



Politechnika Łódzka

Wydział Fizyki Technicznej, Informatyki
i Matematyki Stosowanej

Praca końcowa

Klasyfikacja bólów głowy z wykorzystaniem algorytmów uczenia maszynowego*

Konrad Pławik

Promotor:
dr hab. inż. Agnieszka Wosiak

Czerwiec 2024

* SVN: <https://github.com/kplawik/HeadacheClassification>

Spis treści

| | |
|--|----|
| 1. Wstęp | 3 |
| 2. Dane | 4 |
| 2.1. Zbiór danych | 4 |
| 2.2. Informacje prawne | 4 |
| 3. Wstęp teoretyczny | 6 |
| 3.1. Klasyfikacja | 6 |
| 3.1.1. Klasyfikator kNN (k-najbliższych sąsiadów) | 6 |
| 3.1.2. Naiwny Klasyfikator Bayesa | 6 |
| 3.1.3. SVM - Maszyna Wektorów Nośnych | 7 |
| 3.2. Ewaluacja modelu klasyfikacyjnego | 8 |
| 3.2.1. Macierz pomyłek | 8 |
| 3.2.2. Walidacja krzyżowa | 8 |
| 3.2.3. Pozostałe podstawowe metryki | 8 |
| 3.3. Sztuczne sieci neuronowe | 8 |
| 3.3.1. Perceptron wielowarstwowy | 8 |
| 3.3.2. Sieci głębokie | 9 |
| 3.3.3. Funkcja aktywacji softmax | 9 |
| 4. Techniki LIME i SHAP | 10 |
| 4.1. LIME (Local Interpretable Model-agnostic Explanations) | 10 |
| 4.1.1. LIME dla danych tabelarycznych i klasyfikacji wieloklasowej | 11 |
| 4.2. SHAP (SHapley Additive exPlanations) | 12 |
| 4.2.1. Zalety | 14 |
| 4.2.2. Wady | 15 |
| 5. Eksperymenty | 16 |
| 5.1. Klasyfikacja kNN - dobór liczby sąsiadów | 16 |
| 5.2. Klasyfikacja kNN | 16 |
| 5.2.1. Wyniki | 17 |
| 5.3. Klasyfikacja Naiwnym Klasyfikatorem Bayesa | 17 |
| 5.3.1. Wyniki | 18 |
| 5.4. Selekcja i ekstrakcja cech | 19 |
| 5.4.1. Wyniki | 19 |
| 5.5. Perceptron wielowarstwowy | 20 |
| 5.5.1. Wyniki | 20 |
| 5.6. Sieć głęboka z funkcją aktywacji Softmax | 21 |
| 5.6.1. Wyniki | 23 |
| 5.7. Prezentacja możliwości technik LIME dla NKB | 24 |
| 5.8. Prezentacja możliwości technik SHAP dla NKB | 27 |
| 5.9. Prezentacja możliwości technik SHAP dla sieci głębokiej | 30 |
| 6. Wnioski | 34 |
| 6.1. Podsumowanie | 34 |
| 6.2. Wnioski ogólne | 35 |
| Spis rysunków | 36 |
| Literatura | 36 |

1. Wstęp

Bóle głowy bywają trudne do sklasyfikowania. O ile z obserwacji własnych miałem niestety okazję się o tym przekonać to nawet i świat nauki od lat również boryka się z tym problemem. Brytyjski instytut znany jako Headache Classification Committee of the International Headache Society (IHS) rozróżnia 13 kategorii bólów głowy - a samej tylko migreny - 29 typów [1]. Co więcej instytut ten wyraźnie mówi o tym że pacjent może cierpieć na więcej niż jeden z rodzaj ([1] punkt 9 we wstępie). Badania przeprowadzone przez EHF (European Headache Federation) [2] również potwierdzają że dominujący ból głowy nie musi być jedynym [3].

W pomocą przychodzi nam zagadnienie Uczenia Maszynowego oraz powiązane z nim algorytmy klasyfikacyjne. Poniższa praca dokumentuje wyniki kilkudziesięciu eksperymentów mających na celu automatyczną klasyfikację przy użyciu zarówno algorytmów regresyjnych (np. kNN) jak i głębokich Sieci Neuronowych (Deep Learning).

2. Dane

2.1. Zbiór danych

Wykorzystany zbiór danych pozyskano z serwisu `codeocean.com` [4]. Zbiór ten udostępniona na licencji GNU General Public License (GPL) a jego autorami są:

1. Paola A. Sánchez-Sánchez
2. José Rafael García-González
3. Juan Manuel Rua Ascar.

Cała trójka z pochodzi Universidad Simón Bolívar, Barranquilla w Kolumbii.

Zbiór zawierał anonimowe dane 400 rozpoznanych przypadków a każdy z przypadków 23 cechy. Cechy miały różny typ (np. wiek pacjenta (typ całkowity) czy wystąpienie danego objawu (typ binarny)) co przemawiało za użyciem normalizacji przy użyciu MinMaxScalera z biblioteki Scikit-learn.

W zbiorze znajdowały się dane dotyczące 7 rodzajów bólu głowy. Zbiór nie był zbiorem zbalansowanym (co należy mieć na uwadze w dalszej analizie):

| Type | |
|-------------------------------|-----|
| Basilar-type aura | 18 |
| Familial hemiplegic migraine | 24 |
| Migraine without aura | 60 |
| Other | 17 |
| Sporadic hemiplegic migraine | 14 |
| Typical aura with migraine | 247 |
| Typical aura without migraine | 20 |

dtype: int64

Zbiór nie posiadał brakujących danych więc nie zaistniała konieczność imputacji.

2.2. Informacje prawne

Zbiór udostępniony został na licencji GNU General Public License (GPL) [4].

Wykorzystane oprogramowanie korzystało z licencji:

- Język Python: Python Software Foundation License [5]
- Biblioteka Pandas: BSD 3-Clause License [6]
- Biblioteka NumPy: BSD 3-Clause License [7]
- Biblioteka Seaborn: BSD 3-Clause License [8]
- Biblioteka TensorFlow: Apache License 2.0 [9]

Wspomniane biblioteki zostały szczegółowo opisane w następujących publikacjach naukowych:

- Język Python [10]
- Pandas: <https://zenodo.org/records/10957263> [11]
- NumPy: <https://www.nature.com/articles/s41586-020-2649-2> [12]

Seaborn: <https://joss.theoj.org/papers/10.21105/joss.03021> [13]
TensorFlow: <https://zenodo.org/records/10798587> [14]

3. Wstęp teoretyczny

3.1. Klasyfikacja

3.1.1. Klasyfikator kNN (k-najbliższych sąsiadów)

Klasyfikator kNN [15], ze względu na swoją intuicyjność, jest jednym z najpopularniejszych klasyfikatorów. Działa on zgodnie z regułą: obserwacja x zostaje sklasyfikowana do najliczniejszej klasy z pośród k obserwacji najbliższych punktowi x .

Szacowane prawdopodobieństwo przynależności obserwacji x do danej klasy wśród x najbliższych sąsiadów, zapisujemy jako:

$$\hat{j}|\mathbf{x} = \frac{1}{k} \sum_{i=1}^n l(\rho(\mathbf{x}, \mathbf{x}_i) \leq \rho(\mathbf{x}, \mathbf{x}^{(k)})) l(y_i = j), \quad j = 1, \dots, g \quad (1)$$

gdzie:

$x^{(k)}$ - jest k -tym co do odległości x punktem z próby uczącej

ρ - jest pewną odległością, określaną jako miara niepodobieństwa.

3.1.2. Naiwny Klasyfikator Bayesa

Jest klasyfikatorem probabilistycznym [15], który opiera się na użyciu twierdzenia.

$$P(C|F_1, \dots, F_n) \quad (2)$$

gdzie:

C - oznacza zmienną zależną, będącą zbiorem etykiet klas

F_1, \dots, F_n - cechami opisującymi zbiór przypadków.

Korzystając z twierdzenia Bayesa, które mówi że dla dowolnej hipotezy $h \in \mathcal{H}$ oraz zbioru danych D zachodzi równość:

$$P(h|D) = \frac{P(h)P(D|h)}{P(D)} \quad (3)$$

oraz niezależności warunkowej cech F_i oraz F_j dla $i \neq j$ otrzymujemy:

$$P(F_i|C, F_j) = P(F_i|C) \quad (4)$$

Co ostatecznie daje:

$$P(C|F_1, \dots, F_n) = \frac{1}{Z} P(C) \prod_{i=1}^n P(F_i|C) \quad (5)$$

przy czym Z oznacza współczynnik skalujący, zależny od atrybutów F_1, \dots, F_n i ustalony w przypadku znanych wartości atrybutów cech.

Zatem wynik działania naiwnego klasyfikatora bayesowskiego można zapisać jako:

$$\text{klasa}(f_1, \dots, f_n) = \arg \max_c P(C = c) \prod_{i=1}^n P(F_i = f_i | C = c) \quad (6)$$

3.1.3. SVM - Maszyna Wektorów Nośnych

Maszyna Wektorów Nośnych (Maszyna Wektorów Wspierających) [15] jest to abstrakcyjny koncept maszyny, która działa jak klasyfikator, a której nauka ma na celu wyznaczenie hiperpłaszczyzny rozdzielającej z maksymalnym marginesem przykłady należące do dwóch klas. [16]

Zadanie sprowadza się do znalezienia granicy decyzyjnej między klasami i związane jest z pojęciem separowalności liniowej, zgodnie z którym dwie klasy są liniowo separowalne, gdy istnieje hiperpłaszczyzna H postaci $g(x)$ wyrażona równaniem:

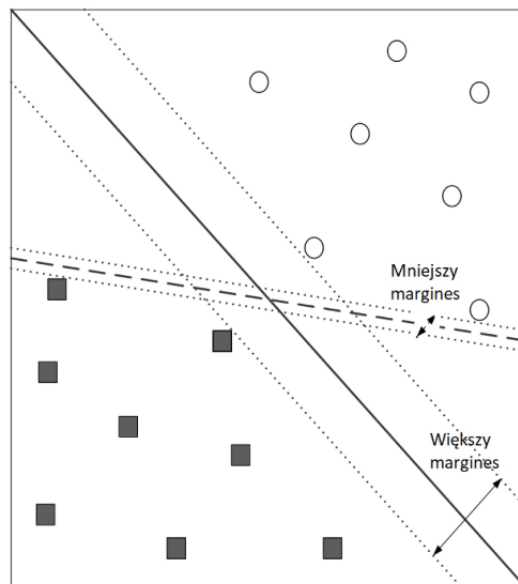
$$g(\mathbf{x}) = \mathbf{w}^T \mathbf{x} + b. \quad (7)$$

przyjmująca wartości:

$$\begin{cases} g(\mathbf{x}_i) > 0 & \text{jeśli } \mathbf{x}_i \in 1, \\ g(\mathbf{x}_i) < 0 & \text{jeśli } \mathbf{x}_i \in -1 \end{cases} \quad (8)$$

gdzie: \mathbf{x} - oznacza wektor danych, zaś \mathbf{w} oraz b są parametrami modelu.

W rezultacie można uzyskać zbiór wielu możliwych rozwiązań (czyli hiperpłaszczyzn), z których wybierane jest takie, które maksymalizuje margines klasyfikatora liniowego:



Rysunek 1. Schemat działania SVM

Powyższy rysunek przedstawia uproszczony schemat działania SVM - źródło: materiały wykładowe.

3.2. Ewaluacja modelu klasyfikacyjnego

3.2.1. Macierz pomyłek

Macierz pomyłek (błędów, ang. confusion matrix) [15], inaczej określana mianem tablicy kontyngencji (ang. contingency table), prezentuje liczby przypadków należących do poszczególnych poprawnych klas decyzyjnych oraz tych, które są przewidywane.

W przypadku wielu etykiet macierz pomyłek jest macierzą kwadratową $m \times m$:

| | Class ₁ | Class ₂ | ... | Class _m |
|--------------------|--------------------|--------------------|----------|--------------------|
| Class ₁ | n_{11} | n_{12} | ... | n_{1m} |
| Class ₂ | n_{21} | n_{22} | ... | n_{2m} |
| \vdots | \vdots | \vdots | \vdots | \vdots |
| Class _m | n_{m1} | n_{m2} | ... | n_{mm} |

W klasyfikacji wieloklasowej oznaczamy często tylko jedną klasę jako pozytywną, a pozostałe łącznie definiujemy jako negatywne - sprowadzając problem do wielu klasyfikacji binarnych.

3.2.2. Walidacja krzyżowa

W związku z tym że wykorzystany wzór nie jest zbiorem zbyt licznych wartości zastosować tzn. walidację krzyżową (inaczej kroswalidację, ang. *cross-validation*).

1. K-krotna walidacja krzyżowa polega na podzieleniu całego zbioru przypadków na k rozłącznych i równolicznych części
2. Kolejno każda z tych części stanowi wydzielony zbiór testowy, a pozostałe $k-1$ - zbiór uczący.
3. Walidację przeprowadza się na każdej z k części zbioru, zaś wynik końcowy jest średnią z poszczególnych wyników częściowych.

3.2.3. Pozostałe podstawowe metryki

W pracy wykorzystano również: dokładność (*Accuracy*), precyzja (*Precision*), czułość (*Sensitivity*), specyficzność (*Specificity*) oraz predykcję klasy negatywnej (*Negative Predictive Value*).

3.3. Sztuczne sieci neuronowe

3.3.1. Perceptron wielowarstwowy

Perceptron wielowarstwowy (MLP, ang. *Multi-Layer Perceptron*) jest podstawowym typem sztucznej sieci neuronowej, który składa się z co najmniej trzech warstw: warstwy wejściowej, jednej lub więcej warstw ukrytych oraz warstwy wyjściowej. Każdy neuron w jednej warstwie jest połączony z każdym neuronem w warstwie następnej, co umożliwia przetwarzanie skomplikowanych wzorców i zależności. W przeciwieństwie do prostego perceptronu jednopoziomowego, MLP jest zdolny do rozwiązywania problemów, które

nie są liniowo separowalne. Proces uczenia w MLP opiera się na algorytmie wstecznej propagacji błędów, który minimalizuje błąd sieci poprzez dostosowanie wag połączeń między neuronami. Perceptrony wielowarstwowe są powszechnie stosowane w zadaniach takich jak klasyfikacja, regresja oraz rozpoznawanie wzorców. Ze względu na swoją elastyczność i moc obliczeniową, MLP stanowi fundament dla bardziej zaawansowanych struktur sieci neuronowych, takich jak sieci konwolucyjne i rekurencyjne. Jego zdolność do uczenia się nieliniowych relacji sprawia, że jest to narzędzie niezwykle użyteczne w szerokim zakresie zastosowań, od rozpoznawania obrazów po przetwarzanie języka naturalnego.

3.3.2. Sieci głębokie

Sieci głębokie (ang. Deep Neural Networks, DNN) to zaawansowane struktury sztucznych sieci neuronowych, które charakteryzują się dużą liczbą warstw ukrytych pomiędzy warstwą wejściową a wyjściową. Dzięki wielowarstwowej architekturze, sieci głębokie mogą modelować bardzo złożone i nieliniowe relacje w danych. Proces uczenia tych sieci wykorzystuje zaawansowane techniki, takie jak wsteczna propagacja błędów oraz optymalizatory gradientowe, które umożliwiają skuteczne dostosowanie wag neuronów. Sieci głębokie są niezwykle efektywne w zadaniach związanych z przetwarzaniem dużych ilości danych, takich jak rozpoznawanie obrazów, analiza dźwięku czy przetwarzanie języka naturalnego. Wprowadzenie warstw konwolucyjnych i rekurencyjnych w ramach sieci głębokich dodatkowo rozszerza ich możliwości, umożliwiając analizę sekwencji i wykrywanie istotnych wzorców w danych przestrzennych. Rozwój technologii sprzętowych, takich jak GPU, oraz technik takich jak dropout, znacząco przyczynił się do sukcesu i szerokiego zastosowania sieci głębokich. Dzięki swojej zdolności do automatycznego ekstraktowania cech i wysokiej dokładności predykcji, sieci głębokie stanowią fundament współczesnej sztucznej inteligencji i uczenia maszynowego.

3.3.3. Funkcja aktywacji softmax

Funkcja aktywacji softmax jest powszechnie stosowana w sieciach neuronowych, szczególnie w warstwach wyjściowych modeli klasyfikacyjnych, aby przekształcić surowe wartości wyjściowe neuronów w prawdopodobieństwa. Softmax przekształca wektor wartości rzeczywistych w wektor wartości, które sumują się do 1, co umożliwia interpretację wyniku jako rozkład prawdopodobieństwa między różnymi klasami. Wartości wyjściowe są eksponowane i następnie normalizowane, co podkreśla różnice między nimi i pomaga w dokładniejszej klasyfikacji. Dzięki swoim właściwościom, funkcja softmax jest idealna do zadań wieloklasowej klasyfikacji, gdzie model musi przypisać jedno z wielu możliwych oznaczeń do danego wejścia.

4. Techniki LIME i SHAP

Zagadnienia uczenia maszynowego postrzegane są niekiedy jako tzw. czarne skrzynki. Przekonanie to wzięło się z tego że, o ile prostsze modele są łatwo interpretowalne dla człowieka, o tyle te bardziej skomplikowane nie dają już żadnych wskazówek jakie cechy okazały się być decydujące jeśli chodzi o podjęte przez wybrany algorytm decyzje. Z pomocą przychodzą nam techniki SHAP i LIME. Pozwalają one na przybliżoną ocenę które z cech miały wpływ na wynik klasyfikacji.

4.1. LIME (Local Interpretable Model-agnostic Explanations)

Lokalne modele zastępcze to modele interpretowalne, które służą do wyjaśniania pojedynczych przewidywań modeli uczenia maszynowego działających jak "czarne skrzynki". Praca dotycząca lokalnych, agnostycznych względem modelu wyjaśnień interpretowalnych (LIME) proponuje konkretną implementację lokalnych modeli zastępczych. Modele zastępcze są trenowane w celu przybliżenia przewidywań leżącego u podstaw modelu "czarnej skrzynki". Zamiast trenować globalny model zastępczy, LIME skupia się na szkoleniu lokalnych modeli zastępczych, aby wyjaśnić indywidualne przewidywania.

Podejście jest dość intuicyjne. Najpierw zapominamy o danych treningowych i wyobrażamy sobie, że mamy tylko model "czarnej skrzynki", do którego możesz wprowadzać dane i otrzymywać przewidywania modelu. Możemy testować skrzynkę tak często, jak chcemy. Naszym celem jest zrozumienie, dlaczego model uczenia maszynowego dokonał pewnego przewidywania. LIME testuje, co dzieje się z przewidywaniami, gdy wprowadzasz do modelu uczenia maszynowego warianty swoich danych. LIME generuje nowy zestaw danych składający się z zakłóconych próbek i odpowiadających im przewidywań modelu "czarnej skrzynki". Na tym nowym zestawie danych a następnie trenuje model interpretowalny, który jest ważony przez bliskość próbek do analizowanego przypadku. Modelem interpretowalnym może być dowolny model z rozdziału o modelach interpretowalnych, na przykład Lasso lub drzewo decyzyjne. Nauczony model powinien być dobrą lokalną aproksymacją przewidywań modelu uczenia maszynowego, ale nie musi być dobrą aproksymacją globalną. Tego rodzaju dokładność nazywa się także lokalną wiernością.

Matematycznie, lokalne modele zastępcze z ograniczeniem interpretowalności można wyrazić następująco:

$$explanation(x) = \arg \min_{g \in G} L(f, g, \pi_x) + \Omega(g) \quad (9)$$

Model wyjaśniający dla instancji x to model g (np. model regresji liniowej), który minimalizuje stratę L (np. błąd średniokwadratowy), mierząc jak blisko wyjaśnienie jest do przewidywania oryginalnego modelu f (np. model xgboost), przy jednoczesnym zachowaniu niskiej złożoności modelu $\Omega(g)$

(np. preferowanie mniejszej liczby cech). G to rodzina możliwych wyjaśnień, na przykład wszystkie możliwe modele regresji liniowej. Miara bliskości π_x definiuje, jak duże sąsiedztwo wokół instancji x rozważamy dla wyjaśnienia. W praktyce LIME optymalizuje tylko część straty. Użytkownik musi określić złożoność, np. wybierając maksymalną liczbę cech, które może użyć model regresji liniowej. [17]

LIME może być stosowany zarówno dla danych tabelarycznych, obrazów oraz tekstu.

4.1.1. LIME dla danych tabelarycznych i klasyfikacji wieloklasowej

Dane tabelaryczne to dane przedstawione w tabelach, gdzie każdy wiersz reprezentuje jedną instancję, a każda kolumna - cechę. Próbkę LIME nie są pobierane wokół interesującej instancji, lecz z centralnej masy danych trenin-
gowych, co jest problematyczne. Jednakże zwiększa to prawdopodobieństwo, że wynik dla niektórych punktów próbki będzie różnił się od punktu danych, który nas interesuje (instancji), i że LIME będzie w stanie przynajmniej w pewnym stopniu wyjaśnić wynik klasyfikacji.

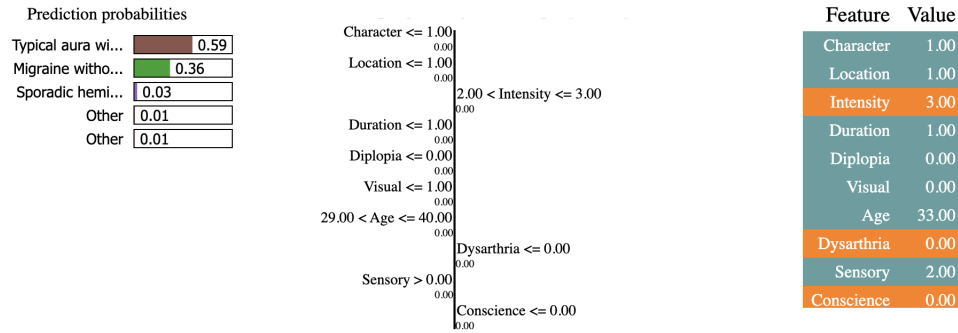
Dane użyte do wyjaśnienia techniką LIME nie powinny być normalizowane czy skalowane. Stanowi to pewnego rodzaju problem gdyż musimy budować nowy model (np. dla naiwnego klasyfikatora Bayesa) aby uniknąć pomyłki z tym bardziej optymalnym już znormalizowanym.

Po definicji explainera (w wolnym tłumaczeniu "wyjaśniacza"):

```
1 #Stworz explainer z danych treningowych (potrzebuje surowych,  
2                                           nieprzeskalowanych danych)  
3 explainer = LimeTabularExplainer(  
4     training_data=X_train.values, # nieprzeskalowane dane treningowe  
5     feature_names=df.columns[:-1].tolist(), # nazwy cech  
6     class_names=class_labels, # nazwy klas  
7     mode='classification' # dla zadania klasyfikacji  
8 )
```

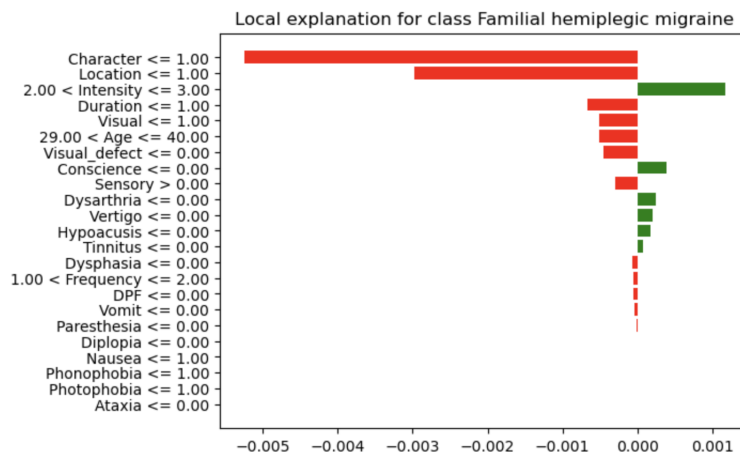
Listing 1. Definicja explainera

Następnie wybieramy instancję do interpretacji (najczęściej definiujemy iterator wskazujący na numer instancji w zbiorze testowym) i otrzymujemy graficzne wyjaśnienie podjętej przez algorytm decyzji:



Rysunek 2. Graficzna interpretacja decyzji modelu

Po stronie lewej widzimy tabelę podobieństwa do konkretnych klas. Po prawej wartości cech uszeregowane od najistotniejszych wg techniki LIME. Naj widzimy np. Po wartości wiersza "Age" dane nie są skalowane ani normalizowane. Na środku jest najistotniejszy element interpretacji, który akurat w naszym wypadku jest wyjątkowo nieczytelny ze względu na ograniczone możliwości skalowania osi. Natomiast istnieje jeszcze inna możliwość wyświetlenia tego wykresu:



Rysunek 3. Szczegółowy wykres istotności cech

Na osi pionowej widzimy nazwy cech wraz z przedziałami ich wartości dla analizowanej instancji. Na osi poziomej widzimy orientacyjną wartość na cecha ta wpływała na wynik - zarówno jeśli cecha świadczyła za przynależnością do klasy (wartości dodatnie oznaczone na zielono) jak i wpływ cech przeciw klasyfikacji (ujemne wartości oznaczone na czerwono). Dla czytelności wybrałem tabelę z innego przykładu. Widzimy jak pomiędzy obrazkiem nr 3 pokrywają się cechy z lewej i prawej strony osi wobec tego widzimy skróconej interpretacji z obrazka nr 2.

4.2. SHAP (SHapley Additive exPlanations)

Celem SHAP jest wyjaśnienie prognozy instancji x poprzez obliczenie wkładu każdej cechy do prognozy. Metoda wyjaśniająca SHAP oblicza war-

tości Shapleya z teorii gier koalicyjnych. Wartości cech danej instancji danych działają jak gracze w koalicji. Wartości Shapleya mówią nam, jak sprawiedliwie rozdzielić „wypłatę” (= prognozę) między cechy. Graczem może być pojedyncza wartość cechy, np. dla danych tabelarycznych. Graczem może być także grupa wartości cech. Na przykład, aby wyjaśnić obraz, piksele można grupować w superpiksele i rozdzielić prognozę między nie. Jedną z innowacji, które wnosi SHAP, jest to, że wyjaśnienie wartości Shapleya jest przedstawiane jako addytywna metoda atrybucji cech, model liniowy. Ta perspektywa łączy LIME i wartości Shapleya. SHAP określa wyjaśnienie jako:

$$g(z') = \phi_0 + \sum_{j=1}^M \phi_j z'_j$$

gdzie g to model wyjaśniający, $z' \in \{0, 1\}^M$ jest wektorem koalicyjnym, M to maksymalny rozmiar koalicji, a $\phi_j \in \mathbb{R}$ to atrybucja cechy dla cechy j , wartości Shapleya. To, co nazywam „wektorem koalicyjnym”, nazywane jest „uproszczonymi cechami” w artykule SHAP. Myślę, że ta nazwa została wybrana, ponieważ np. dla danych obrazowych, obrazy nie są reprezentowane na poziomie pikseli, lecz agregowane do superpikseli. Uważam, że pomocne jest myślenie o z' jako opisujących koalicje: w wektorze koalicyjnym, wpis 1 oznacza, że odpowiednia wartość cechy jest „obecna”, a 0, że jest „nieobecna”. To powinno brzmieć znajomo, jeśli znasz wartości Shapleya. Aby obliczyć wartości Shapleya, symulujemy, że tylko niektóre wartości cech biorą udział („obecne”), a niektóre nie („nieobecne”). Reprezentacja jako model liniowy koalicji to trik do obliczania ϕ ’s. Dla x , interesującej nas instancji, wektor koalicyjny x' to wektor samych 1, tj. wszystkie wartości cech są „obecne”. Wzór upraszcza się do:

$$g(x') = \phi_0 + \sum_{j=1}^M \phi_j$$

Możesz znaleźć ten wzór w podobnej notacji w rozdziale o wartościach Shapleya. Więcej o faktycznej estymacji pojawi się później. Najpierw porozmawiajmy o właściwościach ϕ ’s, zanim przejdziemy do szczegółów ich estymacji.

Wartości Shapleya są jedynym rozwiązaniem, które spełnia właściwości Efektywności, Symetrii, Pomocniczości i Addytywności. SHAP również je spełnia, ponieważ oblicza wartości Shapleya. W artykule SHAP znajdziesz rozbieżności między właściwościami SHAP a właściwościami Shapleya. SHAP opisuje następujące trzy pożądane właściwości:

Lokalna dokładność

$$\hat{f}(x) = g(x') = \phi_0 + \sum_{j=1}^M \phi_j x'_j$$

Jeśli zdefiniujesz $\phi_0 = E_X(\hat{f}(x))$ i ustawisz wszystkie x'_j na 1, to jest to właściwość efektywności Shapleya. Tylko z inną nazwą i używając wektora koalicyjnego.

$$\hat{f}(x) = \phi_0 + \sum_{j=1}^M \phi_j x'_j = E_X(\hat{f}(X)) + \sum_{j=1}^M \phi_j$$

Brak wartości

$$x'_j = 0 \Rightarrow \phi_j = 0$$

Brak wartości oznacza, że brakująca cecha otrzymuje atrybucję równą zero. Zauważ, że x'_j odnosi się do koalicji, gdzie wartość 0 reprezentuje brak wartości cechy. W notacji koalicyjnej, wszystkie wartości cech x'_j instancji, którą chcemy wyjaśnić, powinny być '1'. Obecność 0 oznaczałaby, że wartość cechy jest nieobecna dla interesującej nas instancji. Ta właściwość nie należy do właściwości „normalnych” wartości Shapleya. Więc dlaczego jej potrzebujemy dla SHAP? Lundberg nazywa to „drobnostką księgowości”. Brakująca cecha mogłaby – teoretycznie – mieć dowolną wartość Shapleya bez naruszania właściwości lokalnej dokładności, ponieważ jest mnożona przez $x'_j = 0$. Właściwość Brak wartości wymusza, aby brakujące cechy miały wartość Shapleya równą 0. W praktyce, jest to istotne tylko dla cech stałych.

Spójność

Niech $\hat{f}_x(z') = \hat{f}(h_x(z'))$ i z'_{-j} oznacza, że $z'_j = 0$. Dla dowolnych dwóch modeli f i f' , które spełniają:

$$\hat{f}'_x(z') - \hat{f}'_x(z'_{-j}) \geq \hat{f}_x(z') - \hat{f}_x(z'_{-j})$$

dla wszystkich wejść $z' \in \{0, 1\}^M$, wtedy:

$$\phi_j(\hat{f}', x) \geq \phi_j(\hat{f}, x)$$

Właściwość spójności mówi, że jeśli model zmienia się tak, że marginalny wkład wartości cechy wzrasta lub pozostaje taki sam (niezależnie od innych cech), wartość Shapleya również wzrasta lub pozostaje taka sama. Z właściwości Spójności wynikają właściwości wartości Shapleya: Liniowość, Pomocniczość i Symetria. [18]

4.2.1. Zalety

Ponieważ SHAP oblicza wartości Shapleya, wszystkie zalety wartości Shapleya mają zastosowanie: SHAP ma solidne teoretyczne podstawy w teorii gier. Prognoza jest sprawiedliwie rozdzielona między wartości cech. Otrzymujemy kontrastowe wyjaśnienia, które porównują prognozę z prognozą średnią. [18]

SHAP łączy LIME i wartości Shapleya. Jest to bardzo przydatne do lepszego zrozumienia obu metod. Pomaga to również w ujednoliceniu dziedziny

interpretowalnego uczenia maszynowego. [18]

SHAP ma szybką implementację dla modeli drzewiastych. Uważam, że to klucz do popularności SHAP, ponieważ największą przeszkodą w przyjęciu wartości Shapleya jest wolne obliczanie. [18]

Szybkie obliczenia umożliwiają obliczanie wielu wartości Shapleya potrzebnych do globalnych interpretacji modelu. Globalne metody interpretacji obejmują znaczenie cech, zależność cech, interakcje, grupowanie i wykresy podsumowujące. Z SHAP globalne interpretacje są zgodne z lokalnymi wyjaśnieniami, ponieważ wartości Shapleya są „jednostką atomową” globalnych interpretacji. Jeśli używasz LIME do lokalnych wyjaśnień oraz wykresów częściowej zależności i permutacyjnej ważności cech do globalnych wyjaśnień, brakuje ci wspólnej podstawy. [18]

4.2.2. Wady

KernelSHAP jest powolny. To sprawia, że KernelSHAP jest niepraktyczny do użycia, gdy chcesz obliczyć wartości Shapleya dla wielu instancji. Ponadto wszystkie globalne metody SHAP, takie jak znaczenie cech SHAP, wymagają obliczenia wartości Shapleya dla wielu instancji. [18]

KernelSHAP ignoruje zależność cech. Większość innych metod interpretacji opartych na permutacji ma ten problem. Zastępując wartości cech wartościami z losowych instancji, zwykle łatwiej jest losowo próbować z rozkładu brzegowego. Jednak jeśli cechy są zależne, np. skorelowane, prowadzi to do nadania zbyt dużej wagi mało prawdopodobnym punktom danych. TreeSHAP rozwiązuje ten problem, explicity modelując warunkową prognozę oczekiwaną. [18]

Możliwe jest tworzenie celowo wprowadzających w błąd interpretacji z SHAP, które mogą ukrywać uprzedzenia. Jeśli jesteś naukowcem zajmującym się danymi, który tworzy wyjaśnienia, nie stanowi to problemu (byłoby to nawet zaletą, jeśli jesteś złym naukowcem danych, który chce tworzyć wprowadzające w błąd wyjaśnienia). Dla odbiorców wyjaśnienia SHAP jest to wada: nie mogą być pewni prawdziwości wyjaśnienia. [18]

Biblioteka SHAP umożliwia szereg interpretacji decyzyjności modeli. W naszym wypadku zachodziła jedynie konieczność interpretacji dla interpretacji użycia sieci głębokiej sieci neuronowej dla danych tabelarycznych i klasyfikacji wieloklasowej. Przykłady interpretacji dla analizowanego przypadku znajdują się w rozdziale ”Eksperymenty”. Poniżej natomiast link do artykułu o podstawach interpretacji SHAP:

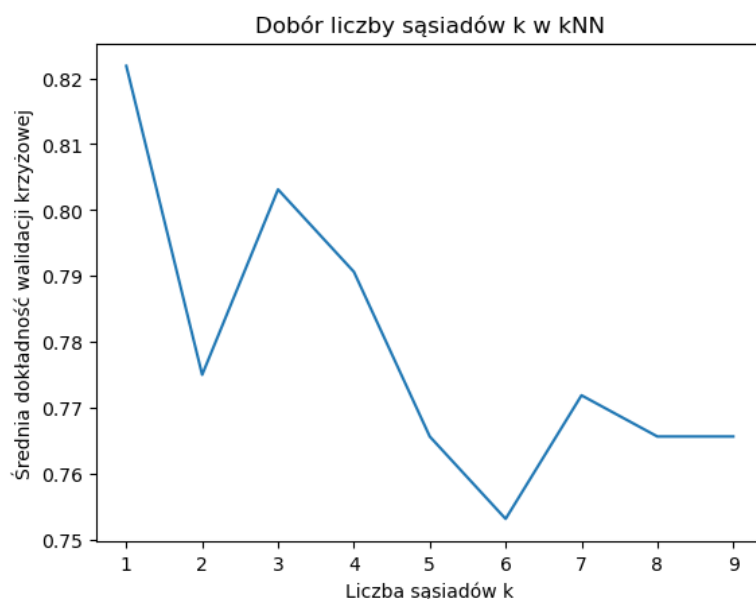
<https://miroslawmamczur.pl/wartosc-shapleya-interpretacja-modeli-blackbox/>

5. Eksperymenty

5.1. Klasyfikacja kNN - dobór liczby sąsiadów

Dobór liczby sąsiadów dla algorytmu kNN jest bardzo istotny. Zbyt mała liczba sąsiadów może powodować zbytne dopasowanie do danych, zbyt duża - negatywnie wpłynie na wartości dokładności i precyzji.

W celu optymalnego doboru k posłużę się średnią wartością dokładności z wykorzystaniem krosvalidacji (o podziale zbioru na 10). Następnie rysuję wykres średniej dokładności w zależności od liczby sąsiadów:



Rysunek 4. Wykres średniej dokładności walidacji krzyżowej

Z obawy o zbytne dopasowanie wybieram liczbę sąsiadów równą 3.

5.2. Klasyfikacja kNN

W przeprowadzonym eksperymencie dokonano podziału zbioru 80:20 (20 procent danych testowych). Następnie zdefiniowano klasyfikator z parametrem `n_neighbors` równym 5. Kolejnym krokiem było wytrenowanie klasyfikatora i przeprowadzenie predykcji na zbiorze testowym:

```
1 from sklearn.neighbors import KNeighborsClassifier
2 from sklearn import metrics
3
4 knn = KNeighborsClassifier(n_neighbors=3)
5 knn.fit(X_train, y_train)
6 score = cross_val_score(knn, X_train, y_train, cv=10, scoring='accuracy')
7
8 y_pred = knn.predict(X_test)
```

Listing 2. Definicja i użycie kNN

5.2.1. Wyniki

Podstawowe metryki dla pierwszego eksperymentu wynosiły precyzja (*Precision*): 0.90 a dokładność (*Accuracy*): 0.7625. Średnia dokładność z użyciem walidacji krzyżowej (z podziałem zbioru testowego na 10) 0.803125. Co nie stanowi wiele informacji, korzystam więc z gotowych metryk dostępnych w bibliotece scikit-learn:

| | precision | recall | f1-score | support |
|-------------------------------|-----------|--------|----------|---------|
| Basilar-type aura | 0.67 | 0.29 | 0.40 | 7 |
| Familial hemiplegic migraine | 0.43 | 0.60 | 0.50 | 5 |
| Migraine without aura | 0.71 | 0.62 | 0.67 | 8 |
| Other | 1.00 | 0.33 | 0.50 | 3 |
| Sporadic hemiplegic migraine | 0.00 | 0.00 | 0.00 | 4 |
| Typical aura with migraine | 0.81 | 0.96 | 0.88 | 49 |
| Typical aura without migraine | 1.00 | 0.75 | 0.86 | 4 |
| accuracy | | | 0.76 | 80 |
| macro avg | 0.66 | 0.51 | 0.54 | 80 |
| weighted avg | 0.74 | 0.76 | 0.73 | 80 |

W przypadku walidacji dla poszczególnych klas precyzja wahała się pomiędzy 43 a 100%. Recall charakteryzował się dużym rozrzutem wartości - mniej liczne klasy miały recall niekiedy i 0-29% a te bardziej liczne 75-96%.

Średnia wartość recallu to 51% a średnia ważona 76% (ta właśnie uwzględniała nierówną liczebność klas). Podobna różnica miała miejsce w przypadku precyzji wyliczonej dla poszczególnych klas - średnia wartość 66% - średnia ważona 74%.

5.3. Klasyfikacja Naiwnym Klasyfikatorem Bayesa

W eksperymencie tym sprawdziłem wyniki klasyfikacji Naiwnym Klasyfikatorem Bayesa. Biblioteka scikit-learn umożliwia przeprowadzenie tzn *Categorical Classification (Categorical Naive Bayes)* gdzie w przeciwieństwie do popularnej klasyfikacji binarnej, metoda jest w stanie zwrócić dwie informacje: etykietę klasy będącej wynikiem klasyfikacji oraz listę ze stopniami podobieństwa dla wszystkich klas.

```
1 from sklearn.naive_bayes import CategoricalNB
2
3 gnb = CategoricalNB()
4
5 y_pred = gnb.fit(X_train, y_train).predict(X_test)
```

Listing 3. Definicja i użycie CategoricalNB

5.3.1. Wyniki

O ile wyniki dokładności (*Accuracy*) wyglądały podobnie niz dla np. kNN - dokładnie 75%. O tyle wyniki dla całości zbioru prezentowały się gorzej o 5-6 punktów procentowych niz dla kNN - precyzja średnia 64% (względem 66%) oraz precyzja wazona 69% (względem 74%). Wyniki dla poszczególnych klas dla precyzji potrafiły się różnić o 20-30 punktów procentowych względem kNN nie dając wyraźniej korelacji względem liczebności klas. Wyniki dla recall po trafiły być niekiedy diametralnie różne - 88%-12% a niekiedy znikomo - 92%-96% względem kNN.

| | precision | recall | f1-score | support |
|-------------------------------|-----------|--------|----------|---------|
| Basilar-type aura | 1.00 | 0.88 | 0.93 | 8 |
| Familial hemiplegic migraine | 0.75 | 0.60 | 0.67 | 5 |
| Migraine without aura | 0.29 | 0.18 | 0.22 | 11 |
| Other | 1.00 | 1.00 | 1.00 | 4 |
| Sporadic hemiplegic migraine | 0.00 | 0.00 | 0.00 | 5 |
| Typical aura with migraine | 0.76 | 0.92 | 0.83 | 62 |
| Typical aura without migraine | 0.67 | 0.40 | 0.50 | 5 |
| accuracy | | | 0.75 | 100 |
| macro avg | 0.64 | 0.57 | 0.59 | 100 |
| weighted avg | 0.69 | 0.75 | 0.71 | 100 |

Niezwykle istotną możliwością wykorzystania Naiwnego Klasyfikatora Bayesa było wyświetlenie podobieństwa testowanej klasy względem wszystkich klas.

Niektóre z klas (niekoniecznie te bardziej licznie) przedstawiały bardzo jednoznaczną klasyfikację, np:

```
Other
0.0009411289994916489: Basilar-type aura
0.00024106562936048384: Familial hemiplegic migraine
1.3757510137960067e-06: Migraine without aura
0.9987800638900048: Other
5.212399025390643e-06: Sporadic hemiplegic migraine
3.406207926665455e-08: Typical aura with migraine
3.111926902521578e-05: Typical aura without migraine
```

dla innych (często dla konkretnych jak np. Typical aura without migraine czy Migraine without aura) mieliśmy rozkłady bardzo zróżnicowane:

```
Typical aura without migraine
0.08048228203931468: Basilar-type aura
0.2633221828713967: Familial hemiplegic migraine
0.0009416760319083586: Migraine without aura
0.005682255909626338: Other
```

| | |
|----------------------|-------------------------------|
| 0.22367861315019222: | Sporadic hemiplegic migraine |
| 0.15361555787258202: | Typical aura with migraine |
| 0.2722774321249797: | Typical aura without migraine |

albo nawet niemal bilateralne:

| | |
|------------------------|-------------------------------|
| Migraine without aura | |
| 0.000315062484758524: | Basilar-type aura |
| 0.0008466488192796888: | Familial hemiplegic migraine |
| 0.516090617842986: | Migraine without aura |
| 0.001079067159295874: | Other |
| 0.0038615304383266213: | Sporadic hemiplegic migraine |
| 0.4772101808065339: | Typical aura with migraine |
| 0.0005968924488194133: | Typical aura without migraine |

5.4. Selekcja i ekstrakcja cech

W czasie wykonanych eksperymentów wykorzystano dwa sposoby selekcji cech: SKB i RFE, oraz mechanizm wyodrębnienia cech PCA.

Definicja algorytmu selekcji cech SKB (czyli Select k Best), wybór k dzieściu najlepszych i wyświetlenie nowych nazw cech:

```
1 from sklearn.feature_selection import SelectKBest, chi2
2
3 skb = SelectKBest(chi2, k = 10)
4 X2 = skb.fit_transform(X, y)
```

Listing 4. Definicja selektora SKB

Definicja selektora cech RFE (dla klasyfikatora SVC i redukcji do 10 cech):

```
1 from sklearn.feature_selection import RFE
2
3 svc = SVC(kernel = 'linear')
4
5 rfe = RFE(estimator = svc, n_features_to_select = 10, step = 1)
6 X3 = rfe.fit_transform(X, y.values.ravel())
```

Listing 5. Definicja selektora RFE

Definicja ekstraktora cech PCA (ekstrakcja do 4 cech).

```
1 from sklearn.decomposition import PCA
2
3 pca = PCA(n_components = 4)
4 X4 = pca.fit_transform(X)
```

Listing 6. Definicja ekstraktora cech PCA

5.4.1. Wyniki

Wyniki prezentowały się następująco:

Średnia dokładność klasyfikacji z wykorzystaniem klasyfikatora ...

| | |
|---------------|--------------------|
| kNN wyniosła: | 0.8024999999999999 |
|---------------|--------------------|

kNN i metody SKB wyniosła: 0.7825
kNN i metody RFE wyniosła: 0.865
kNN i metody PCA: 0.7

SVC wyniosła: 0.8825
SVC i metody SKB wyniosła: 0.8
SVC i metody RFE wyniosła: 0.8825
SVC i metody PCA: 0.735

Co interesujące to właśnie dyskusyjny eksperyment klasyfikacji KNN z selekcją RFE poprawił wynik dla kNN o 8 punktów procentowych a np. SKB pogorszył go o dwa. W przypadku klasyfikatora SVC w/w metody albo nie zmieniły wyniku (RFE) albo pogorszyły wynik od 8-10 punktów procentowych.

Użyty zbiór nie był zbiorem licznym ani też obliczenia na nim wykonywane nie wymagały dużych mocy obliczeniowych. Nie istniało zatem żadne uzasadnienie stosowania którejkolwiek z w/w metod ponieważ przy praktycznie zerowej optymalizacji otrzymywaliśmy gorsze wyniki.

5.5. Perceptron wielowarstwowy

Kolejnym z przeprowadzonych eksperymentów było użycie perceptronu wielowarstwowego. Podział zbioru to 75% na dane treningowe i 25% na dane testowe. Ponownie wykorzystaliśmy bibliotekę scikit-learn:

```
1 from sklearn.neural_network import MLPClassifier
2 mlp = MLPClassifier(hidden_layer_sizes=(6),
3                     max_iter=50000,
4                     alpha=0.0001,
5                     solver='adam',
6                     activation='logistic',
7                     random_state=25,
8                     tol=0.0000001)
```

Listing 7. Definicja perceptronu wielowarstwowego

Wyjaśnienie wykorzystanych parametrów:

1. hidden_layer_sizes - ilość warstw ukrytych
2. max_iter - liczba epok
3. alpha - współczynnik regularyzacji który zapobiega zjawisku przeuczenia
4. solver - wybór algorytmu optymalizacji "adam".
5. activation - wybór sigmoidalnej funkcji aktywacji
6. random_state - ziarno generatora liczb losowych
7. tol - tolerancja dla kryterium stop. Algorytm zatrzymuje się, jeśli zmiana wyniku (kosztu) jest mniejsza niż ta wartość.

5.5.1. Wyniki

Wyniki działania perceptronu okazały się zaskakująco dobre. Przy relatywnie niskiej ilości warstw ukrytych (6), przeciętnej ilości epok (50000) i popularnym optymalizatorze ("adam") osiągnęliśmy dokładność (Accuracy)

na poziomie 94% i średnią ważoną precyzję 95%. Recall wahał się od 60% do 100% (przy średniej ważonej wartości 94%) a współczynnik F1 od 75% do 100% (przy średniej ważonej wartości 93%).

| | precision | recall | f1-score | support |
|-------------------------------|-----------|--------|----------|---------|
| Basilar-type aura | 1.00 | 0.20 | 0.33 | 5 |
| Familial hemiplegic migraine | 0.57 | 0.80 | 0.67 | 5 |
| Migraine without aura | 1.00 | 1.00 | 1.00 | 12 |
| Other | 1.00 | 1.00 | 1.00 | 3 |
| Sporadic hemiplegic migraine | 0.75 | 1.00 | 0.86 | 3 |
| Typical aura with migraine | 0.97 | 0.99 | 0.98 | 67 |
| Typical aura without migraine | 1.00 | 1.00 | 1.00 | 5 |
| accuracy | | | 0.94 | 100 |
| macro avg | 0.90 | 0.86 | 0.83 | 100 |
| weighted avg | 0.95 | 0.94 | 0.93 | 100 |

NN Accuracy = 0.94

Przy mniejszej ilości epok (5000) takiej samej ilości warstw ukrytych (6) i tym samym optymalizatorze ("adam") osiągnęliśmy dokładność (Accuracy) na poziomie 96% i średnią ważoną precyzję 97%. Recall wahał się od 60% do 100% a współczynnik F1 od 75% do 100% (przy średniej ważonej wartości 96%) z tym że biblioteka wyświetliła ostrzeżenie że optymalizator nie zakończył działania więc wyniki mogą być nieoptymalne.

| | precision | recall | f1-score | support |
|-------------------------------|-----------|--------|----------|---------|
| Basilar-type aura | 1.00 | 0.60 | 0.75 | 5 |
| Familial hemiplegic migraine | 0.67 | 0.80 | 0.73 | 5 |
| Migraine without aura | 1.00 | 1.00 | 1.00 | 12 |
| Other | 1.00 | 1.00 | 1.00 | 3 |
| Sporadic hemiplegic migraine | 0.75 | 1.00 | 0.86 | 3 |
| Typical aura with migraine | 0.99 | 0.99 | 0.99 | 67 |
| Typical aura without migraine | 1.00 | 1.00 | 1.00 | 5 |
| accuracy | | | 0.96 | 100 |
| macro avg | 0.91 | 0.91 | 0.90 | 100 |
| weighted avg | 0.97 | 0.96 | 0.96 | 100 |

NN Accuracy = 0.96

5.6. Sieć głęboka z funkcją aktywacji Softmax

Perceptron wielowarstwowy choć dawał świetne wyniki to jednak dawał wynik przynależności do najbardziej prawdopodobnej klasy. W zagadnieniu klasyfikacji bólów głowy interesującym byłoby pokazać wynik w postaci

stopnia podobieństwa przynależności do każdej z możliwych klas. Z pomocą przychodzi nam funkcja aktywacji Softmax i możliwość zastosowania jej w głębokich sieciach neuronowych.

W przypadku funkcji aktywacji Softmax konieczne jest użycie enkodera etykiet klas - czy zamianę etykiet na przyporządkowane im liczby. Następnie w/w liczby zamieniamy na tzw. format hot-one czyli format gdzie danej liczbie przyporządkowujemy ciąg binarny zer oraz jednej jedynki w miejscu w szeregu odpowiadającym danej liczbie. Po testowej klasyfikacji musimy nasze wyniki zdekodować z powrotem do formatu etykiet. Wszystkie te operacje umożliwia nam biblioteka scikit-learn.

Do definicji sieci głębokiej używam biblioteki TensorFlow i jej części Keras.

```
1 model=tf.keras.models.Sequential()
2 model.add(tf.keras.layers.Dense(64, activation='relu'))
3 model.add(tf.keras.layers.Dense(32, activation='relu'))
4 model.add(tf.keras.layers.Dense(num_classes,
5                                 activation='softmax'))
6 model.build(input_shape=23)
7 model.compile(optimizer='Adam',
8               loss='categorical_crossentropy',
9               metrics=['accuracy'])
```

Listing 8. Definicja sieci głębokiej z funkcją aktywacji Softmax

W powyższej definicji mamy:

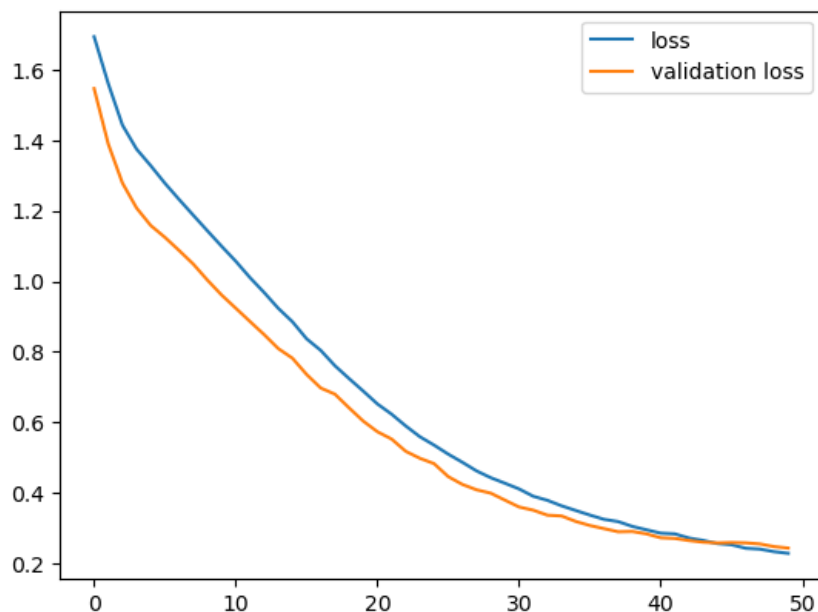
1. definicje modelu sekwencyjnego
2. definicje warstwy gęstej (Dense, wszystkie neurony połączone) z 64 neuronami i funkcją aktywacji ReLU.
3. definicje warstwy gęstej (Dense, wszystkie neurony połączone) z 32 neuronami i funkcją aktywacji ReLU.
4. definicje warstwy gęstej (Dense) z funkcją aktywacji Softmax.
5. określenie ilości wejść - 23 bo tyle mamy cech.
6. kompilację modelu z optymalizatorem "adam", określeniem funkcji straty "categorical_crossentropy" i definicje metryk.

Następnie rozpoczynam trenowanie modelu dla 50 epok, wydzielenie 20% zbioru testowego na zbiór walidacyjny i zapis modelu:

```
1 history = model.fit(X_train,
2                     y_train_one_hot,
3                     epochs=50,
4                     verbose=1,
5                     validation_split=0.2)
6 tf.keras.models.save_model(model, '../models/softmax.keras')
```

Listing 9. Definicja sieci głębokiej z funkcją aktywacji Softmax

Wyświetlenie wykresu wartości funkcji straty i porównanie jej z wartością straty na zbioru walidacyjnego daje mi orientacyjną możliwość oceny słuszności doboru ilości epok.



Rysunek 5. Wykresy funkcji strat

5.6.1. Wyniki

Dla zbioru testowego osiągnęliśmy 95% dokładność.

```
4/4 ===== 0s 801us/step - accuracy: 0.9446 - loss: 0.2267
Loss: 0.21024955809116364, Accuracy: 0.949999988079071
```

Najciekawszym aspektem wykorzystania funkcji Softmax jest możliwość wyświetlenia podobieństwa do wszystkich możliwych klas. Oto kilka przykładów dla konkretnych przypadków, co zrobiłem na dwa sposoby. Pierwszy z nich wyświetlał wszystkie klasy i podobieństwa konkretnego przypadków do każdej z nich:

| | |
|---------------------------------------|-------------------|
| Class: Basilar-type aura, | Probability: 0.25 |
| Class: Familial hemiplegic migraine, | Probability: 0.63 |
| Class: Migraine without aura, | Probability: 0.00 |
| Class: Other, | Probability: 0.09 |
| Class: Sporadic hemiplegic migraine, | Probability: 0.03 |
| Class: Typical aura with migraine, | Probability: 0.00 |
| Class: Typical aura without migraine, | Probability: 0.00 |

a drugi z nich wyświetlał tabelę: enkodowana etykieta klasy, pełna etykieta klasy i prawdopodobieństwo do danej klasy analizowanego przypadku. Wartości uszeregowane malejąco wg podobieństwa:

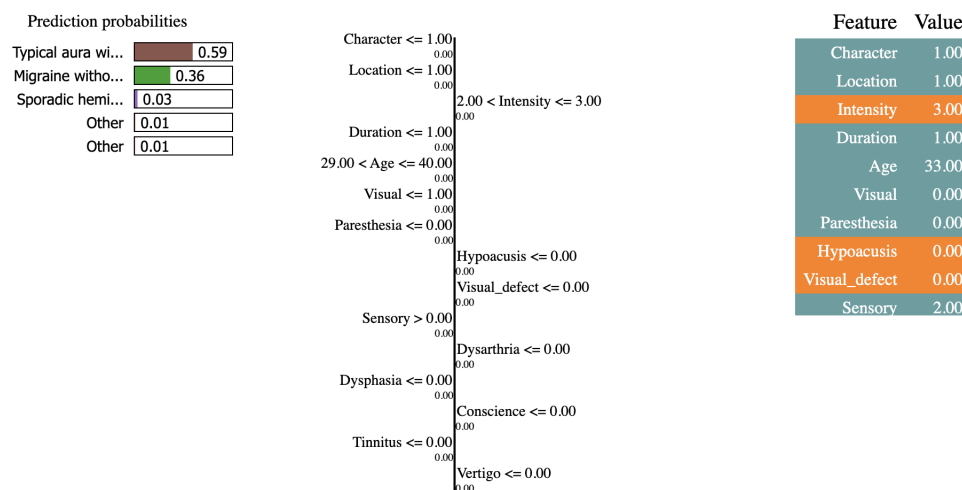
| | Type | Probabilities |
|---|------------------------------|---------------|
| 1 | Familial hemiplegic migraine | 0.63 |
| 0 | Basilar-type aura | 0.25 |
| 3 | Other | 0.09 |

| | | |
|---|-------------------------------|------|
| 4 | Sporadic hemiplegic migraine | 0.03 |
| 5 | Typical aura with migraine | 0.00 |
| 6 | Typical aura without migraine | 0.00 |
| 2 | Migraine without aura | 0.00 |

5.7. Prezentacja możliwości technik LIME dla NKB

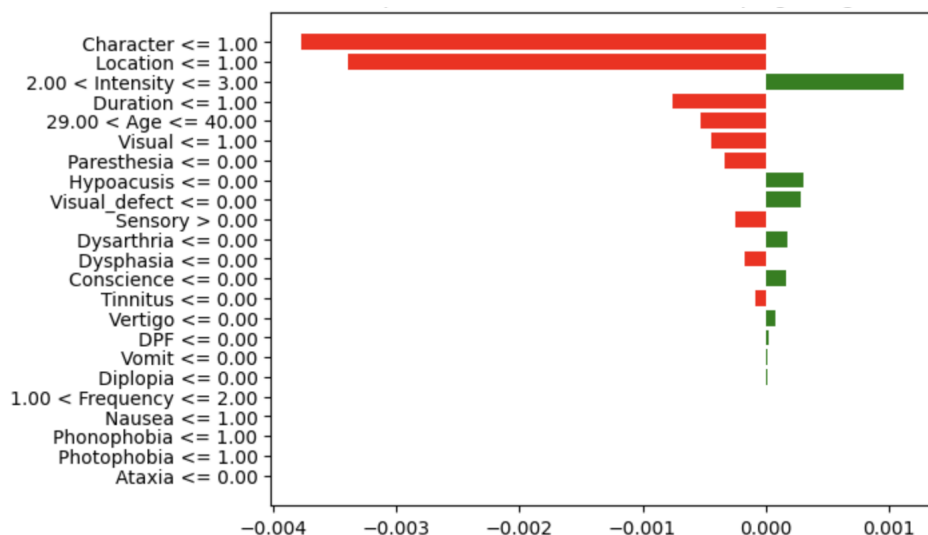
Techniki LIME zastosowano dla klasyfikacji Naiwnym Klasyfikatorem Bayesa. Ze względu na brak możliwości zastosowania normalizacji wyniki pracy z LIME prezentuje w osobnym podrozdziale jak i obliczenia przeprowadzono w osobnym arkuszu Jupytera.

Przykład pierwszy: o niejednoznacznym rozkładzie podobieństw. W przykładzie widzimy niejednoznaczną klasyfikację. Najbardziej prawdopodobny wynik to "Typical aura with migraine" (59%), drugi "Migraine without aura" (36%). Listę klas z prawdopodobieństwami widzimy po lewej stronie wykresu rys. 6. Po środku niezbyt widoczny wykres wpływu cech na wynik. O tym szczegółowo poniżej. Po lewej stronie tabela z cechami i ich wartościami - uszeregowana wg istotności wpływu na wynik klasyfikacji. Wartości nie są znormalizowane co pokazuje np. wartość cechy Wiek ("Age").



Rysunek 6. Zbiorcza prezentacja wyników LIME

Poniżej bardziej czytelna wersja tabeli wpływu cech. Na osi poziomej widzimy orientacyjną wartość na cecha ta wpływała na wynik - zarówno jeśli cecha świadczyła za przynależnością do klasy (wartości dodatnie oznaczone na zielono) jak i wpływ cech przeciw klasyfikacji (ujemne wartości oznaczone na czerwono).



Rysunek 7. Szczegółowy rozkład wpływu cech na wynik

W powyższym przykładzie widzimy że dwie najbardziej wpływowe cechy (charakter i lokalizacja) mogą świadczyć o przynależności wyniku do innej klasy a za klasyfikacją przemawia cecha nr 3 czyli intensywność bólu.

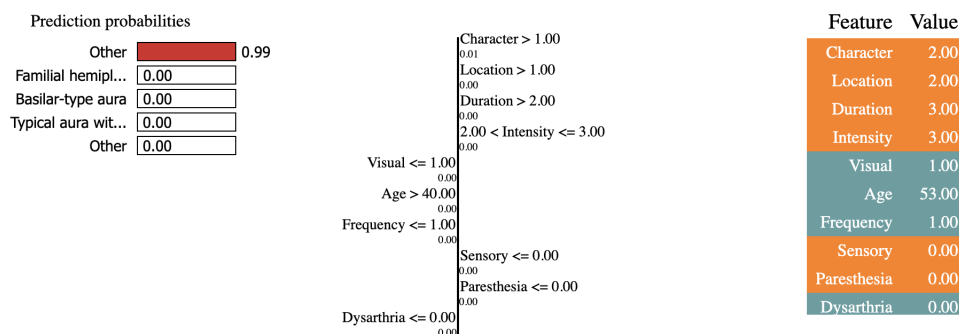
Pełne wyniki klasyfikacji algorytmem NKB prezentowały się zgodnie z wykresem z biblioteki LIME:

```

49 : Typical aura with migraine
0.0012638281303840333: Basilar-type aura
0.0059846389830973635: Familial hemiplegic migraine
0.363060881204291: Migraine without aura
0.008800972062708684: Other
0.032507610772455765: Sporadic hemiplegic migraine
0.5883775288337598: Typical aura with migraine
4.540013303382296e-06: Typical aura without migraine
  
```

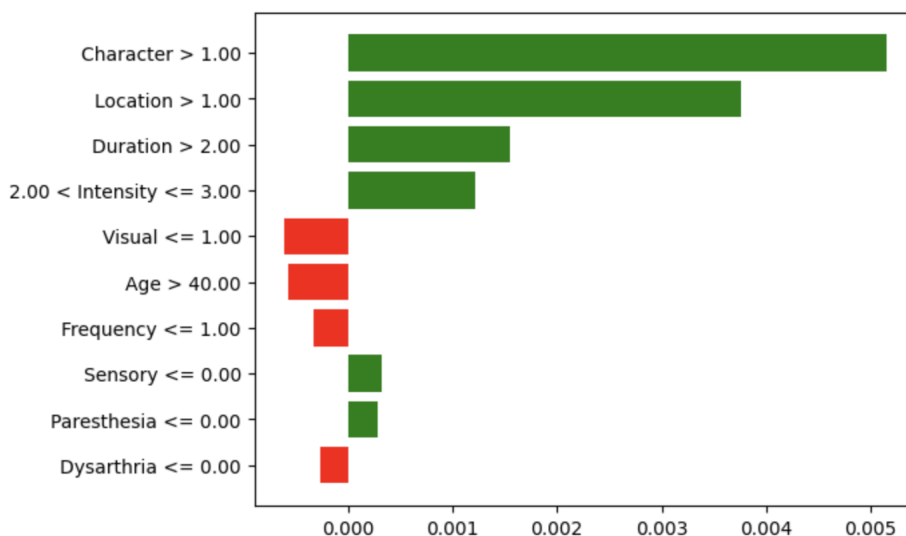
Przykład drugi: o jednoznacznym rozkładzie podobieństw.

W drugim przykładzie przeanalizowano przykład o mocno jednoznacznym rozkładzie podobieństw (99%).



Rysunek 8. Zbiorcza prezentacja wyników LIME - 2

Tutaj pierwsze cztery najbardziej dominujące cechy potwierdzają przynależność do klasy. Trzy kolejne poddają wynik pod wątpliwość.

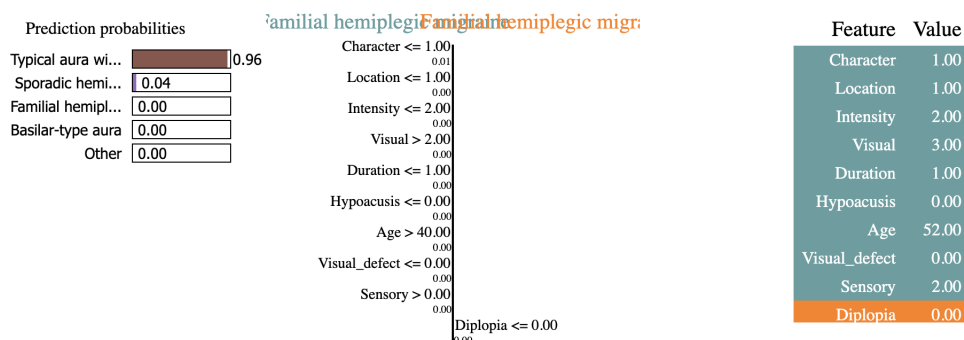


Rysunek 9. Szczegółowy rozkład wpływu cech na wynik - 2

Prawdopodobieństwo potwierdzone przez wyniki NKB.

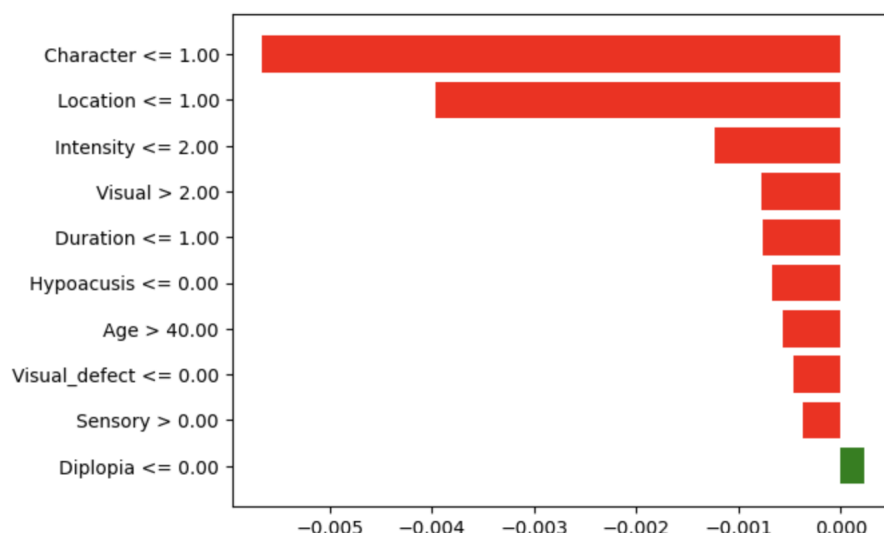
Przykład trzeci: o jednoznacznym rozkładzie podobieństw.

W drugim przykładzie przeanalizowano przykład o mocno jednoznacznym rozkładzie podobieństw (96%).



Rysunek 10. Zbiorcza prezentacja wyników LIME - 3

Wynik jest o tyle interesujący że pomimo mocno jednoznacznej klasyfikacji aż dziewięć najbardziej dominujących klas sugeruje że instancja może należeć do innej klasy. W realnym przypadku taki wynik powinien być szczegółowo przeanalizowany przez osobę z ekspercką wiedzą domenową.



Rysunek 11. Szczegółowy rozkład wpływu cech na wynik - 3

Prawdopodobieństwo potwierdzone przez wyniki NKB.

5.8. Prezentacja możliwości technik SHAP dla NKB

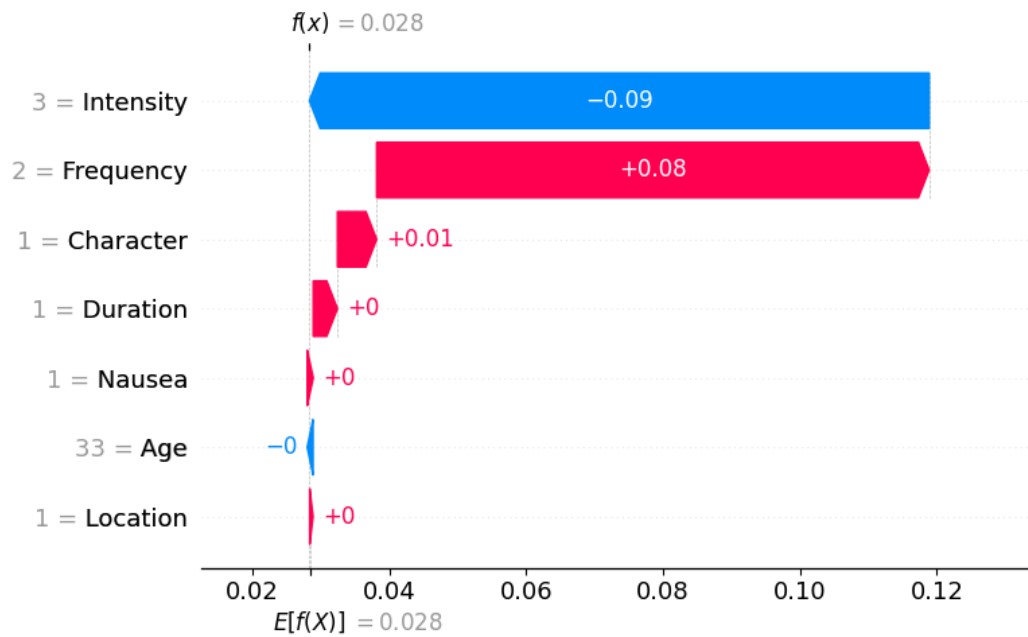
Techniki SHAP zastosowano również dla klasyfikacji Naiwnym Klasyfikatorem Bayesa. Zachowano taki sam podział zbioru i analizowano dokładnie taki sam zbiór testowy (w tym też konkretne przypadki). Tym razem również nie zastosowano normalizacji choć dla SHAP można ją stosować - zachowano te same warunki aby porównać wyniki.

```

1 # Funkcja predykcyjna modelu
2 def predict_proba(X):
3     return gnb.predict_proba(X)
4
5 # Tworzenie wyjasniacza KernelExplainer
6 explainer = shap.KernelExplainer(predict_proba, X_train)
7
8 # Wybór jednej instancji ze zbioru testowego
9 instance = X_test.iloc[0].values.reshape(1, -1)
10
11 # Obliczanie wartosci SHAP dla wybranej instancji
12 shap_values = explainer.shap_values(instance)
13
14 # Tworzenie wykresu typu waterfall dla wybranej instancji i pierwszej klasy
15 shap.waterfall_plot(shap.Explanation(values=shap_values[0][0],
16                                     base_values=explainer.expected_value[0],
17                                     data=instance[0],
18                                     feature_names=df.columns))

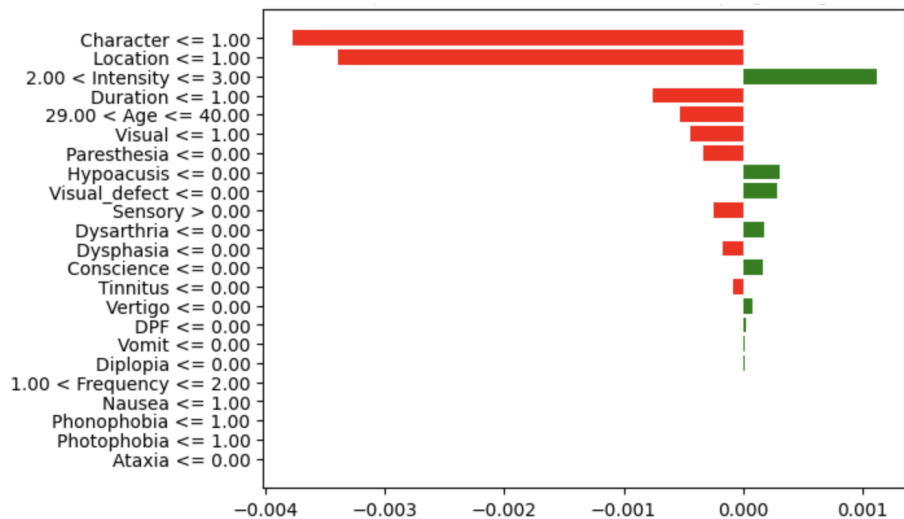
```

Listing 10. Definicja explainera dla SHAP



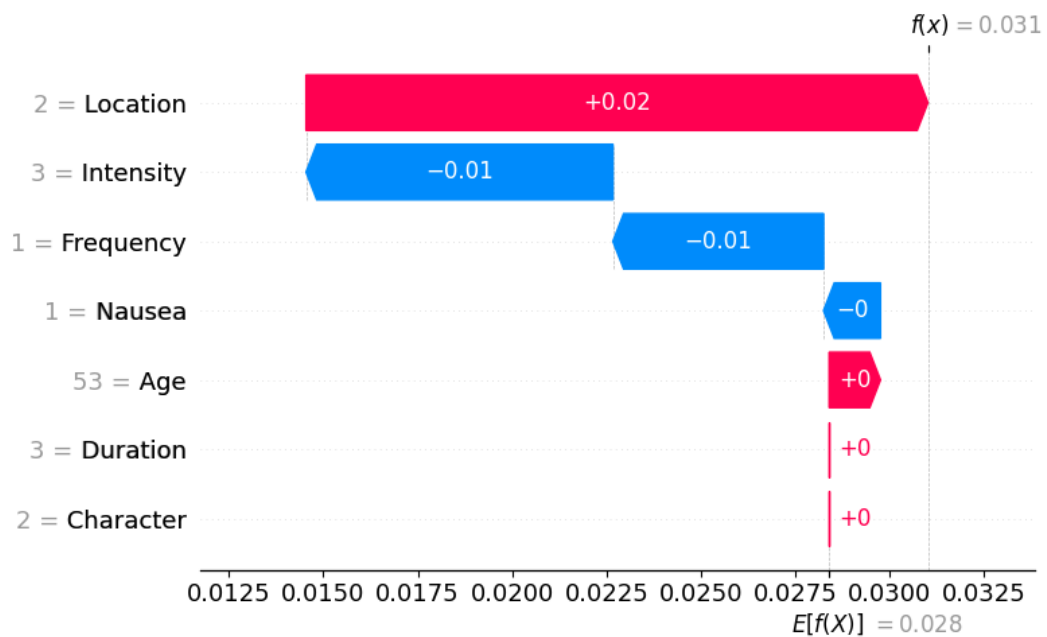
Rysunek 12. Wpływ cech wg SHAP dla NKB

Dla porównanie przypomnienie wykresu dla LIME:



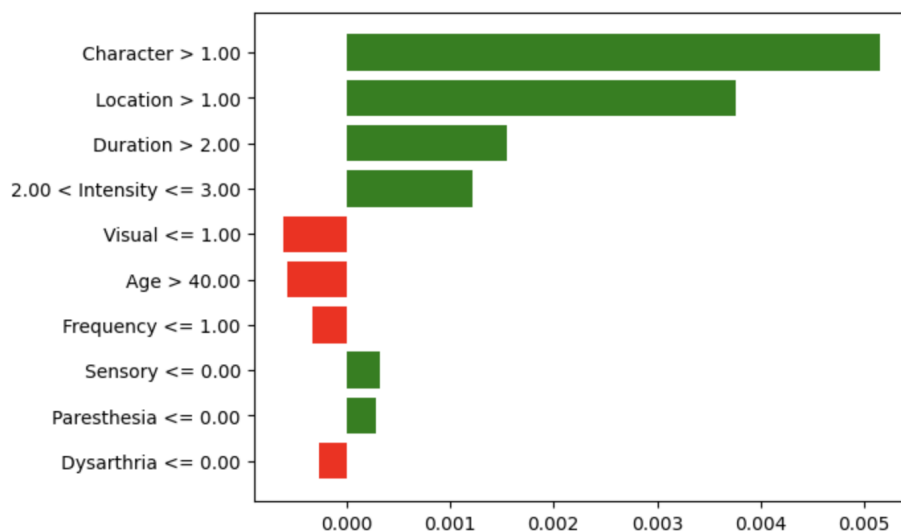
Widzimy częściową zgodność cech. Kolejność jak ich wartości wpływu są już praktycznie zupełnie różne.

Podobną sytuację obserwujemy dla pozostałych przypadków:

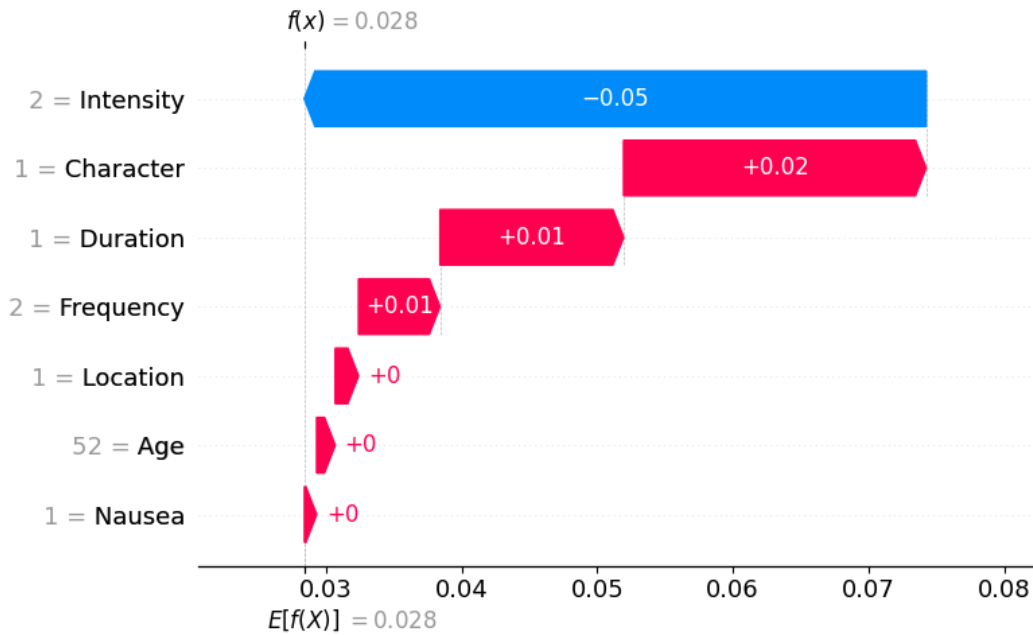


Rysunek 13. Wpływ cech wg SHAP dla NKB - 2

Dla porównanie przypomnienie wykresu dla LIME:

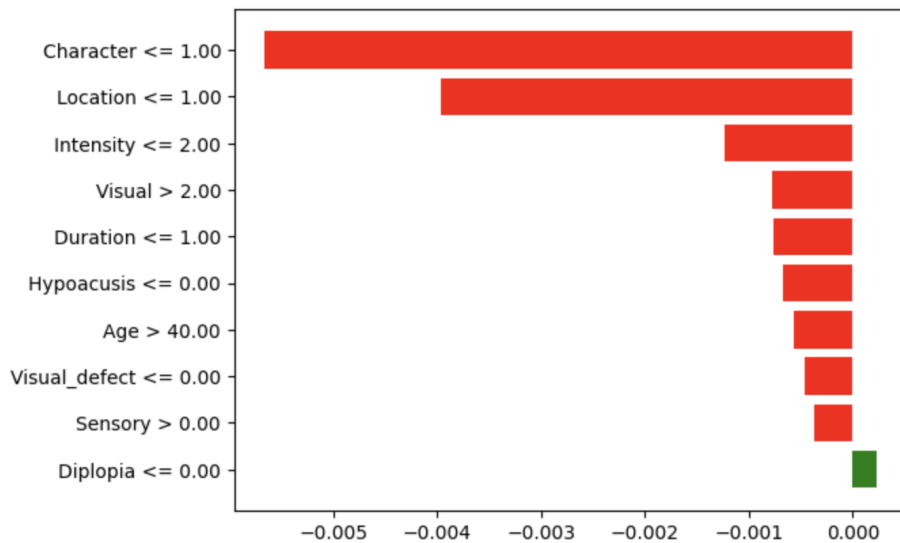


Kolejny przykład:



Rysunek 14. Wpływ cech wg SHAP dla NKB - 3

Dla porównanie przypomnienie wykresu dla LIME:



5.9. Prezentacja możliwości technik SHAP dla sieci głębokiej

Techniki SHAP zastosowano też dla głębokiej sieci neuronowej. Pomimo zastosowania takiego samego podziału zbioru i dokładnie takiego samego zbioru testowego (w tym już konkretnych przypadków) wyniki znacznie różniły się od wyników dla LIME.

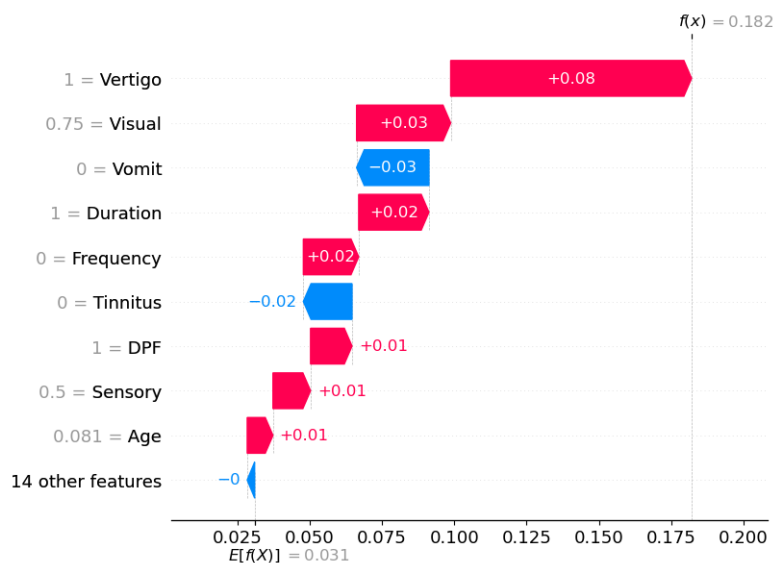
Definicja "wyjaśniacza" jest tutaj nieco trudniejsza niż dla LIME i nieco mniej intuicyjna (choćby przez konieczność dwukrotnej definicji numeru interpretowanej instancji):

```

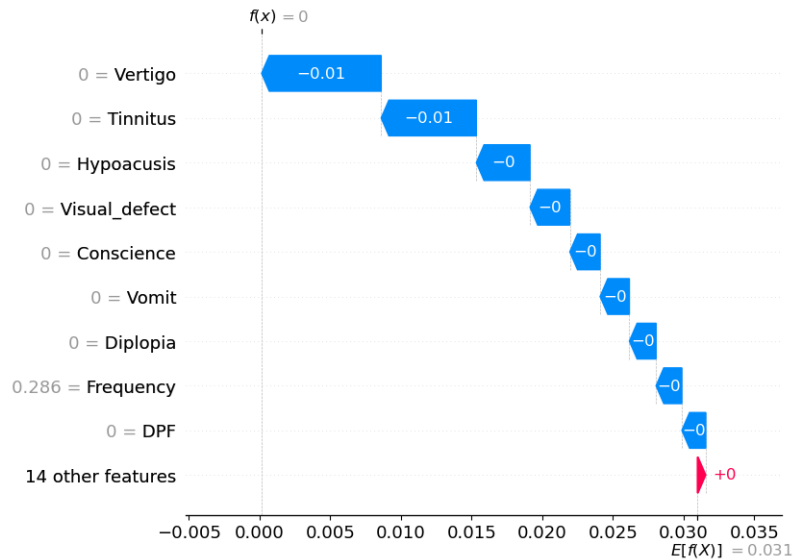
1 # Tworzenie wyjasniacza KernelExplainer
2 explainer = shap.KernelExplainer(predict, X_train)
3
4 # Obliczanie wartosci SHAP dla przykladowych danych
5 shap_values = explainer.shap_values(X_test[0:1]) # X_test to dane testowe, wy
6
7 # Tworzenie obiektu Explanation z etykietami cech
8 explanation = shap.Explanation(values=shap_values[0][0],
9                               base_values=explainer.expected_value[0],
10                              data=X_test[0],
11                              feature_names=df.columns)
12
13 # Wyszwietlanie wykresu wodospadowego
14 shap.waterfall_plot(explanation)

```

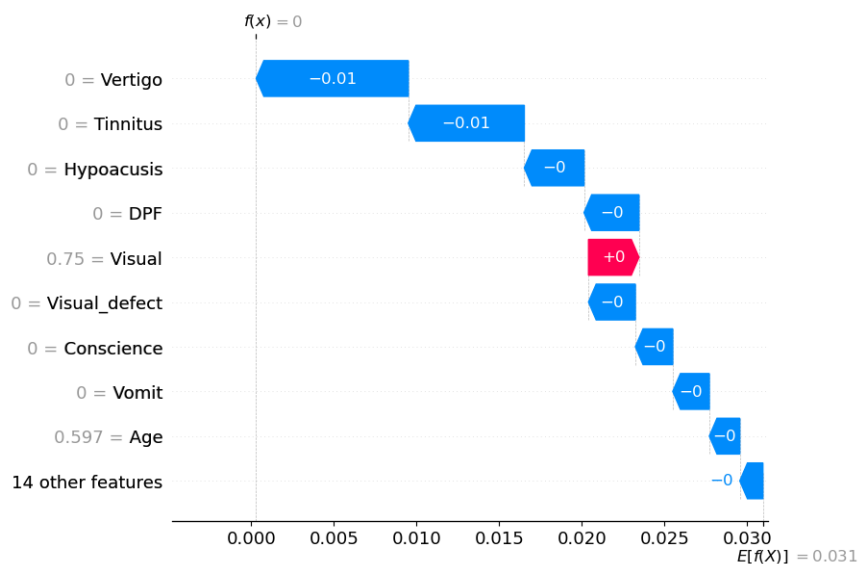
Listing 11. Definicja explainera dla SHAP - 2



Rysunek 15. Wpływ cech wg SHAP dla sieci



Rysunek 16. Wpływ cech wg SHAP dla sieci - 2



Rysunek 17. Wpływ cech wg SHAP dla sieci - 3

Powyższe wykresy to tzw. wykresy wodospadowe.

Oś Y - Cechy - Lista cech (np. Vertigo, Hypoacusis, Conscience) znajduje się po lewej stronie wykresu. Każda cecha ma przypisaną wartość z danych wejściowych (np. 0 = Vertigo).

Oś X - Wartości SHAP - Oś X przedstawia wartości SHAP, które pokazują wpływ każdej cechy na końcową przewidywaną wartość modelu. Wartości SHAP są liczbami, które mogą być dodatnie lub ujemne.

Kolory:

Niebieski: Negatywny wpływ na przewidywanie (obniżają wartość przewidywaną przez model).

Czerwony: Pozytywny wpływ na przewidywanie (zwiększają wartość przewidywaną przez model).

Wartości SHAP pokazują, jak poszczególne cechy wpływają na wynik przewidywany przez model. Cechy z największymi wartościami SHAP (pozytywnymi lub negatywnymi) mają największy wpływ na decyzję modelu. Wartość bazowa reprezentuje średnią przewidywaną wartość na podstawie danych treningowych, a przewidywana wartość $f(x)$ pokazuje, jak daleko od tej średniej znajduje się przewidywanie dla konkretnego przykładu.

W Przypadku LIME cechami dominującymi zwykle były Character, Location, Duration, Intensity czy Age. Dla SHAP dominuje Vertigo, Tinnitus, Visual czy Vomit. Ze względu na różne algorytmy decyzyjne (Naiwny Klasyfikator Bayesa i Głęboka Sieć Neuronowa) porównanie wyników obu technik dla tych samych instancji zdaje się nie mieć sensu, co jednocześnie nie przekreśla użycia obu technik w konsultacji z osobą z wiedzą domenową w zakresie medycyny bólów głowy.

6. Wnioski

6.1. Podsumowanie

W pracy przeanalizowano podstawowe zastosowanie kilku popularnych algorytmów uczenia maszynowego. Oto podsumowanie najważniejszych wniosków z każdego z nich:

kNN

Przy podziale zbioru 75-25 algorytm osiągnął dokładność 75%, precyzję 75% oraz recall 71%. Algorytm wyraźnie gorzej radził sobie z rozpoznawaniem mniej licznych klas. Potencjalnie wyniki mogłyby być dużo lepsze dla bardziej licznego, zbalansowanego zbioru.

Naiwnym Klasyfikator Bayesa

Udało się osiągnąć dokładność 75%, precyzję 69% oraz recall 75%. Pomimo nieco gorszych wyników niż dla kNN zastosowanie Naiwnego Klasyfikatora Bayesa ma tę przewagę że pozwala pokazać podobieństwo do wszystkich możliwych klas, co może być użyteczne w praktycznych zastosowaniach medycznych.

Selekcja i ekstrakcja cech

Nie miały sensu zastosowania ze względu na niewielkie rozmiary zbioru danych i dużą wydajność obliczeń.

Perceptron wielowarstwowy

Charakteryzował się niezwykle wysoką skutecznością klasyfikacji: dokładność 94%, precyzja 95% oraz recall 94%. Dla mniejszej ilości epok jeszcze więcej ale optymalizator nie zakończył wtedy swojej pracy i była szansa na niemiarodajny wynik.

Sieć głęboka z funkcją aktywacji Softmax

Dokładność na zbliżonym poziomie co perceptron z tym że pozwala pokazać podobieństwo do wszystkich możliwych klas, co jak wspomniałem wyżej może mieć potencjalne zastosowanie w wykrywaniu bólów głowy o wielorakim pochodzeniu

Techniki LIME i SHAP

Mogą być cenną wskazówką które konkretnie cechy miały wpływ na wynik klasyfikacji. Powinniśmy mieć jednak na uwadze jak działają, jak interpretować wykresy i przede wszystkim mieć do dyspozycji osobę z wiedzą domenową.

6.2. Wnioski ogólne

Algorytmy uczenia maszynowego - zarówno sieci neuronowe jak i metody klasyfikacji mogą być przydatnym narzędziem w diagnostyce bólów głowy.

Szczególnie efektywne są tu sieci neuronowe ze względu na wysoką dokładność i precyzję.

Bez względu na wybrany algorytm warto zadbać o zbalansowany zbiór danych. Pozwoliło by to na większą pewność co do otrzymanych wyników.

Techniki LIME i SHAP mogą być wskazówką wyjaśniającą decyzje algorytmów.

Pomimo iż nie posiadam wykształcenia medycznego a wiedza domenowa z dziedziny bólów głowy nie jest wiedzą akademicką przypuszczam że klasyfikacja wieloklasowa może być cenną wskazówką że prócz objawów dominujących warto jeszcze zwrócić uwagę na inne objawy bo jak pokazują badania dany pacjent nie musi być dotknięty tylko przez jeden rodzaj bólu głowy.

Spis rysunków

| | |
|--|----|
| 1. Schemat działania SVM | 7 |
| 2. Graficzna interpretacja decyzji modelu | 12 |
| 3. Szczegółowy wykres istotności cech | 12 |
| 4. Wykres średniej dokładności walidacji krzyżowej | 16 |
| 5. Wykresy funkcji strat | 23 |
| 6. Zbiorcza prezentacja wyników LIME | 24 |
| 7. Szczegółowy rozkład wpływu cech na wynik | 25 |
| 8. Zbiorcza prezentacja wyników LIME - 2 | 25 |
| 9. Szczegółowy rozkład wpływu cech na wynik - 2 | 26 |
| 10. Zbiorcza prezentacja wyników LIME - 3 | 26 |
| 11. Szczegółowy rozkład wpływu cech na wynik - 3 | 27 |
| 12. Wpływ cech wg SHAP dla NKB | 28 |
| 13. Wpływ cech wg SHAP dla NKB - 2 | 29 |
| 14. Wpływ cech wg SHAP dla NKB - 3 | 30 |
| 15. Wpływ cech wg SHAP dla sieci | 31 |
| 16. Wpływ cech wg SHAP dla sieci - 2 | 32 |
| 17. Wpływ cech wg SHAP dla sieci - 3 | 32 |

Literatura

- [1] https://www.researchgate.net/publication/291331282_The_International_Classification_of_Headache_Disorders_3rd_edition_beta_version
- [2] <https://www.ehf-headache.com/>
- [3] <https://link.springer.com/article/10.1186/s10194-018-0909-4>
- [4] <https://codeocean.com/capsule/1269964/tree/v1>
- [5] <https://docs.python.org/3/license.html>
- [6] <https://github.com/pandas-dev/pandas/blob/main/LICENSE>
- [7] <https://github.com/numpy/numpy/blob/main/LICENSE.txt>
- [8] <https://github.com/mwaskom/seaborn/blob/master/LICENSE.md>
- [9] <https://github.com/tensorflow/tensorflow/blob/master/LICENSE>
- [10] Van Rossum, Guido and Drake, Fred L.
"Python 3 Reference Manual", 2009
ISBN 1441412697
- [11] <https://zenodo.org/records/10957263>
- [12] <https://doi.org/10.1038/s41586-020-2649-2>
- [13] <https://joss.theoj.org/papers/10.21105/joss.03021>
- [14] <https://zenodo.org/records/10798587>
- [15] A.Wosiak, R.Woźniak, Materiały wykładowe przedmiotu.
- [16] https://pl.wikipedia.org/wiki/Maszyna_wektor%C3%B3w_no%C5%9Bnych
- [17] <https://christophm.github.io/interpretable-ml-book/lime.html>
- [18] <https://christophm.github.io/interpretable-ml-book/shap.html>