**Предсказание биомедицинских свойств магнитных наночастиц для применений в МРТ и гипертермии с помощью методов машинного обучения**

***Ким П.В., Кладько Д.В.***

*Студент, 1 курс магистратуры*

*Национальный исследовательский университет ИТМО,*

*международный научный центр SCAMT, Санкт-Петербург, Россия*

*E-mail: kim@scamt-itmo.ru*

Наноразмерные ферромагнетики являются важным классом материалов, чьи свойства сильно коррелируют с их размером, формой, составом ядра и покрытия. Этот факт делает магнитные наночастицы перспективными во многих областях, особенно в биомедицинских приложениях. Однако, получение частиц с заданными свойствами является ресурсозатратной экспериментальной задачей. Применение методов машинного обучения (МО), предшествующее экспериментальному синтезу, может быть использовано для предсказания значений удельного коэффициента поглощения (SAR) электромагнитного излучения для приложений гипертермии и r1/r2 релаксаций для магнитно-резонансной томографии (МРТ).

Целью данной работы является разработка регрессионных моделей МО для предсказания значений SAR, r1 и r2 релаксаций магнитных наночастиц. Для достижения поставленной цели были решены следующие задачи: используя данные из научных статей была собрана база данных, содержащая 1071 наночастицу и её параметры; используя исходные данные были разработаны производные дескрипторы, которые затем использовались для обучения (80 % данных) и тестирования (20 % данных) алгоритмов МО. Для оценки моделей использовалась процедура кросс-валидации с разбиением датасета на 10 секций. Правильность результатов оценивалась с помощью коэффициента детерминации (R2) и среднеквадратичной ошибки (RMSE).

По результатам сравнения различных моделей после оптимизации гиперпараметров, лучшим алгоритмом для предсказания значения SAR оказался LGBM Regressor, а для предсказания значений r1/r2 релаксаций – ExtraTrees Regressor (значения метрик представлены на рис. 1). Для проверки эффективности предсказаний полученных алгоритмов МО на данных, которые модели ранее не видели, была предложена процедура валидации, заключающаяся в сборе новых образцов с последующим предсказанием их биомедицинских свойств. Анализируя полученные значения используемых метрик (R2 и RMSE), можно сказать, что построенные модели обладают высокой точностью при предсказании значений SAR и r1/r2 релаксаций.

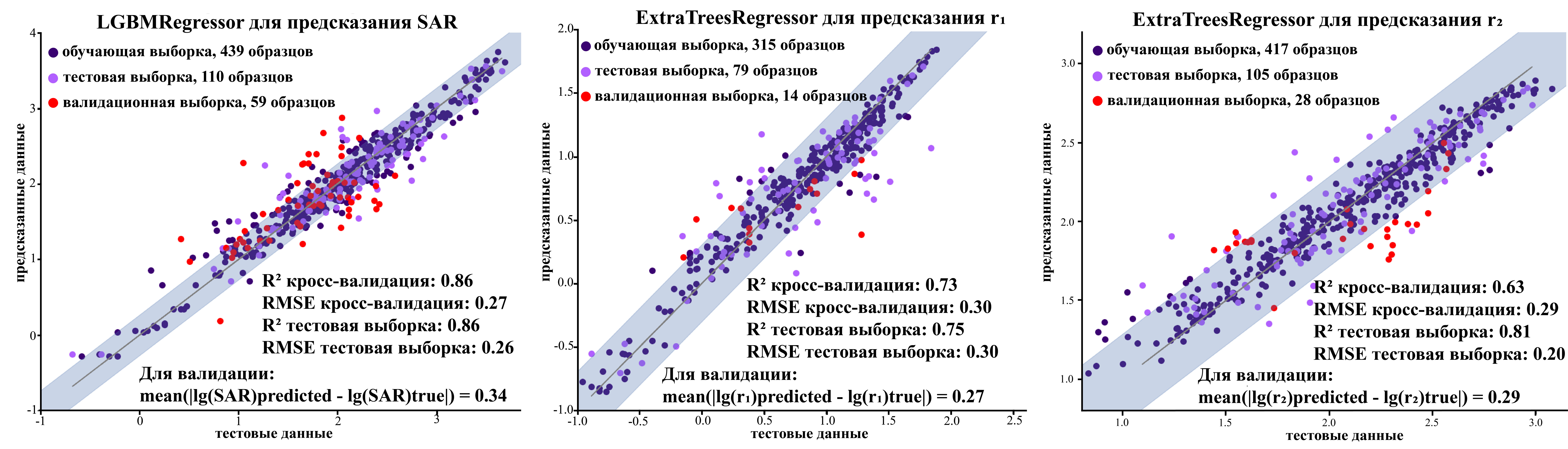


Рис. 1. Эффективность построенных моделей МО для предсказания биомедицинских свойств магнитных наночастиц

*Работа выполнена при поддержке программы «Приоритет 2030»*