться для диагностики аутоиммунных заболеваний [1].

В исследовании использовались *in vitro* спектры сыворотки крови, полученные с применением технологии поверхностно-усиленной рамановской спектроскопии (SERS), подробно описанной в [2]. Всего проанализировано 179 образцов, из которых 139 принадлежали пациентам с подтверждённой СКВ, а 40 – контрольной группе. Для повышения информативности спектров и снижения размерности данных был применен метод разрешения многомерных кривых на основе алгоритма чередующихся наименьших квадратов (MCR-ALS). Его применение позволило эффективно выделить биохимически значимые компоненты спектра, связанные с молекулами белков, липидов и метаболитов [3].

Далее профили концентраций выделенных компонентов использовались в качестве признаков для построения моделей машинного обучения: логистической регрессии, метода опорных векторов (SVM), случайного леса и градиентного бустинга. Оценка качества моделей проводилась с использованием, 5-ти фолдовой кросс-валидации, ROC-кривых и метрики точности.

На рисунке 1 представлены ROC-кривые для построенных моделей. В данном случае также применен метод MCR-ALS для сокращения числа признаков.

Применение современных методов машинного обучения открывает новые возможности для использования диагностических моделей в скрининговых и амбулаторных условиях. Предложенный в работе подход интеллектуального анализа спектров крови на основе SERS и метода MCR-ALS в сочетании с алгоритмами машинного обучения может рассматриваться как перспективный инструмент для ранней диагностики системной красной волчанки. Такой подход позволяет выявлять даже небольшие биохимические изменения в составе сыворотки крови и способствует повышению точности и информативности диагностики аутоиммунных заболеваний.



а) логистическая регрессия, б) метод опорных векторов,
в) случайный лес, г) градиентный бустинг

Рисунок 1 – ROC-кривые для случая классификации
здоровых людей и пациентов с системной красной волчанкой

Таблица 1 – Метрики, полученные в результате классификации

Модель	Accuracy (MCR)	AUC (MCR)
Логистическая регрессия	0,78 ± 0,06	0,91 ± 0,03
Метод опорных векторов	0,83 ± 0,06	0,91 ± 0,06
Случайный лес	0,91 ± 0,03	0,96 ± 0,02
Градиентный бустинг	0,86 ± 0,05	0,81 ± 0,05

Список использованных источников

1. Raman spectroscopy of blood and blood components / C. G. Atkins, K. Buckley, M. W. Blades, R. F. Turner // Applied spectroscopy. – 2017. – Vol. 71, № 5. – P. 767-793.
2. Silver nanoparticles-based substrate for blood serum analysis under 785 nm laser excitation / S. Z. Al-Sammarraie, L. A. Bratchenko, E. N. Typikova [et al.] // Journal of Biomedical Photonics & Engineering. – 2022. – Vol. 8, № 1. – P. 010301.
3. Multidimensional Analysis of Dermoscopic Images and Spectral Information for the Diagnosis of Skin Tumors / I. A. Matveeva, A. I. Komlev, O. I. Kaganov [et al.] // Journal of Biomedical Photonics and Engineering 2024. – Vol. 10, № 1. – P. 010307.

Пименова Ирина Александровна, асп. гр. А1_02.02.12, каф. ЛБС, pimenova.0312@list.ru.