



**Ruprecht-Karls-Universität Heidelberg**  
**Fakultät für Klinische Medizin Mannheim**  
**Dissertations-Kurzfassung**

**Fourier-Transform Infrarotspektroskopie gekoppelt mit künstlichen neuronalen Netzwerken in der hämatologisch-onkologischen Diagnostik**

Autor: Daniel Frambach  
Institut / Klinik: III. Medizinische Klinik  
Doktorvater: Prof. Dr. J. Hastka

Ziel dieser Arbeit, war es die Einsatzmöglichkeiten der Fourier-Transform Infrarotspektroskopie in der Diagnostik von Karzinom- und Leukämiepatienten zu untersuchen. Als Untersuchungsmaterial wurden hierfür Serum und Leukozyten verwendet, die aus peripherem Blut gewonnen werden konnten. Der Vorteil einer infrarotspektroskopischen Methode ist unter anderem das schnell zu liefernde Ergebnis und die durch die Reagenzienfreiheit niedrigen Verbrauchskosten.

Zur Auswertung der Infrarotspektren wurde innerhalb der Arbeit eine moderne Methode der Musterbilderkennung verwendet. Die Software, die Künstliche Neuronale Netze simuliert, lernt selbstständig, durch die Vorgabe von Infrarotspektren samt der zugehörigen klinischen Diagnose die Differenzierung in gegebene Gruppen. Durch die Arbeit konnte gezeigt werden, dass eine mathematische Vorbehandlung der eingesetzten Spektren vorteilhaft ist. Die mathematische Ableitung der Infrarotspektren und der Einsatz des Savitzky-Golay-Algorithmus zu ihrer Spektrenglättung wirkten sich positiv auf die durch das Künstliche Neuronale Netz ermittelten Ergebnisse aus.

Für das Klassifikationsproblem zwischen Karzinomprobenspektren und Spektren eines gesunden Vergleichskollektivs standen im Testset 85 Patienten-/ Probandenserumproben zur Verfügung. Bei 8 (4,7%) von diesen Proben konnte das Auswertesystem keine Klassifikation in eine der beiden Gruppen vornehmen. Für die übrigen Proben wurde eine Sensitivität von 86,1%, Spezifität von 97,6% und Genauigkeit von 92,2% erreicht.

Beim Versuch zur Differenzierung zwischen Serum von Karzinompatienten und welchem von Patienten mit inflammatorischen, nicht malignen Erkrankungen ergab sich eine Genauigkeit von 87,5%. Die anhand von Leukozytensuspensionen durchgeführten Klassifikationsversuche zur Identifizierung von Leukämieprobenspektren und Spektren gesunder Probanden erbrachten keine statistisch belastbaren Ergebnisse. Die für das gleiche Klassifikationsproblem durchgeführten Untersuchungen mit Serum zeigten, wie bereits die Auswertungen der Karzinomprobenspektren, ein hohes Potential der FTIR- Spektroskopie zur Identifizierung betroffener Patientenproben. Von 54 Proben des Testsets wurden 5 (9,3%) als nicht klassifizierbar eingestuft. Für die restlichen Proben ergab sich eine Sensitivität von 93,8% bei gleichzeitiger Spezifität von 97,0% und eine diagnostische Genauigkeit von 95,9%.

Bei dem Versuch einer Differenzierung zwischen Spektren von Patienten mit chronisch lymphatischer Leukämie und chronisch myeloischer Leukämie konnte gezeigt werden, dass auch hier eine Unterteilung durch das System FTIR-Spektroskopie und künstliche neuronale Netze möglich wird. Für die Methode errechnete sich eine Genauigkeit von 85,7%.

Mit der beschriebenen Methode ist es möglich, eine Differenzierung zwischen Serumproben von Karzinom- und Leukämiepatienten im Vergleich zu einem jeweiligen Normalkollektiv zu erreichen. Weiter konnte das hohe Potential einer spektroskopischen Probenanalytik mit nachfolgender Auswertung über künstliche neuronale Netze daran gezeigt werden, dass eine Unterscheidung zwischen Proben von Karzinompatienten sowie Patienten mit inflammatorischen Erkrankungen ebenso realisiert werden konnte wie die Klassifizierung in die beiden Leukämiearten CLL und CML. Es ist zu erwarten, dass mit steigenden Probenzahlen für das Training eines künstlichen neuronalen Netzes die Genauigkeit für die Lösung des vorgegeben Klassifikationsproblems weiter gesteigert werden kann.