

Εξατομικευμένα Συστήματα Τηλεϊατρικής και Βιοϊατρικής

Ιωάννα Γέμου
AM: 1070525
5ο έτος

Περιεχόμενα

1	Σκοπός/Αντικείμενο Μελέτης	2
2	Προεπεξεργασία	2
3	Τεχνικές Ταξινόμησης	3
3.1	Multilayer Perceptron	3
3.2	Deep Learning Algorithm	4
3.3	K-Nearest-Neighbor	5
3.4	Support Vector Machines	5
3.5	Decision Tree	6
3.6	Random Forests	7
4	Hyperparameter Tuning	7
5	Αξιολόγηση των ταξινομητών	7
5.1	Balanced Accuracy	8
5.2	Sensitivity	8
5.3	Specificity	8
5.4	AUC	8
5.5	F1 score	8
6	Ερμηνευσιμότητα των μοντέλων	9
7	Αποτελέσματα	11
8	Παρατηρήσεις	13
9	Πηγές	13

1. Σκοπός/Αντικείμενο Μελέτης

Στην συγκεκριμένη άσκηση μας ζητείται να εφαρμόσουμε μία σειρά από βασικούς αλγορίθμους μηχανικής μάθησης με χρήση της γλώσσας προγραμματισμού **Python**, για την διάγνωση της νόσου **Parkinson** από ηχητικές καταγραφές ομιλίας. Έτσι, καλούμαστε να δοκιμάσουμε αυτές τις μεθόδους και να ταξινομήσουμε κάθε στιγμιότυπο ηχητικής καταγραφής (ένα άτομο) σε υγιές ή μη. Έπειτα, αναζητούμε τις κατάλληλες υπερπαραμέτρους κάθε ταξινομητή που κατασκευάσαμε και προχωράμε στην αξιολόγηση των ταξινομητών. Εν τέλει, με την χρήση της μεθόδου **Shapley**, καταγράφουμε τα πιο σημαντικά χαρακτηριστικά των δεδομένων για την πρόβλεψη σε υγιές ή μη, δηλαδή τα χαρακτηριστικά αυτά που έχουν μεγαλύτερο βάρος για την τελική πρόβλεψη.

2. Προεπεξεργασία

Το dataset δημιουργήθηκε από τον **Max Little of the University of Oxford**, σε συνεργασία με το **National Centre for Voice and Speech, Denver, Colorado**, το οποίο κατέγραψε τις ηχητικές μετρήσεις.

Τα δεδομένα που χρησιμοποιήθηκαν είναι ηχητικές καταγραφές από άτομα που είτε ήταν υγιή ή έπασχαν από την νόσο **Parkinson**. Το σύνολο των δεδομένων περιλαμβάνει καταγραφές ομιλίας από συνολικά 31 άτομα, με τα 23 από αυτά να έχουν την νόσο.

Από κάθε άτομο πάρθηκαν κατα μέσο όρο 6 ηχητικές μετρήσεις, και εν τέλει το αρχείο δεδομένων περιλαμβάνει 195 ηχητικές μετρήσεις.

Κάθε στήλη του αρχείου αντιπροσωπεύει μία συγκεκριμένη ηχητική μέτρηση. κάποιες από αυτές επιγραμματικά αντιπροσωπεύουν:

- **name** - κωδικό όνομα του υποκειμένου
- **MDVP:F0(Hz)** - Μέση ηχητική θεμελιώδης συχνότητα
- **MDVP:Fhi(Hz)** - Μέγιστη ηχητική θεμελιώδης συχνότητα
- **MDVP:Flo(Hz)** - Ελάχιστη ηχητική θεμελιώδης συχνότητα
- **MDVP:Jitter(%)**, **MDVP:Jitter(Abs)**, **MDVP:RAP**, **MDVP:PPQ**, **Jitter:DDP** - Πολλαπλές μετρήσεις μεταβολών στην θεμελιώδη συχνότητα.
- **MDVP:Shimmer**, **MDVP:Shimmer(dB)**, **Shimmer:APQ3**, **Shimmer:APQ5**, **MDVP:APQ**, **Shimmer:DDA** - Πολλαπλές μετρήσεις μεταβολών του πλάτους
- **NHR**, **HNR** - Μετρήσεις σχετικές με τον θόρυβο
- **status** - Health status of the subject (one) - Parkinson's, (zero) - healthy
- **RPDE**, **D2** - Two nonlinear dynamical complexity measures
- **DFA** - Signal fractal scaling exponent
- **spread1**, **spread2**, **PPE** - Three nonlinear measures of fundamental frequency variation

Η κανονικοποίηση των δεδομένων εισόδου σε έναν αλγόριθμο μηχανικής μάθησης αποτελεί το πρώτο βήμα για την επιτυχή συμπεριφορά του. Αυτό γίνεται με την μετατροπή των δεδομένων εισόδου σε μορφές που μπορεί να κατανοήσει ο αλγόριθμος. Γενικά, η κανονικοποίηση δεδομένων εισόδου ενσωματώνει την επεξεργασία δεδομένων, την επιλογή δεδομένων, την εξαγωγή χαρακτηριστικών. Επιπλέον, η κανονικοποίηση των δεδομένων εισόδου ενδέχεται να συνδεθεί και με τη διαγραφή των δεδομένων και την διαγραφή του θορύβου.

Η προεπεξεργασία περιλαμβάνει κανονικοποίηση των δεδομένων μεταξύ του εύρους τιμών 0-1. και είναι σημαντική γιατί σημαίνει ότι μία μονάδα θα λαμβάνει τιμές μόνο μεταξύ του 0 και του 1. Αυτό επιτρέπει στον αλγόριθμο να υπολογίσει τις τιμές εισόδου ενός είδους γραμμής και να διαχωρίσει τις τιμές σε διαφορετικές κατηγορίες. Επιπλέον, η κανονικοποίηση των τιμών των δεδομένων εισόδου σε ένα σύνολο τιμών μεταξύ 0 και 1 μπορεί επίσης να βοηθήσει τον αλγόριθμο να διατηρήσει την ισορροπία μεταξύ των διαφορετικών κατηγοριών των δεδομένων εισόδου.

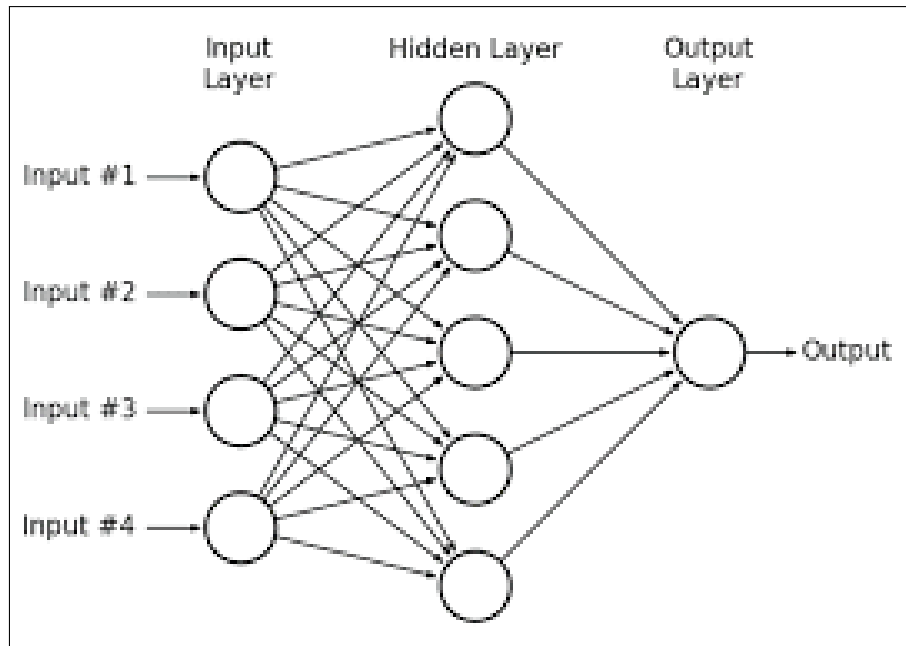
3. Τεχνικές Ταξινόμησης

Παρακάτω αναλύονται οι τεχνικές ταξινόμησης που χρησιμοποιήθηκαν.

3.1. Multilayer Perceptron: Το Multilayer Perceptron (MLP) είναι ένας τύπος ταξινομητή διανυσματικού υπολογισμού με πολλαπλά επίπεδα που περιέχει ενσωματωμένες μονάδες διανυσματικής επεξεργασίας για την επεξεργασία δεδομένων. Προσφέρει μια συνδυασμένη αρχιτεκτονική για την ανάλυση δεδομένων και την επιτυχία των ερωτήσεων μηχανικής μάθησης. Μπορεί να χρησιμοποιηθεί για την ανάλυση δεδομένων, την εξαγωγή χαρακτηριστικών και την κατηγοριοποίηση.

Το MLP αποτελεί ένα είδος **Feed Forward Neural Network**. Πρόκειται για ένα τύπο νευρωνικής δικτύωσης, ο οποίος διατηρεί τα δεδομένα κατευθείαν μεταξύ των διαφόρων επιπέδων. Τα δεδομένα μεταδίδονται από το επίπεδο εισόδου στο επίπεδο εξόδου, χωρίς καμία διακοπή της διαδικασίας. Το τελικό στόχο είναι να δημιουργηθούν συστάσεις ή διατάξεις με βάση τα στοιχεία εισόδου.

Για παράδειγμα, ας υποθέσουμε ότι έχουμε ένα σύστημα που κατατάσσει εικόνες βάσει του είδους τους. Στην πραγματικότητα, η δομή **Feed Forward Neural Network** θα είναι ως εξής: Τα δεδομένα εισόδου θα περνάνε από το επίπεδο εισόδου, το οποίο θα διαιρεί τις εικόνες με βάση το είδος τους. Τα δεδομένα θα μεταδοθούν στο επόμενο επίπεδο, το οποίο θα διακρίνει ακόμα περισσότερες λεπτομέρειες σχετικά με τα είδη των εικόνων. Τέλος, τα δεδομένα θα πάνε στο επίπεδο εξόδου, το οποίο θα επιστρέψει μια διάταξη για την ομαδοποίηση των εικόνων.



3.2. Deep Learning Algorithm: Ο αλγόριθμος που χρησιμοποιήθηκε είναι το βαθύ νευρωνικό δίκτυο TabNet. Το (TabNet) είναι μια αρχιτεκτονική για ερμηνεύσιμα μοντέλα βαθιάς μάθησης. Έχει σχεδιαστεί για χρήση σε σύνολα δεδομένων πινάκων. Βασίζεται σε έναν συνδυασμό του Πίνακα Νευρωνικού Δικτύου (TabNet) και του δικτύου που βασίζεται στην προσοχή (AttentionNet).

Πρόκειται είναι ένα μοντέλο βαθιάς μάθησης σχεδιασμένο να ερμηνεύει πολύπλοκα σύνολα δεδομένων σε πίνακα. Χρησιμοποιεί μια σειρά επιπέδων που βασίζονται στην προσοχή για να μάθει τις αλληλεπιδράσεις χαρακτηριστικών και να εντοπίσει σημαντικά χαρακτηριστικά. Το (AttentionNet) είναι ένα σύνολο τεχνικών που προσδιορίζουν τα πιο σημαντικά χαρακτηριστικά σε ένα σύνολο δεδομένων και καθορίζουν τον τρόπο με τον οποίο αλληλεπιδρούν. Το (TabNet) συνδυάζει αυτές τις δύο τεχνικές για να δημιουργήσει ένα ερμηνεύσιμο μοντέλο βαθιάς μάθησης που μπορεί να παρέχει πληροφορίες για τα δεδομένα.

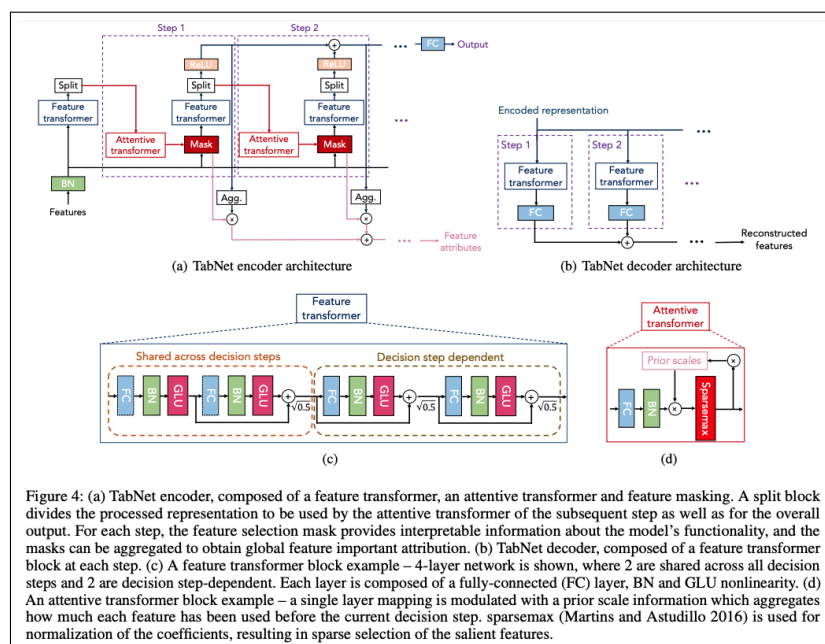
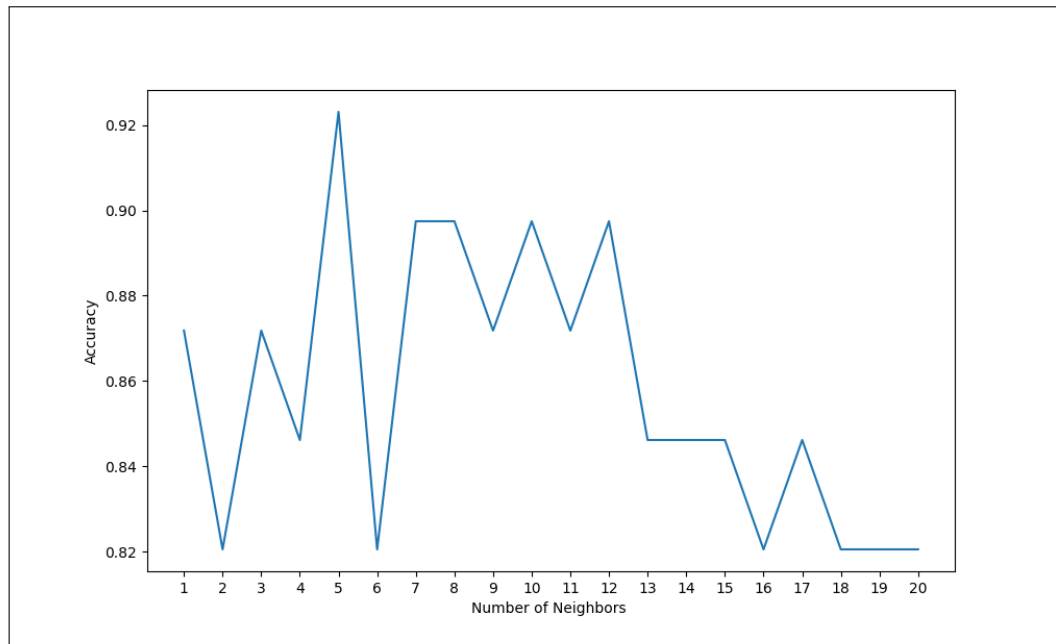


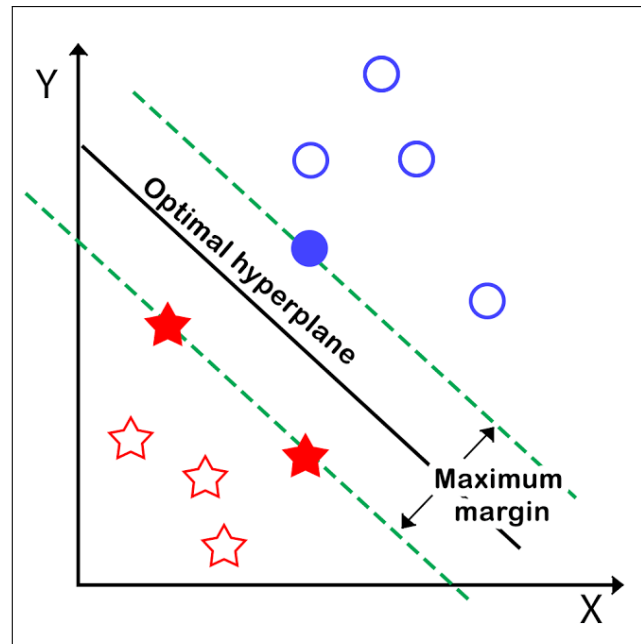
Figure 4: (a) TabNet encoder, composed of a feature transformer, an attentive transformer and feature masking. A split block divides the processed representation to be used by the attentive transformer of the subsequent step as well as for the overall output. For each step, the feature selection mask provides interpretable information about the model's functionality, and the masks can be aggregated to obtain global feature important attribution. (b) TabNet decoder, composed of a feature transformer block at each step. (c) A feature transformer block example – 4-layer network is shown, where 2 are shared across all decision steps and 2 are decision step dependent. Each layer is composed of a fully-connected (FC) layer, BN and GLU nonlinearity. (d) An attentive transformer block example – a single layer mapping is modulated by a prior scale information which aggregates how much each feature has been used before the current decision step. sparsemax (Martins and Astudillo 2016) is used for normalization of the coefficients, resulting in sparse selection of the salient features.

3.3. K-Nearest-Neighbor: Ο αλγόριθμος K-Nearest-Neighbor (KNN) είναι ένας διαδομένος για την κατηγοριοποίηση και την προβλεπτική ανάλυση. Είναι ένας απλός αλγόριθμος που βασίζεται στο γεγονός ότι τα εξαρτημένα δεδομένα που βρίσκονται κοντά σε ένα σημείο θα είναι πιθανώς του ίδιου είδους. Συνοπτικά, ο KNN χρησιμοποιεί τις διαστάσεις των δεδομένων ως τις διαστάσεις που διαχωρίζουν τις κατηγορίες και επιλέγει την κατηγορία με τον μεγαλύτερο αριθμό γειτόνων. Ωστόσο, απαιτεί μεγάλη πολυπλοκότητα για την εκτέλεση. Ο καλύτερος αριθμός γειτόνων για το παράδειγμά μας



3.4. Support Vector Machines: Οι μηχανές διανυσμάτων υποστήριξης (SVM) είναι ένας τύπος εποπτευόμενου αλγόριθμου μηχανικής μάθησης που χρησιμοποιείται για ταξινόμηση και παλινδρόμηση. Τα (SVM) χρησιμοποιούν μια κατηγορία αλγορίθμων που ονομάζονται ταξινομητές μέγιστου περιθωρίου, οι οποίοι κατασκευάζουν ένα υπερεπίπεδο ή ένα σύνολο υπερεπιπέδων για να διαχωρίσουν ένα σύνολο σημείων δεδομένων σε δύο ή περισσότερες κλάσεις.

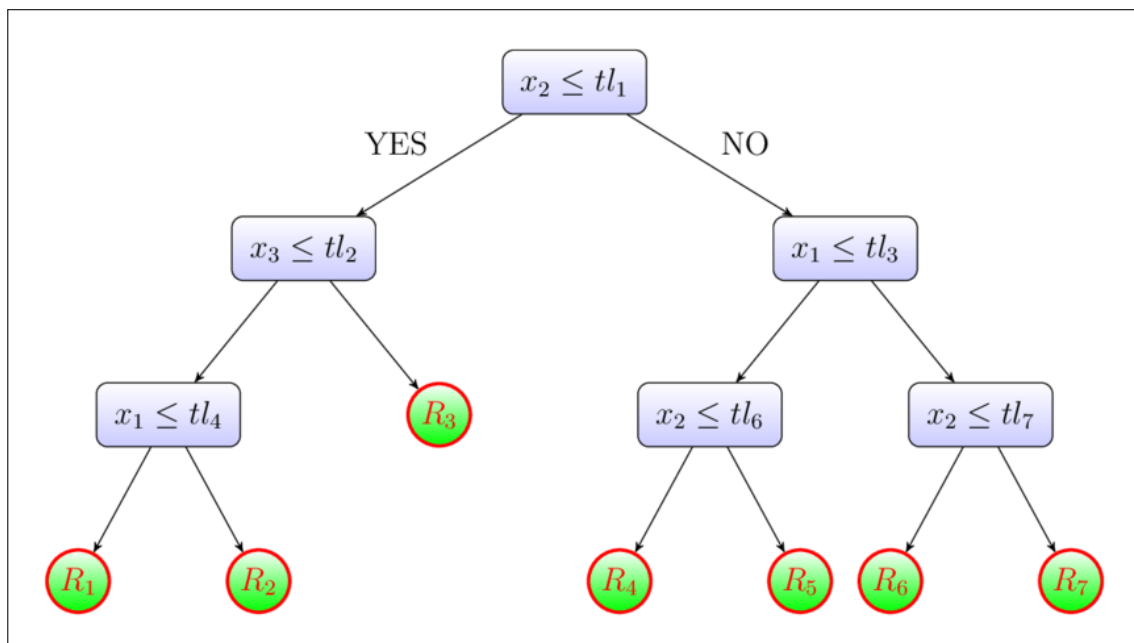
Για παράδειγμα, σε ένα πρόβλημα δυαδικής ταξινόμησης όπως το δικό μας, το (SVM) θα παράγει ένα γραμμικό υπερεπίπεδο που χωρίζει τα σημεία δεδομένων σε δύο ομάδες. Το υπερεπίπεδο επιλέγεται έτσι ώστε να μεγιστοποιεί το περιθώριο μεταξύ των δύο ομάδων, πράγμα που σημαίνει ότι η απόσταση από το υπερεπίπεδο έως τα πλησιέστερα σημεία από κάθε ομάδα πρέπει να είναι όσο το δυνατόν μεγαλύτερη.



3.5. Decision Tree: Τα δέντρα αποφάσεων είναι ένας τύπος εποπτευόμενου αλγορίθμου μάθησης που χρησιμοποιείται τόσο για εργασίες ταξινόμησης όσο και για εργασίες παλινδρόμησης. Είναι ισχυροί αλγόριθμοι που χρησιμοποιούν ένα μοντέλο αποφάσεων που μοιάζει με δέντρο και τις πιθανές συνέπειές τους για να προσδιορίσουν την βέλτιστη πορεία δράσης. Το δέντρο αποφάσεων αποτελείται από μια σειρά ερωτήσεων που μπορούν να χρησιμοποιηθούν για την ταξινόμηση ενός δεδομένου στοιχείου.

Ένα παράδειγμα είναι ένα δέντρο αποφάσεων που χρησιμοποιείται για ιατρική διάγνωση, όπου οι ερωτήσεις που τίθενται θα σχετίζονται με τα συμπτώματα και το ιατρικό ιστορικό του ασθενούς. Οι απαντήσεις σε αυτές τις ερωτήσεις θα ήταν είτε ναι είτε όχι και το δέντρο απόφασης θα παράγει μια διάγνωση για την κατάσταση του ασθενούς.

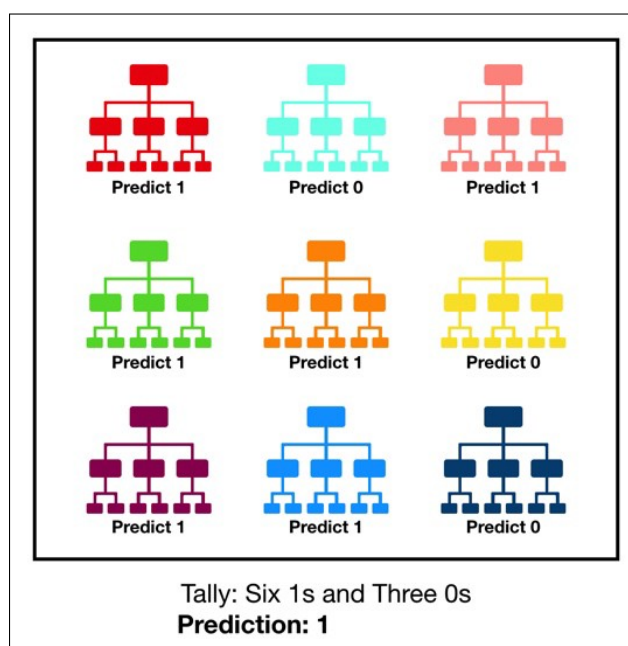
Παράδειγμα:



3.6. Random Forests: Τα Random Forests είναι ένας τύπος αλγόριθμου μηχανικής εκμάθησης συνόλου. Αυτό σημαίνει ότι αποτελείται από πολλά διαφορετικά μοντέλα δέντρων αποφάσεων που συνδυάζονται για να κάνουν προβλέψεις. Ο στόχος ενός Random Forests είναι να δημιουργήσει ένα ακριβές μοντέλο που μπορεί να γενικεύει καλύτερα τα δεδομένα και να κάνει καλύτερες προβλέψεις από ένα δέντρο μεμονωμένων αποφάσεων.

Ξερισμοποιούν μια τεχνική που ονομάζεται **bagging** η οποία λειτουργεί επιλέγοντας τυχαία ένα υποσύνολο δεδομένων για να εκπαιδεύσει κάθε μεμονωμένο δέντρο αποφάσεων. Αυτό γίνεται έτσι ώστε κάθε δέντρο να μπορεί να εκπαιδευτεί σε διαφορετικά δεδομένα, με αποτέλεσμα ένα καλύτερο μοντέλο συνολικά. Τα αποτελέσματα κάθε δέντρου στη συνέχεια συνδυάζονται για να παραχθεί μια τελική πρόβλεψη.

Τα Random Forests χρησιμοποιούνται ευρέως σε πολλούς τύπους εφαρμογών, όπως στην ιατρική απεικόνιση για την ανίχνευση όγκων και στη βιοπληροφορική για την ταξινόμηση αλληλουχιών DNA.



4. Hyperparameter Tuning

Ο συντονισμός υπερπαραμέτρων είναι η διαδικασία επιλογής του καλύτερου συνόλου υπερπαραμέτρων για έναν αλγόριθμο μηχανικής μάθησης προκειμένου να επιτευχθεί η καλύτερη απόδοση σε μια δεδομένη εργασία.

Οι υπερπαραμέτροι είναι μεταβλητές που ορίζονται πριν από την έναρξη της μαθησιακής διαδικασίας και έχουν σημαντικό αντίκτυπο στην απόδοση του μοντέλου. Ο συντονισμός αυτών των μεταβλητών μπορεί να βοηθήσει στην εύρεση του βέλτιστου μοντέλου για ένα δεδομένο πρόβλημα.

Το Hyperparameter Tuning γίνεται πάντα στο σύνολο των δεδομένων εκπαίδευσης.

5. Αξιολόγηση των ταξινομητών

Για την αξιολόγηση χρησιμοποιήθηκε η μέθοδος **Leave One Subject Out** και ως μετρικές αξιολόγησης τα κριτήρια της Ισορροπημένης Ακρίβειας (Balanced Accuracy), Ευαισθησίας (Sensitivity), Ειδικότητας (Specificity), AUC και F1 score.

Η μέθοδος **Leave One Subject Out** είναι ένας τύπος μεθοδολογίας διασταυρούμενης επικύρωσης όπου ένα σημείο δεδομένων (ή υποκείμενο) μένει εκτός του συνόλου δεδομένων εκπαίδευσης και χρησιμοποιείται ως σύνολο δεδομένων επικύρωσης. Αυτό γίνεται για να διασφαλιστεί ότι το μοντέλο δεν ταιριάζει υπερβολικά δοκιμάζοντας τα δεδομένα που χρησιμοποιήθηκαν για την εκπαίδευση του μοντέλου (φαινόμενο **overfitting**).

Αυτή η μέθοδος χρησιμοποιείται συνήθως στην ιατρική έρευνα για την αξιολόγηση της απόδοσης των μοντέλων σε δεδομένα που συλλέγονται από διαφορετικά άτομα και ταιριάζει απόλυτα με την φύση του προβλήματος μας.

Μετρικές Αξιολόγησης:

5.1. Balanced Accuracy: Η ισορροπημένη ακρίβεια είναι μια μέτρηση απόδοσης για εργασίες ταξινόμησης που λαμβάνει υπόψη την ανισορροπία των κλάσεων στο σύνολο δεδομένων. Υπολογίζεται λαμβάνοντας τον μέσο όρο των βαθμολογιών ανάκλησης για κάθε τάξη, όπου κάθε βαθμολογία ανάκλησης είναι ο αριθμός των αληθινών θετικών διαιρεμένων με το άθροισμα των αληθινών θετικών και των ψευδώς αρνητικών. Η ισορροπημένη ακρίβεια χρησιμοποιείται για την αξιολόγηση της απόδοσης ενός μοντέλου στην ακριβή πρόβλεψη των διαφορετικών κλάσεων και μπορεί να βοηθήσει στον εντοπισμό προβλημάτων με προκατάληψη ή ανισορροπία κατηγορίας.

5.2. Sensitivity: Η ευαισθησία είναι ένα μέτρο της ακρίβειας ενός μοντέλου στη σωστή πρόβλεψη θετικών αποτελεσμάτων. Υπολογίζεται ως ο αριθμός των αληθινών θετικών περιπτώσεων (**true positives**) διαιρεμένος με τον συνολικό αριθμό των θετικών περιπτώσεων (αληθινό θετικό συν ψευδώς αρνητικό - **true positives and false negatives**). Είναι ένα μέτρο του πόσο καλά ένα μοντέλο είναι σε θέση να προσδιορίσει θετικά αποτελέσματα.

5.3. Specificity: Η ειδικότητα (ονομάζεται επίσης πραγματικός αρνητικός ρυθμός) είναι ένα μέτρο της ακρίβειας ενός μοντέλου στη σωστή πρόβλεψη των αρνητικών αποτελεσμάτων. Είναι η αναλογία των αληθινών αρνητικών (**true negatives**) από όλες τις αρνητικές προβλέψεις που γίνονται από το μοντέλο. Με άλλα λόγια, είναι η αναλογία των αληθινών αρνητικών σε όλα τα πραγματικά αρνητικά (**true negatives and false positives**). Συνήθως εκφράζεται ως ποσοστό, με το υψηλότερο να είναι καλύτερο.

5.4. AUC: Το AUC (Area Under Curve) είναι μια μέτρηση που χρησιμοποιείται για τη μέτρηση της ακρίβειας ενός μοντέλου δυαδικής ταξινόμησης. Είναι η περιοχή κάτω από την καμπύλη Λειτουργικού Χαρακτηριστικού Δέκτη (ROC), η οποία απεικονίζει τον πραγματικό θετικό ρυθμό (**true positives**) (ευαισθησία) έναντι του ψευδώς θετικού ποσοστού ($1 - \text{ειδικότητα}$). Η AUC είναι ένα μέτρο του πόσο καλά ένα μοντέλο μπορεί να διακρίνει δύο κατηγορίες (π.χ. μια θετική και μια αρνητική κατηγορία). Οι τιμές AUC κυμαίνονται από 0,5 έως 1,0, με μια υψηλότερη τιμή να υποδηλώνει καλύτερο μοντέλο.

5.5. F1 score: Το F1 score είναι ένα μέτρο ακρίβειας για προβλήματα ταξινόμησης. Είναι το αρμονικό μέσο ακρίβειας και ανάκλησης. Υπολογίζεται λαμβάνοντας τον αρμονικό μέσο όρο της ακρίβειας και της ανάκλησης ενός μοντέλου. Το F1 score είναι ο σταθμισμένος μέσος όρος ακρίβειας και ανάκλησης, όπου η καλύτερη τιμή της είναι το 1 (τέλεια ακρίβεια και ανάκληση) και τη χειρότερη το 0.

Η ακρίβεια ποσοτικοποιεί τον αριθμό των προβλέψεων θετικών κλάσεων που ανήκουν στην πραγματικότητα στη θετική κλάση. Η ανάκληση ποσοτικοποιεί τον αριθμό των θετικών προβλέψεων κλάσεων που γίνονται από όλα τα θετικά παραδείγματα στο σύνολο δεδομένων.

Το **F1 score** παρέχει μια ενιαία βαθμολογία που εξισορροπεί τόσο τις ανησυχίες της ακρίβειας όσο και της ανάκλησης.

6. Ερμηνευσιμότητα των μοντέλων

Στο πλαίσιο της μηχανικής μάθησης, η ερμηνευσιμότητα του μοντέλου μας βοηθά να κατανοήσουμε πώς αυτό έχει λάβει μια συγκεκριμένη απόφαση.

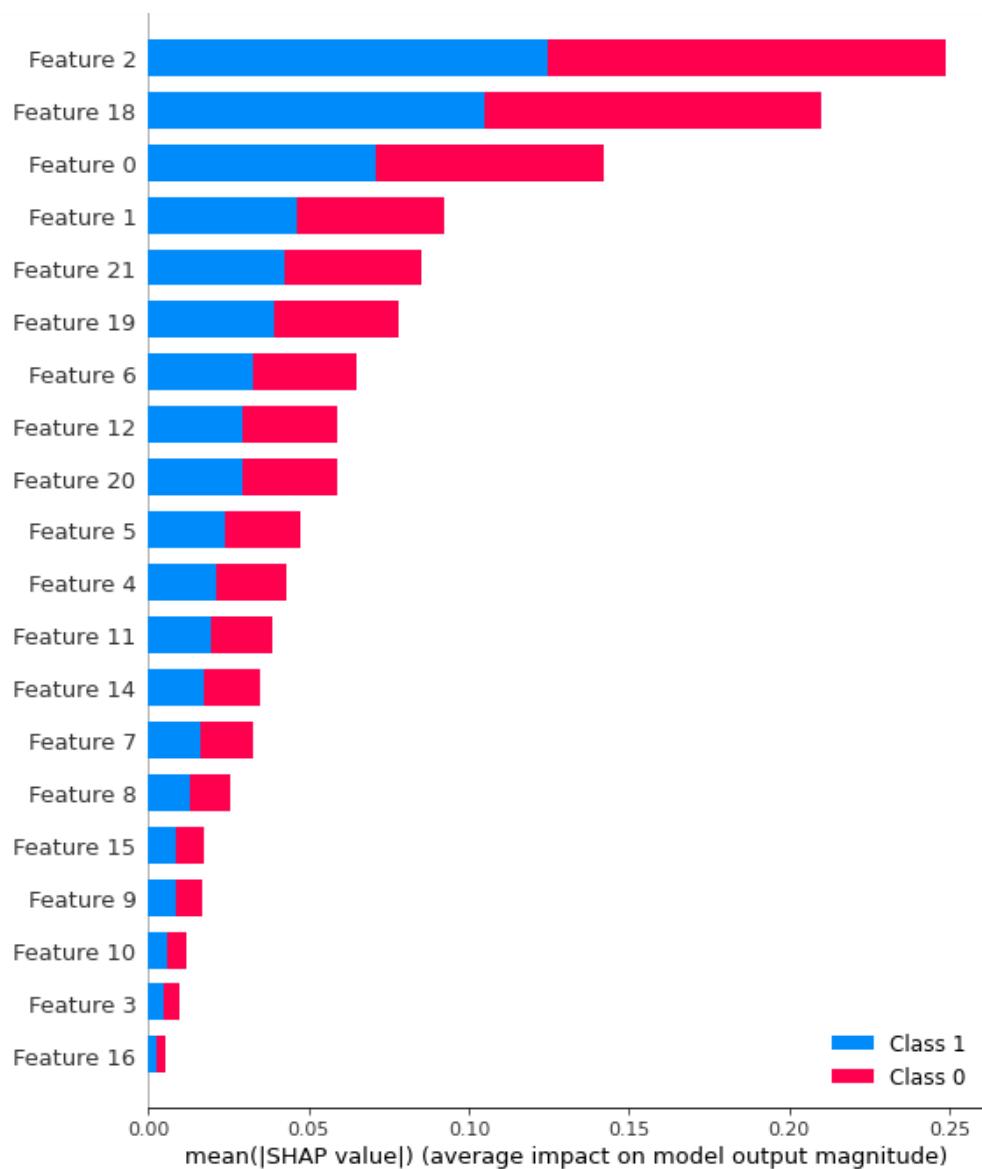
Το μοντέλο μας θα πρέπει να είναι ερμηνεύσιμο και θα πρέπει επίσης να εμφανίζει τα ακόλουθα χαρακτηριστικά:

- **Δικαιοσύνη - Διασφάλιση** ότι οι προβλέψεις είναι αμερόληπτες και δεν κάνουν έμμεσα ή ρητά διακρίσεις σε βάρος προστατευόμενων ομάδων. Ένα ερμηνεύσιμο μοντέλο μπορεί να σας πει γιατί αποφάσισε ότι ένα συγκεκριμένο άτομο δεν πρέπει να λάβει δάνειο και γίνεται ευκολότερο για έναν άνθρωπο να κρίνει εάν η απόφαση βασίζεται σε μια μαθημένη δημογραφική (π.χ. φυλετική) προκατάληψη.
- **Απόρρητο - Διασφάλιση** ότι οι ευαίσθητες πληροφορίες στα δεδομένα προστατεύονται.
- **Αξιοπιστία ή ευρωστία - Διασφάλιση** ότι μικρές αλλαγές στην είσοδο δεν οδηγούν σε μεγάλες αλλαγές στην πρόβλεψη.
- **Αιτιοκρατία - Έλεγχος** ότι επιλέγονται μόνο αιτιακές σχέσεις.
- **Εμπιστοσύνη - Είναι** πιο εύκολο για τους ανθρώπους να εμπιστεύονται ένα σύστημα που εξηγεί τις αποφάσεις του σε σύγκριση με ένα μαύρο κουτί.

Η **Shapley Method** είναι μια μέθοδος ερμηνείας για την κατανόηση της συμβολής κάθε χαρακτηριστικού σε ένα μοντέλο και γενικότερα για την ερμηνεία των αποτελεσμάτων του μοντέλου. Οι τιμές **Shapley** λαμβάνουν υπόψη την αλληλεπίδραση μεταξύ διαφορετικών χαρακτηριστικών, επιτρέποντας μια πιο λεπτή κατανόηση των προβλέψεων ενός μοντέλου. Αυτή η μέθοδος βοηθά στον εντοπισμό των σημαντικών χαρακτηριστικών για την πρόβλεψη ενός δεδομένου αποτελέσματος και στον εντοπισμό τυχόν προκατάληψης ή αδικίας που μπορεί να υπάρχει στο μοντέλο.

Εμπνευσμένοι από διάφορες μεθόδους σχετικά με την ερμηνευσιμότητα των μοντέλων, οι **Lundberg, Lee (2016)** πρότειναν την τιμή **SHAP** ως μια ενιαία προσέγγιση για την εξήγηση των παραγόμενων αποτελεσμάτων οποιουδήποτε μοντέλου μηχανικής μάθησης. Τρία οφέλη που αξίζει να αναφέρουμε εδώ:

- **καθολική ερμηνευσιμότητα** — οι συλλογικές τιμές **SHAP** μπορούν να δείξουν πόσο συνεισφέρει κάθε προγνωστικός παράγοντας, είτε θετικά είτε αρνητικά, στη μεταβλητή στόχο (στην δική μας περίπτωση στο **status** του ασθενή).
- **τοπική ερμηνευσιμότητα** — κάθε παρατήρηση λαμβάνει το δικό της σύνολο τιμών **SHAP**. Αυτό αυξάνει σημαντικά τη διαφάνειά του. Οι παραδοσιακοί αλγόριθμοι δείχνουν τα αποτελέσματα μόνο σε ολόκληρο τον πληθυσμό αλλά όχι σε κάθε μεμονωμένη περίπτωση. Η τοπική ερμηνευτικότητα μας δίνει τη δυνατότητα να εντοπίσουμε και να αντιπαραβάλλουμε τις επιπτώσεις κάθε παράγοντα.
- οι τιμές **SHAP** μπορούν να υπολογιστούν για οποιοδήποτε μοντέλο που βασίζεται σε δέντρα, ενώ άλλες μέθοδοι χρησιμοποιούν μοντέλα γραμμικής παλινδρόμησης ή λογιστικής παλινδρόμησης ως υποκατάστατα μοντέλα.



Σχήμα 1: Ολική Ερμηνευσιμότητα

Παρακάτω φαίνεται η εφαρμογή της μεθόδου Shapley (use of python module shap) για την καθολική ερμηνευσιμότητα.

Παρατηρούμε πως το **feature 2** (3η στήλη του συνόλου δεδομένων), άρα το MDVP:Jitter(%) έχει την μεγαλύτερη επιρροή στην έξοδο. Ακολουθεί το **feature 18-DFA**.

7. Αποτελέσματα

Η παρακάτω εικόνα απεικονίζει τις τιμές των κριτηρίων αξιολόγησης που μας ζητούνταν να εξετάσουμε. Βλέπουμε πως σε γενικές γραμμές τα μοντέλα έχουν παρόμοιες επιδόσεις.

Η ισορροπημένη ακρίβεια είναι μια μέτρηση απόδοσης για εργασίες ταξινόμησης που λαμβάνει υπόψη την ανισορροπία των κλάσεων στο σύνολο δεδομένων. Βλέπουμε πως οι Μηχανές Διανυσμάτων υποστήριξης έχουν την υψηλότερη απόδοση και ακολουθούν τα τυχαία δάση. Παρατηρούμε, επίσης, πως η ευαισθησία έχει αρκετά χαμηλές τιμές που σημαίνει ότι το μοντέλο δεν μπορεί να προβλέψει σωστά τα **true positives**. Η ειδικότητα έχει καλύτερες τιμές, άρα μπορούμε να προβλέψουμε με καλύτερη ακρίβεια τα **false positives**.

Μέσω της μετρικής AUC αποδυνκνείται πως τα μοντέλα μας δεν μπορούν να διαχωρίσουν στιγμιότυπα των δύο κλάσεων. Αυτό πράγματι ισχύει, αφού όλα τα στιγμιότυπα ταξινομούνται ως ασθενείς.

Το F1 Score είναι σε ικανοποιητικά επίπεδα σε όλους τους ταξινομητές.

Classifier	Balanced Accuracy	Sensitivity	Specificity	AUC	F1 Score
Multilayer Perceptron	0.750 +/- 0.440	0.000 +/- 0.000	0.000 +/- 0.000	0.000 +/- 0.000	0.750 +/- 0.440
TabNet	0.260 +/- 0.436	0.800 +/- 0.422	1.000 +/- 0.000	0.000 +/- 0.000	0.018 +/- 0.070
KNN	0.755 +/- 0.359	0.143 +/- 0.356	0.562 +/- 0.512	0.000 +/- 0.000	0.695 +/- 0.428
SVM	0.807 +/- 0.347	0.143 +/- 0.356	0.364 +/- 0.505	0.000 +/- 0.000	0.722 +/- 0.434
Decision Tree	0.781 +/- 0.365	0.179 +/- 0.390	0.538 +/- 0.519	0.000 +/- 0.000	0.698 +/- 0.446
Random Forests	0.792 +/- 0.349	0.143 +/- 0.356	0.538 +/- 0.519	0.000 +/- 0.000	0.720 +/- 0.427

Σχήμα 2: Metrics

Επομένως, ένας αρκετά καλός ταξινομητής είναι οι μηχανές Διανυσμάτων υποστήριξης. Για κάποιο λόγο το μοντέλο βαθιάς μάθησης έχει περίεργα αποτελέσματα. Η δυαδικότητα των κλάσεων μας προϊδεάζει ότι μάλλον έχουν οριστεί ανάποδα οι κλάσεις. Σε περίπτωση που ισχύει ο ισχυρισμός μου τότε το πιο ακριβές μοντέλο είναι το TabNet .

Στον παρακάτω πίνακα φαίνονται αναλυτικά όλοι οι υπερπαραμέτροι κάθε μεθόδου που προ-έκυψαν μετά το **tuning**. Για παράδειγμα, το **Multilayer Perceptron**, όπως βλέπουμε έχει συνολικά 4 επίπεδα, με το πρώτο να είναι το επίπεδο εισόδου και το τελευταίο η έξοδος.

Classifier	Hyperparameters
Multilayer Perceptron	units_input: 41 dropout_input: 0.1 num_layers: 4 units_0: 21 dropout_0: 0.30000000000000004 learning_rate: 0.01 tuner/epochs: 10 tuner/initial_epoch: 4 tuner/bracket: 2 tuner/round: 2 units_1: 1 dropout_1: 0.0 units_2: 1 dropout_2: 0.0 units_3: 1 dropout_3: 0.0 Score: 0.78125
TabNet	No hyperparameter tuning
KNN	metric: manhattan, n_neighbors: 5, weights: distance
SVM	C: 100, degree: 1, kernel: rbf
Decision Tree	criterion: entropy, max_depth: 2, min_samples_leaf: 20
Random Forests	n_estimators: 20, min_samples_split: 2, min_samples_leaf: 1, max_features: sqrt, max_depth: 70, bootstrap: False

Σχήμα 3: Hyperparameters

8. Παρατηρήσεις

Παρατηρούμε πως όλοι οι ταξινομητές έχουν κατά μέσο όρο 80% ακρίβεια για την πρόβλεψη της κατάστασης του ασθενή.

Αυτό είναι απολύτως αναμενόμενο, αφού τα δεδομένα μας είναι μη ισορροπημένα. Αυτό σημαίνει ότι το σύνολο δεδομένων μας περιλαμβάνει πολλά περισσότερα στιγμιότυπα που ανήκουν στην μία κλάση σε σχέση με τα στιγμιότυπα που ανήκουν στην άλλη κλάση. Πράγματι, το **dataset** μας περιλαμβάνει συνολικά μετρήσεις από 31 άτομα και τα 23 από αυτά έχουν την νόσο.

Επίσης, βλέπουμε πως όλα τα μοντέλα δεν καταφέρνουν να προβλέψουν σωστά τα υγιή άτομα, δηλαδή προβλέπουν ότι όλοι είναι ασθενείς, γεγονός που εξηγεί την αδυναμία όλων των αλγορίθμων να προβλέψουν σωστά τα υγιή άτομα.

Έπειτα από λίγη έρευνα αυτό το πρόβλημα μπορεί να λυθεί με χρήση συγκεκριμένων τεχνικών όπως **class weighting**, **oversampling**.

- **class weighting** - τεχνική που χρησιμοποιείται για την αντιμετώπιση μη ισορροπημένων δεδομένων, όπου μια τάξη είναι πολύ πιο κυρίαρχη από άλλες. Λειτουργεί με την ανάθεση υψηλότερου βάρους σε υποεκπροσωπούμενες κλάσεις, ώστε να λαμβάνεται υπόψη η σημασία τους κατά την διαδικασία εκπαίδευσης. Αυτό ενθαρρύνει το μοντέλο να μάθει από τις μειονοτικές τάξεις πιο αποτελεσματικά.
- **oversampling** - η υπερδειγματοληψία είναι μια άλλη τεχνική για την αντιμετώπιση μη ισορροπημένων δεδομένων. Λειτουργεί δημιουργώντας αντίγραφα των παρουσιών της κατηγορίας μειοψηφίας για να αυξήσει την αναπαράστασή τους στο σύνολο δεδομένων. Αυτό βοηθά το μοντέλο να αναγνωρίσει καλύτερα τα πρότυπα και τα χαρακτηριστικά της μειονοτικής τάξης.

Και οι δύο αυτές τεχνικές είναι αποτελεσματικοί τρόποι αντιμετώπισης μη ισορροπημένων συνόλων δεδομένων και μπορούν να βοηθήσουν στη βελτίωση της ακρίβειας των προβλέψεων ενός μοντέλου.

Βέβαια, οι τεχνικές αυτές προτείνονται όταν δεν υπάρχει δυνατότητα παροχής ισορροπημένων δεδομένων, δηλαδή παρεμφερή αριθμό στιγμιότυπων από κάθε κλάση.

Τέλος, όλος ο κώδικας που αναπτύχθηκε βρίσκεται μέσα στον φάκελο **src** και επίσης στο αρχείο **common.py** περιλαμβάνονται κοινές ρουτίνες που χρησιμοποιούνται σε όλες τις μεθόδους (πχ εισαγωγή δεδομένων, **leave one subject out** και αξιολόγηση ταξινομητών).

9. Πηγές

[A Unified Approach to Interpreting Model Predictions](#)

[Support Vector Machines](#)

[TabNet](#)

[Multilayer Perceptron](#)

[Random Forests](#)

[Imbalanced Data](#)

[leave-one-person-out Cross Validation](#)

[Shapley Values](#)

[Explain Your Model with the SHAP Values](#)