**Прямой анализ растительных масел методом APLPI в сочетании с методами машинного обучения**

***Тимакова С.И., Кравец К.Ю.***

*Аспирант 3-го года обучения*

*Институт геохимии и аналитической химии им. В.И. Вернадского Российской академии наук (ГЕОХИ РАН), Москва, Россия*

*E-mail: timakova@geokhi.ru*

Метод APLPI (Atmospheric Pressure Laser Plasma Ionization) основан на ионизации органических соединений в условиях воздействия лазерно-индуцированной плазмы при атмосферном давлении [1]. Такие отличительные особенности, как универсальность ионизации, экспрессность, отсутствие пробоподготовки, высокие производительность и чувствительность, а также совместимость с различными типами масс-анализаторов продемонстрированы в ряде работ [2,3] и определяют высокий потенциал метода для решения различных типов задач аналитической химии.

В докладе представлены результаты исследования возможности применения метода APLPI в сочетании с методами машинного обучения для решения задачи классификации растительных масел. Изучены образцы оливкового, рапсового, подсолнечного и льняного масла и их бинарные смеси. Разработанный ионный источник APLPI использовали в сочетании с масс-анализатором типа Q-TOF (MX5311, ИАП РАН). Генерация плазмы осуществлялась путем воздействия сфокусированного импульсного излучения Nd:YAG лазера на поверхность металлической мишени, находящейся вблизи заборника пробы масс-спектрометра. Мишень помещена в камеру, находящуюся при атмосферном давлении. Измерения проводили в атмосфере аргона. Образцы помещали в виалу, расположенную в газовом тракте ионного источника. Классификацию образцов проводили на основе масс-спектрометрических профилей летучих органических соединений, выделяемых маслами. Хемометрическую обработку данных осуществляли в среде python 3. Для формирования матриц откликов использовали библиотеку «pandas». Метод главных компонент (МГК), t-SNE, иерархическая кластеризация, линейная регрессия использовались в реализации пакета «scikit-learn».

Показано, что при проведении иерархической кластеризации с предварительным отбором признаков методом дисперсионного анализа и сокращением размерности матрицы откликов методом t-SNE, каждый вид масла формирует четкий кластер. На примере анализа смесей оливкового и рапсового масел продемонстрировано, что сочетание метода APLPI с методом множественной линейной регрессии позволяет количественно определить долю масел в исследованных смесях. Рассчитанное значение среднеквадратичной ошибки составляет 0.0017, коэффициент детерминации регрессионной модели R2 = 0.9882.

*Работа выполнена за счет средств бюджетного финансирования ГЕОХИ РАН.*

**Литература**

1. Пенто А. В., Никифоров С. М., Симановский Я. О., Гречников А. А. и Алимпиев С. С. Лазерная абляция и ионизация излучением лазерной плазмы при атмосферном давлении в масс-спектрометрии органических соединений. // Квантовая электроника. 2013. Т. 43. №. 1. С. 55-59

2. Тимакова С.И., Симакина Я.И., Кравец К.Ю., Гречников А.А. Экспресс-анализ проб мочи методом масс-спектрометрии с ионизацией, индуцированной лазерной плазмой при атмосферном давлении // Аналитика и контроль. 2023. Т. 27. №3. С. 141-149.

3. Тимакова С.И., Кравец К.Ю., Гречников А.А., Пенто А.В. Классификация чая по данным масс-спектрометрии с ионизацией, индуцированной лазерной плазмой при атмосферном давлении // Масс-спектрометрия. 2024. Т. 21. № 1. С. 59-65.