



Relazione delle attività svolte durante assegno di ricerca

Titolo del progetto: “Analisi multivariata applicata alla microscopia Raman di organoidi”

Periodo: 01/08/2024 – 31/07/2025 (durata: 1 anno)

Responsabile scientifico: Prof. Patrizio Candeloro

Nel corso del primo anno di attività, il dott. Davide Panella, titolare dell’Assegno di Ricerca, ha sviluppato un approccio innovativo per l’analisi di dati di micro-spettroscopia Raman mediante l’impiego di tecniche di Intelligenza Artificiale avanzata, con particolare riferimento alle Graph Neural Networks (GNN).

L’obiettivo principale del progetto era quello di ottimizzare ed estendere le metodologie di analisi multivariata applicate a mappe iperspettrali Raman di colture cellulari e organoidi, al fine di ottenere una classificazione subcellulare affidabile e riproducibile. Durante il periodo considerato, l’assegnista ha:

- Definito un framework computazionale per la classificazione automatica di spettri Raman raccolti da campioni cellulari, basato sulla conversione dei dataset in grafi non orientati, nei quali ciascuno spettro rappresenta un nodo e le connessioni (edges) sono pesate in funzione della similarità spettrale.
- Implementato e confrontato diverse metriche di distanza (Euclidea, Polare e Asimmetrica), valutandone l’efficacia nella preservazione della struttura dei dati spettrali.
- Addestrato e validato una rete neurale convoluzionale su grafi (GNN a due strati), in grado di classificare i nodi del grafo (ossia i singoli spettri) in classi subcellulari con buona robustezza e coerenza rispetto alla distribuzione biologicamente attesa.
- Introdotto strumenti di interpretabilità del modello, quali gli Integrated Gradients, per valutare le caratteristiche rilevanti utilizzate dalla rete neurale, e confrontato i risultati ottenuti con ground truth e metodiche di *overlapping community detection*.

I risultati hanno mostrato che l’approccio proposto consente di generare mappe bidimensionali coerenti con la struttura subcellulare dei campioni, dimostrando la validità del metodo sia come strumento di ricerca fondamentale sia come potenziale supporto in ambito diagnostico.

L’attività svolta ha portato inoltre alla preparazione e sottomissione di un contributo scientifico dal titolo “*Automatic Classification of Subcellular Regions in Raman Spectral Data Using a Graph Neural Network Approach*”, accettato come abstract presso una conferenza internazionale di Spettroscopia Molecolare che si terrà a Barcellona (12-13 febbraio 2026).

In sintesi, il lavoro condotto dal dott. Davide Panella ha colto gli obiettivi prefissati, contribuendo in maniera significativa allo sviluppo di metodiche di analisi Raman assistite da Intelligenza Artificiale. Le prospettive di prosecuzione del progetto includono l’estensione del framework messo a punto allo studio di strutture cellulari tridimensionali (sferoidi ed organoidi), con lo scopo di validarne ulteriormente l’applicabilità in contesti biologici più complessi.

Il Responsabile Scientifico

Patrizio Candeloro