

Міністерство охорони здоров'я України
Буковинський державний медичний університет

БУКОВИНСЬКИЙ МЕДИЧНИЙ ВІСНИК

DOI: 10.24061/2413-0737.29.1

Український науково-практичний журнал

Заснований у лютому 1997 року

Видається 4 рази на рік

Включений до Ulrichsweb™ Global Serials Directory, наукометричних і спеціалізованих баз даних Google Scholar (США), Index Copernicus International (Польща), Scientific Indexing Services (США), Infobase Index (Індія), Ukrainian research & Academy Network (URAN), НБУ ім. Вернадського, “Джерело”

ТОМ 29, № 1 (113)

2025

Редакційна колегія:

головний редактор Геруш І.В.,
Беліков О.Б., Боднар О.Б., Бойчук Т.М., Ванчуляк О.Я.,
Гринчук Ф.В., Давиденко І.С., Іващук О.І., Ілащук Т.О.,
Коваль Г.Д., Колоскова О.К.,
Кривецький В.В. (заступник головного редактора),
Максим'юк В.В., Пашковська Н.В.,
Проняєв Д.В. (відповідальний секретар), Сидорчук Л.П.,
Сокольник С.В., Ташук В.К., Ткачук С.С.,
Федів О.І., Цигикало О.В., Шкварковський І.В.

Чернівці: БДМУ, 2025

Редакційна рада:

К.М. Амосова (Київ), В.В. Бойко (Харків),
А.І. Гоженко (Одеса), В.М. Запорожан (Одеса),
В.М. Коваленко (Київ), З.М. Митник (Київ),
В.І. Паньків (Київ), В.П. Черних (Харків),
Герхард Дамман (Швейцарія),
Збігнев Копанські (Польща),
Дірк Брутцерт (Бельгія),
Раду Крістіан Дабіша (Румунія),
Віктор Ботнару (Молдова), І.М. Катеренюк (Молдова),
Наталія Мельник (Чехія)

Рекомендовано до друку та до поширення через мережу Інтернет рішенням вченої ради
Буковинського державного медичного університету
(протокол № 7 від 27.03.2025 року)

Буковинський медичний вісник
(Бук. мед. вісник)
Bukovinian Medical Herald
(Buk. Med. Herald) – науково-практичний
журнал, що рецензується, заснований у лютому
1997 р. Видається 4 рази на рік.
Мова видання: українська, англійська.
Сфера розповсюдження загальнодержавна,
зарубіжна. Свідectво про державну
реєстрацію: серія КВ №15684-4156 ПР
від 21.09.2009. Наказом Міністерства освіти і
науки України від 17 березня 2020 року № 409
журнал “Буковинський медичний вісник”
включено до категорії "Б" (медичні
спеціальності – 222) переліку наукових
фахових видань України

Витяг з реєстру суб'єктів у сфері медіа –
реєстрантів, виданий Буковинському
державному медичному університету,
м. Чернівці, код ЕДРОПУ 02010971.
Ідентифікатор медіа R30-03255. Назва
медіа «Буковинський медичний вісник»
«Bukovinian Medical Herald». Рішення
Національної ради України з питань
телебачення і радіомовлення про
реєстрацію від 28.03.2024 № 1037.
Адреса редакції: 58002, м. Чернівці,
пл. Театральна, 2
Тел.: (0372) 55-37-54, 52-39-63
Факс: (0372) 55-37-54
e-mail: bmh@bsmu.edu.ua
Адреса електронної версії журналу в
Internet: <http://e-bmv.bsmu.edu.ua/>

РАМАН-СПЕКТРОСКОПІЯ ТА МЕТОДИ ШТУЧНОГО ІНТЕЛЕКТУ ДЛЯ СКРИНІНГУ РАКУ РОТОВОЇ ПОРОЖНИНИ

С.Л. Говорнян, О.І. Іващук

Буковинський державний медичний університет, м. Чернівці, Україна

Ключові слова: Раман-спектроскопія, скринінг, рак ротової порожнини, нейронні мережі, штучний інтелект, Deep Learning

Буковинський медичний вісник. 2025. Т. 29, № 1 (113). С. 10-14.

DOI: 10.24061/2413-0737.29.1.113.2025.2

E-mail:
hovornyan@bsmu.edu.ua
ivashchuk@bsmu.edu.ua



Резюме. Рак ротової порожнини має високі показники смертності через пізню діагностику. Сучасні методи скринінгу недостатньо чутливі, що робить актуальним пошук нових підходів. Раман-спектроскопія дозволяє аналізувати біохімічні зміни, а штучний інтелект, зокрема згорткові нейронні мережі (CNN), покращує обробку спектральних даних та виявлення прихованих патернів.

Мета дослідження – оцінити ефективність CNN у аналізі раманівських спектрів слини для скринінгу раку ротової порожнини та порівняти з традиційними статистичними методами.

Результати. Аналіз трьох груп пацієнтів (здорові, передрак, рак) показав, що найбільш чутливі спектральні діапазони – $1450\text{--}1580\text{ cm}^{-1}$ і $1580\text{--}1700\text{ cm}^{-1}$. Найвища точність CNN (90%) досягнута при використанні всього спектрального діапазону ($830\text{--}2100\text{ cm}^{-1}$), що перевершує традиційні статистичні методи. Використання повного спектра дозволяє виявляти приховані закономірності та підвищує стійкість моделі до шумів.

Висновки. CNN демонструє вищу ефективність у спектральному аналізі раку ротової порожнини порівняно зі статистичними методами. Використання всього спектра є більш інформативним, ніж аналіз окремих піків. Подальші дослідження можуть охоплювати інші методи машинного навчання та впровадження спектроскопії в клінічну практику.

RAMAN SPECTROSCOPY AND ARTIFICIAL INTELLIGENCE METHODS FOR ORAL CANCER SCREENING

S.L. Hovornyan, O.I. Ivashchuk

Key words: Raman spectroscopy, screening, oral cancer, neural networks, artificial intelligence, deep learning.

Bukovinian Medical Herald. 2025. V. 29, № 1 (113). P. 10-14.

Resume. Oral cancer has a high mortality rate due to late diagnosis. Current screening methods lack sensitivity, highlighting the need for new approaches. Raman spectroscopy enables the analysis of biochemical changes, while artificial intelligence, particularly convolutional neural networks (CNN), enhances spectral data processing and the detection of hidden patterns.

Objective. To evaluate the effectiveness of CNN in analyzing Raman spectra of saliva for oral cancer screening and compare it with traditional statistical methods.

Results. The analysis of three patient groups (healthy, precancerous, and cancerous) revealed that the most sensitive spectral ranges are $1450\text{--}1580\text{ cm}^{-1}$ and $1580\text{--}1700\text{ cm}^{-1}$. The highest CNN accuracy (90%) was achieved when using the full spectral range ($830\text{--}2100\text{ cm}^{-1}$), outperforming traditional statistical methods. Utilizing the entire spectrum allows for the identification of hidden patterns and increases model robustness against noise.

Conclusions. CNN demonstrates superior performance in spectral analysis for oral cancer screening compared to statistical methods. Full-spectrum analysis is more informative than examining individual peaks. Future research may explore other machine learning techniques and the integration of spectroscopy into clinical practice.

Вступ. Рак ротової порожнини (переважно плоскоклітинний рак, OSCC) залишається серйозною проблемою охорони здоров'я зі стабільно невисокою п'ятирічною виживаністю близько 50% через пізнє виявлення хвороби. Відомо, що рання діагностика значно підвищує шанси на успішне лікування: на I

стадії 5-річна виживаність може перевищувати 80%, тоді як на IV стадії вона знижується до ~40%. На жаль, до 50% випадків OSCC діагностуються на пізніх стадіях через безсимптомний початок та обмежені можливості існуючих скринінгових методів. Тому розвиток неінвазивних підходів раннього виявлення

має вирішальне значення [1].

Одним із перспективних методів є Раман-спектроскопія – оптична техніка, що дозволяє за допомогою лазерного випромінювання оцінювати молекулярний склад біологічних тканин або рідин. Вона неінвазивна, швидка і здатна виявляти біохімічні зміни, пов'язані зі злоякісними трансформаціями, наприклад зміни вмісту білків, ліпідів та нуклеїнових кислот у зразках слини або тканини.

Останні дослідження підтвердили потенціал Раман-спектроскопії як додаткового інструмента для ранньої діагностики OSCC та передракових станів, виявляючи характерні спектральні «відбитки» злоякісних змін [2]. Водночас інтерпретація складних спектральних даних потребує потужних аналітичних підходів. Методи штучного інтелекту, зокрема глибоке навчання на основі згорткових нейронних мереж (Convolutional Neural Networks, CNN), демонструють високу точність у діагностиці раку, перевершуючи традиційні статистичні підходи. На відміну від класичних методів, що аналізують окремі піки чи використовують лінійні комбінації ознак, CNN автоматично виокремлюють складні приховані патерни в спектрах, підвищуючи чутливість і специфічність виявлення патології [3].

За останні 5 років накопичено чимало доказів переваг поєднання Раман-спектроскопії з методами глибокого навчання для діагностики раку. У цій роботі представлено результати застосування CNN для аналізу раманівських спектрів слини з метою скринінгу раку ротової порожнини та порівняння ефективності цього підходу з традиційним статистичним аналізом спектральних ознак. [3]

Мета дослідження - оцінити ефективність CNN в аналізі раманівських спектрів слини для скринінгу раку ротової порожнини та порівняти з традиційними статистичними методами.

Матеріал і методи. Дослідження включало три групи пацієнтів:

1. Контрольна група (N) – здорові особи (43 учасники) без патологій ротової порожнини;
2. Група передраку (P2) – 44 пацієнти з діагностованою лейкоплакією (потенційно злоякісне ураження слизової);
3. Група раку (C) – 44 пацієнти з підтвердженим плоскоклітинним раком ротової порожнини.

Середній вік та співвідношення статей у групах були зіставними (відмінності незначущі, $p > 0,05$), що виключає вплив демографічних чинників на результати аналізу. У всіх учасників брали нестимульовану слину об'ємом ~2 мл; зразки слини зібрані вранці натщесерце, після чого піддані центрифугуванню та фільтрації для видалення клітинного детриту. Отриманий прозорий супернатант наносили на інертну підкладку і висушували при кімнатній температурі, щоб сконцентрувати біомолекули. Раман-спектри кожного зразка реєстрували на лабораторному спектрометрі зі збудженням лазером 785 нм (потужність 100 мВт) у діапазоні від ~800 до 1800 cm^{-1} , який охоплює основні

коливальні смуги біологічних молекул (такі як амід I ~1650 cm^{-1} , смуги ліпідів ~1440-1450 cm^{-1} тощо). Спектральна роздільна здатність становила ~4 cm^{-1} . Для кожного зразка накопичували 3–5 спектрів з експозицією 10 с і усереднювали для підвищення відношення сигнал/шум. Перед аналізом спектри проходили стандартну попередню обробку: усунення фону (вилучення флуоресцентного фону шляхом підгонки полінома), згладжування (фільтр Савіцького-Голея) та нормалізацію за інтенсивністю найбільшого піка.

Для виявлення спектральних ознак, найбільш чутливих до патологічних змін, проведено порівняльний аналіз інтенсивностей на кожній довжині хвилі між групами. Спочатку виконано однофакторний дисперсійний аналіз (ANOVA) по всьому спектру, який підтвердив наявність статистично значущих відмінностей між групами (C, P2, N) при рівні значущості ($p < 0,01$). Далі застосовано пост-хок t-тести (з поправкою Бонферроні) для кожної пари груп, а також розраховано р-значення для різниці інтенсивностей на кожному з дискретних значень довжини хвилі. Таким чином вдалося виокремити спектральні діапазони, де різниця між спектрами здорових і патологічних зразків найбільша.

Для автоматизованої багатовимірної обробки спектральних даних розроблено модель на основі 1-вимірної згорткової нейронної мережі. Архітектура моделі (рис. 1) включала вхідний шар розмірністю, що дорівнює кількості спектральних каналів (довжин хвиль) у вибраному діапазоні, за яким слідували три послідовні блоки згортки і субдискретизації. Перший згортковий шар складався з 128 фільтрів (розмір ядра 5 точок), що виконували 1D-конволюцію спектра з активацією ReLU. Далі застосовувався шар макспулінгу з вікном 2, який зменшував розмірність виходу вдвічі, і шар батч-нормалізації для уніфікації розподілу ознак. Також після першого і другого блоків згортки вводився Dropout (20%) для запобігання перенавчанню. Другий згортковий шар мав 256 фільтрів (ядро 5), третій – 128 фільтрів (ядро 3) з подальшою глобальною усереднюючою субдискретизацією (Global Average Pooling), що згортала кожну карту ознак в одне середнє значення. Таким чином, CNN виокремлювала багаторівневі локальні ознаки спектра – від дрібномасштабних пікових особливостей до узагальнених патернів по всьому діапазону. Отримані ознаки надходили до багатощарового перцептрону: послідовно розташованих прихованих повнозв'язних шарів (кількість нейронів: рівна розміру вхідного спектра, половина розміру, чверть розміру) з активацією tanh. Завершував архітектуру вихідний нейрон з активацією sigmoid, що генерував ймовірність приналежності спектра до класу «патологія» (напр. рак) або «норма». Для навчання мережі використовували функцію втрат бінарної крос-ентропії і оптимізатор Adam (навчальна швидкість 3×10^{-4}). Щоб збалансувати вибірку за класами (адже у задачах «рак vs контроль» та ін. кількість випадків могла відрізнятися), застосовано

Оригінальні дослідження

метод надсемплінгу меншості SMOTE перед поділом на тренувальну й тестову вибірки (70/30). Навчання проводили протягом 100 епох із міні-пакем 8 та методом раннього зупину (якщо значення `val_loss` не покращувалося протягом 10 епох). Така архітектура підібрана експериментально – вона забезпечила найкраще узгодження між здатністю моделі навчитися складним розрізняльним ознакам і узагальнювати їх (уникнувши перенавчання). Перевагою 1D-CNN є автоматичне виокремлення інформативних характеристик без необхідності ручного вибору піків або складної попередньої обробки даних. Нейромережа вловлює локальні патерни інтенсивностей (форми піків, співвідношення між сусідніми смугами) по всьому спектру, що важко врахувати традиційними методами. Крім того, використання усереднення ознак і шарів відсіву шуму робить модель стійкою до експериментального шуму та варіабельності зразків. Завдяки цьому запропонована CNN особливо ефективна для аналізу біомедичних спектрів, які містять множинні корельовані ознаки і шуми [3].

Результати дослідження та їх обговорення

Аналіз різних діапазонів довжин хвиль.

З'ясовано, що дві ділянки – 1450–1580 cm^{-1} та 1580–1700 cm^{-1} – демонструють найбільш значні відмінності між здоровими, передраковими та раковими зразками ($p < 0,01$) [4]. Зокрема, в інтервалі ~1500–1600 cm^{-1} інтенсивності характерних піків у групі раку були помітно нижчими, ніж у контролі (наприклад, при ~1600 cm^{-1} інтенсивність у С у середньому на ~1,6% нижча, $p \approx 0,004$). Натомість, у передракових зразках (лейкоплакія) на цих же довжинах хвиль спостерігалось підвищення інтенсивності порівняно зі здоровими (на ~5–7%), що свідчить про прогресивні біохімічні зміни ще до малігнізації. Найбільша спектральна розбіжність між раковими та нормальними зразками виявлена в ділянці 1657–1660 cm^{-1} , де інтенсивність амідного піка різко зменшувалася при злоякісній трансформації. Відомо, що піки ~1650 cm^{-1} відповідають коливанням амідних груп білків, а ~1450 cm^{-1} – деформаційним коливанням метиленових груп ліпідів і білків. У нормальних тканинах спектр зазвичай “ліпід-домінантний” (сильніший пік ~1445 cm^{-1}), тоді як у злоякісно змінених тканинах відносно посилюються амідні смуги білків. Наш статистичний аналіз підтвердив, що саме зміни вмісту білків/ліпідів відображаються в різниці інтенсивностей у діапазонах 1450–1700 cm^{-1} між групами. Ці “чутливі” спектральні ділянки відібрано для подальшого цілеспрямованого аналізу та побудови моделей [4].

Для оцінки впливу спектрального діапазону на якість класифікації було навчено серію моделей CNN для розділення груп (С vs N, С vs P2, P2 vs N) на різних інтервалах довжин хвиль. Результати підтвердили, що продуктивність CNN суттєво залежить від вибраних ознак спектра. Найвищу точність класифікації рак vs контроль мережа досягла при використанні вузького діапазону 1640–1670 cm^{-1} , який містить амід І –

інтенсивна смуга білків, чутлива до злоякісної трансформації. Для цієї задачі точність моделі становила ~95%, площа під ROC-кривою (AUC) ~0,97. Для ширшого діапазону 1580–1700 cm^{-1} (що включає амід І та сусідні піки) показники були близькими – точність ~93–94%. Натомість, у ділянці 1450–1580 cm^{-1} (в основному смуги білків і ліпідів середньої інтенсивності) якість класифікації була дещо нижчою – точність близько 88% (AUC ~0,90). Це узгоджується з тим, що відмінності між С і N у цій ділянці менш виражені, ніж у діапазоні амідних коливань. Потенційно «шумові» ділянки нижнього (830–1450 cm^{-1}) та верхнього (1700–2100 cm^{-1}) інтервалів спектра дали найгірші результати класифікації (точність не перевищувала 80%). Це вказує, що в цих ділянках відсутні суттєві діагностичні сигнали, а домінує випадковий шум та фон. Цікаво, що використання усього спектра (830–2100 cm^{-1}) для тренування CNN дозволило досягти стабільно високої ефективності для всіх типів порівнянь. Зокрема, при одночасному аналізі всіх довжин хвиль модель правильно розпізнавала рак vs контроль з точністю ~94%, рак vs передрак – ~90%, передрак vs контроль – ~88%. Повносектральний підхід виявився більш універсальним: мережа навчилася ідентифікувати сукупність дрібних ознак по всьому спектру, що характеризують кожен клас, тоді як вузькі діапазони давали високу точність лише для окремих пар груп. Наприклад, для задачі передрак vs контроль вузькополосний діапазон 1640–1670 cm^{-1} був менш інформативним (точність лише ~80%), оскільки різниця між спектрами лейкоплакії і нормальної слизової в цій ділянці невелика. Натомість CNN, проаналізувавши весь спектр, виявила інші патерни (зростання інтенсивностей у 1500–1550 cm^{-1} , зсув відносної інтенсивності піків 1330/1450 cm^{-1} тощо), які дозволили успішно відрізнити передрак від норми, навіть якщо основний амідний пік був подібним. Таким чином, включення всього спектрального профілю дало змогу мережі виявити приховані комбінації ознак, недоступні при аналізі тільки окремих “маркерних” піків.

Порівняння ефективності CNN та статистичних методів

Ефективність розробленої CNN-моделі порівнювали з традиційним підходом, що базується на аналізі інтенсивностей чутливих піків і статистичній класифікації. Випробувано модель лінійного дискримінантного аналізу (LDA), навченої на двох найбільш значущих довжинах хвиль (наприклад, 1650 і 1600 cm^{-1} для задачі С vs N). Така модель показала значно гірші результати: точність класифікації рак vs контроль становила ~75–80%, а для передрак vs контроль не перевищувала 70% (близько до межі випадкового вгадування). Навіть використання методів головних компонент з наступним LDA підвищувало точність лише до ~85% для найпростіших задач. Отримані показники узгоджуються з даними літератури: наприклад, у дослідженні з використанням Раманівських спектрів слини та PCA-LDA було

досягнуто чутливості $\sim 79\%$ при виявленні раку. Натомість, наш підхід на основі CNN забезпечив чутливість і специфічність понад 90% для виявлення раку, істотно перевершуючи традиційні алгоритми. Важливо, що нейромережа також продемонструвала вищу робастність: при додаванні в модель штучного білого шуму її точність знижувалася незначно (на $3\text{--}5\%$), тоді як статистичні моделі втрачали до $15\text{--}20\%$ точності. Це свідчить про здатність CNN вловлювати стійкі закономірності в спектрах, які залишаються інформативними навіть на тлі шумів чи варіацій, тоді як прості методи, що спираються на абсолютні значення окремих піків, більш чутливі до перешкод. Приховані спектральні патерни, виявлені CNN при аналізі всього спектра, включають зміну співвідношення інтенсивностей піків амідів I ($\sim 1650\text{ см}^{-1}$) і смуг ліпідів ($\sim 1440\text{ см}^{-1}$), зниження інтенсивностей смуг нуклеїнових кислот ($\sim 1090\text{ см}^{-1}$ фосфатного скелета) у ракових зразках, появу додаткових плечей піків у передракових спектрах тощо. Більшість із цих ознак не були артіфактами очевидними і не виявлялися при пороговому статистичному аналізі, однак нейромережа успішно навчилася їх розпізнавати, підвищуючи точність діагностики.

Результати підтвердили, що різні ділянки спектра по-різному інформативні для виявлення злоякісних змін. Висока діагностична цінність інтервалу $1580\text{--}1700\text{ см}^{-1}$ пояснюється наявністю в ньому амідних смуг білків (насамперед амід I $\sim 1655\text{ см}^{-1}$), які суттєво змінюються при малигнізації тканин. Зменшення інтенсивності амідного піка в спектрах слини ракових хворих можна інтерпретувати як ознаку протеолітичного розпаду та зниження вмісту високомолекулярних білків, характерного для прогресування раку. Одночасно, у передракових станах (лейкоплакія) спостерігалось підвищення відносної інтенсивності білкових і нуклеїнових смуг, що відображає інтенсивні проліферативні процеси та запалення перед злоякісною трансформацією (UA 1.docx). Діапазон $1450\text{--}1580\text{ см}^{-1}$, хоч і менш контрастний, також важливий – він містить смуги валентних коливань CH_2/CH_3 -груп, пов'язані зі вмістом ліпідів і колагену. Відомо, що нормальні слизові тканини мають більш виражені ліпідні піки ($\sim 1445\text{ см}^{-1}$), тоді як для пухлин характерне зниження ліпідних та підвищення білкових сигналів. Наші дані відповідають цій тенденції: у спектрах здорових зразків інтенсивність $1440\text{--}1450\text{ см}^{-1}$ була вищою, а в ракових – знижувалась, натомість амідна ділянка поведилася протилежно. Це підтверджує, що CNN використовувала саме ці біохімічні зміни (співвідношення білок/ліпіди) як ознаки для класифікації. Натомість, у низькочастотному інтервалі $<1450\text{ см}^{-1}$ корисної інформації мало: там розташовані переважно коливання вуглеводів та фонові флуоресцентні компоненти, які сильно варіюють між зразками і тому погіршують роботу моделі. Цим пояснюється слабка продуктивність CNN на вузьких діапазонах $830\text{--}1450\text{ см}^{-1}$ та $1700\text{--}2100\text{ см}^{-1}$.

Висока точність і чутливість CNN порівняно з традиційними підходами узгоджується з висновками інших дослідників. Застосування глибоких нейронних мереж до спектроскопічних даних раніше продемонструвало переваги над лінійними дискримінантними аналізами та іншими класичними алгоритмами. Зокрема, в огляді 2022 р. відзначено, що CNN стабільно перевершують методи LDA, SVM тощо при класифікації раманівських спектрів різних видів раку завдяки здатності враховувати нелінійні взаємозв'язки ознак. У нашому дослідженні CNN змогла одночасно використати інформацію з кількох спектральних ділянок (білкові, ліпідні, нуклеїнові смуги), тоді як статистичний підхід спирався лише на один-два піки. Це ключова причина, чому нейромережева модель має вищу чутливість до ранніх біохімічних зрушень: вона розпізнає комплексні «підписи» раку в спектрі, навіть якщо зміни окремих піків не перевищують пороги значущості. Більш того, CNN може навчатися на шумних даних і виявляти стійкі патерни, у той час як традиційні методи часто потребують попереднього придушення шумів і можуть втрачати частину сигналу. Наша модель включала шари нормалізації і Dropout, що забезпечило їй певну регуляризацию і стійкість. Цікаво, що в недавньому дослідженні Li та співавт. (2023) поєднання оптоволоконної Раман-спектроскопії з глибокою CNN дозволило досягти $94\text{--}95\%$ точності при діагностиці та градації раку ротової порожнини, що зіставно з результатами гістопатології. Це підтверджує наші висновки про те, що глибоке навчання здатне забезпечити діагностичну точність, близьку до «золотого стандарту». Важливо підкреслити, що аналіз усього спектра виявився кращим, ніж використання лише окремих «маркерних» довжин хвиль, навіть якщо останній статистично значущі. Повноспектральний підхід враховує всі можливі біомаркери одночасно та їхні взаємозв'язки. Наприклад, піки амідів I і ліпідів можуть давати максимальний контраст між нормою і раком, але для відмінності передраку від норми важливими виявляються додаткові смуги (наприклад, смуги колагену $\sim 1250\text{--}1300\text{ см}^{-1}$). CNN, аналізуючи весь спектр, успішно комбінує інформацію з усіх релевантних ділянок, тоді як фокусування лише на одній довжині хвилі пропускає ці додаткові ознаки. Отже, наші результати аргументують, що для задач скринінгу доцільно використовувати весь спектральний сигнал, а не тільки вибрані піки, щоб не втратити важливу інформацію про стан зразка [3, 5].

Висновки. Проведене дослідження продемонструвало принципову можливість застосування Раман-спектроскопії слини в поєднанні з методами глибокого навчання для неінвазивного скринінгу раку ротової порожнини. Розроблена 1D-CNN модель показала вищу точність та чутливість у розрізненні здорових, передракових та ракових зразків у порівнянні з традиційним статистичним аналізом спектрів. Зокрема, CNN досягла точності $\sim 90\text{--}95\%$ ($\text{AUC} > 0,9$) при класифікації, тоді як методи на основі вибіркового аналізу піків дали $70\text{--}85\%$. Таким чином,

Оригінальні дослідження

глибоке навчання перевершує класичні підходи у виявленні складних спектральних змін, пов'язаних із ранніми стадіями злоякісного процесу. Аналіз усього спектра виявився ефективнішим, ніж використання лише окремих «чутливих» довжин хвиль, що пояснюється наявністю множинних біомаркерів раку по всьому спектральному діапазону. Якщо традиційний підхід міг би зосередитись на одному піку (наприклад, 1650 cm^{-1}), то CNN одночасно враховує десятки ознак – від співвідношення інтенсивностей білкових та ліпідних смуг до дрібних зсувів положення піків – що забезпечує більш надійну діагностику. Отримані результати підтверджують переваги впровадження AI-аналізу раманівських спектрів у клінічну практику для раннього виявлення раку ротової порожнини. Виявлено, що найбільш інформативними є колективні зміни у всьому спектрі, тож використання повноспектральних даних дозволяє уникнути втрати важливої інформації, яка могла б бути пропущена при вибіркового аналізі кількох піків.

Перспективи подальших досліджень.

Перспективи подальших досліджень включають розширення застосування методів машинного навчання та вдосконалення моделі. Зокрема, доцільно порівняти інші алгоритми глибокого навчання – такі як рекурентні нейронні мережі (RNN) чи сучасні трансформери – для аналізу спектральних послідовностей, що може покращити виявлення довгих залежностей у спектрах. Крім того, цікавою є

розробка методів неконтрольованого навчання (кластеризація, автоенкодер) для виявлення природних кластерів спектрів та прихованих закономірностей без наявності апіорних міток. Наприклад, автоенкодер на базі CNN міг би навчитися стислого представлення спектрів, що відображає їхній біохімічний стан, і виявляти аномальні спектри, характерні для ранніх стадій раку. Такі підходи можуть доповнити контрольоване навчання, підвищивши надійність скринінгу. Також планується протестувати інші види класичних алгоритмів (SVM, Random Forest) та ансамблеві моделі для оцінки, чи зможе їх комбінація з CNN покращити точність. Іншим напрямом є збільшення вибірки пацієнтів та включення даних *in vivo* (наприклад, спектри безпосередньо зі слизової рота за допомогою волоконної Раман-оптики), аби перевірити узагальненість моделі в клінічних умовах. На перспективу інтеграція спектроскопії з AI може бути розширена до мультимодальних підходів – комбінування раманівських даних із флуоресцентними зображеннями чи молекулярно-біологічними маркерами для отримання ще більш надійних результатів. У цілому, подальший розвиток систем глибокого навчання для аналізу біоспектральних даних відкриває шлях до створення об'єктивних, кількісних і доступних методів ранньої діагностики раку, що особливо актуально для низькоресурсних середовищ.

References

1. Abati S, Bramati C, Bondi S, Lissoni A, Trimarchi M. Oral Cancer and Precancer: A Narrative Review on the Relevance of Early Diagnosis. *Int J Environ Res Public Health*. 2020;17(24):9160. DOI: 10.3390/ijerph17249160.
2. Faur CI, Dinu C, Toma V, Jurj A, Marginean R, Onaciu A, et al. A New Detection Method of Oral and Oropharyngeal Squamous Cell Carcinoma Based on Multivariate Analysis of Surface Enhanced Raman Spectra of Salivary Exosomes. *J Pers Med*. 2023;13(5):762. DOI: 10.3390/jpm13050762.
3. Blake N, Gaifulina R, Griffin LD, Bell IM, Thomas GMH. Machine Learning of Raman Spectroscopy Data for Classifying Cancers: A Review of the Recent Literature. *Diagnostics*. 2022;12(6):1491. DOI: 10.3390/diagnostics12061491.
4. Sharma M, Jeng MJ, Young CK, Huang SF, Chang LB. Developing an Algorithm for Discriminating Oral Cancerous and Normal Tissues Using Raman Spectroscopy. *J Pers Med*. 2021;11(11):1165. DOI: 10.3390/jpm11111165.
5. Li X, Li L, Sun Q, Chen B, Zhao C, Dong Y, et al. Rapid Multi-Task Diagnosis of Oral Cancer Leveraging Fiber-Optic Raman Spectroscopy and Deep Learning Algorithms. *Front Oncol*. 2023;13:1272305. DOI: 10.3389/fonc.2023.1272305.
6. Luo R, Popp J, Bocklitz T. Deep Learning for Raman Spectroscopy: A Review. *Analytica*. 2022;3(3):287-301. DOI: 10.3390/analytica3030020.

Відомості про авторів

Говорнян С.Л. – асистент кафедри онкології та радіології Буковинського державного медичного університету, м. Чернівці, Україна. <https://orcid.org/0000-0003-2766-2218>.

Іващук О.І. – д-р мед. наук, професор кафедри онкології та радіології Буковинського державного медичного університету, м. Чернівці, Україна. <https://orcid.org/0000-0003-1747-2648>.

Information about the authors

Serhiy Hovornyan – Assistant of the Department of Oncology and Radiology, Bukovinian State Medical University, Chernivtsi, Ukraine. <https://orcid.org/0000-0003-2766-2218>.

Oleksandr Ivashchuk – MD, Professor of the Department of Oncology and Radiology, Bukovinian State Medical University, Chernivtsi, Ukraine. <https://orcid.org/0000-0003-1747-2648>.

Надійшла до редакції 26.02.25
© С.Л. Говорнян, О.І. Іващук, 2025