

УДК 546.03

## ИСПОЛЬЗОВАНИЕ МЕТОДОВ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ ДЛЯ ПРЕДСКАЗАНИЯ СВОЙСТВ МАГНИТНЫХ НАНОЧАСТИЦ ДЛЯ ПРИМЕНЕНИЙ В МРТ И ГИПЕРТЕРМИИ

Ким П.В. (Университет ИТМО), Кладько Д.В. (Университет ИТМО)

Научный руководитель – д.х.н, профессор Виноградов В.В.  
(Университет ИТМО)

**Введение.** Магнитные наночастицы – важнейший класс материалов, чьи свойства определяются их параметрами, что делает перспективным использование этих частиц в катализе, экологии и, в особенности, в биомедицине. Фактором, ограничивающим использование наноразмерных магнитных агентов, является тот факт, что их получение является эмпирической задачей, которая требует большого количества ресурсов и временных затрат.

**Основная часть.** Суть предлагаемого решения состоит в разработке алгоритмов машинного обучения (МО) для предсказания значений удельного коэффициента поглощения (SAR), отражающего эффективность наночастиц в приложениях гипертермии, а также  $r_1$  и  $r_2$  релаксаций, определяющих разрешение снимков магнитно-резонансной томографии (МРТ) магнитных наночастиц. Для этого была собрана база данных, содержащая 1071 образец магнитных наночастиц с соответствующими им параметрами. Полученные данные после обработки были использованы для обучения (80 % от общего числа данных) и тестирования (20 % от общего числа данных) алгоритмов МО. Для определения эффективности моделей использовалась кросс-валидация с разбиением набора данных на 10 секций. Правильность предсказаний оценивалась с помощью таких метрик как среднеквадратичная ошибка (RMSE) и коэффициент детерминации ( $R^2$ ). Влияние параметров на предсказываемые значения было исследовано с помощью анализа SHAP-диаграмм. Для оценки качества предсказаний моделей МО на ранее не виденных алгоритмом данных был проведен сбор новых образцов с последующим предсказанием их биомедицинских характеристик.

**Выводы.** После проведения процедур сравнения различных моделей было показано, что для предсказания значения SAR лучшим алгоритмом является LGBM Regressor, имеющий такие показатели метрик, как  $R^2 = 0.86$  и  $RMSE = 0.27$  на кросс-валидации,  $R^2 = 0.86$  и  $RMSE = 0.26$  на тестовой выборке; для предсказания значений  $r_1$  и  $r_2$  релаксаций – ExtraTrees Regressor со значениями  $R^2 = 0.72$ ,  $RMSE = 0.31$  и  $R^2 = 0.63$ ,  $RMSE = 0.29$  на кросс-валидации для  $r_1$  и  $r_2$  соответственно;  $R^2 = 0.75$ ,  $RMSE = 0.30$  и  $R^2 = 0.79$ ,  $RMSE = 0.21$  на тестовой выборке соответственно для  $r_1$  и  $r_2$ . Анализ SHAP-диаграмм показал хорошо известные зависимости предсказываемых значений от дескрипторов, что говорит о соответствии предсказаний алгоритмов МО физическому смыслу происходящих процессов. Валидация моделей показала соответствие предсказаний, полученных с использованием ранее не виденных алгоритмом образцов, метрикам моделей (средние значения разницы между предсказываемым и экспериментальным значениями равны:  $\overline{\Delta lg(SAR)} = 0.34$ ,  $\overline{\Delta lg(r_1)} = 0.27$ ,  $\overline{\Delta lg(r_2)} = 0.29$ , что соотносится со значениями RMSE, равными соответственно 0.27, 0.30, 0.29). Вышеописанные факты делают перспективным использование разработанных моделей МО для облегчения процесса разработки магнитных наночастиц для применений в МРТ и гипертермии.

*Работа выполнена при поддержке программы «Приоритет 2030»*