

## Расчет коэффициента диагностической значимости метаболомного профилирования пациентов с воспалительными заболеваниями кишечника

Научный руководитель – Захаржевская Наталья Борисовна

Трошенкова А.Н.<sup>1</sup>, Внукова А.А.<sup>2</sup>, Захаржевская Н.Б.<sup>3</sup>

1 - Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, Химический факультет, Кафедра аналитической химии, Москва, Россия, *E-mail: Alextroshulya@mail.ru*; 2 - НИИ физико-химической медицины Федерального медико-биологического агентства, Москва, Россия, *E-mail: biochem.fan@ya.ru*; 3 - НИИ физико-химической медицины Федерального медико-биологического агентства, Молекулярная биология, Москва, Россия, *E-mail: natazaha@gmail.com*

Спектр метаболитов, выделяемых в просвет желудочно-кишечного тракта, является источником прогностической информации, способствуя пониманию особенностей патогенетических процессов, в частности воспалительных заболеваний кишечника (ВЗК), имеющих, зачастую, неявную симптоматику. Использование метода газохроматографического анализа с парофазной экстракцией позволяет упростить этапы пробоподготовки образцов и способствует расширению спектра определяемых метаболитов в группах сравнения. В стандартный список компонентов, идентифицируемых в образцах стула пациентов методом парофазного ГХ-МС, стабильно входят коротко-, средне- и длинноцепочечные жирные кислоты, индолы, фенольные соединения, сульфиды [1,2]. Основной задачей данного исследования являлось определение оптимальной комбинации значимых метаболитов для верификации ВЗК.

В работе представлен анализ легколетучих компонентов, выявляемых в стуле пациентов с воспалительными заболеваниями кишечника и в группе здорового контроля посредством ГХ/МС Shimadzu QP2010 Ultra с парофазным экстрактором Shimadzu HS-20. Методами статистической обработки представлены расчетные коэффициенты диагностической значимости метаболомного профилирования.

Суммарные метаболомные профили легколетучих соединений достоверно отличались в группах контроля и воспалительных заболеваний кишечника. Методы статистической обработки позволили достоверно выявить отдельные легколетучие соединения, снижение количества которых стабильно определяется в группе ВЗК

В ходе работы были рассчитаны коэффициенты диагностической значимости результатов метаболомного профилирования для интерпретации полученных данных при верификации ВЗК. При использовании Байесовского наивного классификатора формула диагностического коэффициента значимости приобрела вид: *Tetradecanoic acid* & lowast; *Hydrocinnamic acid* & lowast; *n-Hexadecanoic acid* & lowast; *Hexanoic acid* & lowast; *Indole* & lowast; *Pentanoic acid*

В состав расчетной формулы индексов диагностической значимости вошли вещества, содержание которых связывают с воспалительными процессами ЖКТ. Найденные прямые и обратные зависимости концентраций указанных компонентов могут надежно верифицировать ВЗК, что уже на этапе предварительной неинвазивной диагностики будет способствовать своевременной терапии заболеваний.

### Источники и литература

- 1) Vicky De Preter , et al. (2015). Faecal metabolite profiling identifies medium-chain fatty acids as discriminating compounds in IBD. *Aliment Pharmacol Ther*, Mar;64(3):447-58
- 2) Christopher Walton , et al. (2013) Analysis of volatile organic compounds of bacterial origin in chronic gastrointestinal diseases *Inflamm Bowel Dis* 2013 Sep;19(10):2069-78