

# دانش آزمایشگاهی ایران

سال دوازدهم ■ شماره ۱ ■ بهار ۱۴۰۳ ■ شماره پیاپی ۴۵

ISSN 2538-3450



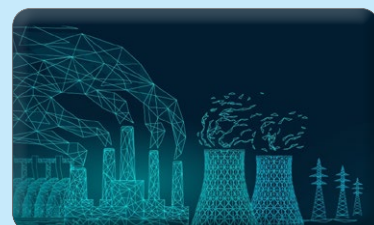
ارزش گوهرشناسی و دیرینه‌شناسی کهربا و روش‌های آزمایشگاهی تشخیص آن



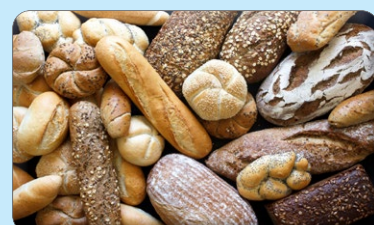
تصویربرداری فراطیفی رامان و پیاده‌سازی الگوریتم‌های یادگیری ماشین، راهکاری نوین در استخراج نقشه توزیع مولکولی مواد



بررسی نرمال بودن توزیع نتایج آزمون با استفاده از نرم‌افزار MiniTab



بهینه‌سازی واحدهای گاز سوز با استفاده از الگوریتم فرا ابتکاری آموزش - یادگیری



بررسی میزان گلوتن در مواد غذایی با استفاده از روش الایزا

## تولید نانوالیاف با روش‌های نوین الکترورسی

یک دهه در مسیر رشد و رونق خدمات آزمایشگاهی کشور

بهره‌مندی ۱۲هزار نفر از تسهیلات اعتباری بهارانه شبکه آزمایشگاهی

## نویسندگان

امین صفایی<sup>۱\*</sup>، مرجان جعفری<sup>۱</sup>

۱. کارشناسان آزمایشگاه مرکزی دانشگاه شیراز

\*Amin.safaie2016@gmail.com

تاریخ دریافت: ۱۴۰۳/۰۲/۱۱

تاریخ پذیرش: ۱۴۰۳/۰۲/۲۱

## واژه‌های کلیدی

میکروسکوپ کانفوکال رامان، تصاویر فراطیفی (HS)،  
هوش مصنوعی و یادگیری ماشین، پراکندگی غیرخطی  
رامان، الگوریتم‌های نظارت‌نشده، PCA.

# تصویربرداری فراطیفی رامان و پیاده‌سازی الگوریتم‌های یادگیری ماشین، راهکاری نوین در استخراج نقشه توزیع مولکولی مواد

## چکیده

طیف‌سنجی پراکندگی غیرخطی رامان، از جمله روش‌های طیف‌نگاری اپتیکی است که به دلیل آشکارسازی مدهای ارتعاشی مولکول هدف که بیانگر اثر انگشت مولکول بوده، امکان طیف‌سنجی و آشکارسازی گونه‌های شیمیایی موجود در مواد در مقیاس مولکولی را فراهم می‌آورد. همچنین یک سامانه اپتیکی ترکیبی متشکل از یک سیستم طیف‌سنجی رامان به همراه میکروسکوپ کانفوکال نوری، این امکان را فراهم می‌آورد که بتوان سطح نمونه مورد بررسی را به صورت نقطه به نقطه، با گام‌های فضایی قابل کنترل، جاروب نموده و با اندازه‌گیری طیف پراکندگی رامان غیرخطی هر نقطه، اطلاعات مولکولی موجود در سطح نمونه را ثبت کرد. از تجمیع داده‌های خام طیفی تهیه شده و مختصات فضایی هر طیف، تصاویری موسوم به تصاویر فراطیفی<sup>۱</sup> دو بُعدی تهیه شده که در آن هر پیکسل حاوی یک بازه طیفی از پراکندگی غیرخطی رامان است. سپس در مرحله تجزیه و تحلیل داده‌های HS حاصل شده، با استفاده از روش‌های آماری پیشرفته در حوزه هوش مصنوعی و یادگیری ماشین، اطلاعات مربوط به چگونگی توزیع مولکولی و فازهای شیمیایی نمونه مزبور با حساسیت و دقت بالا استخراج می‌شود. این روش ترکیبی به همراه روش‌های عددی مذکور، به خوبی می‌تواند مجموعه داده‌های پیچیده و بزرگ تصویر HS را تحلیل و اطلاعات مربوط به نقشه توزیع مولکولی نمونه‌های طیف‌نگاری شده را فراهم کند. لذا در این مقاله، از یک چیدمان اپتیکی ترکیبی، متشکل از یک میکروسکوپ کانفوکال نوری و یک سامانه طیف‌سنجی رامان استفاده شده است و با استفاده از این چیدمان و بهره‌گیری از لیزر مرئی با طول موج ۵۳۲ نانومتر، سطح یک نمونه دو پلیمری با توزیع ناهمگن به تعداد ۳۹۰۰ نقطه جاروب شد و طیف پراکندگی غیرخطی رامان نمونه در نقاط مختلف آن به ثبت رسید و تصاویر فراطیفی خام از این نمونه هدف تهیه شده است. در نهایت، نقشه مولکولی از چگونگی توزیع فضایی پلیمرها در این قرص با استفاده از روش‌های آماری هوش مصنوعی و یادگیری ماشین استخراج شده است.

علم آشکارسازی مواد در مقیاس مولکولی<sup>۲</sup>، شامل روش‌های نوین و فناوری‌های نوظهوری است که به مطالعه رفتار یک مولکول منفرد در میان سیستم پیچیده‌ای<sup>۳</sup> از مولکول‌ها می‌پردازد؛ به طوری که بررسی در لحظه ساختار، دینامیک و عملکرد مولکولی و همچنین درک ویژگی‌های فیزیکی و شیمیایی در مقیاس مولکولی بدون نیاز به میانگین‌گیری و روش‌های آنسامبلی<sup>۴</sup> را میسر می‌سازد [۱ تا ۳]. طیف‌سنجی و تصویربرداری فلئوئورسانس<sup>۵</sup> یکی از مرسوم‌ترین روش‌های اپتیکی است که در یک دهه اخیر، آشکارسازی مواد در مقیاس مولکولی را امکان‌پذیر ساخته است. در این روش، مولکول‌های هدف مورد بررسی با رنگدانه‌های آلی، رنگ‌آمیزی و برچسب‌گذاری می‌شود و پس از برانگیختگی، این رنگدانه‌ها با طول موج مشخص، تابش فلئوئورسانس حاصل به‌منظور آشکارسازی و مطالعه فرایندهای دینامیکی مولکول‌های هدف بررسی می‌شوند [۴ و ۵]. با این حال، این روش نیز در آشکارسازی مواد در مقیاس مولکولی با محدودیت‌هایی روبه‌رو است. از جمله مهم‌ترین این چالش‌ها و محدودیت‌ها این است که امکان اتصال برچسب به همه انواع مولکول‌ها امکان‌پذیر نیست و همچنین خود برچسب‌گذاری و نشان‌دار کردن مولکول‌ها [۶] به‌منظور تشخیص و آشکارسازی، می‌تواند روی جنبش و حرکت<sup>۶</sup> مولکول‌ها تاثیرگذار باشد [۷] که این امر منجر به ایجاد اثرات ناخواسته و نامطلوب در مطالعه دینامیکی مولکول‌های هدف می‌شود.

طیف‌سنجی رامان ابزاری قدرتمند و مفید به‌منظور مشخصه‌یابی و آنالیز ساختار شیمیایی مواد در مقیاس مولکولی است. از جمله مزیت‌های این روش طیف‌سنجی، می‌توان به دو ویژگی مهم غیرمخرب بودن و عدم نیاز به آماده‌سازی نمونه اشاره نمود. از طرفی دیگر، ماهیت اپتیکی این روش، اندازه‌گیری‌ها را به‌صورت غیرتماسی امکان‌پذیر ساخته است. به‌علاوه، حجم مورد نیاز نمونه برای آنالیز طیفی در این روش، بسیار اندک (از مقیاس  $\mu\text{m}^3$  است [۸]. همچنین، چیدمان اپتیکی طیف‌سنجی رامان، این امکان را فراهم می‌آورد که اندازه‌گیری‌ها در محل و به‌صورت برخط صورت پذیرد، از این‌رو می‌توان فعالیت شیمیایی مد نظر را در مقیاس ثانیه پایش نمود. از دیگر ویژگی‌های این روش طیف‌سنجی این است که بسته به کاربرد مورد انتظار، می‌توان میزان تفکیک فضایی از حدود  $1 \mu\text{m}$  تا  $1 \text{ cm}$  به‌منظور آنالیز سطحی و یا حجمی نمونه، تنظیم نمود [۹]. در این روش، امکان اندازه‌گیری برای تمامی فازهای شیمیایی ماده اعم از جامد، مایع و گاز وجود دارد. در نهایت، باید اشاره نمود که در طیف‌سنجی رامان برخلاف طیف‌نگاری مادون قرمز<sup>۷</sup>، رطوبت و آب عاملی مزاحم محسوب نشده و این بدین علت است که مدهای ارتعاشی آب مشخص و منحصر به فرد بوده و از این رو، در ترکیب با سایر مواد، قابل تفکیک هستند.

امروزه تصویربرداری از اجسام و پدیده‌ها دارای مفاهیم بسیار پیچیده‌تر و گسترده‌تری نسبت به چند دهه اخیر است. در واقع علم MD، تحول و پیشرفت عظیمی در روش‌های تصویربرداری اپتیکی بر مبنای تصویربرداری فراطیفی<sup>۸</sup> را در مقیاس مولکولی موجب شده است [۱۰ و ۱۱]؛ تا آن جا که روش‌های مبتنی بر این رهیافت، امکان ثبت تصاویر با دقت، حساسیت و قدرت تفکیک فضایی<sup>۹</sup> بالا به‌منظور تهیه نقشه مولکولی<sup>۱۰</sup> و تعیین توزیع فضایی گونه‌های مختلف مولکولی در یک نمونه آزمایشگاهی هدف را فراهم آورده است [۱۱]. از مهم‌ترین دسته تصاویر HS که حاوی اطلاعاتی مربوط به اثرانگشت و ساختار مولکولی و توزیع شیمیایی مولکولی موجود در نمونه مورد بررسی است، تصاویر HS غیرخطی بر مبنای پراکندگی رامان است [۱۱ و ۱۲]. توسعه چیدمان‌های اپتیکی طیف‌سنجی رامان نظیر یک سامانه ترکیبی متشکل از یک سیستم طیف‌سنجی رامان به همراه میکروسکوپ کانفوکال نوری، این امکان را فراهم آورده است که بتوان سطح نمونه مورد بررسی را به‌صورت نقطه به نقطه با گام‌های فضایی قابل کنترل در سه راستای فضایی X-Y-Z جاروب کرده و طیف پراکندگی غیرخطی رامان هر نقطه را ثبت نمود [۱۱]؛ در نهایت، با استفاده از اطلاعات تجمیع شده، تصاویر HS غیرخطی دو بُعدی و سه بُعدی حاصل می‌شود که حاوی اطلاعاتی در مورد چگونگی توزیع گونه‌های مختلف مولکولی موجود در نمونه، با تفکیک فضایی بالا است. اما این رهیافت اپتیکی با چالش‌هایی روبه‌رو است که از جمله آن می‌توان به عدم توانایی تحلیل حجم عظیم اطلاعات مولکولی موجود در طیف‌های غنی پراکندگی رامان و داده‌های تصاویر HS رامان اشاره نمود.

استفاده از روش‌های آماری پیشرفته در حوزه هوش مصنوعی<sup>۱۱</sup> و تحلیل یادگیری ماشین<sup>۱۲</sup>، امکان پردازش و تجزیه و تحلیل مجموعه داده‌های پیچیده و بزرگ طیفی و به دنبال آن، استخراج اطلاعات، ویژگی‌ها و الگوهای پیچیده موجود در طیف پراکندگی غیرخطی رامان را به‌صورت خودکار فراهم می‌کنند [۱۳ تا ۱۸]. به عبارت دقیق‌تر، نتایج حاصل از تصویربرداری فراطیفی مبتنی بر طیف‌سنجی رامان، همواره به‌صورت مجموعه داده‌های

بزرگ و خام بوده [۱۹ و ۲۰] که شامل تعداد زیادی از طیف‌های ارتعاشی مربوط به ساختار و ترکیبات پیچیده شیمیایی است [۱۵ و ۲۱]؛ از این رو، به‌منظور پی بردن به پیچیدگی اطلاعات موجود در داده‌های خام طیفی و همچنین تشخیص افت‌وخیزهای بسیار جزئی و درک تفاوت‌های ظریف در نوارهای ارتعاشی مربوط به مولکول‌های متفاوت، استفاده از این‌گونه روش‌های هوشمند امری ضروری است تا بتوان اطلاعاتی را در مورد چگونگی توزیع گونه‌های مختلف مولکولی موجود در نمونه، با تفکیک فضایی بالا استخراج نمود [۲۲ تا ۲۵].

با توجه به اهمیت و جایگاه آشکارسازی ساختار شیمیایی مواد در مقیاس مولکولی و همچنین در راستای ارائه راهکار اپتیکی نوین به‌منظور تهیه نقشه مولکولی از گونه‌های شیمیایی موجود در نمونه مورد بررسی، در این تحقیق، پس از مروری کوتاه بر اصول طیف‌نگاری رامان و تصویربرداری فرایطی براساس طیف‌نگاری رامان، به ثبت تصویر فرایطی توسط فوتون‌های پراکنده شده غیرخطی رامان از یک نمونه قرص پلیمری با ترکیب ناهمگن از ساختار مولکولی در دو بُعد اقدام شده است و پس از آن الگوریتم‌های آماری نظارت نشده و بر مبنای یادگیری ماشین روی داده‌های خام فرایطی اعمال شده و در نهایت، نقشه مولکولی از چگونگی توزیع فضایی پلیمرها در این قرص استخراج می‌شود. در طی این تحقیق نشان داده می‌شود که با بکارگیری الگوریتم‌ها و تحلیل‌های آماری چندمتغیره مبتنی بر هوش مصنوعی و یادگیری ماشین در کنار داده‌های فرایطی ثبت شده در طی فرایند تصویربرداری HS رامان، پروفایل فضایی و نقشه توزیع ساختار شیمیایی در مقیاس مولکولی، به‌صورت کاملاً هوشمند و بدون نیاز به برچسب‌گذاری و یا رنگ‌آمیزی و با حساسیت، دقت و قدرت تفکیک فضایی بالا فراهم می‌شود.

## تئوری

در این بخش، ابتدا اصول فیزیکی حاکم بر پراکندگی غیرخطی رامان بیان شده و همچنین چیدمان اپتیکی سامانه ترکیبی طیف‌سنجی پراکندگی غیرخطی رامان و میکروسکوپ کانفوکال نوری توصیف می‌شود؛ سپس، تصویربرداری فرایطی بر مبنای پراکندگی رامان به‌عنوان رهیافتی نوین در راستای تهیه نقشه مولکولی مواد مورد بحث و بررسی قرار می‌گیرد و در نهایت، انواع الگوریتم‌های آماری مبتنی بر هوش مصنوعی و یادگیری ماشین، به‌صورت خلاصه و با هدف تجزیه و تحلیل مجموعه داده‌های عظیم و خام تصاویر فرایطی و تهیه نقشه مولکولی مواد در دو و سه بُعد به‌صورت هوشمند بررسی می‌شود.

## اصول فیزیکی حاکم بر پراکندگی رامان و توصیف اپتیکی چیدمان سامانه ترکیبی طیف‌سنجی پراکندگی غیرخطی رامان و میکروسکوپ کانفوکال نوری

به‌طور کلی، هنگامی که یک مولکول در معرض تابش امواج الکترومغناطیسی قرار می‌گیرد، توزیع بار الکترونی مولکول تحت تاثیر نوسانات سریع میدان الکتریکی مختل می‌شود؛ بنابراین، به دلیل جابه‌جایی الکترون‌ها نسبت به هسته‌ها با بار مثبت، یک ممان دوقطبی الکتریکی در مولکول القا می‌شود. این ممان دوقطبی القایی نوسانی، به‌عنوان یک منشأ برای تولید میدان‌های الکترومغناطیسی ثانویه تابشی عمل می‌کند، به طوری که این میدان ثانویه، معیاری از نور پراکنده شده توسط مولکول است. تغییرات

زمانی این ممان دوقطبی القایی و رابطه آن با بسامد نور فرودی ( $\omega_0$ ) و همچنین بسامد ویژه مدهای ارتعاشی مولکول ( $\omega_q$ ) در رابطه (۱) بیان شده است. همان‌گونه که در رابطه (۱) ملاحظه می‌شود، دوقطبی القایی ایجاد شده در مولکول، می‌تواند عامل پراکندگی‌های کشسان و غیرکشسان شود؛ پراکندگی کشسان رایلی ( $\mu^{\text{Rayleigh}}(t, \omega_0)$ ) که هیچ‌گونه اطلاعاتی را در رابطه با ساختار مولکولی در بر نداشته و همچنین پراکندگی‌های غیرکشسان استوکس و آنتی‌استوکس رامان ( $\mu^{\text{Stokes/Anti-Stokes Raman}}(t, \omega_0 \pm \omega_q)$ ) که حاوی اطلاعات ترازهای ارتعاشی مولکولی هستند:

### رابطه (۱)

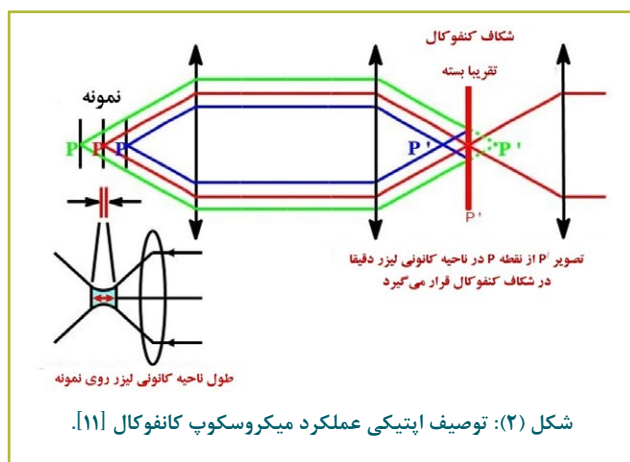
$$\mu^{\text{Stimulated}}(t) = \mu^{\text{Rayleigh}}(t, \omega_0) + \mu^{\text{Stokes Raman}}(t, \omega_0 - \omega_q) + \mu^{\text{Anti-Stokes Raman}}(t, \omega_0 + \omega_q)$$

با مطالعه میزان تغییرات حاصل شده در انرژی فوتون‌های پراکنده شده نسبت به فوتون‌های فرودی با استفاده از یک چیدمان اپتیکی دقیق و مناسب، می‌توان به اطلاعات ترازهای ارتعاشی مولکولی به‌منظور آشکارسازی و شناسایی دقیق تک مولکول دست یافت. به‌صورت کلی، یک سامانه طیف‌سنجی رامان، از سه قسمت اصلی تشکیل می‌شود [۸ و ۱۱]:

- منبع برانگیختگی نوری که به‌طور معمول از منابع همدوس لیزری استفاده می‌شود.

- سیستم اپتیکی هدایت کننده فوتون‌های فرودی روی نمونه و همچنین چیدمان اپتیکی به‌منظور جمع‌آوری فوتون‌های پراکنده شده که بیشتر، یک سیستم میکروسکوپ در این بخش می‌تواند مورد استفاده قرار گیرد.

صفحه مرکزی ناحیه DOF عدسی شیئی به طیف‌سنج راه پیدا کنند؛ به عبارتی دیگر، شکاف، مانع از عبور فوتون‌های پراکنده شده از سطوح بالاتر و یا پایین‌تر از صفحه مرکزی کانونی عدسی به طیف‌سنج می‌شود. این ویژگی، با عنوان خاصیت کانفوکالی<sup>۱۵</sup> شناخته می‌شود [۱۱ و ۲۷]. این ویژگی کمک می‌کند که به‌طور مؤثر، علاوه بر تقویت قدرت تفکیک‌پذیری عرضی، یک قدرت تفکیک محوری نیز ایجاد شود. معیار قدرت تفکیک در دو جهت عرضی و محوری، شاخصی مهم و تعیین‌کننده در کیفیت تصویرهای ثبت شده توسط ابزارهای تصویربرداری میکروسکوپی محسوب می‌شود. در واقع، سیستم‌های تصویربرداری کانفوکال، بر این اصل استوار هستند که نوری که از ناحیه کانونی گسیل نشده باشد، نمی‌تواند از فیلتر فضایی مقابل آشکارساز عبور کند.



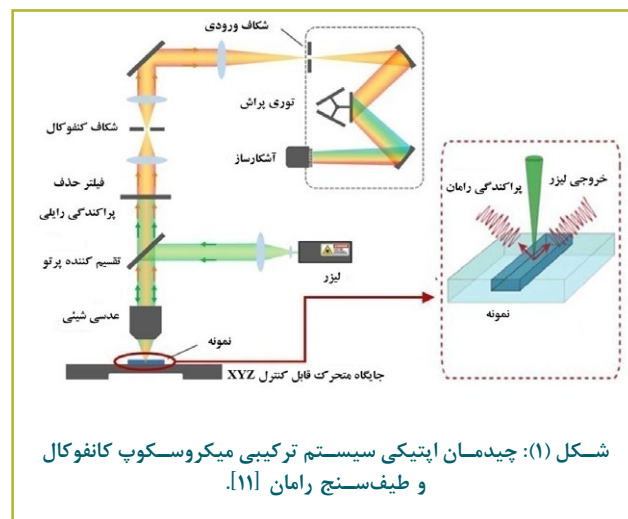
### تصویربرداری فرایطیفی بر مبنای طیف‌نگاری رامان

امروزه تصویربرداری از اجسام و پدیده‌ها دارای مفاهیم بسیار پیچیده‌تر و گسترده‌تری نسبت به چند دهه اخیر است [۳۰]. به‌طور کلی، تصاویر رنگی که دوربین‌های معمول ثبت می‌کنند، ترکیبی از سه تصویر در باندهای فرکانسی قرمز (R)، سبز (G) و آبی (B) هستند. در واقع، ترکیب تصاویر در این سه باند فرکانسی، ثبت توزیع رنگ‌های بازتابی از سطح نمونه در ناحیه اپتیکی که چشم انسان به آن حساس است را امکان‌پذیر می‌کند؛ با این حال، با اینکه روش تصویربرداری RGB<sup>۱۶</sup> برای مشخص کردن اجسام براساس شکل و رنگ مناسب بوده اما از آن جایی که تنها سه باند فرکانسی مرئی در دسترس است، قابلیت شناسایی اجسام، به حداقل می‌رسد. با پیشرفت فناوری، امروزه امکان ثبت تصاویر فرایطیفی فراهم شده است.

تصویربرداری فرایطیفی HS، روشی است که در آن به جای اختصاص دادن رنگ‌های اصلی RGB به هر پیکسل، طیف وسیعی از باندهای فرکانسی نور بازتاب شده از سطح اجسام اندازه‌گیری و ثبت می‌شود [۱۱، ۳۰ و ۳۱]. شکل (۳)،

طیف‌سنج برای ثبت طیف فوتون‌های پراکنده شده. لازم به ذکر است که دقت و قدرت تفکیک طیف پراکندگی ثبت شده، وابسته به ویژگی‌های مولفه‌های به کار رفته در طیف‌سنج است که مهم‌ترین آنها توری پراش و آشکارساز است.

شکل (۱)، چیدمان اپتیکی یک سامانه ترکیبی متشکل از میکروسکوپ نوری کانفوکال و یک طیف‌سنج رامان را نمایش می‌دهد [۱۱]. در این چیدمان، نور لیزر ابتدا از طریق عدسی شیئی میکروسکوپ نوری روی نمونه، کانونی شده و پس از پراکندگی توسط مولکول‌های حاضر در لکه کانونی بیم لیزر، پرتوهای پس پراکنده شده توسط همان عدسی میکروسکوپ، جمع‌آوری شده و به سمت طیف‌سنج هدایت می‌شود. سپس، پرتوهای جمع‌آوری شده به‌منظور حذف فوتون‌های پراکنده شده رایلی از آنها، از فیلترهای مناسب عبور می‌کند. در نهایت، این پرتوهای فیلتر شده در مسیر هدایت به سمت طیف‌سنج، به‌منظور ثبت طیف نقطه‌ای پراکندگی رامان، درست از مولکول‌های موجود در مرکز لکه کانونی پرتو لیزر، از یک شکاف با پهنای قابل تنظیم (بین‌هول)<sup>۱۳</sup> عبور داده می‌شوند. درون طیف‌سنج نیز با استفاده از مولفه‌های اپتیکی مناسب و توری پراش، یک واگرایی فضایی بر حسب طول موج برای فوتون‌های پراکنده شده رامان اتفاق افتاده و در نهایت، از طریق یک آشکارساز نوری، شدت این فوتون‌ها براساس بازه طول موجی آنها ثبت می‌شود [۱۱، ۲۶ و ۲۷].



مطابق شکل (۲)، زمانی که نور لیزر توسط عدسی شیئی میکروسکوپ روی نمونه کانونی می‌شود، تمامی مولکول‌هایی که در ناحیه عمق کانونی<sup>۱۴</sup> عدسی شیئی قرار می‌گیرند، برانگیخته شده و موجب پراکندگی فوتون‌ها در جهت‌های مختلف می‌شوند [۲۸ و ۲۹]. قرار گرفتن یک شکاف قابل تنظیم در مسیر پرتوی پراکنده شده قبل از ورود به طیف‌سنج، این امکان را فراهم می‌آورد که تنها فوتون‌های پراکنده شده از مولکول‌های موجود در

نقطه را ثبت نمود؛ به تجمیع این داده‌های طیفی (شدت پراکندگی و جابه‌جایی رامان) با مختصات فضایی که در آن به ازای هر پیکسل از تصویر، یک بازه طیفی از پراکندگی غیرخطی رامان ثبت شده‌است، تصویربرداری فراطیفی (HS) و غیرخطی رامان می‌گویند. تصاویر HS غیرخطی دو بُعدی و یا سه بُعدی حاصل شده، حاوی اطلاعاتی در مورد چگونگی توزیع گونه‌های مختلف مولکولی موجود در نمونه (نقشه مولکولی)، با تفکیک فضایی بالا است [۱۱ و ۱۲، ۳۰ و ۳۲]. در این صورت، استخراج این مجموعه اطلاعات مولکولی، تنها منوط به تجزیه و تحلیل صحیح و سریع افت‌وخیزهای موجود در اطلاعات طیفی ثبت شده‌است. این امر با استفاده از الگوریتم‌های آماری در حوزه هوش مصنوعی و یادگیری ماشین محقق می‌شود.

### ■ الگوریتم‌های آماری یادگیری ماشین

توسعه روش‌های آماری پیشرفته در حوزه هوش مصنوعی و یادگیری ماشین، راهکارهای مناسب و مؤثری را به‌منظور تجزیه و تحلیل مجموعه داده‌های عظیم و پیچیده ارائه می‌کنند. امروزه به دلیل تنوع در نوع و حجم وسیع داده‌ها در حوزه‌های مختلف تحقیقاتی، الگوریتم‌های آماری پیشرفته متعددی در حوزه هوش مصنوعی و یادگیری ماشین به‌منظور تحلیل و تفسیر آنها توسعه داده شده‌است. در حالت کلی، مبنای عملکرد روش‌های هوشمند تحلیل آماری پیشرفته مبتنی بر یادگیری ماشین در حوزه تفسیر مجموعه داده‌ها، مطابق با دو رهیافت کلی الگوریتم‌های نظارت نشده و الگوریتم‌های نظارت شده است. به‌طور کلی، مبنای عملکرد روش‌های هوشمند تحلیل آماری مبتنی بر یادگیری ماشین در حوزه تفسیر مجموعه داده‌ها، مطابق با دو رهیافت کلی به شرح زیر است [۳۳ و ۳۴]:

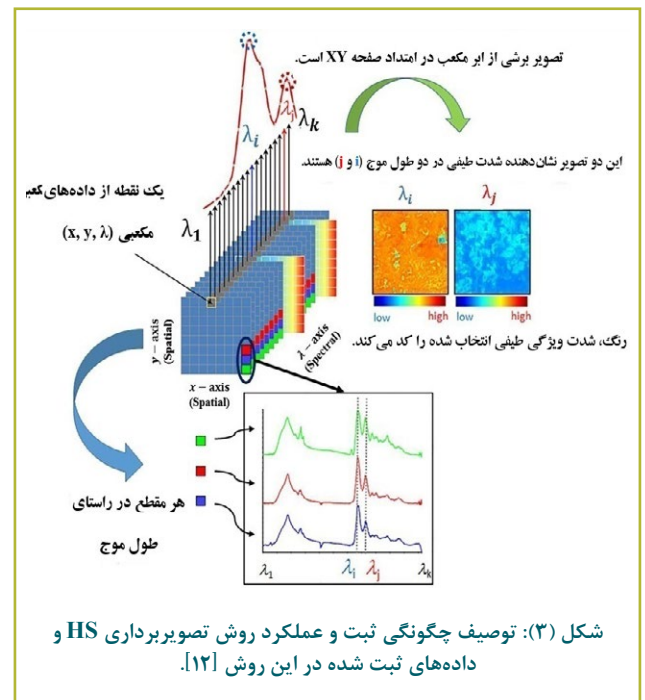
■ الگوریتم‌های نظارت شده<sup>۱۸</sup> [۱۱ و ۳۵]: الگوریتم‌هایی هستند که از طریق آموزش<sup>۱۹</sup> با استفاده از مجموعه داده‌های شناخته شده با طبقه‌بندی قطعی، که با عنوان پایگاه داده<sup>۲۰</sup> شناخته می‌شوند، به دسته‌بندی<sup>۲۱</sup> داده‌های جدید بر مبنای دانش استخراج شده می‌پردازند.

■ الگوریتم‌های نظارت نشده<sup>۲۲</sup> [۱۱ و ۳۵]: الگوریتم‌هایی هستند که در آنها از طریق ارزیابی مجموعه داده‌ها، الگوهای پیچیده‌ای که بین داده‌ها وجود دارد، استخراج شده و در نهایت یک طبقه‌بندی<sup>۲۳</sup> از داده‌ها بدون دانش قبلی ارائه می‌شود.

براساس دو رهیافت ذکر شده، از طریق دانش حاصل شده از الگوریتم‌های آماری بر مبنای یادگیری ماشین، این امکان فراهم می‌شود که بتوان اطلاعات خام طیفی را به‌صورت کاملاً خودکار پردازش و در جهت استخراج عوامل مورد نظر ارزیابی نمود.

از جمله روش‌هایی که در دسته الگوریتم‌های نظارت نشده قرار می‌گیرند، می‌توان به الگوریتم‌های خوشه‌بندی سلسله مراتبی<sup>۲۴</sup> و k-میانه<sup>۲۵</sup> اشاره نمود. اساس عملکرد این الگوریتم‌ها به شرح زیر است:

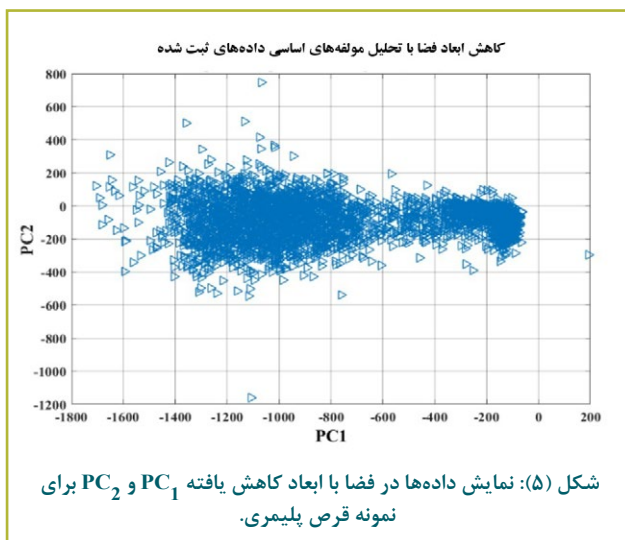
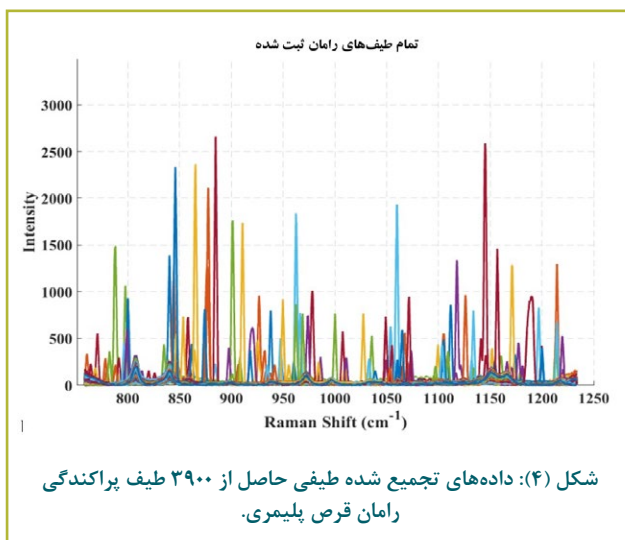
چگونگی ثبت و عملکرد روش تصویربرداری HS را نمایش می‌دهد. همان‌گونه که در شکل ملاحظه می‌شود، داده‌های ذخیره شده در طی یک فرایند تصویربرداری HS، به‌صورت یک مجموعه داده مکعبی هستند؛ بدین معنا که این مکعب تصویر فراطیفی<sup>۱۷</sup>، حاوی مجموعه اطلاعات مربوط به مختصات فضایی به همراه داده‌های طیفی هر نقطه است. به عبارت ساده‌تر، به ازای هر پیکسل از تصویر در صفحه  $x-y$ ، یک بازه طیفی ثبت می‌شود. بسته به ناحیه طیفی ثبت شده به ازای هر پیکسل، این نوع تصاویر به‌صورت ذاتی حاوی حجم بالایی از اطلاعات ارزشمند نظیر ساختار مولکولی و ترکیبات شیمیایی نمونه مورد بررسی هستند. از جمله ساده‌ترین موارد استفاده از تصاویر HS، به تصویر کشیدن داده‌ها در باندهای فرکانسی به غیر از RGB است؛ به طوری که در این‌گونه تصاویر، رنگ‌های اختصاص یافته، بیانگر رنگ واقعی نمونه نبوده بلکه متناسب با شدت نور بازتاب شده از سطح نمونه هدف متناظر با باند فرکانسی مورد بررسی، کدگذاری شده‌اند [۱۱ و ۳۲].



از مهم‌ترین دسته تصاویر HS که حاوی اطلاعاتی مربوط به اثرانگشت و ساختار مولکولی و توزیع شیمیایی مولکولی موجود در نمونه مورد بررسی است، تصاویر HS غیرخطی بر مبنای پراکندگی رامان هستند [۱۱ و ۱۲]. به‌منظور ثبت تصاویر HS غیرخطی بر پایه پراکندگی رامان، از چیدمان اپتیکی ترکیبی ارائه شده در شکل استفاده می‌شود. بدین‌منظور، چنانچه جایگاه قرارگیری نمونه زیر میکروسکوپ به یک استپ موتور با دقت بالا تجهیز شده باشد، حرکت نمونه در سه راستای  $X-Y-Z$  را میسر می‌کند، در این صورت این امکان فراهم می‌شود که بتوان سطح نمونه مورد بررسی را به‌صورت نقطه به نقطه با گام‌های فضایی قابل کنترل در سه راستای فضایی  $X-Y-Z$  جاروب کرد و طیف پراکندگی غیرخطی رامان هر

شد. این تصویربرداری‌ها با استفاده از میکروسکوپ کانفوکال رامان هوریبا<sup>۲۹</sup> با توری پراش  $1800 \text{ groove/mm}$  در آزمایشگاه مرکزی دانشگاه شیراز انجام شده‌است.

مدت زمان ۰/۵ ثانیه برای ثبت طیف هر نقطه در نظر گرفته شده‌است. شکل (۴) داده‌های تجمیع شده خام طیفی ثبت شده از  $3900$  طیف پراکندگی رامان قرص پلیمری در ناحیه طیفی  $750 \text{ cm}^{-1}$  تا  $1250 \text{ cm}^{-1}$  را نمایش می‌دهد. باید توجه شود که طیف رامان به ازای هر نقطه در این بازه طیفی شامل  $1024$  جابه‌جایی رامان<sup>۳۰</sup> بوده، به طوری که میزان شدت در هر جابه‌جایی رامان، دربردارنده اطلاعات مولکولی نقطه مورد بررسی است. با توجه به دشوار بودن تحلیل داده‌های طیفی  $3900$  نقطه در این فضای  $1024$  بُعدی، از الگوریتم آماری PCA بهره گرفته شده‌است تا بتوان ابعاد فضای  $1024$  بُعدی را به دو بُعد با بیشترین میزان انحراف از معیار میان داده‌ها کاهش داد (شکل (۵)). همان‌گونه که در شکل (۵) مشهود است، داده‌ها در دو ناحیه با چگالی بالا متمرکز شده‌اند که نشان از حضور دو دسته با ساختار مولکولی متفاوت است.



■ HCA: روش خوشه‌بندی سلسله مراتبی، یک ابزار اکتشافی برای آشکارسازی خوشه‌های ذاتی موجود در یک مجموعه داده معین است. این الگوریتم، براساس یک معیار، که در اینجا فاصله اقلیدسی میان داده‌ها است، شروع به خوشه‌بندی داده‌ها می‌کند به‌گونه‌ای که هر خوشه، می‌تواند زیرمجموعه‌ای از خوشه‌های بزرگتر باشد. در این رهیافت می‌توان بسته به نیاز، داده‌ها را به  $k$  دسته معین دسته‌بندی نمود.

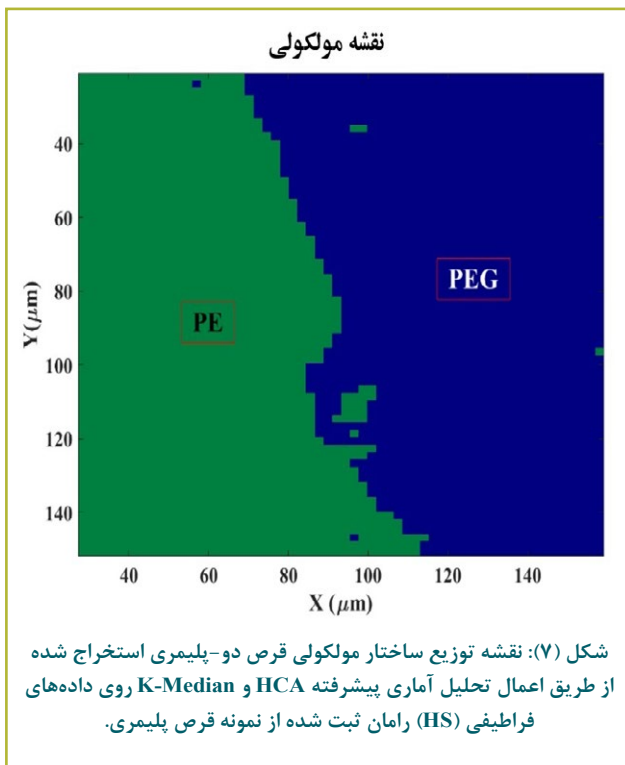
■ K-Median: این الگوریتم خوشه‌بندی، این هدف را دنبال می‌کند که  $N$  مجموعه داده معین را به  $k$  خوشه تقسیم‌بندی کند. رهیافت این تقسیم‌بندی بدین گونه است که باید  $k$  مرکز خوشه‌ها به‌گونه‌ای جستجو شوند که فاصله داده‌های قرار گرفته در هر خوشه تا مراکز آنها، کمینه مقدار را به خود اختصاص دهند.

لازم به ذکر است که به‌منظور سرعت بخشیدن و بهینه کردن عملکرد الگوریتم‌های خوشه‌بندی، نیاز است محاسبات فضایی انجام پذیرند که در آن بیشترین انحراف از معیار میان داده‌ها وجود داشته باشد. به‌منظور دستیابی به چنین فضای محاسباتی با ابعاد کاهش یافته از الگوریتم تحلیل مولفه‌های اساسی<sup>۲۶</sup> استفاده می‌شود. این الگوریتم، محاسبات را به فضای ویژه برداری ماتریس همبستگی داده‌ها انتقال داده و ویژه بردارها با بیشترین انحراف از معیار میان داده‌ها را، معیار محاسبات قرار می‌دهد.

داده‌های خام تجمیع شده فراطیفی بر مبنای پراکندگی غیرخطی رامان، همواره شامل چندین هزار طیف پراکندگی رامان به ازای یک توزیع فضایی مشخص است، از این رو، یک مجموعه عظیمی از داده‌های خام با حجم زیاد محسوب می‌شوند. بنابراین، در حالت معمول، استخراج و تفسیر اطلاعات مولکولی و یا یافتن افت‌وخیزها و شباهت‌های موجود در این مجموعه عظیم از داده‌های طیفی ثبت شده، به‌صورت سریع و صحیح بسیار پیچیده و دشوار است. از این رو، در این تحقیق از طریق توسعه کدهای محاسباتی مربوط به الگوریتم‌های خوشه‌بندی نظارت نشده مناسب و اعمال آنها روی داده‌های عظیم تصاویر HS، رهیافتی برای استخراج اطلاعات مربوط به نقشه مولکولی مواد، از مجموعه داده‌های بزرگ و پیچیده طیفی ارائه می‌شود.

## بحث و بررسی نتایج

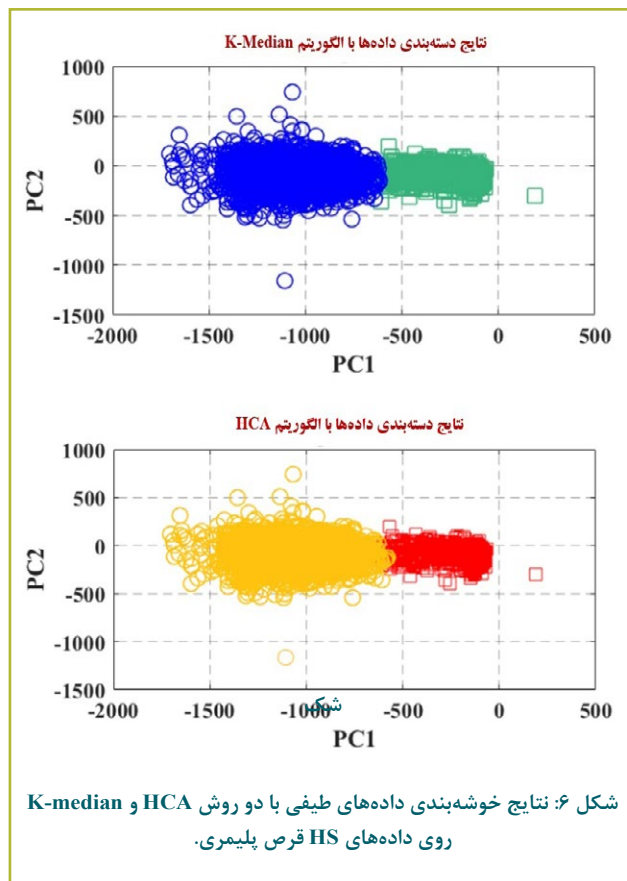
در این تحقیق، ابتدا یک قرص متشکل از دو پلیمر پلی‌اتیلن<sup>۲۸</sup> و پلی‌اتیلن گلایکل<sup>۲۹</sup> که به‌صورت غیریکنواخت و ناهمگن ترکیب شده‌اند، تهیه شده‌است. سپس، یک سطح مقطع از قرص پلیمری به ابعاد  $130$  در  $130$  میکرومتر که شامل  $3900$  نقطه با گام فضایی  $2$  میکرومتری برای تصویربرداری HS دو بُعدی انتخاب



## نتیجه‌گیری

در این تحقیق، از یک قرص حاوی دو پلیمر مختلف با توزیع غیرهمگن، با استفاده از سامانه ترکیبی طیف‌سنج رامان و میکروسکوپ کانفوکال نوری، یک تصویر HS شامل ۳۹۰۰ نقطه ثبت شده است. از تجمیع مجموعه اطلاعات عظیم داده‌های خام طیفی با موقعیت فضایی متناظر با هر نقطه طیفی، داده‌های فرایندی (HS) غیر قابل نمایش حاصل می‌شود که می‌توان با تجزیه و تحلیل این اطلاعات از طریق روش‌های آماری هوش مصنوعی و یادگیری ماشین، نقشه توزیع فضایی گونه‌های مختلف مولکولی موجود در نمونه مورد بررسی را استخراج نمود که در این پژوهش، با بکارگیری الگوریتم‌های آماری در حوزه یادگیری ماشین نظیر کاهش فضای محاسباتی PCA و روش‌های خوشه‌بندی HCA و K-median، نوع پلیمرها به صورت دقیق شناسایی شده و در نهایت نقشه مولکولی از چگونگی توزیع فضایی آنها در این قرص پلیمری استخراج شده است. در واقع، با ترکیب نمودن الگوریتم‌های هوش مصنوعی و روش تصویربرداری فرایندی اپتیکی رامان، امکان ثبت تصاویر با کیفیت، دقت، حساسیت و قدرت تفکیک فضایی بالا به منظور تهیه نقشه مولکولی و تعیین توزیع فضایی گونه‌های مختلف مولکولی در یک نمونه آزمایشگاهی هدف فراهم می‌شود.

در گام بعد، به منظور ارائه یک خوشه‌بندی از داده‌ها و با هدف شناسایی نقاط با ویژگی طیفی مشابه و سپس دسته‌بندی آنها در گروه‌های یکسان، دو الگوریتم نظارت نشده K-Median و HCA به‌طور هم‌زمان روی داده‌ها در فضای دو بُعدی PC1 و PC2 پیاده‌سازی شده است. نتایج این مرحله در شکل (۶) نمایش داده شده است.



همان‌گونه که ملاحظه می‌شود، هر دو الگوریتم نظارت نشده، دسته‌بندی‌های یکسانی را برای این مجموعه داده طیفی پیش‌بینی می‌کنند که نشان از تفکیک‌پذیری مناسب داده‌ها در فضای محاسباتی پیشنهادی با PCA است.

در ادامه، با ترکیب اطلاعات حاصل شده از دسته‌بندی داده‌ها و موقعیت فضایی ثبت شده به ازای هر طیف (داده‌های فرایندی (HS) رامان)، نقشه توزیع ساختار مولکولی این قرص پلیمری مطابق شکل (۷) استخراج شده است. این نقشه مولکولی، غیریکنواختی توزیع مولکولی دو پلیمر PE و PEG را در این قرص تایید می‌نماید. در نهایت در پایان این گام، نتایج حاصل از استخراج نقشه مولکولی، با مقایسه طیف هر ناحیه با طیف رامان نمونه‌های استاندارد هر پلیمر اعتبارسنجی شده است. بدین ترتیب با ترکیب الگوریتم‌های نظارت نشده هوش مصنوعی با تصویربرداری HS براساس طیف‌نگاری رامان، نقشه مولکولی دو بُعدی قرص پلیمری به همراه تفکیک و چگونگی توزیع فضایی دو پلیمر PE و PEG تشکیل دهنده نمونه هدف، استخراج شد.



## پی‌نوشت

1. Hyperspectral (HS) images
2. Molecular Detection (MD)
3. Complex System
4. Ensemble
5. Fluorescence Spectroscopy and Microscopy
6. Kinetics
7. Infrared spectroscopy (IR)
8. Hyperspectral Imaging (HSI)
9. Spatial Resolution
10. Molecular Mapping
11. Artificial Intelligence (AI)
12. Machine Learning
13. Pin Hole
14. Depth of Focus (DOF)
15. Confocality
16. The use of red, green, and blue (RGB) color imaging
17. Hyperspectral Image Cube Data
18. Supervised Algorithm
19. Training
20. Data Base
21. Classification
22. Unsupervised Algorithm
23. Clustering
24. Hierarchical Clustering Algorithm (HCA)
25. K-Median
26. Principle Component Analysis (PCA)
27. Polyetylen (PE)
28. Polyethylene glycol (PEG)
29. HORIBA
30. Raman Shift

## مراجع

- [1] C. Y. Li et al., "Real-time detection of single-molecule reaction by plasmon-enhanced spectroscopy," *Sci. Adv.*, vol. 6, no. 24, pp. 1–9, 2020, doi: 10.1126/sciadv.aba6012.
- [2] Y. Qiu, C. Kuang, X. Liu, and L. Tang, "Single-Molecule Surface-Enhanced Raman Spectroscopy," pp. 1–16, 2022.
- [3] A. A. Deniz, S. Mukhopadhyay, and E. A. Lemke, "Single-molecule biophysics: At the interface of biology, physics and chemistry," *J. R. Soc. Interface*, vol. 5, no. 18, pp. 15–45, 2008, doi: 10.1098/rsif.2007.1021.
- [4] Jie Zhang, G. Qi, C. Xu, and Y. Jin, "Enzymatic Preparation of Plasmonic-Fluorescent Quantum Dot-Gold Hybrid Nanoprobes for Sensitive Detection of Glucose and Alkaline Phosphatase and Dual-Modality Cell Imaging," *Anal. Chem.*, vol. 91, no. 21, pp. 14074–14079, 2019, doi: 10.1021/acs.analchem.9b03818.
- [5] D. Frank et al., "Overview of the role of nanotechnological innovations in the detection and treatment of solid tumors," *Int. J. Nanomedicine*, vol. 9, no. 1, pp. 589–613, 2014, doi: 10.2147/IJN.S50941.
- [6] A. Gharatape and A. Y. Khosroushahi, "Optical Biomarker-based Biosensors for Cancer / Infectious," *Appl. Immunohistochem. Mol. Morphol.*, vol. 00, no. 00, pp. 1–9, 2017.
- [7] C. Salinas, M. V. Amé, and A. G. Bracamonte, "Synthetic non-classical luminescence generation by enhanced silica nanophotonics based on nano-bio-FRET," *RSC Adv.*, vol. 10, no. 35, pp. 20620–20637, 2020, doi: 10.1039/d0ra02939d.
- [8] B. A. In situ Spectroscopic Techniques at High Pressure Supercritical Fluid Science and Technology, vol. 7.
- [9] I. Durickovic, "Using Raman Spectroscopy for Characterization of Aqueous Media and Quantification of Species in Aqueous Solution," *Appl. Mol. Spectrosc. to Curr. Res. Chem. Biol. Sci.*, 2016, doi: 10.5772/64550.
- [10] G. Deka, C. K. Sun, K. Fujita, and S. W. Chu, "Nonlinear plasmonic imaging techniques and their biological applications," *Nanophotonics*, vol. 6, no. 1, pp. 31–49, 2017, doi: 10.1515/nanoph-2015-0149.
- [11] J. Dieing, T. Hollricher, O., & Toporski, *Confocal Raman Microscopy Second Edition*, vol. 66. 2018.
- [12] K. B. Beć, J. Grabska, G. K. Bonn, M. Popp, and C. W. Huck, "Principles and Applications of Vibrational Spectroscopic Imaging in Plant Science: A Review," *Front. Plant Sci.*, vol. 11, no. August, pp. 1–27, 2020, doi: 10.3389/fpls.2020.01226.
- [13] L. Pan, P. Zhang, C. Daengngam, S. Peng, and M. Chongcheawchamnan, "A review of artificial intelligence methods combined with Raman spectroscopy to identify the composition of substances," *J. Raman Spectrosc.*, vol. 53, no. 1, pp. 6–19, 2022, doi: 10.1002/jrs.6225.
- [14] S. Chen et al., "Raman Spectroscopy Reveals Abnormal Changes in the Urine Composition of Prostate Cancer: An

- Application of an Intelligent Diagnostic Model with a Deep Learning Algorithm,” *Adv. Intell. Syst.*, vol. 3, no. 4, p. 2000090, 2021, doi: 10.1002/aisy.202000090.
- [15] P. Solís-Fernández and H. Ago, “Machine Learning Determination of the Twist Angle of Bilayer Graphene by Raman Spectroscopy: Implications for van der Waals Heterostructures,” *ACS Appl. Nano Mater.*, vol. 5, no. 1, pp. 1356–1366, 2022, doi: 10.1021/acsnm.1c03928.
- [16] J. W. Tang et al., “Comparative Analysis of Machine Learning Algorithms on Surface Enhanced Raman Spectra of Clinical Staphylococcus Species,” *Front. Microbiol.*, vol. 12, no. August, 2021, doi: 10.3389/fmicb.2021.696921.
- [17] R. Kothari et al., “Raman spectroscopy and artificial intelligence to predict the Bayesian probability of breast cancer,” *Sci. Rep.*, vol. 11, no. 1, pp. 1–17, 2021, doi: 10.1038/s41598-021-85758-6.
- [18] I. Kecoglu, M. Sirkeci, M. B. Unlu, A. Sen, U. Parlattan, and F. Guzelcimen, “Quantification of salt stress in wheat leaves by Raman spectroscopy and machine learning,” *Sci. Rep.*, vol. 12, no. 1, pp. 1–10, 2022, doi: 10.1038/s41598-022-10767-y.
- [19] N. Blake, R. Gaifulina, L. D. Griffin, I. M. Bell, and G. M. H. Thomas, “Machine Learning of Raman Spectroscopy Data for Classifying Cancers: A Review of the Recent Literature,” *Diagnostics*, vol. 12, no. 6, pp. 1–19, 2022, doi: 10.3390/diagnostics12061491.
- [20] Y. Kanemura et al., “Assessment of skin inflammation using near-infrared Raman spectroscopy combined with artificial intelligence analysis in an animal model,” *Analyst*, vol. 147, no. 12, pp. 2843–2850, 2022, doi: 10.1039/d2an00193d.
- [21] V. Karunakaran et al., “A non-invasive ultrasensitive diagnostic approach for COVID-19 infection using salivary label-free SERS fingerprinting and artificial intelligence,” *J. Photochem. Photobiol. B Biol.*, vol. 234, no. August, p. 112545, 2022, doi: 10.1016/j.jphotobiol.2022.112545.
- [22] C. Post et al., “Application of laser-induced, deep uv raman spectroscopy and artificial intelligence in real-time environmental monitoring—solutions and first results,” *Sensors*, vol. 21, no. 11, 2021, doi: 10.3390/s21113911.
- [23] D. Cui, L. Kong, Y. Wang, Y. Zhu, and C. Zhang, “In situ identification of environmental microorganisms with Raman spectroscopy,” *Environ. Sci. Ecotechnology*, vol. 11, p. 100187, 2022, doi: 10.1016/j.ese.2022.100187.
- [24] R. Luo, J. Popp, and T. Bocklitz, “Deep Learning for Raman Spectroscopy: A Review,” *Analytica*, vol. 3, no. 3, pp. 287–301, 2022, doi: 10.3390/analytica3030020.
- [25] M. A. Kouri et al., “Raman Spectroscopy: A Personalized Decision-Making Tool on Clinicians’ Hands for In Situ Cancer Diagnosis and Surgery Guidance,” *Cancers (Basel)*, vol. 14, no. 5, 2022, doi: 10.3390/cancers14051144.
- [26] S. F. Wu et al., “Raman scattering investigation of the electron-phonon coupling in superconducting Nd(O,F) BiS<sub>2</sub>,” *Phys. Rev. B - Condens. Matter Mater. Phys.*, vol. 90, no. 5, pp. 3–7, 2014, doi: 10.1103/PhysRevB.90.054519.
- [27] T. Dieing and O. Hollricher, “High-resolution, high-speed confocal Raman imaging,” *Vib. Spectrosc.*, vol. 48, no. 1, pp. 22–27, 2008, doi: 10.1016/j.vibspec.2008.03.004.
- [28] S. Thomas, Y. Grohens, G. Vignaud, N. Kalarikkal, and J. James, *Nano Optics: Fundamental, Experimental Methods, and Applications*. 2020.
- [29] L. Novotny and B. Hecht, *Principles of Nano-Optics*, 2nd ed. New York, 2012.
- [30] K. N. Prajapati, A. A. Nair, S. R. P. Silva, and J. Mitra, “Hyperspectral imaging with Raman scattered photons: A new paradigm in Raman analysis,” 2021, [Online]. Available: <http://arxiv.org/abs/2106.02876>.
- [31] I. J. Maybury, D. Howell, M. Terras, and H. Viles, “Comparing the effectiveness of hyperspectral imaging and Raman spectroscopy: a case study on Armenian manuscripts,” *Herit. Sci.*, vol. 6, no. 1, pp. 1–15, 2018, doi: 10.1186/s40494-018-0206-1.
- [32] K. Hauke, J. Kehren, N. Böhme, S. Zimmer, and T. Geisler, “In situ hyperspectral Raman Imaging: A new method to investigate sintering processes of ceramic material at high-temperature,” *Appl. Sci.*, vol. 9, no. 7, 2019, doi: 10.3390/app9071310.
- [33] M. Hussain, J. Zou, H. Zhang, R. Zhang, Z. Chen, and Y. Tang, “Recent Progress in Spectroscopic Methods for the Detection of Foodborne Pathogenic Bacteria,” *Biosensors*, vol. 12, no. 10, 2022, doi: 10.3390/bios12100869.
- [34] H. Zhao et al., “The application of machine-learning and Raman spectroscopy for the rapid detection of edible oils type and adulteration,” *Food Chem.*, vol. 373, no. PB, p. 131471, 2022, doi: 10.1016/j.foodchem.2021.131471.
- [35] M. Jordan, J. Kleinberg, and B. Scho, *Pattern Recognition and Machine Learning*.

## Authors

Amin safaie<sup>1\*</sup>  
Marjan Jafari<sup>1</sup>

\*Amin.safaie2016@gmail.com

1.Laboratory Specialist in Shiraz  
University Central Lab, Shiraz, Iran



MACHINE  
LEARNING

## Raman hyperspectral imaging and the implementation of machine learning algorithms: an innovative approach for molecular mapping of materials

### Abstract

Nonlinear Raman scattering spectroscopy is an optical method used to detect vibrational modes of target molecules, enabling the analysis and detection of chemical species at the molecular scale. When combined with a confocal optical microscope, this system can scan the sample surface point-by-point and record the molecular information present. By processing the raw spectral data and spatial coordinates, two-dimensional hyperspectral images are generated, containing nonlinear Raman scattering information for each pixel. Advanced statistical methods in artificial intelligence and machine learning are then used to extract information about the spatial distribution of molecules and chemical phases with high sensitivity and accuracy. In this study, an integrated optical setup consisting of a confocal optical microscope and a Raman spectroscopic system was used to scan the surface of a heterogeneous polymer sample at 3900 points using a visible laser with a wavelength of 532 nanometers. The recorded hyperspectral images were then processed using artificial intelligence and machine learning statistical methods to extract a molecular map of the spatial distribution of polymers in the sample.

### Keywords

Raman Hyperspectral Imaging, Unsupervised Machine Learning, PCA, HCA, K-median.

## Production of Nanofibers with New Electrospinning Methods



Gemological and paleontological value of amber and laboratory methods of its detection



Raman hyperspectral imaging and the implementation of machine learning algorithms: an innovative approach for molecular mapping of materials



Checking the normality of distribution of test results using minitab software



Optimization of gas-fired units using teaching-learning meta-heuristic algorithm



Study on gluten amounts of foodstuffs by ELISA method