

О некоторых методах обоснования диагностического решения, принятого на основании алгоритмов машинного обучения

Аннотация

Рассматриваются различные алгоритмы классификации в аспекте их применения в диагностике рака молочной железы по данным микроволновой радиотермометрии. В частности, описываются их принцип действия и возможность обоснования поставленного диагноза по численным данным. Предлагается алгоритм обоснования по дереву решений и наивному байесовскому классификатору. Приводятся примеры обоснования по раку молочной железы.

Введение

В настоящее время алгоритмы машинного обучения в медицине применяются в качестве основного блока консультативных систем. Они с достаточно высокой точностью определяют диагностическое решение, что существенно облегчает работу врача. Однако некоторые алгоритмы машинного обучения способны решать другую, не менее важную задачу – обоснование поставленного диагноза на языке, понятном для специалистов. В рассматриваемой работе вопрос возможности обоснования рассматривается в контексте применения метода микроволновой радиотермометрии.

Микроволновая радиотермометрия – биофизический метод неинвазивного обследования, заключающийся в измерении внутренних и поверхностных температур тканей по интенсивности их теплового излучения соответственно в микроволновом (РТМ) и инфракрасном (ИК) диапазонах [1], [2]. По данной тематике за последние годы были получены результаты, показывающие эффективность метода в диагностике различных заболеваний [2]–[10]. В частности, в ряде работ предлагается следующий подход к решению этой проблемы [3]–[6]. В основу выработки диагностического решения ставится разработка дескриптивных математических моделей, характеризующих отличительные особенности температурных полей пациентов различных диагностических классов. По построенным математическим моделям проектируется соответствующее признаковое пространство, при помощи которого производится классификация. Построенное признаковое пространство выполняет две задачи: во-первых, алгоритмы, обученные по данным признакам, показывают высокую точность диагностики; во-вторых, благодаря тому, что признаки характеризуют отличительные особенности заболеваний, возникает возможность их анализа и интерпретации на язык, понятный врачам-диагностам.

Проблема обоснования в машинном обучении, с одной стороны, не нова, но при этом становится все более и более актуальной. В частности, рассматривались способы интерпретации классификаторов по текстовым данным [1], по изображению [11]. Предлагались различные общие подходы [12]. Однако работа с количественными признаками имеет свою специфику. В то время как в словах и изображениях достаточно выделить части, характерные для того или иного класса, числовые данные более естественно анализировать на основе математических моделей, что будет показано далее. Поэтому имеет смысл отдельно рассмотреть обоснование по количественным данным.

Методы обоснования можно условно разделить на два типа: первый тип методов строит обоснование, не используя никакой информации от классификатора кроме поставленного диагноза. Обоснование в таком случае строится по значениям признаков, их обработке статистическими методами. Однако такое обоснование зачастую не коррелирует с алгоритмом постановки диагноза. Второй тип методов строит обоснование по данным классификаторов с последующей их обработкой. Например, можно использовать вероятностную информацию наивного байесовского классификатора. Таким образом, получается обоснование, соответствующее принци-

пу действия классификатора, и специалист может наблюдать все предпосылки, по которым поставлен диагноз. В рассматриваемой работе нас интересует только такой тип алгоритмов.

Несмотря на то что обоснование рассматривается в контексте применения метода микроволновой радиотермометрии, предложенные методы применимы и для диагностики по другим данным. Ключевым моментом обоснования является признаковое пространство, пригодное для интерпретации на язык, понятный специалистам.

Материалы и методы

Для диагностики рака молочной железы у пациентов проводились измерения кожных и глубинных температур в 10 различных точках в каждой молочной железе, а также дополнительно в 2 опорных точках. Схема измерений показана на рис. 1. По схеме центральная точка соответствует соску, точки 1...8 – внешнему радиусу молочной железы. Точки T1 и T2 – опорные.

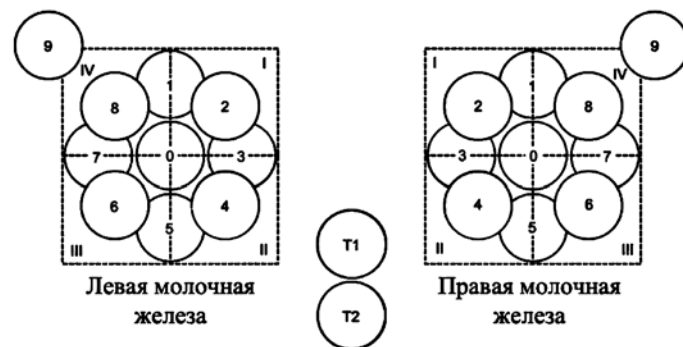


Рис. 1. Схема температурных измерений

Таким образом, база данных состоит из множества глубинных температур (1) и множества кожных температур (2):

$$T^{i,mw} = \{t_{0,r}^{mw}, \dots, t_{9,r}^{mw}, t_{0,l}^{mw}, \dots, t_{9,l}^{mw}, t_{0,p}^{mw}, t_{1,p}^{mw}\}; \quad (1)$$

$$T^{i,ir} = \{t_{0,r}^{ir}, \dots, t_{9,r}^{ir}, t_{0,l}^{ir}, \dots, t_{9,l}^{ir}, t_{0,p}^{ir}, t_{1,p}^{ir}\}, \quad (2)$$

где i – номер пациента; mw – температуры, измеренные в микроволновом диапазоне; ir – температуры, измеренные в инфракрасном диапазоне; первый нижний индекс – номер точки, в которой измерялась температура; второй нижний индекс – место измерения: l – левая молочная железа; r – правая молочная железа; p – опорная область.

В процессе анализа измеренных температур были выявлены следующие характерные особенности у здоровых пациентов, которые, как правило, не наблюдаются у больных раком молочной железы: низкое значение термоасимметрии (разницы между температурами правой и левой молочных желез в симметричных точках измерений); равномерное распределение температур в молочной железе, отсутствие «горячих» областей; определенное значение отношения кожных и глубинных температур.

Опираясь на них, было построено 62 различных признака [5]. По полученному признаковому пространству проводилась классификация различными алгоритмами. В табл. 1 приведены результаты вычислительных экспериментов. Алгоритмы оценивались по двум параметрам: чувствительность (доля верно диагностированных пациентов группы риска) и специфичность (доля верно диагностированных здоровых пациентов). Таким образом было получено признаковое пространство, эффективное в диагностике рака молочной железы и допускающее обоснование на понятном специалистам языке.

Таблица 1

Точность классификаторов

Классификатор	Чувствительность	Специфичность
Нейронная сеть	0,930	0,908
Логистическая регрессия	0,894	0,913
Дерево решений	0,886	0,889
Наивный байесовский классификатор	0,860	0,867

Рассмотрим алгоритмы по порядку.

Нейронные сети

Модель состоит из множества так называемых нейронов, объединенных в слои. Нейроны из одного слоя передают свою информацию в нейроны следующего слоя. Каждый нейрон является комбинацией нейронов предыдущих слоев. Первый слой состоит из нейронов, значения которых соответствуют входным признакам. Такой тип классификаторов зачастую является высокоточным, однако имеет один существенный недостаток – его неинтерпретируемость. Из-за постоянного преобразования признаков модель становится «черным ящиком», в котором нельзя оценить вклад каждого признака в поставленный диагноз и соответственно предпосылки диагноза. Важно отметить, что это относится к числовым данным. Как уже было сказано во введении, они имеют свою специфику. Так, нейронные сети при работе с изображениями допускают интерпретируемость.

Логистическая регрессия

Алгоритм является вероятностной моделью. Диагноз ставится по логистической функции (3)

$$f(z) = \frac{1}{1 + e^{-z}}, \quad (3)$$

где $z = \sum_{i=1}^n C_i \cdot x_i$ – линейная комбинация признаков; x_i – признаки; C_i – коэффициенты регрессии. Если значение линейной комбинации отрицательное, то пациент считается здоровым. И наоборот, если значение положительное, то пациент считается больным. В работе [13] описан процесс обоснования поставленного диагноза по логистической регрессии. Однако мы считаем важным отметить некоторые недостатки и ограничения алгоритма.

Исходя из принципа действия алгоритма обоснование может строиться на значении произведения $c_i x_i$. Если оно отрицательно, то признак x_i характерен для здоровых пациентов. Однако на практике признаки зачастую принимают исключительно положительное или отрицательное значение. То есть

$\text{sign}(c_i x_i) = \text{const}$, из-за чего признак получается характерным только для одного из диагнозов. Чтобы решить эту проблему, необходимо преобразовать признаки таким образом, чтобы отрицательное значение признака характеризовало один диагноз, положительное – другой. Преобразование признаков требует отдельного изучения и в данной работе не рассматривается.

Дерево решений

Алгоритм является условной моделью. Условия организуются древовидной структурой, в которой узлом является условие вида «Признак $i \leq x$ ». Каждый узел соединен с двумя последующими. Конечный узел является диагнозом. На рис. 2 представлен пример построенного дерева решений.

Ключевым моментом обоснования является то, что структура дерева решений статична, поэтому каждый узел можно сопоставить со словесным описанием. Например, по рис. 2 первому узлу будут соответствовать следующие описания:

- если условие в узле выполняется, то «Значение признака 1 в норме»;
- если условие в узле не выполняется, то «Значение признака 1 значительно повышено».

Принцип построения оценок характера «значительно повышено» предлагается делать по аналогии с вариантами в наивном байесовском классификаторе, который будет описан далее. Однако описание узлов дерева осуществляется вручную, так как значение каждого следующего узла зависит еще и от контекста предыдущих.

1. Для каждого узла в дереве решений:
2. Если классифицируемый пациент «попадает» в рассматриваемый узел, то:
3. Если условие в узле выполняется для пациента, то: Вывести информацию узла, когда условие выполняется.
4. Иначе: Вывести информацию узла, когда условие не выполняется.

Наивный байесовский классификатор

Алгоритм является вероятностной моделью, диагностирующей на основе характерности признаков объекта для того или иного класса пациентов. Это видится нам удобным для построения обоснования. Приведем формулу подсчета класса:

$$\hat{y} = \arg \max_y P(y) \prod_{i=1}^n P(x_i | y), \quad (4)$$

где $\hat{y}$ – итоговый класс; $P(y)$ – вероятность класса y , т. е. доля класса y в обучающей выборке; $P(x_i | y)$ – условная вероятность.

Так, если $P(x_2 | \text{болен}) > P(x_2 | \text{здоров})$, то это означает, что признак x_2 характерен для пациентов класса «болен». На основе этого знания и производится обоснование.

Опишем подробнее алгоритм обоснования.

1. Для каждого признака i из [признак 0 .. признак m]:
2. Если $P(\text{признак } i | 1) > P(\text{признак } i | 2)$, то: Признак i характерен для класса 1 (здоровые пациенты).
3. Иначе: Признак i характерен для класса 2 (пациенты из группы риска).
4. Определить отклонение признака i от нормы.

Так как вероятностная оценка классификатора не дает информации о том, в чем заключается характерность признака для данного класса, требуется дополнительный анализ признаков. Одним из вариантов такого анализа является сравнение



Рис. 2. Пример структуры дерева решений

значения признака с его распределением у здоровых пациентов. Будем сравнивать признак с четырьмя процентилями: 25, 40, 60 и 75. Если значение признака:

- меньше 25-го перцентиля, то оно значительно ниже нормы;
- между 25-м и 40-м процентилями, то оно незначительно ниже нормы;
- между 40-м и 60-м процентилями, то оно в пределах нормы;
- между 60-м и 75-м процентилями, то оно незначительно выше нормы;
- больше 75-го перцентиля, то оно значительно выше нормы.

Таким образом, получается обоснование вида «Средняя температура левой молочной железы значительно выше нормы, что характерно для пациентов, больных раком». Количество пороговых значений и их описание может меняться в зависимости от специфики и контекста предметной области.

Результаты

Приведем пример обоснования по алгоритмам «наивный байесовский классификатор» и «дерево решений». В качестве признакового пространства выберем четыре функции, характеризующие некоторые гипотезы:

- незначительная термоасимметрия (признак F1):

$$\|T_r^{i,mw} - T_l^{i,mw}\|_1 = \sum_{k=0}^9 |T_r^{i,mw} - T_l^{i,mw}|;$$

- равномерное распределение температур (признак F2):

$$\max_{t \in T^{i,mw} \setminus T_0^{i,mw}} |T_0^{i,mw} - t|;$$

- осцилляция глубинных температур. Повышенное значение характеризует наличие «горячей» области (признак F3):

$$\max_{t \in T^{i,mw}} t - \min_{t \in T^{i,mw}} t;$$

- осцилляция кожных температур. Повышенное значение характеризует наличие «горячей» области (признак F4):

$$\max_{t \in T^{i,dr}} t - \min_{t \in T^{i,dr}} t.$$

Вначале рассмотрим наивный байесовский классификатор. В табл. 2 приведены значения признаков диагностируемого пациента и значения условных вероятностей.

Таблица 2

Наивный байесовский классификатор

Признак	F1	F2	F3	F4
Значение	8,7	1,5	3	0,89
$P(\text{Признак} \mid \text{класс «здоров»})$	$4,3 \cdot 10^{-7}$	0,26	0,1	0,18
$P(\text{Признак} \mid \text{класс «болен»})$	0,1	0,42	0,17	0,29

Как видно, по всем признакам вероятность принадлежности пациента к классу больных выше, чем к классу здоровых. Рассмотрим это на примере первого признака. На рис. 3 представлена диаграмма ящиков с усами. Левый ящик показывает распределение значений признака по здоровым, правый – по больным. Пунктирной линией отмечено значение признака у рассматриваемого пациента. Как видно, у больных такие значения признака встречаются чаще. Это же наблюдается и по остальным признакам.

Таким образом, получаем следующее обоснование по данному алгоритму:

- все признаки характерны для класса «болен»;
- величина термоасимметрии значительно выше нормы;
- температура соска незначительно выше нормы;
- величина осцилляции глубинных температур значительно выше нормы, возможно присутствие «горячей» области среди глубинных температур;

- величина осцилляции кожных температур незначительно выше нормы.

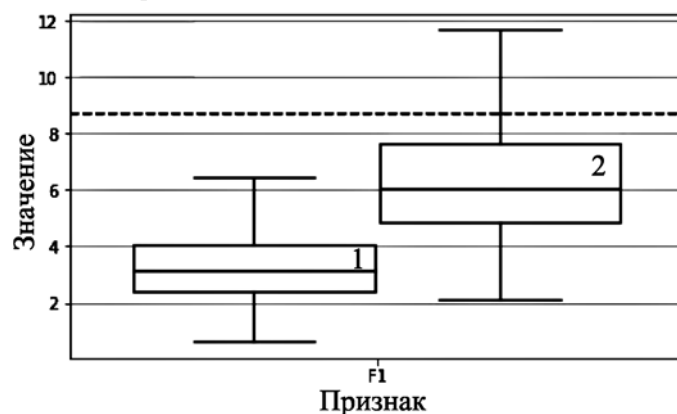


Рис. 3. Диаграмма ящика с усами по первому признаку: 1 – здоров; 2 – болен

Рассмотрим дерево решений на том же примере. На обучающей выборке алгоритм построил древовидную структуру, которая представлена на рис. 4.

При диагностике пациент проверяется по условиям слева направо. Так, на рисунке серым цветом отмечены ячейки, для которых выполняются соответствующие им правила для пациента. Получаем, что пациент является больным, потому что у него повышенная термоасимметрия. В обосновании не сказано про признак F3 – величину осцилляции глубинных температур. Это связано с тем, что для признака значение «3,85» значительно выше нормы. И то, что значение признака ниже заданного уровня, никак не характеризует его. Оно также может быть на уровне нормы или значительно отклоняться от нее. Однако при диагностике это знание не используется. Классификатору достаточно того, что у пациента повышенная термоасимметрия.

Рассмотрим здорового пациента, которого оба классификатора определили верно. По наивному байесовскому классификатору значение каждого признака более характерно для здоровых пациентов. Сравнение признаков с нормой показывает следующие результаты: величина термоасимметрии в пределах нормы, температура соска незначительно ниже нормы, величина осцилляции глубинных температур незначительно ниже нормы, величина осцилляции кожных температур значительно ниже нормы.

Обоснование по дереву решений получается следующим: термоасимметрия не повышена, невысокая температура соска.

Считаем важным отметить, что обоснование по различным алгоритмам классификации не гарантирует получение подобных друг другу отчетов, что наблюдается на приведенных примерах.

Заключение

В заключение отметим, что выбор метода обоснования в первую очередь зависит от точности диагностики при помощи классификатора. Если же точность диагностики по всем классификаторам отличается незначительно, выбор делается по специфике методов обоснования. В одной области может быть важно сообщить вероятностную информацию, в другой более важной может быть относительная статистическая информация, а именно повышено или понижено значение признака относительно нормы.

Дальнейшим направлением развития работы нам видится изучение других алгоритмов классификации и разработка методов обоснования для них по числовым данным. Опираясь на рассмотренные алгоритмы классификации, мы не видим возможности построения общего подхода к обоснованию, так как на обоснование значительно влияет специфика работы алгоритмов.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (по аппаратной части – проект № 19-19-00349) и при под-

Список литературы:

1. Ribeiro M.T., Singh S., Guestrin C. «Why Should I Trust You?»: Explaining the Predictions of Any Classifier / Proceedings of the 22nd ACM SIGKDD International Conference on Knowledge Discovery and Data Mining. 13-17 August 2016. San Francisco, California, USA. PP. 1135-1144.
2. Vesnin S.G., Turnbull A.K., Dixon J.M., Goryanin I. Modern Microwave Thermometry for Breast Cancer // Journal of Molecular Imaging & Dynamics. 2017. Vol. 7. № 2. PP. 1-6.
3. Замечник Т.В., Лосев А.Г., Левишинский В.В. Результаты оптимизации диагностических признаков рака молочной железы, выявляемые методом микроволновой радиотермометрии // Медицинский вестник Северного Кавказа. 2019. Т. 14. № 1.1. С. 48-52.
4. Levshinskii V.V. Intelligent system for diagnostics of venous diseases based on the microwave radiothermometry data // Lecture Notes in Networks and Systems. 2021. Vol. 155. PP. 212-219.
5. Levshinskii V.V. Mathematical models for analyzing and interpreting microwave radiometry data in medical diagnosis // Journal of Computational and Engineering Mathematics. 2021. Vol. 8. № 1. PP. 3-14.
6. Levshinskii V., Galazis C., Ovchinnikov L., Vesnin S., Losev A., Goryanin I. Application of Data Mining and Machine Learning in Microwave Radiometry (MWR) // Communications in Computer and Information Science. 2020. Vol. 1211 CCIS. PP. 265-288.
7. Osmonov B., Ovchinnikov L., Galazis C., Emilov B., Karabragimov M., Seitov M., Vesnin S., Losev A., Levshinskii V., Popov I., Mustafin C., Kasymbekov T., Goryanin I. Passive Microwave Radiometry for the Diagnosis of Coronavirus Disease 2019 Lung Complications in Kyrgyzstan // Diagnostics. 2021. Vol. 11. № 2. PP. 1-15.
8. Goryanin I., Karbainov S., Shevelev O., Tarakanov A., Redpath K., Vesnin S., Ivanov Y. Passive microwave radiometry in biomedical studies // Drug Discovery Today. 2020. Vol. 25. № 4. PP. 757-763.
9. Tarakanov A.V., Tarakanov A.A., Vesnin S.G., Efremov V.V., Roberts N., Goryanin I. Influence of ambient temperature on recording of skin and deep tissue temperature in region of lumbar spine // European Journal of Molecular & Clinical Medicine. 2020. Vol. 7. № 1. PP. 21-26.
10. Gudkov A.G., Leushin V.Y., Vesnin S.G., Sidorov I.A., Sedankin M.K., Solov'ev Y.V., Agasieva S.V., Chizhikov S.V., Gorbachev D.A., Vidyakin S.I. Studies of a Microwave

Radiometer Based on Integrated Circuits // Biomedical Engineering. 2020. Vol. 53. № 6. PP. 413-416.

11. Spinks G., Moens M.-F. Justifying diagnosis decisions by deep neural networks // Journal of Biomedical Informatics. 2019. Vol. 96. PP. 1-13.
12. Loi M., Ferrario A., Vigano E. Transparency as design publicity: Explaining and justifying inscrutable algorithms // Ethics and Information Technology. 2020. PP. 1-20. Published online: 20 Oct. 2020.
13. Biran O., McKeown K. Human-centric justification of machine learning predictions / Proceedings of the 26th International Joint Conference on Artificial Intelligence. 19-25 August 2017. Melbourne, Australia. PP. 1461-1467.

Александр Георгиевич Лосев,
д-р физ.-мат. наук, профессор,
кафедра математического анализа
и теории функций,
Илларион Евгеньевич Попов,
магистрант,
Александр Юрьевич Петренко,
магистрант,
кафедра фундаментальной информатики
и оптимального управления,
Институт математики
и информационных технологий,
ФГАОУ ВО «Волгоградский государственный
университет»,
г. Волгоград,
Александр Григорьевич Гудков,
д-р техн. наук, профессор,
кафедра «Технологии приборостроения»,
ФГБОУ ВО «МГТУ им. Н.Э. Баумана»,
Сергей Георгиевич Веснин,
канд. техн. наук, генеральный директор,
ООО «Фирма «РЭС»,
Сергей Владимирович Чижиков,
аспирант,
кафедра «Технологии приборостроения»,
ФГБОУ ВО «МГТУ им. Н.Э. Баумана»,
генеральный директор,
ООО «НПП «Технологические инновации»,
г. Москва,
e-mail: chigikov95@mail.ru

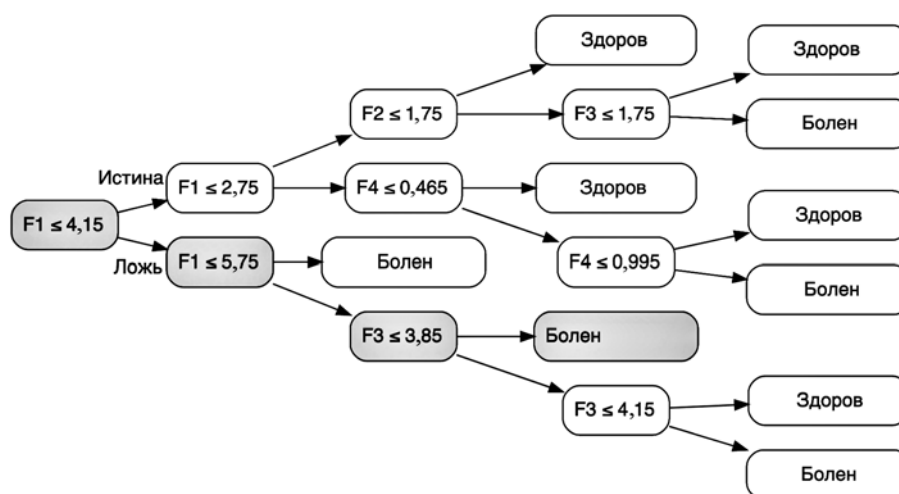


Рис. 4. Структура дерева решений