新算法精准解码分子光学“指纹”

作者：writer 来源：科学网

本文原地址：https://www.iikx.com/news/progress/33171.html

本文仅供学习交流之用，版权归原作者所有，请勿用于商业用途！

新算法精准解码分子光学“指纹”
。科技日报讯（记者刘霞）美国莱斯大学研究团队开发出一种新的机器学习算法——峰值敏感弹性网络逻辑回归（PSE-LR）。该算法擅长解释分子、材料和疾病生物标志物的独特光学特征，有助实现更快、更精确的医学诊断和样本分析。相关论文发表于新一期《纳米》杂志。

研究团队表示，这项技术的核心突破在于教会计算机识别分子或材料等与光相互作用产生的独特“指纹”。借助这一技术，未来只要将光照射在一滴液体或组织样本上，医生们或许就能捕捉到阿尔茨海默病的早期信号。

PSE-LR不仅拥有“明辨秋毫”的识别能力，更具备“开诚布公”的可解释性。与其他“黑箱”式机器学习模型不同，它能生成清晰的“特征重要性图谱”，精确突出关键光谱区段，使诊断结果可靠、可解释和可溯源，且便于验证。

PSE-LR与其他机器学习模型进行比较，结果显示其性能更胜一筹，特别是在识别微妙或重叠的光谱特征方面。此外，在随后的系列验证实验中，该算法的表现也可圈可点，包括成功检测出液体中新冠病毒刺突蛋白的痕量存在、精准识别小鼠脑组织内的神经保护成分、有效区分阿尔茨海默病样本的细微光谱差异，以及鉴别出二维半导体材料的独特光学特征等。

作者：刘霞 来源：科技日报

更多 科学进展 请访问 https://www.iikx.com/news/progress/

本文版权归原作者所有，请勿用于商业用途，爱科学iikx.com转发