

УДК 004.932

Поляченко Артур Ігорович,
аспірант Київський національний університет імені Тараса Шевченка

ПОШУК КОНТУРІВ ОБЛАСТЕЙ ІЗ ПЕВНОЮ ПАТОЛОГІЧНОЮ СТРУКТУРОЮ НА МРТ ЗНІМКАХ

Поляченко А. І. Пошук контурів областей із певною патологічною структурою на МРТ знімках. У статті розглянуто та запропоновано методи та моделі пошуку контурів областей із певною патологічною структурою на МРТ знімках. Для розв'язку проблеми локалізації аномальних тканинних утворень на МРТ знімках можуть бути використані коефіцієнти просторової автокореляції на базі локального та глобального індексів Морана. Для пошуку контурів областей із певною патологічною структурою на МРТ знімках запропоновано використання згорткових нейронних мереж.

Ключові слова: пошук, локалізація, МРТ, автокореляція, згорткові нейронні мережі, патологічна структура.

Поляченко А. И. Поиск контуров областей с определенной патологической структурой на МРТ снимках. В статье рассмотрены и предложены методы и модели поиска контуров областей с определенной патологической структурой на МРТ снимках. Для решения проблемы локализации аномальных тканевых образований на МРТ снимках могут быть использованы коэффициенты пространственной автокорреляции на базе локального и глобального индексов Морана. Для поиска контуров областей с определенной патологической структурой на МРТ снимках предложено использование сверхточных нейронных сетей.

Ключевые слова: поиск, локализация, МРТ, автокорреляция, сверхточные нейронные сети, патологическая структура.

Poliachenko A. I. Search for the contours of areas with a specific pathological structure on MRI images. The article reviews and suggests methods and models for searching the outlines of areas with a specific pathological structure on MRI images. To solve the problem of the localization of abnormal tissue formations on MRI images, spatial autocorrelation coefficients based on local and global Moran indices can be used. The use of convolutional neural networks has been proposed to search for contours of areas with a specific pathological structure on MRI images.

Keywords: search, localization, MRI, autocorrelation, convolutional neural networks, pathological structure.

Постановка наукової проблеми. Успіхи сучасної медицини суттєво залежать від досягнень у сфері медичного приладобудування та розвитку медичного програмного забезпечення. Однією з найважливіших задач, що постає перед лікарями, є визначення точних меж пухлин та інших аномальних утворень у тканинах організму людини. Для обстеження пацієнта, як правило, використовуються методи комп'ютерної та магнітно-резонансної томографії (КТ та МРТ відповідно). Обидва методи дозволяють проводити пошарове вивчення внутрішньої будови органічних структур без їх фізичного пошкодження (якщо не розглядати можливі побічні ефекти у результаті опромінення чи тривалого знаходження у потужному магнітному полі).

У світі сьогодні існує значна кількість алгоритмів для кластеризації медичних зображень, які можна розділити на структурні та статистичні. Структурні методи базуються на просторових властивостях зображень і є чутливими до артефактів та шуму, що негативно відображається на їх застосовності. Також вони є залежними від чіткості границь між областями на зображенні та обраного початкового наближення. З іншого боку, статистичні методи розглядають зображення як деякий розподіл випадкової величини інтенсивності кольору пікселів. Проблема полягає у тому, що основною характеристикою ураженої тканини є її внутрішня структура. Іншими словами, густина ураженої та неуразеної тканини може бути дуже схожою. Як наслідок, відповідні області на КТ чи МРТ знімку будуть досить подібними і аналіз значень інтенсивності не зможе надати потрібної інформації. Існуючі алгоритми концентруються на виявленні контрастних переходів у зображенні як основний засіб кластеризації.

Застосування методів просторової статистики вперше відбулося в 40-х роках ХХ століття такими вченими як П. Моран [1, 16] і Р. Джири [1, 9]. Практично до 70-х років ХХ століття дані методи просторової статистики не мали розвитку.

Ученими А. Кліффом і Дж. Ордом у 1973 році була опублікована робота [6], яка присвячена просторовій залежності (автокореляції) в просторових даних. Поряд з тим, Ж. Палінк вперше вводить термін «просторова економетрика» [17], як новий напрямок науки про просторову автокореляцію та асиметрію в просторових зв'язках. Подальший розвиток методів просторової статистики супроводжується розробками статистичних тестів для оцінки просторових регресивних моделей.

Потужним поштовхом на початку 1990-х років для застосування і розвитку методів просторової статистики стала поява комп'ютерних технологій і мережі Інтернет, а також загальний розвиток

прикладних наук. У зв'язку з цим з'являються нові області для застосування методів просторової статистики. Книга [3] була однією з перших фундаментальних робіт того часу. Автор даної книги [3] визначає просторову економетрику як набір методів для роботи з особливостями просторових даних в статистичному аналізі та робить введення поняття просторових ефектів, що мають безпосереднє відношення до просторової залежності (автокореляції) і гетерогенності (неоднорідності) даних. Як правило, на практиці побачити просторову автокореляцію і неоднорідність не так вже й просто. Потрібно відзначити, що сучасна література про методи просторової статистики присвячена в основному різним тестам на просторову автокореляцію. На даний момент розроблено безліч тестів для виявлення просторової автокореляції, такі як статистики Морана, Джири, Вальда, тест Гетіса і Орда тощо.

Для пошуку контурів областей із певною патологічною структурою на МРТ знімках необхідно проаналізувати методи і моделі аналізу просторових даних і запропонувати нове рішення.

Аналіз останніх досліджень і публікацій. У даний час просторовий статистичний аналіз спирається на наявність просторових взаємозв'язків між досліджуваними об'єктами (зображеннями). Для визначення таких зв'язків задаються матриці просторових ваг, що формалізують допущення, що даний об'єкт (зображення) має зв'язок з найближчими сусідніми об'єктами (зображеннями) [21].

Надалі в роботі буде використовуватися слово зображення, позначаючи при цьому також і окрему частину цього зображення. Через відсутність жорстких правил визначення не тільки просторових ваг, а й кола сусідніх об'єктів (зображень), існує безліч різних метрик в просторі. При цьому, як вибір сусідніх об'єктів (зображень) так і визначення просторових ваг не обмежується тільки граничним розташуванням. Широкого застосування знайшла зміна інтенсивності зображень сусідніх об'єктів (зображень).

Для отримання гарних асимптотичних властивостей оцінок, матриця просторових ваг повинна при цьому відповідати умовам постійності, тобто мати обмеження на просторові ваги і їх суму.

Існують наступні види матриць просторових ваг [3, 8]:

- матриця граничних сусідів;
- матриця найближчих сусідів;
- матриця відстаней;
- матриця відстаней, з урахуванням розміру зображення.

Матриці просторових ваг повинні бути квадратними. При цьому головна діагональ матриці складається з нулів. Таким чином, виключається вплив об'єкта (зображення чи його частини) самого на себе. Рядки матриці містять ваги, з якими сусідні об'єкти впливають на даний об'єкт. Найчастіше, вагова матриця нормалізується за рядками (сума ваг за кожним рядком матриці дорівнює одиниці). Така нормалізація дозволяє звертати матриці в статистичних пакетах і враховувати відносні, а не абсолютні відстані між об'єктами (зображеннями або їх частинами) в разі використання матриці відстаней.

Бінарна матриця граничних сусідів (contiguity matrix) [2, 4] є одним з найбільш простих способів обліку просторових взаємозв'язків:

$$W_{ij} = \begin{cases} 0, & \text{якщо } i = j, \\ 1, & \text{якщо } j \text{ межує з } i, \\ 0, & \text{не межує,} \end{cases} \quad (1)$$

в якій вказується, що на об'єкт (зображення) впливають тільки ті сусіди, які межують з ним.

Необхідно відзначити, що через бінарність матриці при нормалізації за рядками можна прийти до того, що для досліджуваної частини зображення вплив сусідніх частин зображень враховується з одними і тими ж вагами. У зв'язку з цим таку матрицю краще використовувати, коли розглядаються частини зображень, які є однорідними за площею. У цьому випадку площа зображення буде мати рівномірне розподілення для частин зображення. Тоді використання таких ваг може бути обгрунтованим.

Більш повно розташування сусідніх зображень може бути описано за допомогою бінарної матриці найближчих сусідів, в якій близькість між об'єктами врахована в такий спосіб:

$$W_{ij} = \begin{cases} 0, & \text{якщо } i = j, \\ 1, & \text{якщо } d_{ij} \leq d_i(k), \\ 0, & \text{якщо } d_{ij} > d_i(k), \end{cases} \quad (2)$$

де d_{ij} – відстані між об'єктами (центрами зображень);

$d_i(k)$ – мінімальна відстань k -го порядку між об'єктами i та j .

У цьому випадку число сусідів для кожного об'єкта дорівнюватиме k . Основна ідея цього методу полягає в тому, щоб розрахувати відстані від досліджуваного об'єкта до всіх інших частин. Потім необхідно взяти k мінімальних відстаней і якраз k -а відстань для досліджуваного об'єкта буде тією межею, за якою взаємодія не враховується.

Ще точніше близькість об'єктів можна врахувати за допомогою стандартної матриці відстаней (distance matrix), просторові ваги якої розраховуються наступним чином:

$$W_{ij} = \begin{cases} 0, & \text{якщо } i = j, \\ 1/d_{ij}^\gamma, & \text{якщо } d_{ij} \leq D(q), \\ 0, & \text{якщо } d_{ij} > D(q), \end{cases} \quad (3)$$

де $D(q)$ – квантілі відстаней, $q = 1..4$. У більшості випадків, показник ступеня γ в (3) береться рівним двом. Тоді можна отримати аналог гравітаційної моделі: тяжіння об'єктів обернено пропорційно квадрату відстані між ними. Відповідно, чим далі розташовуються частини зображень одна від одного, тим менше вони взаємодіють. Коли q :

$$W_{ij} = \begin{cases} 0, & \text{якщо } i = j, \\ A_j/d_{ij}^\gamma, & \text{якщо } d_{ij} \leq D(q), \\ 0, & \text{якщо } d_{ij} > D(q), \end{cases} \quad (4)$$

де A_j – показник, що відображає вагомість або інтенсивність (або яскравість) сусідньої частини зображення j . Даний підхід дозволяє врахувати додатковий параметр, що характеризує кожну частину зображень.

У дослідженнях [9-12] були виявлені просторові викиди (області, у яких є значні відмінності в значеннях щодо їхніх сусідів). Для обчислення такої неоднорідності використовувалася локальна просторова статистична середня:

$$G_i = \sum_{j=1}^n \omega_{ij} \xi_{ij} \quad (5)$$

де G_i – мірою розташування частини зображення i , що визначена за ваговою матрицею з елементами ω_{ij} і ξ_{ij} , що показує взаємодію між значеннями атрибутів в їх місцях розташування i і j .

Ця статистична величина буде вимірювати ступінь просторових взаємодій різних показників в межах вказаної відстані даного місця розташування частини зображення. Таким чином, локальна просторова середня є корисним аналітичним інструментом для того, щоб ідентифікувати просторові тенденції певних зображень.

Підсумовуючи, необхідно відзначити, що матриця просторових ваг є формалізацією припущення про взаємні зв'язки частин зображення. При цьому сусідні частини зображення, як правило, більше пов'язані одна з одною, ніж розташовані на значній відстані. В усіх методах просторової статистики, основою яких є просторова авторегресія, закладено обчислення залежностей для відповідного дослідження зображення від усіх інших його частин. Для обчислення таких залежностей між частинами зображення необхідна побудова просторової матриці ваг.

Просторова автокореляція схожа на коефіцієнт автокореляції, що використовується при аналізі часових рядів [18-21]. На відміну від часових рядів, де спостерігаються показники впорядковані в часі, просторова автокореляція проводить оцінку ступеня взаємозв'язку між досліджуваними показниками, які впорядковані в просторі. При цьому позитивній просторовій автокореляції відповідає утворення кластерів в просторі спостережень з близькими показниками. У разі негативної просторової автокореляції поруч будуть групуватися об'єкти, що володіють несхожими характеристиками. Існує безліч тестів для перевірки просторової автокореляції. Однак більшість з них не надає повноти інформації про характер структурованості деякої ознаки, а лише служать для перевірки гіпотези, що близько розташовані частини зображення більш схожі за певною ознакою, а більш віддалені – менш схожі. У разі складної структури, коли переходи між сусідніми ділянками зображення мають «нелінійний» характер (знов утворена пухлина), більш точну картину можна отримати, використовуючи показники просторової автокореляції (Spatial autocorrelation), такі як, коефіцієнт I – Морана або C – Джири.

Показник I загальної просторової автокореляції (статистика Морана) [3, 15] розраховується наступним чином:

$$I = \frac{n \sum_i^n \sum_j^n \omega_{ij} (X_i - \bar{X})(X_j - \bar{X})}{S_0 \sum_i^n (X_i - \bar{X})^2}, \quad (6)$$

де X – досліджувана ознака;

$S_0 = \sum_i^n \sum_j^n \omega_{ij}$ – сума ваг просторової матриці W .

Якщо позначити відхилення ознаки від середнього значення \bar{X} як $Z = X - \bar{X}$, то останній вираз можна записати в наступній матричній формі:

$$I = \frac{n Z' W Z}{S_0 Z' Z}. \quad (7)$$

Коефіцієнт просторової автокореляції Морана I являє собою ступінь лінійного зв'язку між вектором Z нормованих значень показника X і вектором WZ просторово зважених середнього показника \bar{X} сусідніх частин зображення, який називається просторовим лагом (Spatially lagged vector). Статистика I , більшого математичного очікування відповідає позитивній $E(I) = -1/(n-1)$ просторовій автокореляції (кластеризація). Таким чином, великим значенням зважених середнього показника \bar{X} сусідніх частин зображення відповідають великі значення X кожної з частин зображення. Відповідно, статистика I , меншого математичного очікування, характеризується присутністю негативної просторової автокореляції. При цьому індекс Морана знаходиться в межах $-1 \leq I \leq 1$:

- якщо ж $I = 0$, то просторова кореляція відсутня;
- при $-1 \leq I < 0$ – присутня негативна просторова кореляція;
- при $0 < I \leq 1$ – присутня позитивна просторова кореляція.

Результати аналізу інтерпретуються в контексті нульової гіпотези, яка містить те, що досліджувані показники розподілені випадково між частинами зображень, іншими словами просторові процеси, які створили спостережувану структуру значень, носять випадковий характер. Для визначення можливості відхилення нульової гіпотези обчислюються p -значення і Z -оцінка. P -значення є імовірністю того, що досліджувані просторові закономірності були створені випадковим процесом. Чим менше p -значення, тим менше імовірність випадкового характеру розподілу явища. Z -оцінка є стандартним відхиленням. Значення Z -оцінки, що знаходяться в межах $-1,96 \dots +1,96$, являють собою очікуваний результат і свідчать про випадковий характер поширення явища.

Для зображення можна використати двовимірний простір значень інтенсивності з евклідовою відстанню в якості просторової ваги (рис. 1), з глобальним індексом Морана $I = -1$.

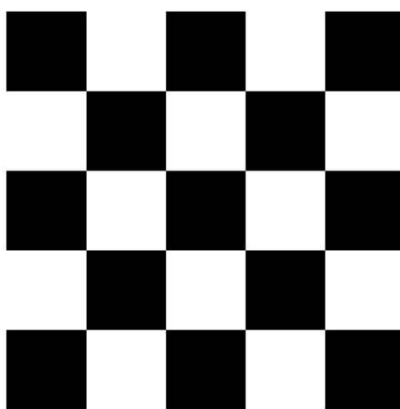


Рис. 1. Двовимірний простір значень інтенсивності з евклідовою відстанню в якості просторової ваги (Global Moran's $I = -1$)

Міра просторової автокореляції (статистика Джири C) вводиться наступним чином:

$$C = \frac{(n-1) \sum_i^n \sum_j^n \omega_{ij} (X_i - X_j)^2}{2S_0 \sum_i^n (X_i - \bar{X})^2} \quad (8)$$

де X – досліджувана ознака;

$S_0 = \sum_i^n \sum_j^n \omega_{ij}$ – сума ваг просторової матриці W .

Індекс Джири лежить в межах $0 \leq C \leq 2$:

- якщо $C = 1$, то просторова кореляція відсутня;
- при $1 < C \leq 2$, то присутня негативна просторова кореляція;
- при $0 \leq C < 1$, то присутня позитивна просторова кореляція.

Статистики Джири і Морана пов'язані, але не є ідентичними. Індекс Морана I є показником глобальної просторової автокореляції, в той час як міра Джири C є більш чутливою до локальної просторової автокореляції [2, 9].

Важливим етапом аналізу отриманих даних є побудова просторової діаграми розсіювання Морана. По осі абсцис відкладаються стандартизовані z -значення досліджуваного показника, а по осі ординат – значення просторового фактора Wz . На діаграмі відображається лінія регресії Wz на z , нахил якої дорівнює коефіцієнту загальної просторової автокореляції I при стандартизованій матриці ваг [20].

Коефіцієнт просторової автокореляції показує ступінь лінійного взаємозв'язку між вектором z зосереджених значень досліджуваного показника і вектором Wz просторово зважених зосереджених значень досліджуваного показника в сусідніх частинах зображення, який називається просторовим лагом (Spatially lagged vector) [20].

Просторова діаграма розсіювання (Moran Scatter Plot) дозволяє наочно візуалізувати розкид значень досліджуваного показника щодо просторового лага.

Для прикладу, на рис. 2 показано, що на осі абсцис відкладаються значення вектора z , а на осі ординат – значення вектора Wz . Також на діаграмі наноситься лінія регресії Wz на z , кут нахилу якої відповідає індексу Морана I [14]. Діаграма розсіювання ділиться на чотири квадранта: High-High (HH), High-Low (HL), Low-High (LH), Low-Low (LL) (рис. 2).

Квадранти відповідають певним видам розташування:

- лівий верхній квадрант діаграми (LH) характеризується угрупованням частин зображень з низьким значенням досліджуваного показника в оточенні частин зображень з високим значенням показника;
- правий верхній (HH) – частини зображень з високим значенням досліджуваного показника знаходяться в оточенні частин зображень з високими значеннями досліджуваного показника;
- лівий нижній (LL) – частини зображень з низьким значенням досліджуваного показника оточені частинами зображень з низькими значеннями показника;
- правий нижній (HL) – частини зображень з високим значенням досліджуваного показника, оточені частинами зображень з низьким значенням показника.

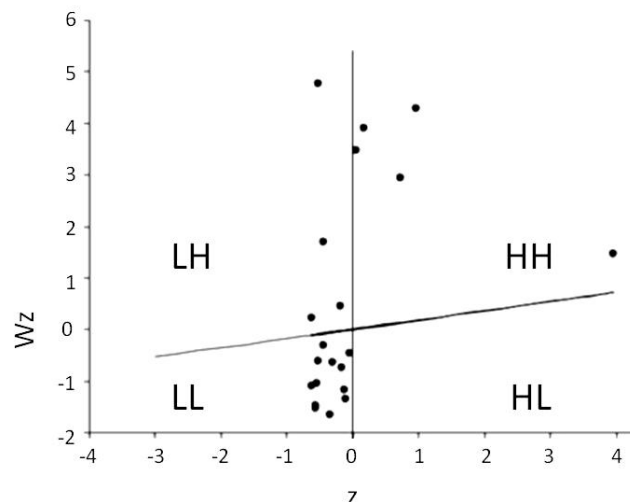


Рис. 2. Приклад просторової діаграми розсіювання (Global Moran's $I = 0,179$)

Квадранту LH і HL відповідає негативна просторова автокореляція, що свідчить про кластеризацію розрізаних значень досліджуваного показника.

Квадрантам LL і HH відповідає позитивна просторова автокореляція, яка свідчить про угруповання частин зображень з близькими значеннями досліджуваного показника. По суті, просторова діаграма розсіювання дозволяє визначити нетипові частини зображення, що відносяться до квадрантів LH і HL.

Для перевірки гіпотези про існування просторової кореляції може бути розрахована статистика Морана I або статистика Джири C .

Визначення просторової кореляції, що включає підрахунок коефіцієнта загальної просторової автокореляції і побудова діаграми розсіювання, є першим кроком в аналізі просторових даних. Індекс Морана I вказує на те, що значення досліджуваної змінної X просторово кластеризовані більшою мірою, на відміну від випадкового розподілу, але не пояснює які причини такого явища. Тому наступним етапом аналізу є перевірка гіпотез про характер просторових взаємодій.

Локальний індекс Морана (LISA – Local Index Spatial Autocorrelation) розраховується за формулою [5, 13]:

$$I_{Li} = n \frac{(X_i - \bar{X}) \sum_j \omega_{ij} (X_j - \bar{X})}{\sum_j (X_i - \bar{X})^2}, \quad (9)$$

При $I_{Li} < 0$ присутня негативна автокореляція для частин зображення i , тобто дана частина зображення за даним значенням істотно відрізняється від сусідніх частин зображення (outlier).

При $I_{Li} > 0$ присутня позитивна автокореляція, тобто досліджувана частина зображення за даним значенням подібна сусіднім частинам зображення (cluster).

При $|I_{Li}| > |I_{Lj}|$ – подібність або відмінність частини зображення i з оточуючими її сусідніми частинами зображення є великою, ніж в порівнянні з сусідніми частинами зображення j .

Матричні методи розрахунку складових локального індексу Морана. У процесі дослідження характеристик взаємовпливу досліджуваної частини зображення і всіх ближніх або далеких її частин можливо вести пошук для:

- будь-якої частини зображення окремо;
- сукупності частин зображення, що об'єднані за одним критерієм;
- сукупності частин зображення, що об'єднані відразу за кількома критеріями.

Вихідною посилкою такого твердження є аналіз математичних дій, виконуваних при визначенні локального індексу Морана. Результатом одного з дій є матриця складових локального індексу Морана по кожній частині зображення. При цьому важливо, що в ній вже враховано ефект автокореляції. Можна вважати, що зазначені складові виступають не тільки в якості проміжних результатів, але можуть бути рівноцінно використані з метою поглибленого аналізу взаємозв'язків за кожною частиною зображення.

Отже, крім глобального і локального індексів Морана, можливо виявити складові локального індексу за кожною частиною зображення, тобто охарактеризувати силу взаємовпливу частини зображення по відношенню до інших частин зображення.

Окрім того, слід зазначити, що сума складових по кожній частині зображення є не що інше, як сам локальний індекс Морана, а сума всіх локальних індексів Морана становить глобальний індекс Морана. Таким чином, локальний індекс Морана можна визначити двома способами:

- за формулою (9);
- у якості проміжної дії при розрахунку глобального індексу I Морана:

$$I_{Li} = z_i \sum_j W_{ij} z_j, \quad (10)$$

де I_{Li} – локальний індекс Морана для конкретної частини зображення i .

Через локальний індекс Морана I_{Li} досліджуваних частин зображення можна визначити глобальний індекс I Морана за наступною формулою:

$$I = \sum_i I_{Li}. \quad (11)$$

Просторові регресивні моделі є потужним інструментом, що дозволяє при обліку фактора розташування зображення оцінювати різні характеристики його частин, наприклад, віддаленість від локального чи досліджуваного центру відповідної частини зображення, інтенсивність чи яскравість тощо.

При побудові просторових регресійних моделей доводиться стикатися з проблемою наявності просторових залежностей серед збурюючих факторів. У зв'язку з цим класичний МНК стає неефективним, оскільки призводить до зміщення оцінок дисперсії залишків, завищеною величиною R^2 і, як наслідок, неспроможними статистичними висновками. Також присутність просторової кореляції в залишках спотворює властивості тестів при перевірці значимості включених у модель змінних і діагностики залишків. Щоб уникнути таких особливостей просторових моделей, при їх побудові необхідно застосовувати ефективні тести перевірки на наявність просторової автокореляції в залишках. Якщо останнє підтверджується, то необхідно застосовувати відповідні методи оцінювання та специфікації моделі, які дозволять нейтралізувати негативний ефект від просторових кореляцій. Як правило, при аналізі просторових даних розглядаються три види моделей: модель просторового лага, модель лага тільки на екзогенні змінні і модель просторової помилки. Розглянемо кожну із запропонованих моделей більш докладно.

У матричній формі модель просторового лага (змішана просторова авторегресійна модель) записується у вигляді [1, 8]:

$$Y = \alpha + \beta x + \rho WY + \varepsilon, \quad \varepsilon \sim N(0, \sigma^2 I), \quad (12)$$

де Y – $(n \times 1)$ значення ендогенної (що пояснюється) змінної;

X – $(n \times k)$ екзогенні (що пояснюються) змінні;

β – $(k \times 1)$ коефіцієнти;

WY – просторовий лаг на ендогенну змінну;

ρ – коефіцієнт просторової авторегресії.

Далі розглянемо модель конвергенції з просторовим лагом на ендогенну змінну, що має такий вигляд:

$$g_T = \alpha + \beta y_0 + \rho W g_T + \varepsilon, \quad \varepsilon \sim N(0, \sigma^2 I). \quad (13)$$

По суті, у даній моделі перевіряється гіпотеза, про те, що частини зображення, що знаходяться в оточенні інших частин, будуть мати таку ж саму тенденцію до зміни. Модель (2.13) являє собою мінімальну модель умовної конвергенції.

Альтернативний спосіб моделювання взаємовпливу частин зображення – включення в модель просторового лага на екзогенні змінні:

$$Y = \alpha + X\beta + WX\gamma + \varepsilon, \quad \varepsilon \sim N(0, \sigma^2 I), \quad (14)$$

де γ – $(k \times 1)$ просторові коефіцієнти. Якщо в якості єдиного екзогенного фактора взяти початкове значення змінної, отримаємо окремий випадок моделі (2.14):

$$g_T = \alpha + \beta y_0 + \rho W y_0 + \varepsilon, \quad \varepsilon \sim N(0, \sigma^2 I). \quad (15)$$

Модель (2.15) є мінімальною моделлю умовної конвергенції з просторовим лагом на початкове значення. Фізична інтерпретація даної моделі полягає в тому, що темпи зростання досліджуваного зображення (частини зображення – наприклад, пухлини) залежать, як від його значення в початкового зображенні, так і початкових значень показника сусідніх частин.

Модель просторової помилки (SAR-модель) передбачає, що випадкова компонента проходить просторовий авторегресійний процес першого порядку [5, 7, 14]:

$$Y = \alpha + X\beta + u, \quad u = \lambda W u + \varepsilon, \quad \varepsilon \sim N(0, \sigma^2 I), \quad (16)$$

де λ – коефіцієнт просторової кореляції залишків.

У такій моделі мається на увазі існування просторової залежності в залишках регресії. Якщо виразити залишки, як

$$u = (1 - \lambda W)^{-1} \varepsilon,$$

і підставити їх в вихідне рівняння, то модель (16) набуде вигляду:

$$Y = (1 - \lambda W)\alpha + X\beta + \lambda WY + WX\gamma + \varepsilon, \quad \varepsilon \sim N(0, \sigma^2 I), \quad (17)$$

з наступним обмеженням:

$$\gamma + \lambda\beta = 0.$$

Модель (17) є просторовою моделлю, що включає просторовий лаг, як на ендогенну, так і на всі екзогенні змінні.

Виділення невіршених раніше частин загальної проблеми.

Розглянуті методи і моделі аналізу просторових даних вказують на відсутність потужного та ефективного інструменту для пошуку контурів областей із певною патологічною структурою на МРТ знімках. У даному випадку таким методом можуть бути згорткові нейронні мережі (ЗНМ), яким властива спеціальна архітектура штучних нейронних мереж, та, які націлені на ефективне розпізнавання зображень з технологією глибокого навчання. Окрім того, у ЗНМ використовуються деякі особливості мозкової діяльності людини при сприйнятті світовідбиття. ЗНМ не використовувались раніше для вирішення завдання пошуку контурів областей із певною патологічною структурою на МРТ знімках.

Формулювання мети дослідження. У даній статті необхідно розробити метод пошуку контурів областей із певною патологічною структурою на МРТ знімках.

Виклад основного матеріалу й обґрунтування отриманих результатів. Для встановлення патології на МРТ знімках можуть бути застосовані ЗНМ, які дозволять виконати їх класифікацію та отримати текстовий висновок. Розраховуючи показник I загальної просторової автокореляції МРТ знімків, будемо проводити навчання ЗНМ для розпізнавання патології.

Ідея ЗНМ полягає в чергуванні згорткових шарів (convolutionlayers) і субдискретних шарів (subsamplinglayers, шарів підвибірки). Структура ЗНМ – односпрямована (без зворотних зв'язків), принципово багатшарова. Для навчання використовуються стандартні методи, найчастіше метод зворотного поширення помилки. Функція активації нейронів (передавальна функція) – будь-яка, за вибором дослідника. У згорткових шарах (CONV), приховані нейрони замінюються згортковими фільтрами. Замість підбору ваг для нейронів, необхідно вирішити завдання підбору ваг для сімейства фільтрів. Згорткові шари впорядковують нейрони в тривимірному режимі з використанням висоти, ширини і глибини для оброблюваного сигналу.

Фільтри в ЗНМ перетинають усе зображення, використовуючи типову згортку. Оскільки розмір фільтра набагато менше зображення, кількість ваг – різко скорочується. Просторова протяжність фільтрів визначається розміром рецептивного поля (receptive field).

Глибина згорткового шару визначає кількість різних нейронів, які обробляються тими ж рецептивними полями, які називаються стовпцями глибини, з іншим набором ваги. Наприклад, при традиційній обробці зображень в градаціях сірого – фільтр може мати розмір 5x5. Якщо зображення ще і кольорове (RGB), фільтр буде розширено до 5x5x3. Основна ідея аналогічна підключенню одного і того ж вхідного вузла, оброблюваного декількома прихованими вузлами в традиційних мережах прямого поширення. Мета створення декількох нейронів з обробкою одного і того ж рецептивного поля полягає в тому, щоб ідентифікувати і захопити різні функції для однієї області входу. Кожен фільтр, застосований до вхідного зображення (незалежно від глибини), виводить одну площину виходу. Кількість фільтрів i , отже, глибина згорткових шарів збільшуються в міру того, як мережа переходить від входу до виходу, оскільки мережа перемикається із захоплення простих ознак до більш складних ознак в зображеннях.

Ширина фільтра, висота, глибина і крок використовуються для побудови тривимірного згорткового шару. Крок блоку вимагає необхідності введення нових стовпців глибини для просторових областей зображення, розташоване на відстані одиниці. Крок слід вибирати обережно, оскільки низький крок призводить до більшої кількості дозволів на кожне відфільтроване зображення з високим роздільним перекриттям в $receptive\ field$, що призводить до збільшення надмірності в вагах. Навпаки, значення більш високого кроку дають зображення з фільтром з низьким дозволом, за рахунок підвищеного ризику швидкої втрати важливої інформації через множину вхідних параметрів, що сприяють відносно меншому набору параметрів. Нульове заповнення включає нульові значення зазначеного розміру у всіх вимірах по обидва боки від межі.

ЗНМ складаються з чотирьох видів шарів.

Основним компонентом є згортковий шар, CONV, а також шари RELU (RELU), пули шарів (POOL) і повністю підключені шари (FC).

Шари CONV – це спосіб заміни традиційних повністю підключених шарів в мережах прямого поширення з допомогою цифрових фільтрів. Отже, подібно до прихованих шарів в традиційних НМ, CONV-шарах в ЗНМ необхідно ввести нелінійності, щоб дозволити мережі вивчати складні нелінійні поверхні. Таким чином, необхідно явно додавати функцію нелінійної активації RELU як шар після кожного шару CONV:

$$h(a) = \max(0, a), \quad (18)$$

де $a = WX + b$.

Застосування у якості функції активації ReLU дозволяє забезпечити головні переваги, які надають можливість здійснити пришвидшення навчання нейронної мережі через розрідженість та меншу величину ймовірності розмиття градієнту в порівнянні з іншими активаційними функціями. Виникнення розрідженості відбувається при значеннях $a < 0$. Для більшої кількості нейронів з ReLU-активацією в шарі характерна більша розрідженість отриманого результату.

Навчання будемо проводити для залежностей значень просторового фактора Wz від стандартизованих z -значень і з наступним розрахунком коефіцієнту загальної просторової автокореляції.

Шар пулінгу зменшує просторові розміри вихідного об'єму і зберігає кількість ваг. Операція об'єднання, працює на кожному фрагменті глибини введення і зменшує його. Операція об'єднання використовує два параметри: *receptivefield* і крок. *Maxpooling* замінює всі елементи рецептивного поля на вході за допомогою максимального елемента в рецептивному полі на виході. Потім він переміщається із зазначеним кроком до наступного *receptivefield* на вході. Найбільш поширеними значеннями є 3×3 з кроком 2 і 2×2 з кроком 2.

Метод L2 polling обчислює норму L2 усіх елементів в *receptivefield* і замінює *receptivefield* цим значенням. Нормою L2 є тільки квадратний корінь з суми квадратів всіх елементів в сприйнятливому полі.

Архітектура ЗНМ буде розглянута і описана для конкретного випадку у наступному розділі.

Для зниження ефекту перенавчання використовується Dropout шар.

Традиційно для задач класифікації в якості функції втрат використовується кросс-ентропія. Інакше кажучи, робимо мінімізацію різниці між виходом нейронної мережі і відповідним зображенням. Різницею, якраз і буде величина кросс-ентропії, яка визначається за наступною формулою:

$$D(\hat{y}, y) = - \sum_j y_j \ln \hat{y}_j. \quad (19)$$

Для навчання використовується Adam-алгоритм зворотного розповсюдження помилки із стохастичним градієнтним спуском, який дозволяє регулювати величину швидкості навчання. У даному випадку у ЗНМ використовуються накопичені значення градієнтів, що отримані на попередніх кроках, і накопичені значення квадратів градієнтів. Сам процес накопичення протікає на основі експоненціального розпаду середніх значень (EDAverage). Самі значення, що отримані на останньому кроці мають найбільший внесок для сумарного вихідного значення в порівнянні із значеннями градієнтів, що отримані на перших кроках:

$$\bar{m}_t = \beta_1 m_{t-1} + (1 - \beta_1) g_t; \quad \bar{v}_t = \beta_2 v_{t-1} + (1 - \beta_2) g_t^2, \quad (20)$$

де \bar{m}_t – середня оцінка першого моменту;

\bar{v}_t – середня оцінка другого моменту.

Оскільки у вище приведених формулах констатація величин \bar{m}_t і \bar{v}_t може бути ініціалізована нулями, то виходить, що вони мають тяжіння до нулів. Таке тяжіння сильно проявляється на початкових кроках і, коли величина коефіцієнтів розпаду приймає мале значення (β_1 і $\beta_2 \sim 1$). Для вирішення цієї проблеми на значення моментів накладається штраф:

$$\hat{m}_t = \frac{m_t}{1 - \beta_1^t}; \quad \hat{v}_t = \frac{v_t}{1 - \beta_2^t}. \quad (21)$$

Величини отриманих значень використовуються в процесі оновлення нових параметрів на основі формули:

$$\theta_{t+1} = \theta_t - \frac{\eta}{\sqrt{\hat{v}_t} + \epsilon} \hat{m}_t. \quad (22)$$

Розглянемо принцип побудови алгоритму зворотного поширення помилки ЗНМ. У випадку запропонованої ЗНМ їй характерний і достатній в наявності один паралельний одновимірний шар. Нехай W – матриця вагових коефіцієнтів, які характеризують зв'язок виходів і входу паралельних шарів, а V – матриця вагових коефіцієнтів, які з'єднують вихід паралельного шару і вихідний. Індеси для входу – i , індеси елементів паралельного нейронного шару – j , а індеси виходів – k .

У ЗНМ відбувається навчання на наборах зображень (X_a – один з елементів множини зображення M) і реакцій на них (Y_a – один з елементів множини реакцій), $a = 1 \dots p$. При цьому величинами активності нейронів є y , а сумарні зважені входи нейронів – x з відповідними індексами.

При алгоритмі зі зворотним поширенням помилки в ЗНМ матимемо наступні кроки:

Крок 1. Вважаємо, що початковим значенням ваг для двох нейронів одного паралельного шару при $t = 0$ притаманні випадкові числа.

Крок 1. Відбувається подача вхідного сигналу (зображення) X_a в ЗНМ, в результаті відбувається формування вихідного сигналу $y^l Y_a$. Тоді функціонування нейронів проходить послідовні етапи від шару до шару на підставі наступних формул:

- у першому паралельному шарі:

$$x_j = \sum_i W_{ij} X_i^a; \quad (23)$$

- у вихідному шарі:

$$x_k = \sum_j V_{jk} y_j; \quad y_k = f(x_k). \quad (24)$$

В останній формулі $f(x)$ являє собою неспадаючу функцію ReLU.

Крок 2. Приймаємо, що для вхідного сигналу значення функціоналу квадратичної помилки ЗНМ має наступний вигляд:

$$E = \frac{1}{2} \sum_k (y_k - Y_k^a)^2. \quad (25)$$

Проведемо обов'язкову мінімізацію наведеного функціоналу за допомогою класичного градієнтного методу, для якого характерним є ітераційний процес уточнення аргументу, який виконується відповідно до формули:

$$V_{jk}(t+1) = V_{jk}(t) - h \frac{\partial E}{\partial V_{jk}}. \quad (26)$$

Бачимо, що в складі функції помилки відсутні залежності від ваги V_{jk} в явному виді, тому використовуємо формули неявного диференціювання для складної функції:

$$\frac{\partial E}{\partial y_k} = \delta_k = (y_k - Y_k^a); \quad (27)$$

$$\frac{\partial E}{\partial x_k} = \frac{\partial E}{\partial y_k} \frac{\partial y_k}{\partial x_k} = \delta_k y_k (1 - y_k); \quad (28)$$

$$\frac{\partial E}{\partial V_{jk}} = \frac{\partial E}{\partial y_k} \frac{\partial y_k}{\partial x_k} \frac{\partial x_k}{\partial V_{jk}} = \delta_k y_k (1 - y_k) y_j. \quad (29)$$

Крок 3. Виконаємо підстроювання ваг паралельного шару ЗНМ. Для цього будемо використовувати градієнтний метод:

$$W_{jk}(t+1) = W_{jk}(t) - h \frac{\partial E}{\partial W_{jk}}. \quad (30)$$

Аналогічно виконуємо обчислення похідних, але вже з деякими ускладненнями формули, призначеної для помилки d_j з використанням ф-ли (28) та:

$$\frac{\partial E}{\partial y_j} = \delta_j = \sum_k \frac{\partial E}{\partial x_k} \frac{\partial x_k}{\partial y_j} = \sum_k \delta_k y_k (1 - y_k) V_{jk}. \quad (31)$$

$$\frac{\partial E}{\partial W_{jk}} = \frac{\partial E}{\partial y_j} \frac{\partial y_j}{\partial x_j} \frac{\partial x_j}{\partial W_{jk}} = \delta_j y_j (1 - y_j) X_i^a = \left[\sum_k \delta_k y_k (1 - y_k) V_{jk} \right] [y_j (1 - y_j) X_i^a]. \quad (32)$$

Під час обчислення d_j застосовується принцип зворотного поширення помилки, тобто тільки за іншими змінними паралельного шару беруться часткові похідні. Далі, за допомогою отриманих виразів відбувається модифікація ваг паралельного нейронного шару ЗНМ.

Крок 4. Надалі, для всіх навчальних етапів повторюються кроки 1-3, а завершення навчання відбувається в тому випадку, коли досягається заданий рівень помилки або досягнута максимально допустима кількість ітерацій. Пройдені 2 і 3-й кроки допомагають вирішити завдання з оптимізації

отриманого функціоналу помилки із застосуванням градієнтного методу з подальшим навчанням ЗНМ. Отримані параметри характеризуються темпами навчання і вибираються з дуже малими значеннями для забезпечення гарантії збіжності застосованого методу.

Висновки та перспективи подальшого дослідження. У роботі розглянуто та запропоновано методи та моделі пошуку контурів областей із певною патологічною структурою на МРТ знімках. На основі проведеного аналізу методів і моделей для аналізу просторових даних показано, що для розв'язку проблеми локалізації аномальних тканинних утворень на МРТ знімках можуть бути використані коефіцієнти просторової автокореляції на базі локального та глобального індексів Морана. Для пошуку контурів областей із певною патологічною структурою на МРТ знімках запропоновано використання згорткових нейронних мереж, які дозволять виконати їх класифікацію та отримати текстовий висновок.

Навчання ЗНМ для розпізнавання патології на МРТ знімках будемо проводити для залежностей значень просторового фактора Wz від стандартизованих Z -значень і з наступним розрахунком коефіцієнту загальної просторової автокореляції.

Перспективою подальших досліджень є реалізація алгоритму розрахунку значень коефіцієнтів просторової автокореляції і реалізації ЗНМ для розпізнавання патології на МРТ знімках зі створенням програмного засобу з використанням відповідної мови програмування.

1. Alonso W. Location and Land Use. Harvard University Press: Cambridge, MA. – 1964.
2. Anselin L. Spatial Data Analysis with SpaceStat and ArcView. Workbook (3 rd Edition) University of Illinois. – 1999.
3. Anselin L. Spatial Econometrics: Methods and Models, Kluwer Academic Publishers, Dordrecht. – 1988.
4. Anselin L., Can A. Spatial Effects in Models of Mortgage Origination: Paper presented at the 91st annual meeting of the Association of American Geographers. - 1995.
5. Chen Y. New Approaches for Calculating Moran's Index of Spatial Autocorrelation, 2013. PLoS ONE 8(7): e68336. DOI:10.1371/journal.pone.0068336.
6. Cliff A., Ord J. Spatial Autocorrelation. Pion, London, 1973.
7. Digital Imaging and Communications in Medicine (DICOM). – <http://medical.nema.org/dicom>
8. Fingleton B., Lopez-Bazo E. Empirical growth models with spatial effects, Papers in Regional Science, Blackwell Publishing. – 2006. - Vol. 85(2). - P. 177–198.
9. Geary R. The contiguity ratio and statistical mapping. The Incorporated Statistician, 5, 1954. 115 – 145.
10. Getis A, Ord J.K. The analysis of spatial association by use of distance statistics: Geographical Analysis. – 1992. Vol. 24.
11. Getis A., Mur J., Zoller H. (ed.) Spatial Econometrics and Spatial Statistics, Palgrave, London. – 2004.
12. Getis A., Ord J.K. Local spatial statistics: an overview: Spatial analysis: modelling in a GIS environment. – 1996.
13. Local Measures of Spatial Autocorrelation. Briggs Henan University, 2010. Available at: <http://www.utdallas.edu/~rbriggs/henan/11SAlocal.ppt> (accessed 26 December 2018).
14. Martin P., Ottaviano G. Growing locations: industry location in a model of endogenous growth / European Economic Review. – 1999. – Vol. 43. – P. 281–302.
15. Moran P. Notes on Continuous Stochastic Phenomena, Biometrika. – 1950. – Vol. 37. – P. 17-33.
16. Moran P. The interpretation of statistical maps. Journal of the Royal Statistical Society, Series B, 10. 1948. 243 – 251.
17. Paelinck J., Klaassen L. Spatial Econometrics. Saxon House. Farnborough, 1979.
18. Афанасьев В.Н., Юзбашев М.М. Анализ временных рядов и прогнозирование: Учебник. - М.: Финансы и статистика, 2001. - 228 с.
19. Берндт Э.Р. Практика эконометрики: классика и современность. – М.: НТИ-ДАНА, 2005. – 864 с.
20. Вакуленко Е.С. Введение в пространственную эконометрику / М.: НИУ ВШЭ, 2013. URL: http://pokrovka11.files.wordpress.com/2013/01/spatial_econometrics.pdf (дата обращения: 26.12.2018)
21. Кендалл М. Многомерный статистический анализ и временные ряды / М. Кендалл, А. Стьюарт. - М.: Наука, 1976. - 736 с.