

Научная статья

УДК 004.048

doi: 10.17223/19988605/69/12

**Программный комплекс нейросетевой классификации данных
газоаналитического обследования дыхательной системы**

**Артём Викторович Обходский¹, Денис Евгеньевич Кульбакин²,
Елена Владимировна Обходская³, Александр Сергеевич Попов⁴,
Евгений Олегович Родионов⁵, Виктор Иванович Сачков⁶,
Владимир Иванович Чернов⁷, Евгений Лхамацыренович Чойнзон⁸**

¹ *Национальный исследовательский Томский политехнический университет, Томск, Россия*

^{2, 5, 7, 8} *НИИ онкологии ТНИМЦ Российской академии наук, Томск, Россия*

^{3, 4, 6} *Национальный исследовательский Томский государственный университет, Томск, Россия*

^{5, 8} *Сибирский государственный медицинский университет, Томск, Россия*

¹ *art707@yandex.ru*

² *kulbakin_d@mail.ru*

³ *fil330a@yandex.ru*

⁴ *asptomsktpu@gmail.com*

⁵ *rodionov_eo@oncology.tomsk.ru*

⁶ *vicsachkov@gmail.com*

⁷ *chernov@tnimc.ru*

⁸ *choynzonov@tnimc.ru*

Аннотация. Предложены алгоритм и архитектура нейронной сети для классификации сигнальных паттернов, формируемых в устройствах для анализа состава газовой смеси в выдыхаемом воздухе. В устройствах применяется набор неселективных полупроводниковых газовых датчиков, синхронизированных между собой и работающих в режиме термодиклирования. Реализованный алгоритм и нейронная сеть обеспечивают нормировку значений сигналов одновременно со всего набора датчиков и дифференциацию сигнальных паттернов. Программный комплекс реализован на алгоритмическом языке программирования C++ в среде Qt и позволяет проводить дообучение нейронной сети за счет интеграции инструментов системы управления базой данных и нейросетевого анализа данных при увеличении объемов базы. В исследовании применялись данные от проб выдыхаемого воздуха, отобранные у здоровых добровольцев и пациентов со злокачественными новообразованиями орофарингеальной области и гортани. Полученные показатели чувствительности и специфичности нейросетевого классификатора данных сопоставимы с современными высокоточными рентгенологическими методами диагностики опухолей дыхательных путей.

Ключевые слова: программный комплекс; классификация данных; искусственная нейронная сеть; параметры обучения; анализ эффективности классификатора.

Благодарности: Исследование выполнено при финансовой поддержке гранта РНФ в рамках научного проекта № 23-15-00177 «Теоретическое и клиническое обоснование молекулярной оценки состава выдыхаемого воздуха для диагностики онкологических заболеваний», <https://rscf.ru/project/23-15-00177/>

Для цитирования: Обходский А.В., Кульбакин Д.Е., Обходская Е.В., Попов А.С., Родионов Е.О., Сачков В.И., Чернов В.И., Чойнзон Е.Л. Программный комплекс нейросетевой классификации данных газоаналитического обследования дыхательной системы // Вестник Томского государственного университета. Управление, вычислительная техника и информатика. 2024. № 69. С. 112–123. doi: 10.17223/19988605/69/12

Neural network classification software for the gas analytical survey data of respiratory system

Artem V. Obkhodskiy¹, Denis E. Kulbakin², Elena V. Obkhodskaya³, Aleksandr S. Popov⁴, Evgeniy O. Rodionov⁵, Victor I. Sachkov⁶, Vladimir I. Chernov⁷, Evgeny L. Choyznzonov⁸

¹ National Research Tomsk Polytechnic University, Tomsk, Russian Federation

^{2, 5, 7, 8} Cancer Research Institute – branch of the Tomsk National Research Medical Center of the Russian Academy of Science, Tomsk, Russian Federation

^{3, 4, 6} National Research Tomsk State University, Tomsk, Russian Federation

^{5, 8} Siberian State Medical University, Tomsk, Russian Federation

¹ art707@yandex.ru

² kulbakin_d@mail.ru

³ fil330a@yandex.ru

⁴ asptomsktpu@gmail.com

⁵ rodionov_eo@oncology.tomsk.ru

⁶ vicsachkov@gmail.com

⁷ chernov@tnimc.ru

⁸ choynzonov@tnimc.ru

Abstract. An algorithm and neural network architecture are proposed for classifying signal patterns generated in devices for analyzing the composition of a gas mixture in exhaled air. The devices use a set of non-selective semiconductor gas sensors synchronized with each other and operating in the thermal cycling mode. The implemented algorithm and neural network provide for the normalization of signal values simultaneously from the entire set of sensors and the differentiation of signal patterns. The software package is implemented in the C++ algorithmic programming language in the Qt environment and allows for additional training of the neural network by integrating tools from the database management system and neural network data analysis when increasing the database volume. The studies used data from exhaled air samples taken from healthy volunteers and patients with squamous cell carcinoma of the larynx and oropharynx. The obtained sensitivity and specificity indicators of the neural network data classifier are comparable with modern high-precision X-ray methods for diagnosing respiratory tract tumors.

Keywords: software package; data classification; artificial neural network; training parameters; classifier efficiency analysis.

Acknowledgments: The study was supported by the Russian Science Foundation grant № 23-15-00177 «Theoretical and clinical substantiation of the molecular assessment of the composition of exhaled air for the diagnosis of oncological diseases», <https://rscf.ru/en/project/23-15-00177>.

For citation: Obkhodskiy, A.V., Kulbakin, D.E., Obkhodskaya, E.V., Popov, A.S., Rodionov, E.O., Sachkov, V.I., Chernov, V.I., Choyznzonov, E.L. (2024) Neural network classification software for the gas analytical survey data of respiratory system. *Vestnik Tomskogo gosudarstvennogo universiteta. Upravlenie, vychislitel'naya tekhnika i informatika – Tomsk State University Journal of Control and Computer Science*. 69. pp. 112–123. doi: 10.17223/19988605/69/12

Введение

Уровень развития медицинских технологий, обеспечивающих успешное лечение онкологических заболеваний, напрямую влияет на показатель средней продолжительности жизни и, как следствие, на качество жизни значительной части населения страны. С увеличением возраста растет и риск развития онкопатологий [1]. В связи с этим для улучшения качества жизни необходимо уделять внимание развитию технологий, направленных на профилактику и предварительную диагностику онкологических заболеваний на ранних стадиях [2].

С развитием технологий полупроводниковых материалов, чувствительных к компонентам газовых смесей, микропроцессорной техники и методов цифровой обработки данных интерес к сенсорным технологиям диагностики рака по анализу выдыхаемого воздуха значительно возрос, о чем свидетельствует быстро растущее число публикаций на эту тему. Основными характеристиками раковой

опухоли являются неконтролируемый рост клеток внутри организма, изменение обмена веществ в организме и характерный для этого патологического процесса выброс летучих органических соединений. В зависимости от того, где расположены раковые клетки, они имеют разные характерные профили выделяемых летучих органических соединений, которые используются для дифференциации по сравнению с людьми, у которых онкопатология отсутствует. Из-за низкой растворимости в крови характеристические летучие органические соединения легко диффундируют в альвеолярный воздух и впоследствии выделяются с выдыхаемым воздухом, что позволяет их обнаруживать. Технологии анализа летучих органических соединений в выдыхаемом воздухе в последнее время привлекают повышенное внимание в связи с их возможным применением для раннего скрининга рака благодаря сравнительно высокой скорости проведения анализа и неинвазивности метода [3].

Ранняя предварительная диагностика в случаях злокачественных новообразований головы и шеи позволяет проводить более эффективное и своевременное лечение, обеспечивает меньшую потерю функциональности и снижение уровня смертности [4]. В результате своевременного выявления и терапии больных с местно-распространенными злокачественными опухолями орофарингеальной области и гортани, которые входят в структуру локализаций рака головы и шеи, может быть исключен целый комплекс негативных последствий: инвалидизация, нарушение физиологических функций, тяжелые косметические потери, а также интенсивное возникновение психоэмоциональных травм [5]. Современные методики обследования больных со злокачественными новообразованиями орофарингеальной области и гортани основываются на использовании эндоскопических, рентгенологических и морфологических методов диагностики [6]. Эффективность таких методов зависит как от доступности инструментальной и лабораторной базы, так и от опыта специалистов диагностического профиля. В связи с этим к новым методам предварительной диагностики предъявляются требования низкой себестоимости, независимости от человеческого фактора, а также возможности использования в неспециализированных клиниках врачами первичного звена (ЛОР-врачами, стоматологами и др.).

В качестве неинвазивного метода скрининга злокачественных новообразований головы и шеи может выступать технология, предусматривающая анализ газовой смеси в выдыхаемом воздухе. В устройствах, использующих такой подход, применяются различные наборы газовых датчиков и интеллектуальные методы обработки данных [7]. Применяемое оборудование для этой технологии относительно недорогое. Оно обладает высокой мобильностью, не требует дополнительного переобучения персонала, является оперативным. Газовые полупроводниковые датчики обладают инерционностью, но при этом обеспечивают получение данных без существенных задержек.

В рамках настоящего исследования устройство-газоанализатор используется для неселективной идентификации летучих органических соединений в выдыхаемом воздухе больных злокачественными новообразованиями головы и шеи и здоровых добровольцев [8]. Полученные данные структурируются для дальнейшего установления их принадлежности классу проб от пациентов с патологией или здоровых добровольцев. Идентифицируемая совокупность летучих органических соединений будет считаться биомаркером заболевания, если она статистически отличается у привлекаемых для исследования групп людей.

Злокачественные новообразования изменяют состав и содержание некоторых летучих органических соединений, присутствующих в дыхании человека, которые могут рассматриваться в качестве маркера заболевания [9, 10]. Качественно и количественно идентифицировать химические вещества в газовой смеси на основе большого количества данных позволяют методы машинного обучения. Совместно с устройствами-газоанализаторами часто применяются метод опорных векторов, метод ближайших соседей и искусственные нейронные сети [11]. Большинство работ, связанных с анализом летучих органических соединений и их взаимосвязью с онкологическими заболеваниями, так или иначе используют искусственные нейронные сети.

В работе [12] исследовали применение различных методик классификации для определения рака легких. В эксперименте приняли участие 100 добровольцев с практически одинаковым распределением по количеству здоровых и больных. Для классификации применялись модифицированный k-NN-метод, классификаторы на основе линейных и квадратичных дискриминантных функций и ис-

кусственная нейронная сеть. Точность классификации добровольцев во всех трех случаях оказалась на уровне 89%. Такой показатель сопоставим с современными рентгенологическими методами диагностики злокачественных новообразований. Например, применение ПЭТ / КТ обладает чувствительностью и специфичностью на уровне 90,1 и 96,2% соответственно [13]. При этом показатели точности классификатора данных на основе искусственной нейронной сети могут быть улучшены путем увеличения количества эпох обучения и внутренних слоев, учитывая небольшое количество статистических данных. В работе [12] количество эпох обучения составило 20 и использовалась нейронная сеть с одним внутренним слоем.

Цель настоящего исследования – формирование базовой архитектуры, алгоритма и нейронной сети для построения программного комплекса нейросетевой классификации данных газоаналитического обследования дыхательной системы, обеспечивающего обработку данных, формируемых с помощью специализированных устройств анализа состава газовой смеси в выдыхаемом воздухе. К создаваемому программному комплексу предъявлялись требования выполнения всех операций и стадий по обработке данных преимущественно в автоматическом режиме, возможности оценки частных и обобщенных критериев эффективности формируемых нейронных сетей, структурирования разнородных наборов данных, получаемых от устройств анализа состава газовых смесей, и реализации механизмов дообучения нейронных сетей. Наряду с этим программный комплекс должен осуществлять подбор обучающих выборок данных для формирования нейросетевых классификаторов патологий дыхательной системы разного типа.

1. Формат представления данных газоаналитического обследования дыхательной системы

В нашем исследовании измерение совокупных сигнальных паттернов газовой смеси в выдыхаемом воздухе осуществляется с помощью устройства-газоанализатора, обеспечивающего единый унифицированный набор действий для отбора проб у всех исследуемых добровольцев при соблюдении нормальных внешних условий [8]. Датчики во время функционирования устройства-газоанализатора работают в режиме термоциклирования и за время сбора данных формируют нескольких полных циклов от точки начала нагрева до точки окончания остывания.

В результате оцифровки состава газовой смеси в выдыхаемом воздухе по каждому обследуемому добровольцу формируется массив значений из 24 числовых рядов, каждый из которых включает в среднем 7 периодов термоциклирования. Автоматизация процесса пробоотбора в устройстве-газоанализаторе обеспечивает всегда одинаковый объем вводимого воздуха для проб всех добровольцев, равный 250 мл. Программное обеспечение устройства-газоанализатора запускает процесс сбора данных на 90 с. Аналого-цифровое преобразование сигналов с 24 полупроводниковых металлооксидных неселективных газовых датчиков выполняется с частотой дискретизации 50 Гц. После завершения измерения сигнальных паттернов включается продувка устройства очищенным воздухом.

На рис. 1 представлен пример графика с усредненными значениями величин откликов S с одного датчика для двух групп обследуемых добровольцев. В группе со злокачественными новообразованиями головы и шеи усреднение проводилось по 23 пробам, в контрольной группе здоровых добровольцев – по 25 пробам.

Параметр S вычислялся по формуле

$$S = k \frac{U_i - U_i^0}{U_i^0}, \quad (1)$$

где k – коэффициент масштабирования, равный 100 000, U_i – уровень напряжения на выходе датчика в 4-м периоде одного цикла измерения, U_i^0 – уровень напряжения на выходе датчика в 1-м периоде одного цикла измерения, соответствующего по времени U_i и характеризующего фоновый воздух. Для расчетов при обработке данных из одного периода термоциклирования используется только интервал от начала до окончания нагрева датчиков с длительностью 3,5 с как более информативный с точки зрения преобразования измеряемого параметра.

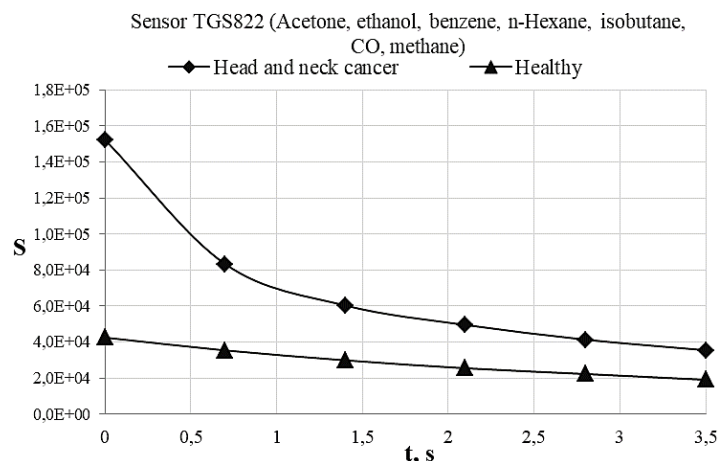


Рис. 1. Усредненные отклики датчика TGS822 на выдыхаемый воздух
Fig. 1. Averaged responses of the TGS822 sensor to exhaled air

Отличие форм кривых и соответствующих значений сигналов на графиках показывает изменение в составе выдыхаемого воздуха, в частности в концентрациях активных молекул. Такие отличия в усредненных данных для пациентов с патологией и здоровых добровольцев являются явным признаком дифференциации добровольцев для искусственной нейронной сети при ее обучении и верификации.

В ходе подготовки данных для последующей классификации нейронной сетью с помощью программного комплекса формируется массив-строка содержащий последовательно выстроенные ряды значений от всех 24 датчиков, каждый из которых включает соотношение 4 и 1 периодов термоциклирования от точки начала нагрева до точки начала остывания на периоде 3,5 с. С частотой дискретизации 50 Гц формируется 175 значений для каждого отдельного ряда. В ходе исследования экспериментальным путем выявлено, если брать каждое 10-е значение отдельного ряда, то погрешность не увеличивается; таким образом, был существенно уменьшен размер входного массива данных со 175 значений для каждого датчика до 17. В результате на вход нейросетевого классификатора по каждому отдельному обследуемому добровольцу подавался массив-строка из 17×24 значений, полученных с газовых датчиков. Общая размерность входного слоя нейронной сети составила 408 значений. На текущем этапе работ не проводились исследования, направленные на улучшение точности нейросетевого классификатора за счет применения информации о возрасте, гендерной принадлежности, локализации опухолевого процесса, факте курения и употребления алкоголя, а также длительного приема лекарственных препаратов по поводу возможных имеющихся хронических заболеваний и других факторах.

2. Нейросетевой классификатор данных

В ходе исследования проведено несколько серий экспериментов, при которых определялись возможности нейронной сети по классификации данных от здоровых добровольцев и пациентов со злокачественными новообразованиями головы и шеи. Такой подход позволяет использовать характерные преимущества бинарных классификаторов. В перспективе этот метод может использоваться в предварительной диагностике разных заболеваний путем последовательного применения отдельных нейросетевых бинарных классификаторов.

На верхнем функциональном уровне алгоритм программного комплекса нейросетевой классификации данных проводит предварительный отбор проб выдыхаемого воздуха у пациентов с наличием патологии и добровольцев без патологического процесса. Далее рассчитывается показатель порога разделения положительных и отрицательных проб, а затем с использованием программного комплекса предварительно диагностируется злокачественное новообразование головы и шеи при определенных значениях выходного нейрона искусственной нейронной сети. Значения формируются предваритель-

но обученной нейронной сетью на соответствующем наборе добровольцев, включающем 48 человек в соотношении примерно 50:50 – с наличием и без патологии.

Архитектура нейронной сети синтезируется для достижения определенной цели. Учитывается большое количество параметров, таких как законы соответствия выборок исходным образам, размерности, природа изменчивости входных и выходных данных и т.д. Существуют общие рекомендации для выбора архитектуры нейронной сети, для начального определения ее размерности, передаточных функций нейронов, форматов данных и т.д. Если отсутствует возможность подобрать архитектуру под конкретную цель, то она выбирается экспериментальным путем из наиболее близких вариантов [14].

Исходя из поставленной задачи предварительной диагностики заболевания, наиболее подходящим вариантом архитектуры нейронной сети для классификации здоровых добровольцев и пациентов с патологическим процессом является нейронная сеть прямого распространения типа многослойный перцептрон. Наличие одного или нескольких скрытых слоев в такой сети позволяет осуществлять нелинейные преобразования разнообразных сигналов. При этом вопрос выбора размера скрытого слоя в каждом конкретном случае, как правило, решается опытным путем. Количество и размерность скрытого слоя в ходе нашего исследования варьировали для достижения максимальной точности и обеспечения работоспособности классификатора на имеющемся статистическом наборе данных. Общая размерность входного слоя нейронной сети соответствует количеству предварительно обработанных выходных сигналов с датчиков и составляет 408. Выходной слой – один нейрон, принимающий значение в диапазоне от -1 до 1 и разграниченный порогом разделения положительных и отрицательных проб. Нормировка на такой диапазон сделана для всех функций активации программного комплекса для удобства анализа диаграмм перекрестной проверки. Значения нейронов выходного слоя представляют собой вероятность. Значение, близкое к 1 выше порога разделения на выходном нейроне, означает соответствие обрабатываемых данных набору пациентов с патологией, ниже порога до -1 – здоровым добровольцам. Рекуррентные нейронные сети не подходят для поставленной задачи из-за наличия обратных связей, что делает их ближе к задачам предсказания трендов, чем к задачам бинарной классификации. Радиальные нейронные сети имеют сложности в обучении, особенно для используемых размерностей, что впоследствии приведет к значительному снижению точности классификации.

Обучение искусственной нейронной сети осуществлялось с помощью алгоритма обратного распространения сигнала ошибки. Этот метод представляет собой разновидность градиентного метода, оптимизированного с учетом архитектуры многослойного перцептрона. С его помощью производилась минимизация функции ошибки, которая определена в пространстве параметров нейронной сети. Параметрами сети в этом случае являются весовые коэффициенты всех нейронов. Успешное завершение процесса обучения сети определялось по минимуму ошибки на тестовом множестве примеров обработки данных. Тестовое множество выделялось из исходного множества имеющегося набора данных проб выдыхаемого воздуха, из которого также выделялось и обучающее множество. Тестовые и обучающие множества при этом не пересекались.

При определении оптимальных параметров обучения нейронной сети на имеющемся наборе данных варьировали гиперпараметры. Для базовой архитектуры нейронной сети применена нормализация – алгоритм, согласно которому некоторым слоям нейронной сети на вход подаются данные, предварительно обработанные и имеющие нулевое математическое ожидание и единичную дисперсию. В ходе исследования осуществлялся подбор подходящих функций активации. Они выбираются в зависимости от задачи и входных данных. Также возможно использование разных функций активации на разных слоях нейронной сети. При исследовании влияния типа функций активации в скрытых слоях на качество работы нейронной сети с имеющимся набором данных удалось установить то, что при использовании линейных функций активации `linear` в каждом скрытом слое нейронная сеть сохраняет свое качество с незначительным отклонением.

В ходе исследования проверялась зависимость эффективности нейронной сети от параметра скорости обучения `learning_rate` с оптимизацией по алгоритму глубокого обучения `adam`. В результате

оптимальными являются значения в диапазоне $\text{learning_rate} = 0,0008 \div 0,001$. Исследование зависимости эффективности классификатора от количества скрытых слоев показало, что уменьшение их количества с 3 до 1 с шагом 1 не приводит к увеличению точности классификатора, однако необходимо наличие как минимум одной нормализации между скрытыми и выходным слоями для сохранения его точности.

3. Структура и функции программного комплекса

Все компоненты программного комплекса нейросетевой классификации данных газоаналитического обследования дыхательной системы взаимодействуют между собой двумя способами: через системные переменные и вызов функций с параметрами или без них. Структура программного комплекса представлена на рис. 2.

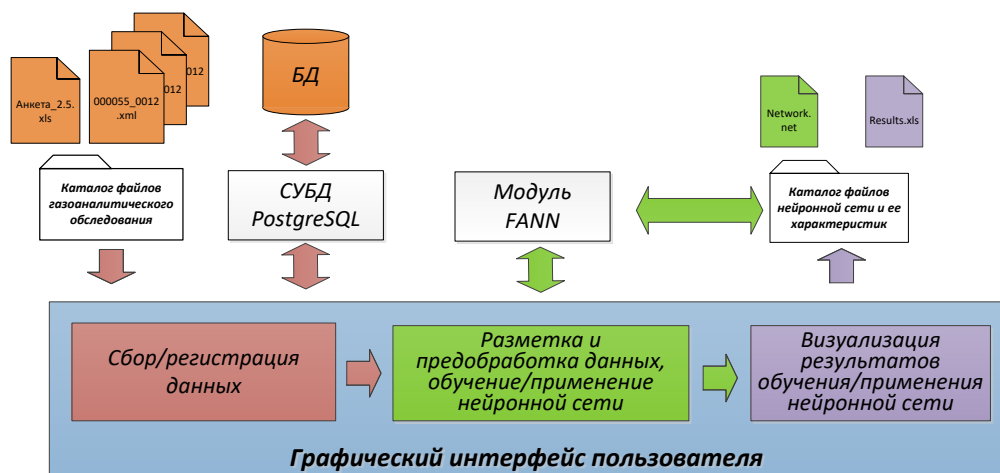


Рис. 2. Структура программного комплекса нейросетевой классификации данных газоаналитического обследования дыхательной системы

Fig. 2. The structure of the neural network classification software for the gas analytical examination data of respiratory system

Графический интерфейс пользователя обеспечивает функции переключения экранов по стадиям обработки данных, переключения режимов работы комплекса и отображение процесса их выполнения, защиты от неправильных действий пользователя, а также индикации текущего состояния процесса обработки данных. В нем реализован экран для выполнения функций сбора и регистрации данных. С помощью него данные из файла «Анкета_X.X.xls» с метаданными по добровольцам и многочисленным файлам «Номер пробы_серийный номер устройства.xml», в которых содержатся соответствующие оцифрованные сигнальные паттерны по каждому отдельному добровольцу, предварительно помещенных в каталог файлов газоаналитического обследования, заносятся и структурируются в базу данных. Перенос данных в базу осуществляется для их последующей автоматизированной обработки и анализа. Для взаимодействия программного комплекса с базой данных применяется система управления PostgreSQL. Связь программного комплекса с базой данных осуществляется при помощи стандартизированных SQL запросов.

Задача проектирования логической структуры базы данных газоаналитического обследования дыхательной системы пациентов с исследуемыми патологическими процессами (плоскоклеточный рак гортани, рак орофарингеальной области) и добровольцев контрольной группы без опухолевых патологий состояла в определении состава таблиц и атрибутов (полей) таблиц базы. Для каждого поля определены тип, название и сформировано его содержание. С целью минимизации объема отдельных таблиц каждому полю присвоено уникальное обозначение (классификатор). При этом обозначения выбирались с учетом сохранения логической связи с названиями полей: например, поле Medical address обозначено символами MED_ADDRESS, полю Type treatment присвоено обозначение TYPE_TREAT и т.д.

Разработанная логическая и физическая структура базы данных позволяет сохранять неструктурированные метаданные, а также осуществлять оперативный поиск необходимой информации по наборам задаваемых атрибутов средствами системы управления. Каждая сущность логической структуры базы данных имеет уникальное имя, которое отражает ее смысловое значение. Для каждой сущности заданы ее подробное описание и особенности взаимодействия с другими таблицами. Регистрация данных в базе выполняется периодически после накопления очередной порции данных в устройствах анализа состава газовой смеси в выдыхаемом воздухе, размещаемых в медицинских учреждениях.

Этап обработки данных выполняется с помощью экрана графического интерфейса, в котором реализованы функции разметки и предобработки данных, обучения и применения нейронной сети. До проведения нейросетевого анализа данных сигнальные паттерны, зарегистрированные в базе, могут подвергаться предварительной обработке (нормировке, приведению к диапазону, выполнению калибровочной функции, численному сокращению, преобразованию типа и т.д.), после чего они становятся доступными для нейросетевого анализа.

Функция нейросетевого анализа данных выполняется в двух режимах. Первый режим предусматривает выбор записей в базе для обучения искусственной нейронной сети, настройку гиперпараметров, обучение и синтез нейронной сети в файл Network.net. Во втором режиме осуществляется применение существующей сети для классификации отдельных записей из базы данных.

Разработка программного комплекса осуществлялась в среде Qt под управлением операционной системы Linux Ubuntu. Для программной реализации искусственной нейронной сети использовались встраиваемые библиотеки. После анализа существующих библиотек, написанных на языке C/C++, был сделан выбор в пользу FANN (Fast Artificial Neural Network). Данная библиотека создавалась с использованием окружения операционной системы GNU/Linux, языка C и компилятора gcc, что совместимо с конфигурацией используемых программных модулей и компонентов в программном комплексе.

После запуска экрана обработки данных происходит проверка того, какое действие необходимо выполнить. Если необходимо обучить нейронную сеть, то запускается функция, в результате работы которой формируется выходной файл Network.net, содержащий параметры обученной нейронной сети: количество слоев, количество нейронов в каждом слое, тип активационной функции, алгоритм обучения, количество рассчитанных весов и их значения. При обучении нейронной сети задаются параметры с помощью функции `fann_set_{training_algorithm, learning_rate, activation_function_hidden, activation_function_output, train_error_function, quickprop_decay}` и др.}. Если программный комплекс работает в режиме применения существующей нейронной сети, обученной ранее, то ее загрузка из файла Network.net происходит с помощью функции `fann_create` с параметрами. Файл, содержащий параметры и весовые коэффициенты нейронной сети, находится в рабочем каталоге программного комплекса.

После того как нейронная сеть обучена и все ее выходные файлы сгенерированы в рабочий каталог, с помощью функции визуализации результатов обучения и применения нейронной сети в графическом интерфейсе происходит формирование отчета об эффективности бинарного классификатора на обучающем наборе с выбранными гиперпараметрами. Данные отчета заносятся в файл Results.xls. При этом, если до этого выполнялось действие по обучению нейронной сети, файл будет содержать зависимости потерь и точности при обучении и верификации от количества эпох для обучающих и тестовых наборов данных с визуализацией t-SNE в виде таблиц значений и графиков [15], диаграмму распределения классов при выполнении перекрестной проверки, ROC-характеристику, показатель AUC [16] и т.д. Если же выполнялось действие по применению нейронной сети, то в файл отчета добавятся сведения о значении выходного нейрона и классификации обрабатываемого набора данных.

4. Применение программного комплекса

В тестовом эксперименте рассматривался набор данных от 23 здоровых добровольцев и 25 пациентов с плоскоклеточным раком гортани и орофарингеальной области. После обучения нейронной

сети и перекрестной проверки были получены результаты, представленные на рис. 3, 4. Точность предварительной диагностики составила 79,17%, чувствительность – 80,12%, специфичность – 78,26%.

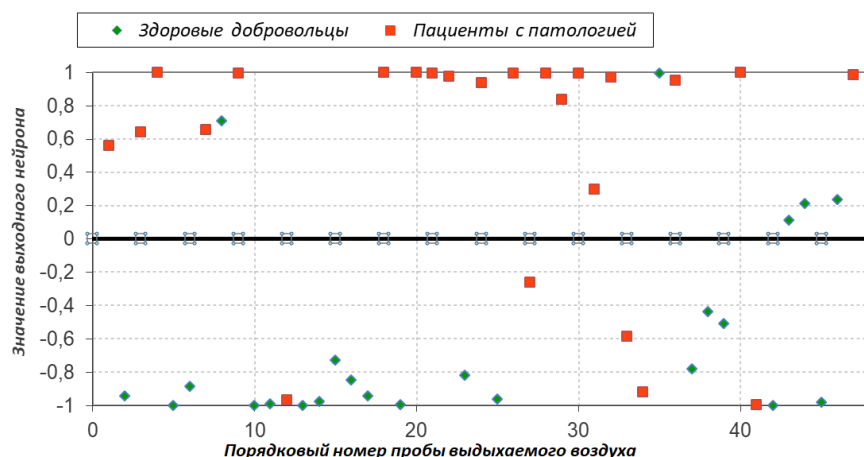


Рис. 3. Диаграмма классификации проб при перекрестной проверке для всех здоровых добровольцев и пациентов с плоскоклеточным раком гортани и оротофарингеальной области

Fig. 3. The samples classification diagram of cross-validation for all healthy volunteers and patients with squamous cell carcinoma of the larynx and oropharynx

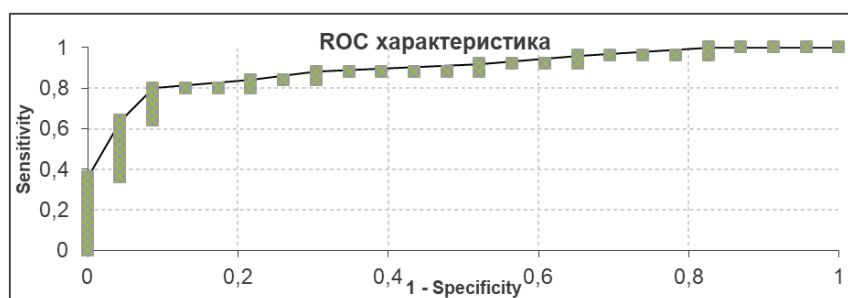


Рис. 4. ROC-характеристика для всех здоровых добровольцев и пациентов с плоскоклеточным раком гортани и оротофарингеальной области

Fig. 4. ROC curve for all healthy volunteers and patients with squamous cell carcinoma of the larynx and oropharynx

Порог разделения положительных и отрицательных тестов был найден с помощью анализа ROC-характеристики и составил 0,071. Величина AUC-ROC составила 0,873, что говорит о хорошем качестве классификатора.

В проведенном исследовании состав добровольцев по группам участников сопоставим по полу и возрасту. На начальном этапе исследования изучалась возможность использования сигнальных паттернов выдыхаемого воздуха для дифференциации здоровых добровольцев и пациентов с патологией. Поэтому весь набор данных о добровольцах при обучении и применении нейросетевого классификатора не применялся. В дальнейшем учет дополнительных сведений, таких как факт курения, пол, возраст, локализация опухолевого процесса, стадия заболевания, факт употребления алкоголя, а также длительный прием лекарственных препаратов по поводу возможных имеющихся хронических заболеваний и др., при обработке данных позволит улучшить работу нейронной сети при классификации добровольцев и методику предварительной диагностики в целом.

Заключение

В работе предложены алгоритм и архитектура нейронной сети для создания программного комплекса нейросетевой классификации данных газоаналитического обследования дыхательной системы. Программный комплекс обеспечивает обработку данных, формируемых с помощью специализированных устройств анализа состава газовой смеси в выдыхаемом воздухе. В качестве чувствительных

элементов в каждом отдельном устройстве применяется набор неселективных полупроводниковых газовых датчиков, синхронизированных между собой и работающих в режиме термоциклирования. Преимущества созданного программного комплекса заключаются в автоматизации операций по обработке данных за счет интеграции инструментов системы управления базой данных и нейросетевого анализа данных. Это позволяет структурировать записи в базе, переобучать и дообучать нейронные сети при увеличении объемов данных с пробами выдыхаемого воздуха, что, в свою очередь, обеспечивает формирование рабочих нейронных сетей для целевых медицинских приборов предварительной диагностики заболеваний дыхательной системы. В нашем исследовании программный комплекс применялся для обработки данных от проб выдыхаемого воздуха, отобранных у здоровых добровольцев и пациентов со злокачественными новообразованиями орорингеальной области и гортани.

Вследствие полносвязности искусственной нейронной сети алгоритмическая сложность вычислений пропорциональна квадрату числа нейронов, что влечет за собой значительные временные затраты на обучение сетей большого размера [14]. Поскольку обучение нейронной сети включает в себя большое количество необходимых математических операций, которые поддаются распараллеливанию, при дальнейшем развитии программного комплекса нейросетевой классификации данных газоаналитического обследования дыхательной системы необходимо заложить функции проведения расчетов с применением вычислительных ресурсов графических ускорителей и программной библиотеки CUDANN.

На текущем этапе исследования полученные показатели чувствительности и специфичности сопоставимы с современными высокоточными рентгенологическими методами диагностики опухолей дыхательных путей (МРТ, СКТ, ПЭТ) [13, 17]. Достигнутые показатели эффективности нейросетевого классификатора данных газоаналитического обследования дыхательной системы отражают его перспективность в предварительной диагностике опухолевых процессов у больных раком орорингеальной области и гортани.

Список источников

1. Shah J.P., Patel S.G. Head and neck surgery and oncology. Mosby, 2013. 713 p.
2. Zhuikova L.D., Choyazonov E.L., Ananina O.A., Odintsova I.N. Cancer incidence in Siberia and Russian Far East // *Siberian Journal of Oncology*. 2019. V. 18, is. 6. P. 5–11. doi: 10.21294/1814-4861-2019-18-6-5-11
3. Krilaviciute A., Stock C., Leja M., Brenner H. Potential of non-invasive breath tests for preselecting individuals for invasive gastric cancer screening endoscopy // *J. Breath Res.* 2018. V. 12. Art. 036009. doi: 10.1088/1752-7163/aab5be
4. Hirsch F.R., Franklin W.A., Gazdar A.F., Bunn P.A. Early detection of lung cancer: Clinical perspectives of recent advances in biology and radiology // *Clinical Cancer Research*. 2001. V. 7. P. 5–22.
5. Harris A., Lyu L., Wasserman-Winko T., George S., Johnson J.T., Nilsen M.L. Neck Disability and Swallowing Function in Post-treatment Head and Neck Cancer Patients // *Otolaryngology – Head and Neck Surgery*. 2020. V. 163 (4). P. 763–770. doi: 10.1177/0194599820923630
6. Clinical Practice Guidelines in Oncology // The National Comprehensive Cancer Network. URL: https://www.nccn.org/professionals/physician_gls/default.aspx
7. Behera B., Joshi R., Anil Vishnu G.K., Bhalerao S., Pandya H.J. Electronic nose: A non-invasive technology for breath analysis of diabetes and lung cancer patients // *Journal of Breath Research*. 2019. V. 13 (2). Art. 024001.
8. Chernov V.I., Choyazonov E.L., Kulbakin D.E., Obkhodskaya E.V., Obkhodskiy A.V., Popov A.S., Sachkova A.S., Sachkov V.I. Cancer Diagnosis by Neural Network Analysis of Data from Semiconductor Sensors // *Diagnostics*. 2020. V. 10 (9). Art. 677. doi: 10.3390/diagnostics10090677
9. Gordon S.M., Szidon J.P., Krotoszynski B.K., Gibbons R.D., O'Neill H.J. Volatile organic compounds in exhaled air from patients with lung cancer // *Clinical Chemistry*. 1985. V. 31 (8). P. 1278–1282.
10. Phillips M., Cataneo R.N., Cummin A.R.C., Gagliardi A.J., Gleeson K., Greenberg J., Maxfield R.A., Rom W.N. Detection of lung cancer with volatile markers in the breath // *Chest*. 2003. V. 123 (6). P. 2115–2123.
11. Kesavaraj G., Sukumaran S. A study on classification techniques in data mining // 4th International Conference on Computing, Communications and Networking Technologies. ICCCNT 2013. Art. 6726842.
12. Blatt R., Bonarini A., Calabró E., Della Torre M., Matteucci M., Pastorino U. Lung cancer identification by an electronic nose based on an array of MOS sensors // *IEEE International Conference on Neural Networks – Conference Proc.* 2007. P. 1423–1428.
13. Rivera M.P., Mehta A.C., Wahidi M.M. Establishing the Diagnosis of Lung Cancer // *Chest*. 2013. V. 143 (5). P. e142S–e165S.
14. Сорокоумова Д.А., Корелин О.Н., Сорокоумов А.В. Построение и обучение нейронной сети для решения задачи распознавания речи // *Информатика и системы управления*. 2015. № 3 (110). С. 77–83.

15. van der Maaten L.J.P., Hinton G.E. Visualizing High-Dimensional Data Using t-SNE // *Journal of Machine Learning Research*. 2008. V. 9. P. 2579–2605.
16. Sokolova M., Japkowicz N., Szpakowicz S. Beyond Accuracy, F-Score and ROC: A Family of Discriminant Measures for Performance Evaluation // *Advances in Artificial Intelligence*. 2006. V. 4304. P. 1015–1021. URL: <https://cdn.aaai.org/Workshops/2006/WS-06-06/WS06-06-006.pdf>
17. Becker M., Zaidi H. Imaging in head and neck squamous cell carcinoma: the potential role of PET/MRI // *Br. J. Radiol.* 2014. V. 87 (1036). Art. 20130677.

References

1. Shah, J.P. & Patel, S.G. (2013) *Head and Neck Surgery and Oncology*. Mosby.
2. Zhuikova, L.D., Choyznzonov, E.L., Ananina, O.A. & Odintsova, I.N. (2019) Cancer incidence in Siberia and Russian Far East. *Siberian Journal of Oncology*. 18(6). pp. 5–11. DOI: 10.21294/1814-4861-2019-18-6-5-11
3. Krilaviciute, A., Stock, C., Leja, M. & Brenner, H. (2018) Potential of non-invasive breath tests for preselecting individuals for invasive gastric cancer screening endoscopy. *Journal of Breath Research*. 12. Art. 036009. DOI: 10.1088/1752-7163/aab5be
4. Hirsch, F.R., Franklin, W.A., Gazdar, A.F. & Bunn, P.A. (2001) Early detection of lung cancer: Clinical perspectives of recent advances in biology and radiology. *Clinical Cancer Research*. 7. pp. 5–22.
5. Harris, A., Lyu, L., Wasserman-Winko, T., George, S., Johnson, J.T. & Nilsen, M.L. (2020) Neck Disability and Swallowing Function in Posttreatment Head and Neck Cancer Patients. *Otolaryngology – Head and Neck Surgery*. 163(4). pp. 763–770.
6. The National Comprehensive Cancer Network. (n.d.) *Clinical Practice Guidelines in Oncology*. [Online] Available from: https://www.nccn.org/professionals/physician_gls/default.aspx
7. Behera, B., Joshi, R., Anil Vishnu, G.K., Bhalariao, S. & Pandya, H.J. (2019) Electronic nose: A non-invasive technology for breath analysis of diabetes and lung cancer patients. *Journal of Breath Research*. 13(2). Art. 024001.
8. Chernov, V.I., Choyznzonov, E.L., Kulbakin, D.E., Obkhodskaya, E.V., Obkhodskiy, A.V., Popov, A.S., Sachkova, A.S. & Sachkov, V.I. (2020) Cancer Diagnosis by Neural Network Analysis of Data from Semiconductor Sensors. *Diagnostics*. 10(9). Art. 677. DOI: 10.3390/diagnostics10090677.
9. Gordon, S.M., Szidon, J.P., Krotoszynski, B.K., Gibbons, R.D. & O'Neill, H.J. (1985) Volatile organic compounds in exhaled air from patients with lung cancer. *Clinical Chemistry*. 31(8). pp. 1278–1282.
10. Phillips, M., Cataneo, R.N., Cummin, A.R.C., Gagliardi, A.J., Gleeson, K., Greenberg, J., Maxfield, R.A. & Rom, W.N. (2003) Detection of lung cancer with volatile markers in the breath. *Chest*. 123(6). pp. 2115–2123.
11. Kesavaraj, G. & Sukumaran, S. (2013) A study on classification techniques in data mining. *4th International Conference on Computing, Communications and Networking Technologies, ICCCNT*. Art. 6726842.
12. Blatt, R., Bonarini, A., Calabró, E., Della Torre, M., Matteucci, M. & Pastorino, U. (2007) Lung cancer identification by an electronic nose based on an array of MOS sensors. *IEEE International Conference on Neural Networks – Conference Proceedings*. pp. 1423–1428
13. Rivera, M.P., Mehta, A.C. & Wahidi, M.M. (2013) Establishing the Diagnosis of Lung Cancer. *Chest*. 143(5). e142S–e165S.
14. Sorokoumova, D., Korelin, O. & Sorokoumov, A. (2015) Postroenie i obuchenie neyronnoy seti dlya resheniya zadachi raspoznavaniya rechi [Development and training of the neural network for voice recognition solution]. *Informatika i sistemy upravleniya – Computer Science and Management Systems*. 3(110). pp. 77–83.
15. van der Maaten, L.J.P. & Hinton, G.E. (2008) Visualizing High-Dimensional Data Using t-SNE. *Journal of Machine Learning Research*. 9. pp. 2579–2605.
16. Sokolova, M., Japkowicz, N. & Szpakowicz, S. (2006) Beyond Accuracy, F-Score and ROC: A Family of Discriminant Measures for Performance Evaluation. *Advances in Artificial Intelligence*. 4304. pp. 1015–1021.
17. Becker, M. & Zaidi, H. (2014) Imaging in head and neck squamous cell carcinoma: the potential role of PET/MRI. *British Journal of Radiology*. 87(1036). Art. 20130677.

Информация об авторах:

Обходский Артём Викторович – кандидат технических наук, доцент инженерной школы ядерных технологий Национального исследовательского Томского политехнического университета (Томск, Россия). E-mail: art707@yandex.ru

Кульбакин Денис Евгеньевич – доктор медицинских наук, заведующий отделением Научно-исследовательского института онкологии филиала Томского национального исследовательского медицинского центра Российской академии наук (Томск, Россия). E-mail: kulbakin_d@mail.ru.

Обходская Елена Владимировна – кандидат технических наук, старший научный сотрудник лаборатории химических технологий Национального исследовательского Томского государственного университета (Томск, Россия). E-mail: fil330a@yandex.ru

Попов Александр Сергеевич – младший научный сотрудник лаборатории химических технологий Национального исследовательского Томского государственного университета (Томск, Россия). E-mail: asptomsktpu@gmail.com

Родионов Евгений Олегович – кандидат медицинских наук, старший научный сотрудник Научно-исследовательского института онкологии филиала Томского национального исследовательского медицинского центра Российской академии наук; ассистент кафедры онкологии Сибирского государственного медицинского университета (Томск, Россия). E-mail: rodionov_eo@oncology.tomsk.ru

Сачков Виктор Иванович – доктор химических наук, заведующий лабораторией химических технологий Национального исследовательского Томского государственного университета (Томск, Россия). E-mail: vicsachkov@gmail.com

Чернов Владимир Иванович – доктор медицинских наук, профессор, член-корреспондент РАН, заместитель директора по научной и инновационной работе Томского НИМЦ; заведующий отделением радионуклидной терапии и диагностики Научно-исследовательского института онкологии филиала Томского национального исследовательского медицинского центра Российской академии наук (Томск, Россия). E-mail: chernov@tnimc.ru

Чойнзон Евгений Лхамцыренович – доктор медицинских наук, профессор, академик РАН, директор Научно-исследовательского института онкологии филиала Томского национального исследовательского медицинского центра Российской академии наук; заведующий кафедрой онкологии Сибирского государственного медицинского университета (Томск, Россия). E-mail: choynzonov@tnimc.ru

Вклад авторов: все авторы сделали эквивалентный вклад в подготовку публикации. Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

Information about the authors:

Obkhodskiy Artem V. (Candidate of Technical Sciences, Associate Professor, School of Nuclear Technology, National Research Tomsk Polytechnic University, Tomsk, Russian Federation). E-mail: art707@yandex.ru

Kulbakin Denis E. (Doctor of Medical Sciences, Head of Department of Head and Neck Tumors, Cancer Research Institute, Tomsk National Research Medical Center of the Russian Academy of Sciences, Tomsk, Russian Federation). E-mail: kulbakin_d@mail.ru

Obkhodskaya Elena V. (Candidate of Technical Sciences, Senior Researcher, Laboratory of Chemical Technologies, Chemical faculty, National Research Tomsk State University, Tomsk, Russian Federation). E-mail: fil330a@yandex.ru

Popov Aleksandr S. (Junior Researcher, Laboratory of Chemical Technologies, Chemical faculty, National Research Tomsk State University, Tomsk, Russian Federation). E-mail: asptomsktpu@gmail.com

Rodionov Evgeniy O. (Candidate of Medical Sciences, Senior Researcher, Department of Thoracic Oncology, Cancer Research Institute, Tomsk National Research Medical Center of the Russian Academy of Sciences; Assistant, Department of Oncology, Siberian State Medical University, Tomsk, Russian Federation). E-mail: rodionov_eo@oncology.tomsk.ru

Sachkov Victor I. (Doctor of Chemistry Sciences, Associate Professor, Head of the Laboratory of Chemical Technologies, Chemical faculty, National Research Tomsk State University, Tomsk, Russian Federation). E-mail: vicsachkov@gmail.com

Chernov Vladimir I. (Doctor of Medical Sciences, Professor, Deputy Director for Science and Innovation, Head of Nuclear Medicine Department, Cancer Research Institute, Tomsk National Research Medical Center of the Russian Academy of Sciences, Tomsk, Russian Federation). E-mail: chernov@tnimc.ru

Choynzonov Evgeny L. (Doctor of Medical Sciences, Professor, Member of the Russian Academy of Sciences, Director of the Cancer Research Institute, Tomsk National Research Medical Center of the Russian Academy of Sciences; Head of Oncology Department of Siberian State Medical University, Tomsk, Russian Federation). E-mail: choynzonov@tnimc.ru

Contribution of the authors: the authors contributed equally to this article. The authors declare no conflicts of interests.

Received 18.07.2024; accepted for publication 02.12.2024

Поступила в редакцию 18.07.2024; принята к публикации 02.12.2024