ВЫПОЛНЕНО

Исполнитель НИОКР
Милтых Илья Сергеевич

ОТЧЕТ

о выполнении НИОКР по теме:

«Разработка компьютерной программы для исследования внутриорганного артериального русла почки человека с применением нейросетевого моделирования»

к Договору (Соглашению) № 19183ГУ/2023
от 11.03.2024 г.

Этап 2

Пензенская обл., с. Бессоновка, 2024

РЕФЕРАТ

Отчёт 15 с., 7 рис., 0 табл., 0 источн., 0 прил.

ВНУТРИОРГАННОЕ СОСУДИСТОЕ РУСЛО, БИФУРКАЦИИ, МОРФОМЕТРИЯ, ПОЧКА, НЕЙРОСЕТЕВОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

Целью данной работы является разработка компьютерной программы «3D-Vasculograph v.2» для исследования внутриорганного артериального русла почки человека путем численного и нейросетевого моделирования количественной анатомии дистальных участков артериального русла почки на основе измерений проксимальных участков.

В рамках второго этапа работы выполнена разработка архитектуры нейросетевой модели, произведено ее обучение, разработан лабораторных образец компьютерной программы «3D-Vasculograph v.2» для исследования внутриорганного артериального русла почки человека путем численного и нейросетевого моделирования количественной анатомии дистальных участков артериального русла почки на основе измерений проксимальных участков, а также проведено её тестирование.

По результатам работы составлен данный отчёт, состоящий из введения, заключения и 3 глав.

СОДЕРЖАНИЕ

ВВЕДЕНИЕ **3**

1 Разработка и обучение нейросетевой модели для моделирования артериальных бифуркаций внутриорганного артериального русла почки человека **4**

2 Разработка лабораторного образца компьютерной программы для нейросетевого моделирования количественной анатомии внутриорганного артериального русла почки **9**

3 Тестирование лабораторного образца компьютерной программы для нейросетевого моделирования количественной анатомии внутриорганного артериального русла почки **13**

ЗАКЛЮЧЕНИЕ **15**

ВВЕДЕНИЕ

Решение проблемы моделирования артериальных бифуркаций внутриорганного артериального русла почки человека является сложной задачей. Для построения корректной модели бифуркации почки человека необходимо одновременно решить 4 задачи предсказания:

1) Диаметра максимального нижестоящего сосуда;
2) Диаметра минимального нижестоящего сосуда;
3) Длины максимального нижестоящего сосуда;
4) Длины минимального нижестоящего сосуда.

Первые две задачи решаются при помощи линейных регрессионных уравнений. Однако для решения оставшихся двух задач регрессия не подходит. Причина в том, что длина сосуда имеет неявные зависимости между длинами и диаметрами сосудов предыдущего и текущего уровня.

В решении данной проблемы объективно могут помочь нейронные сети. Среди них вероятно присутствуют такие подходы и архитектуры, с помощью которых можно решить данную задачу. Однако при практической разработке выяснилось, что далеко не все сети можно использовать. Были испробованы такие архитектуры как: многослойный персептрон, рекуррентные сети LSTM архитектуры, KAN архитектура и графовые нейронные сети. В ходе работы наилучшие результаты были показаны с использованием именно графовых нейронных сетей. Это может быть объяснено тем, что сосуды в почке представляют собой именно граф.

Среди графовых сетей присутствует множество различных архитектур. Были испробованы архитектуры графовых сверточных нейронных сетей и графовые сети внимания. Наилучшие результаты показала именно Graph Attention Network (графовые сети внимания).

Разработка и обучение нейросетевой модели для моделирования артериальных бифуркаций внутриорганного артериального русла почки человека

Графовая нейронная сеть внимания представляет собой произвольное количество одноименных слоев, связанных между собой. Входными данными для слоя являются набор узловых признаков: $h = \{\vec{h}_1,\vec{h}_2,...,\vec{h}_{1N}\},\vec{h}_i \in \mathbb{R}^F$, где N - это количество узлов, а F - количество признаков в каждом узле. Выходом слоя будет являться набор узловых признаков $h' = \left\{ h'^{\vec{}}_1 \; h'^{\vec{}}_2 \; h'^{\vec{}}_N \; h'^{\vec{}}_i^{F'} \right\}$.

Чтобы иметь достаточную способность для преобразования входных признаков в более высокоуровневые функции необходимо хотя бы одно обучаемое линейное преобразование. Для этого на первом этапе используется общее линейное преобразование, параметризованное матрицей весов, $W \in \mathbb{R}^{F' \times F}$, примененной к каждому узлу. Затем применяется самовнимание узлов – общий механизм внимания $a{:}\mathbb{R}^{F'} \times \mathbb{R}^{F'} \to \mathbb{R}$ вычисляет коэффициенты внимания $e_{ij} = a\left(W\vec{h}_i, W\vec{h}_j\right)$, которые показывают, насколько важны узловые признаки j по отношению к узлу i. Чтобы коэффициенты были легко сравнимы между разными узлами, их нормализуют по всем выборам j с помощью функции `softmax`: $a_{ij} = \frac{exp(e_{ij})}{\sum_{k \in N_i} exp(e_{ik})}$. Нормализованные коэффициенты внимания используются для вычисления линейной комбинации соответствующих им признаков и использоваться они будут как финальные выходные признаки каждого узла (после применения нелинейности, σ): $h'^{\vec{}}_i\left(\sum_{j \in N_i} a_{ij} W\vec{h}_j\right)$.

Графовая сеть внимания имеет несколько преимуществ в сравнении с другими подходами:

1) Расчет каждого слоя внимания может быть эффективно распараллелен по всем ребрам, а вычисление выходных функций по всем узлам.

2) В отличие от графовых сверточных сетей графовая сеть внимания позволяет присваивать разные важности узлам в одной соседней среде, что обеспечивает значительный скачок вместимости модели.
3) Внимание применяется в общий манере ко всем ребрам в графе, и поэтому оно не зависит от предварительного доступа к глобальной структуре графа или (характеристикам) всех его узлов (ограничение многих предыдущих техник). Данные преимущества обуславливают хорошие результаты сети в сравнении с другими архитектурами.

Для программной разработки и обучения модели использовался язык `python` 3.11 и библиотека `PyTorch` версии 2.3.0 с использованием библиотеки `cuda` 2.3.1. Необходимость `cuda` обусловлена большим количеством данных, что сказывается на времени обучения. В качестве интерфейса для работы была использована надстройка `PyTorch` называемая `torch_geometric` версии 2.5.3. Выбор данной библиотеки обусловлен удобством ее использования, так как библиотека является надстройкой над `PyTorch`. В ней уже имеется множество реализованных архитектур графовых нейронных сетей, в частности слой графовой сети внимания, представленная в работе.

Входные данные представлены в виде `csv` файла из набора, размерностью 14 колонок и 9643 рядов.

В колонках указаны такие характеристики как:

1) Номер протокола исследуемой почки;
2) Пол;
3) Возраст;
4) Положение почки;
5) Генерация сосуда;
6) Уровень деления сосуда;
7) Диаметр сосуда;
8) Диаметр большего нижестоящего сосуда;
9) Диаметр меньшего нижестоящего сосуда;
10) Длина большего нижестоящего сосуда;

11) Длина меньшего нижестоящего сосуда;
12) Тип сосуда;
13) Вид сосуда.

Прежде чем обучать модель, данные необходимо подготовить. Предобработка данных заключалась в исключении рядов с пропущенными данными. Так как в наборе имеется 32 уникальных протокола почки, данные необходимо подготовить в правильной последовательности для точного обучения и нахождения зависимостей для указанных характеристик, таких как пол и возраст пациента. Для этого была использована библиотека `networkx` версии 3.3. Суть обработки заключалась в построении русла почки в виде графа на основании длин и диаметров сосудов. В результате такой предобработки удалось убрать несвязанные точки графа и соединить все протоколы в единой стартовой точке `0,0`. Визуализация первого протокола представлена на рисунке 1.1.

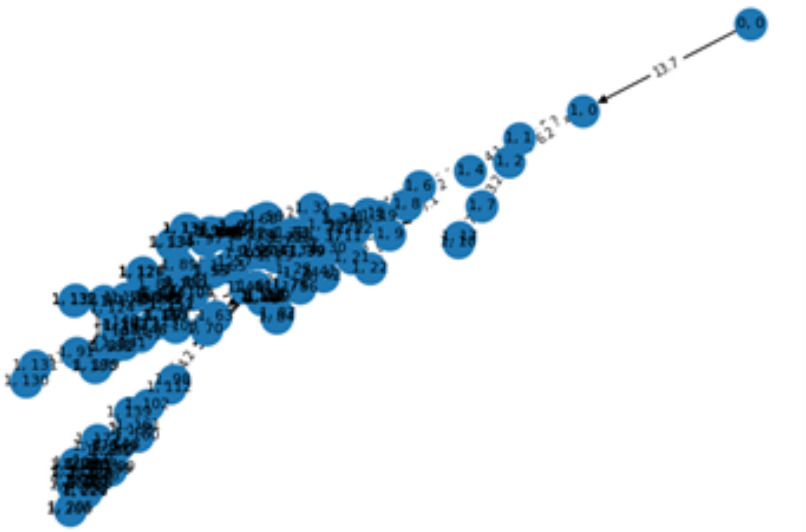

Рисунок 1.1 – Графическое отображение 1 протокола. В узле графа изображен его уникальный индекс, в ребрах графа указана длина сосуда.

Получившиеся данные были преобразованы в тензоры библиотеки `PyTorch` и объедены в один общий тензор пространства 1. Для использования в библиотеке `torch_geometric` данные необходимо разместить в

специальном классе `Data` для гомогенного графа. Для этого при помощи библиотеки `Numpy` версии 1.26.4 тензор преобразуется в матрицу смежности графа в виде массива. Для корректного соотношения узлов необходимо добавить индекс в объект `Data`, что также достигается при помощи библиотеки `Numpy`.

Так как необходимо находить максимальную и минимальную длину, то необходимо обучить две модели. Первая будет находить минимальную длину сосуда, вторая максимальную. Обе модели будут решать задачу регрессии.

Для обучения необходимо использовать только те признаки, которые явно известны или могут быть посчитаны с известной точностью. Этому удовлетворяют такие параметры, как:

1) Текущий диаметр;
2) Минимальный диаметр;
3) Максимальны диаметр;
4) Уровень деления сосуда;
5) Пол;
6) Возраст;
7) Текущая длина сосуда.

Как показали исследования, использование положения почки ухудшает предсказательную силу моделей. Использование минимальной и максимальной длины сосуда повышают точность предсказания модели, но данные характеристики не могут быть использованы ввиду их неопределенности на этапе предсказания нижестоящих длин. Генерация, тип и вид сосуда так же не могут быть заранее определены, так как их тоже необходимо знать до вычисления нижестоящих длин.

Результирующая модель была получена при помощи подбора количества слоев и их параметров, а также подбором параметра оптимизатора. В результате наилучшие результаты показала графовая сеть, состоящая из двух слоев графовой сети внимания, реализованной в библиотеке `torch_geometric`. Входной слой включает в себя 7 нейронов, скрытый 1024

нейрона, выходной слой 1 нейрон. Функцией активации между слоями является ReLu. Остальные параметры для слоев графовой сети внимания использованы по умолчанию, за исключением опции `concat=False` для второго слоя. В этом случае применяется усредненные значения для «мультиголовного внимания», а не объединенные по умолчанию. Наилучшие результаты показал оптимизатор Adam с параметрами `learning_rate = 0.001` и `weight_decay = 0.00001`. В качестве ограничения переобучения был использован контроль значений для тестовой выборки. В процессе обучения было позволено троекратное снижение показателя со значением неучитываемой дельты 0.01.

Разработка лабораторного образца компьютерной программы для нейросетевого моделирования количественной анатомии внутриорганного артериального русла почки

Для возможности корректного моделирования анатомии артериального русла почки необходимо объединить разработанные нейросетевые модели для нахождения максимального и минимального значений длин сосудов и графический интерфейс для удобной работы пользователя.

Программа моделирования артериального русла сосудов почки включает в себя два регрессионных уравнения для вычисления максимальных и минимальных диаметров сосудов. Для вычисления длин используются две сохраненные модели, которые показали наилучшие метрики качества в процессе обучения. Для корректной работы сохраненных моделей необходимо учитывать входные параметры, такие как пол и возраст моделируемого русла, а также уровень, до которого необходимо провести построение. В обязательном порядке нужно ввести значение длины и диаметра первого сегмента моделирования. Благодаря этим начальным данным производится вычисление нижестоящих сегментов – сначала производится расчет значений диаметров, так как для них необходимо знать только начальный сегмент, затем производится расчет длин. Такой порядок обусловлен тем, что для расчета нижестоящей длины необходимо знать значение диаметров как начального, так и нижестоящего сегмента. Затем каждому смоделированному сегменту приравнивается уникальный индекс начального и конечного сегмента. Все данные сохраняются в `DataFrame` библиотеки `pandas` версии 2.2.2.

Для удобной работы с программой был разработан графический интерфейс. Для создания интерфейса был выбран язык `python` версии 3.11.7 и библиотека `PyQt5` версии 5.15.11. Выбор данной библиотеки был обусловлен относительной простотой реализации графического интерфейса и быстрой работой конечного продукта, так как внутри используется одноименная библиотека `Qt` на языке C++.

Графический интерфейс состоит из трех зон. В левой зоне происходит настройка модели, где имеется возможность выбрать возраст и пол пациента, начальное значение диаметра и начальное значение длины первого сегмента сосуда (рис. 2.1). Дальше остается выбрать количество уровней для расчета и нажать кнопку расчет модели.

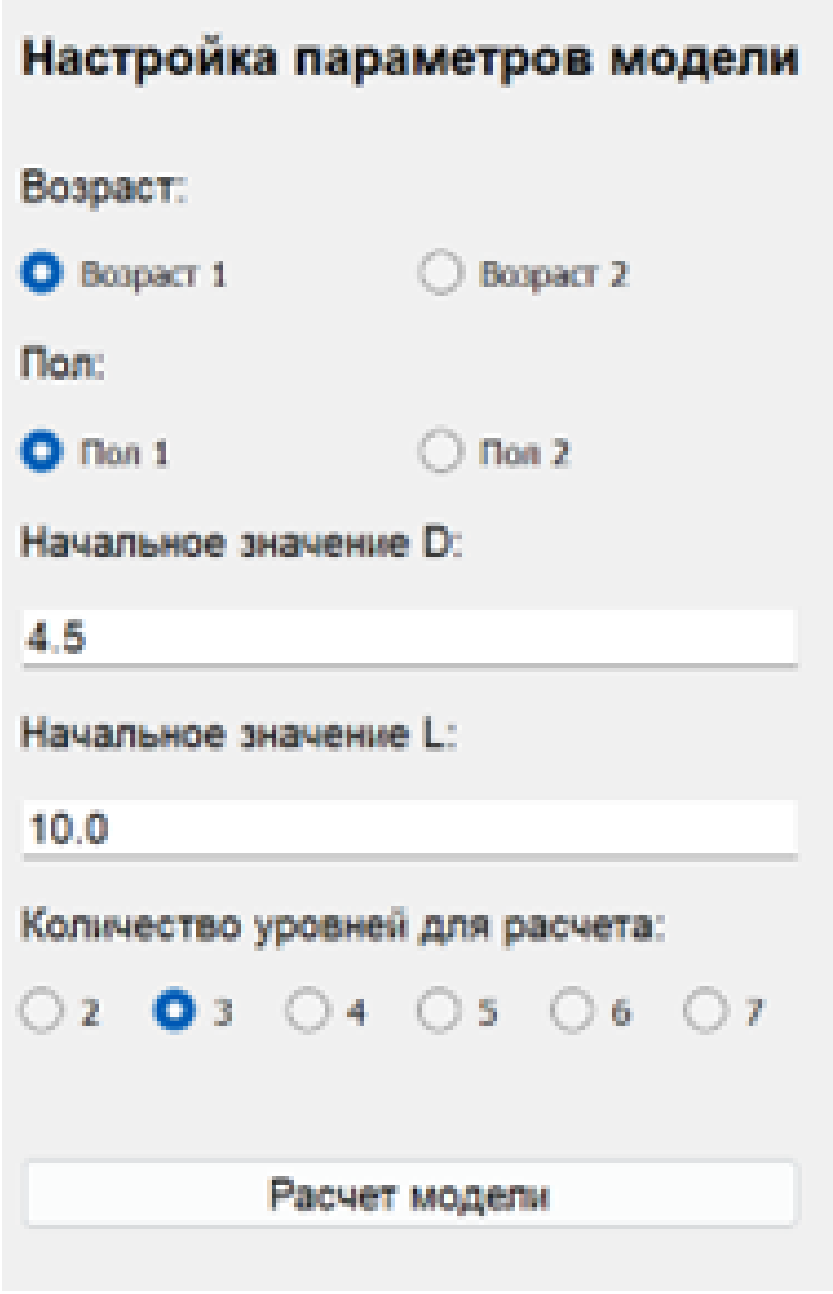

Рисунок 2.1 – Интерфейс инициализации модели для расчета

После расчета запускается программа моделирования. Ее результаты будут отображены в центральной части в виде таблицы. Имеется возможность редактировать имеющиеся сегменты. Так же можно добавлять новые сегменты

вручную при нажатии соответствующей кнопки внизу. В дополнение у пользователя имеется возможность выгрузить модель в csv формате для дальнейшей работы с сырыми данными или импорта в другую программу. Центральная часть интерфейса представлена на рисунке 2.2.

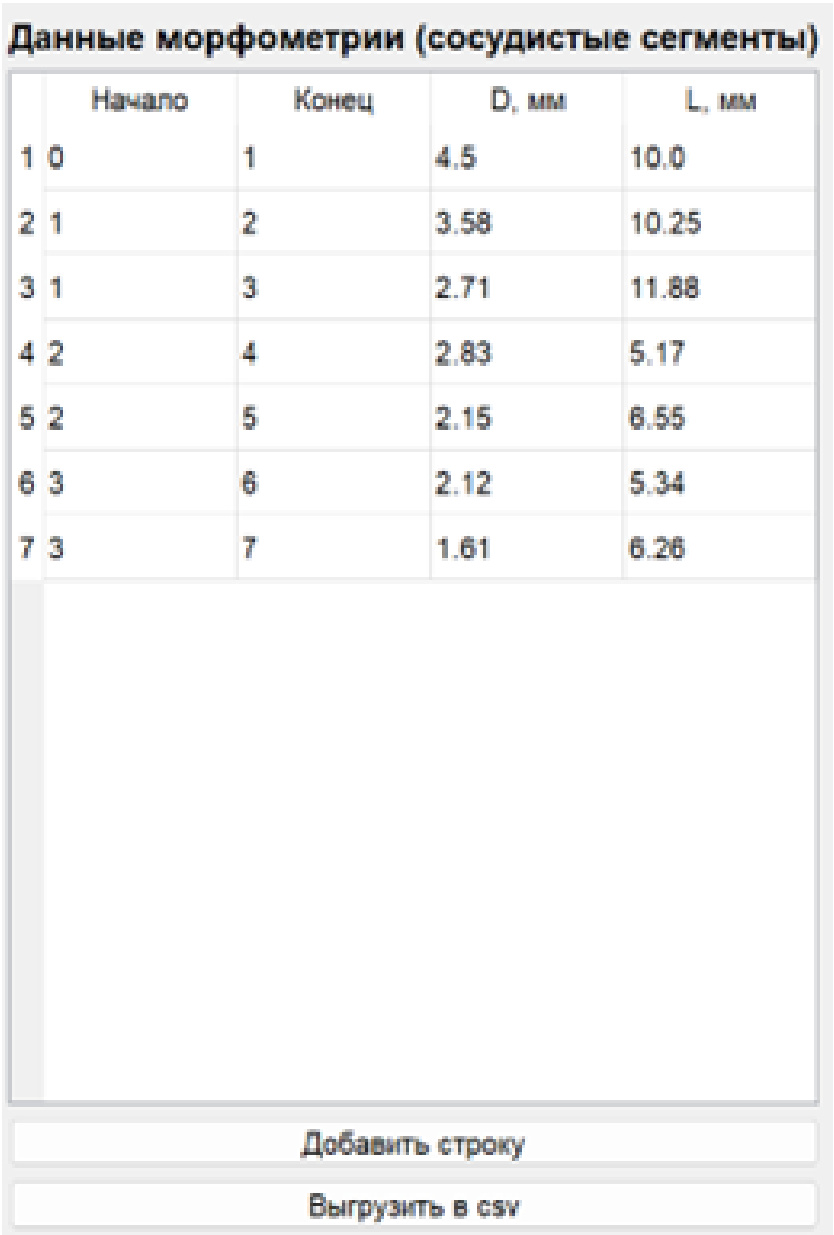

Рисунок 2.2 – Центральный интерфейс программы

В правой части есть возможность графического отображения построенных сегментов. Для этого используется уже упоминавшаяся библиотека `networkx`. В качестве алгоритма для расположения узлов графа выбрана функция стоимости длины пути Камада-Каваи. Для построения необходимо нажать кнопку построить изображение в левой части интерфейса.

При необходимости получившиеся изображение можно сохранить, так же нажав соответствующую кнопку. Полный интерфейс программы представлен на рисунке 2.3.

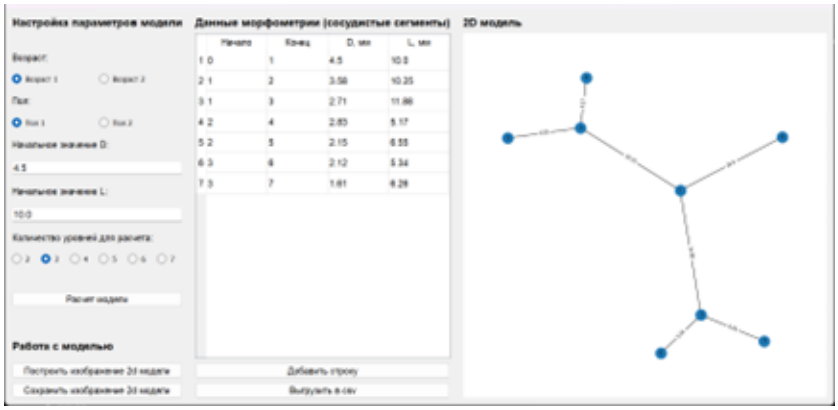

Рисунок 2.3 – Центральный интерфейс программы

Тестирование лабораторного образца компьютерной программы для нейросетевого моделирования количественной анатомии внутриорганного артериального русла почки

В качестве результатов тестирования программы будут представлены метрики качества обучения модели. Для оценки качества использовались значения r^2. Для максимальной длины на тренировочном наборе $r^2 = 0.75$, на тестовом $r^2 = 0.74$. В качестве функции потерь использовалась функция MSE, ее значения во время обучения приведены на рисунке 3.1.

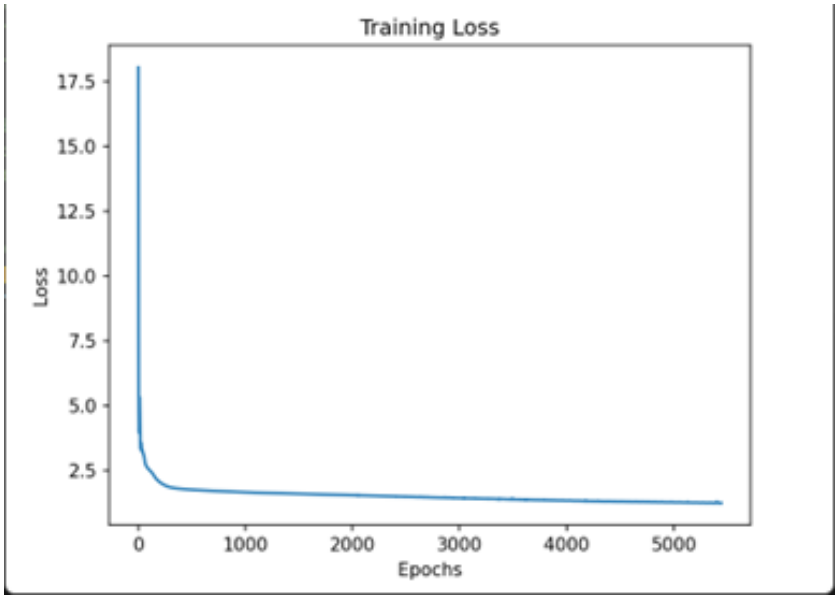

Рисунок 3.1 – Функция потерь для модели расчета максимальной длины

Для модели расчета минимальной длины использовались аналогичные метрики и функции потерь. Значение на тренировочном наборе $r^2 = 0.77$, на тестовом $r^2 = 0.73$. Значение функции потерь приведено на рисунке 3.2.

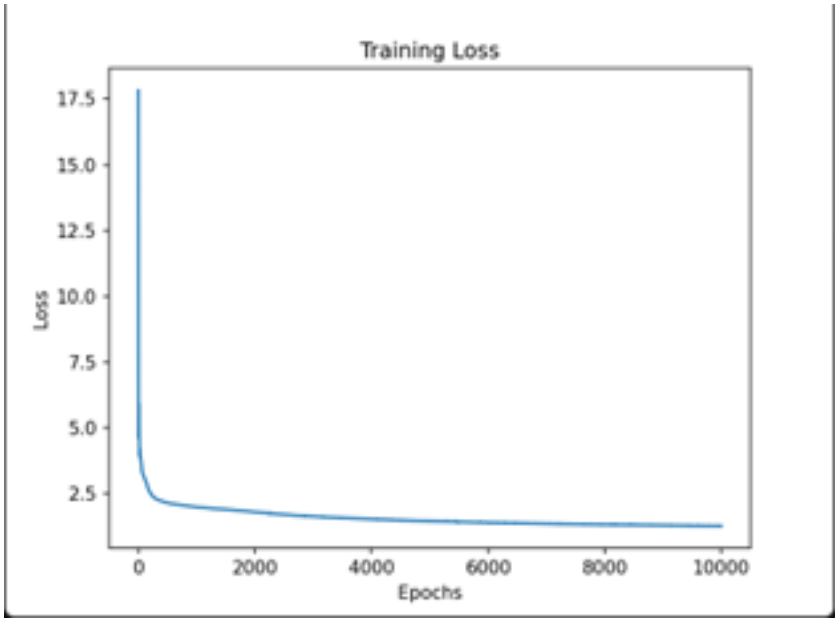

Рисунок 3.2 – Функция потерь для модели расчета минимальной длины

В результате работы программы генерируется `csv` файл, содержащий информацию о геометрии внутриорганного артериального русла. На рисунке 3.3 (б) представлена визуализация внутриорганного артериального русла почки, полученная при помощи нейросетевого моделирования, в сравнении с моделью, построенной по данным морфометрии (рис. 3.3 (а).

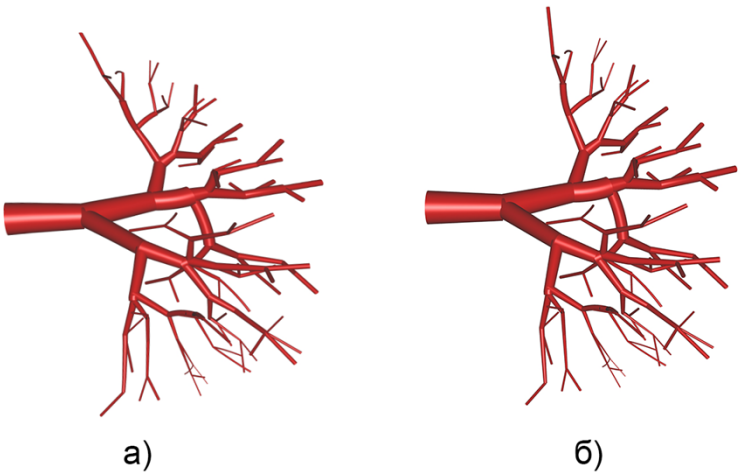

Рисунок 3.3 – Модель внутриорганного артериального русла почки, построенная по данным морфометрии (а) и нейросетевого моделирования (б)

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В ходе выполнения данной работы был разработан лабораторный образец компьютерной программы «3D-Vasculograph v.2», предназначенный исследования внутриорганного артериального русла почки человека путем численного и нейросетевого моделирования количественной анатомии дистальных участков артериального русла почки на основе измерений проксимальных участков. В рамках проекта была успешно создана архитектура графовой нейронной сети, адаптированная для задачи моделирования бифуркаций артериального русла. На основе данной модели был разработан лабораторный образец программного обеспечения, который прошел этап тестирования и продемонстрировал высокие показатели точности в задачах предсказания длины и диаметра сосудов.

Полученные результаты подтверждают эффективность использования нейросетевого подхода для решения поставленных задач и открывают новые перспективы в области численного моделирования анатомии внутриорганных сосудистых русел. Программа обладает удобным графическим интерфейсом, что делает ее доступной для использования в исследовательской и медицинской практике.

В дальнейшем предполагается доработка программного обеспечения с целью расширения его функциональных возможностей и повышения точности моделирования, а также проведение дополнительных исследований по адаптации программы к моделированию внутриорганных сосудистых русел других органов.

Реквизиты

ГРАНТОПОЛУЧАТЕЛЬ:
Милтых Илья Сергеевич

Дата рождения: 20.02.2001

Паспорт: 56-20-608016 выдан УМВД России по Пензенской области 03.03.2021

ИНН: 580902509930

Адрес регистрации:

185013, Респ. Карелия, г. Петрозаводск, р-н Рыбка, ул. Боровая, д. 46, кв. 12

Банковские реквизиты:
Лицевой счет: 40817810848001211668 в банке ПЕНЗЕНСКОЕ ОТДЕЛЕНИЕ N8624 ПАО СБЕРБАНК (Пенза), БИК 045655635, к/с 30101810000000000635

ГРАНТОПОЛУЧАТЕЛЬ

Милтых И. С.