

ОПТИМІЗАЦІЯ БАЙЄСІВСЬКИХ МЕРЕЖ ДЛЯ ДІАГНОСТИКИ ЗАХВОРЮВАНЬ ЩИТОПОДІБНОЇ ЗАЛОЗИ ШЛЯХОМ ЕКСПЕРТНОЇ ДИСКРЕТИЗАЦІЇ ДАНИХ

Вінницький національний технічний університет

Анотація

У роботі досліджено застосування дискретних Байєсівських мереж для діагностики станів щитоподібної залози (гіпотиреоз, гіпертиреоз, норма). Продемонстровано, що стандартні методи автоматичної дискретизації неперервних клінічних показників (рівнів гормонів TSH, T3, T4) призводять до значної втрати діагностичної точності. Порівняно ефективність автоматичного квантильного розбиття та запропонованого гібридного підходу, який поєднує медичні референтні інтервали з алгоритмічною оптимізацією порогів. Запропонований метод дозволив підвищити точність класифікації з 82% до 84.63%.

Ключові слова: Байєсівські мережі, дискретизація даних, щитоподібної залози, pgmpy, медична діагностика, машинне навчання, support decision system.

Abstract

This paper investigates the application of discrete Bayesian Networks for diagnosing thyroid gland conditions (hypothyroidism, hyperthyroidism, normal). It is demonstrated that standard methods of automatic discretization for continuous clinical indicators (TSH, T3, T4 hormone levels) lead to a significant loss of diagnostic accuracy. The efficiency of automatic quantile binning is compared with the proposed hybrid approach, which combines medical reference intervals with algorithmic threshold optimization. The proposed method improved classification accuracy from 82% to 84.63%.

Keywords: Bayesian Networks, data discretization, thyroid gland, pgmpy, medical diagnosis, machine learning, support decision system.

Вступ

Діагностика захворювань щитоподібної залози є складним завданням, що вимагає комплексного аналізу клінічних симптомів та лабораторних показників [4-6]. Автоматизовані системи підтримки прийняття рішень (СППР) стають важливим інструментом для лікарів-ендокринологів [5]. Серед методів машинного навчання особливе місце посідають Байєсівські мережі (Bayesian Networks, BN) [1]. На відміну від методів "чорної скриньки" (нейронні мережі, SVM), BN належать до класу інтерпретованих моделей ("White Box"), оскільки вони моделюють ймовірнісні причинно-наслідкові зв'язки між симптомами та хворобами [3]. Це дозволяє лікарю не лише отримати прогноз, а й зрозуміти логіку системи через аналіз таблиць умовних ймовірностей (Conditional Probability Tables, CPD).

Головною проблемою застосування класичних дискретних BN у медицині є необхідність перетворення неперервних даних (рівні гормонів) у дискретні стани ("Низький", "Норма", "Високий"). Некоректна дискретизація може призвести до втрати критично важливої інформації [2]. Метою роботи є розробка методу оптимізації порогів дискретизації для підвищення точності Байєсівської мережі при діагностиці тиреоїдних розладів.

Матеріали та методи

Експериментальне дослідження проводилось на основі відкритого набору даних "Thyroid Disease Data" [7]. Для аналізу було використано датасет, що містить понад 9000 записів про пацієнтів. За результатами дослідження було створено Kaggle notebook [6]. Кожен запис включає 29 атрибутів, серед яких:

- Демографічні дані: вік ('age'), стать ('sex');
- Анамнез та медична історія: інформація про прийом ліків (тироксин, антитиреоїдні препарати), наявність супутніх станів (вагітність, пухлини, психологічні розлади) та перенесені операції;
- Лабораторні показники: рівні гормонів TSH (тиреотропний гормон), T3 (трийодтиронін), TT4 (загальний тироксин), T4U (поглинання тироксину) та розрахунковий індекс FTI.

Цільова змінна `target` у вихідному наборі містила детальну класифікацію діагнозів. Для цілей даного дослідження було виконано агрегацію класів у три основні категорії:

- `Normal` – відсутність патологій;
- `Hyperthyroid` (коди A, B, C, D) – підвищена функція щитоподібної залози;
- `Hypothyroid` (коди E, F, G, H) – знижена функція.

Моделювання виконувалося мовою Python 3.x з використанням бібліотеки імовірнісного програмування `pgmpy`. Структура мережі (Directed Acyclic Graph, DAG) була розроблена не автоматично, а на основі експертних знань ("Expert Knowledge Structure"). Вузол "Condition" (Діагноз) був визначений як кореневий батьківський вузол, що має прямий причинно-наслідковий вплив на вузли симптомів та результатів аналізів (рис.1).

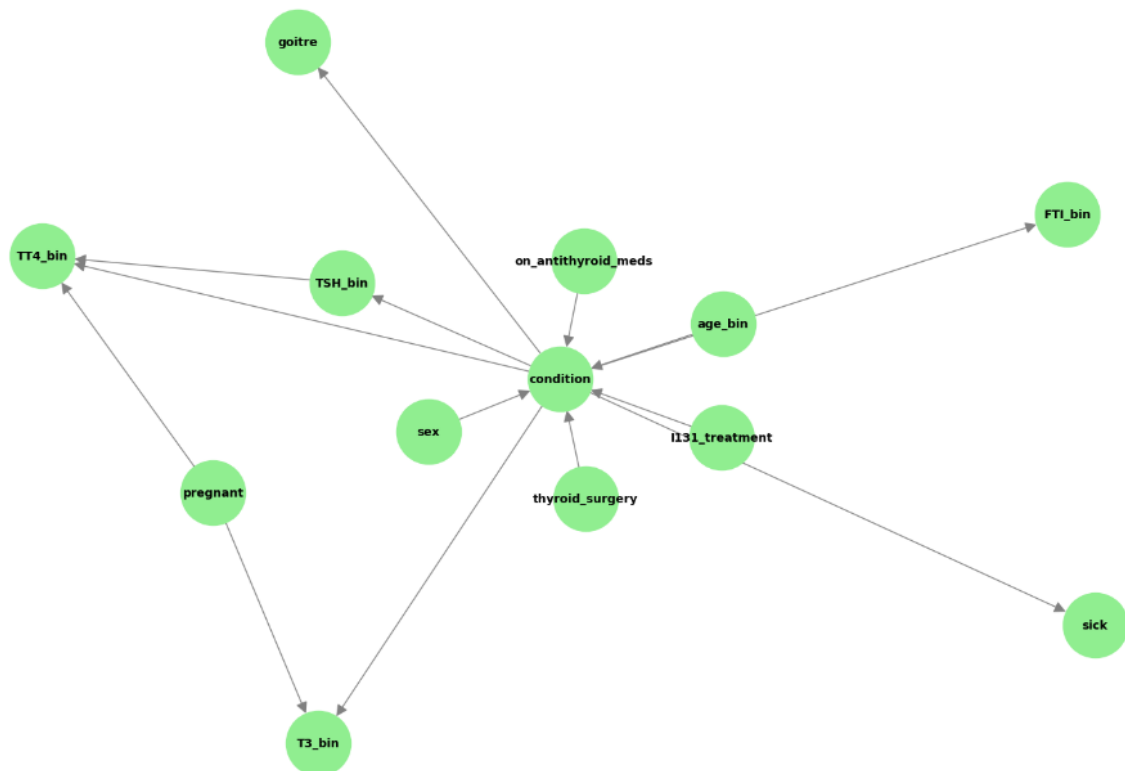


Рис. 1. Структура розробленої Байєсівської мережі

Навчання параметрів мережі (Parameter Learning) здійснювалося методом оцінки максимальної правдоподібності (Maximum Likelihood Estimation, MLE), який розраховує умовні ймовірності на основі частот подій у навчальній вибірці [3].

Для вирішення проблеми неперервних змінних було реалізовано та порівняно два підходи:

1. Автоматична дискретизація (Baseline): Використання функції `pandas.qcut` для розбиття діапазонів значень на рівні квантилі (Equal-Frequency Binning) [6].

2. Гібридна експертна дискретизація (Proposed Method): Базові пороги були встановлені згідно з клінічними протоколами (наприклад, норма TSH 0.4–4.0 мкМО/мл), після чого застосовано алгоритм Grid Search для тонкого налаштування (Tuning) меж з метою максимізації метрики Ассигасу на валідаційній вибірці.

Результати дослідження

Аналіз розподілу сирих даних показав, що рівні гормонів, зокрема Тиреотропного гормону (TSH), мають яскраво виражену нелінійну залежність від діагнозу.

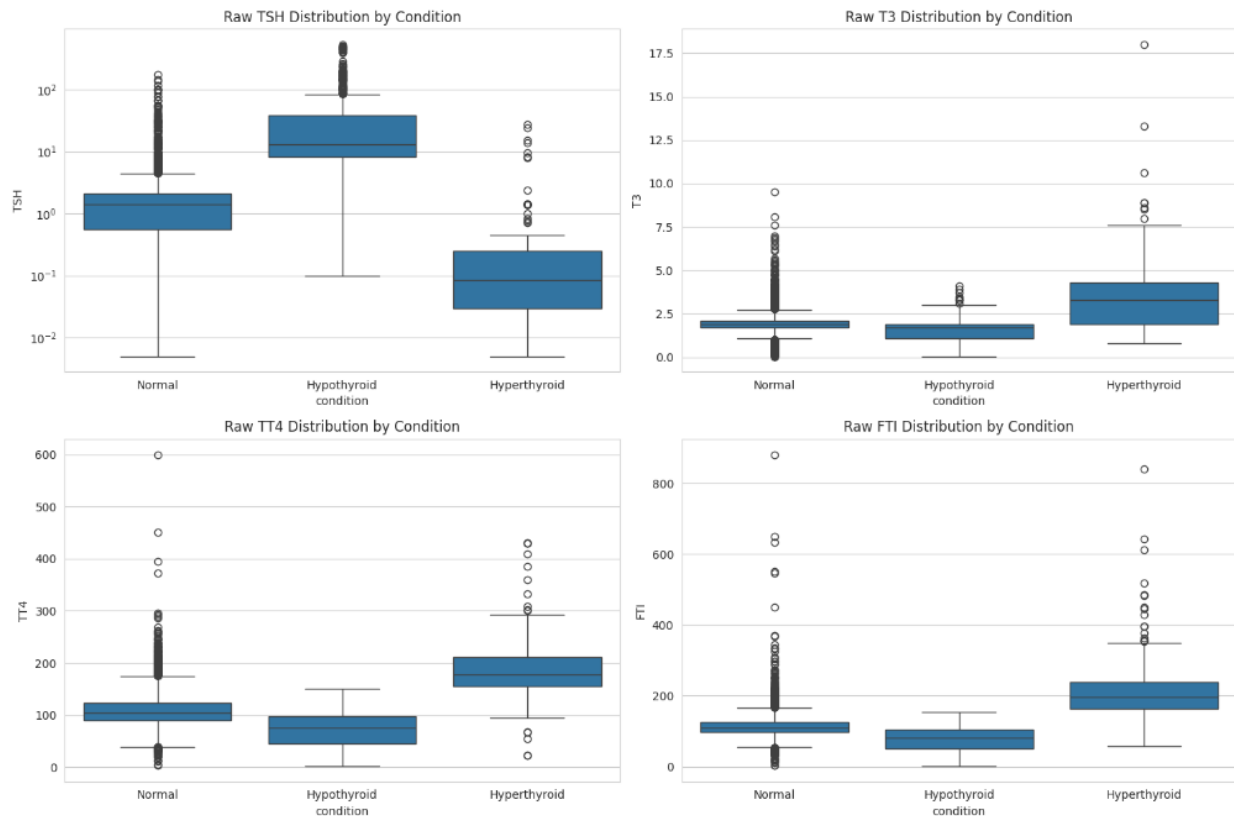


Рис. 2. Розподіл рівня TSH для різних діагнозів

На Рисунку 2 чітко видно, що пацієнти з гіпертиреозом мають аномально низький рівень TSH, тоді як гіпотиреоз характеризується підвищеними значеннями. Це підтверджує гіпотезу про неефективність рівномірного квантильного розбиття, яке ігнорує ці природні кластери.

Порівняльний аналіз точності моделей показав суттєву перевагу запропонованого підходу:

1. Модель з автоматичною дискретизацією ('qcut'):

- Accuracy: ~82.0%
- Macro F1: ~0.45
- Проблема: Модель демонструє високу специфічність, але вкрай низьку чутливість до хворих пацієнтів, часто класифікуючи їх як здорових через розмиті межі інтервалів.

2. Модель з оптимізованими експертними порогами:

- Accuracy: 84.63%
- Weighted F1: 0.84
- Результат алгоритму Tuning: Знайдено оптимальні межі для TSH: 'Low < 0.001', 'High > 6.0'. Це дозволило відсікти "сіру зону".

Додатковий "стрес-тест", проведений шляхом виключення гормональних вузлів з вхідних даних, показав точність на рівні 89.86% (рівень базового класу Majority Class), що доводить: в даній предметній області саме точна інтерпретація неперервних показників є ключем до правильного діагнозу.

Висновки

У даній роботі було проведено комплексне дослідження ефективності вірогіднісних графічних моделей, зокрема дискретних Байєсівських мереж, для задачі диференціальної діагностики захворювань щитоподібної залози. Основний акцент було зроблено на вирішенні проблеми дискретизації неперервних біомедичних даних, яка часто стає "вузьким місцем" при впровадженні методів машинного навчання в клінічну практику.

В ході експериментів було доведено, що стандартні автоматичні методи підготовки даних, такі як квантильне розбиття ('qcut'), є неефективними для медичних показників, що мають чітко визначені фізіологічні норми. Модель, побудована на таких даних, досягла точності лише 82% і демонструвала критично низьку здатність ідентифікувати патологічні стани (Hypothyroid/Hyperthyroid), фактично працюючи на рівні базового класифікатора, що "вгадує" найпоширеніший клас (Majority Class Classifier). Це підтвердило гіпотезу, що ігнорування медичної семантики даних призводить до втрати діагностичної цінності моделі.

Запропонований у роботі гібридний підхід "Expert-Optimized Thresholding" дозволив подолати ці обмеження. Поєднання апіорних знань про референтні інтервали гормонів із алгоритмічним пошуком оптимальних меж прийняття рішень (Threshold Tuning) підвищило точність класифікації до 84.63%, а зважений F1-score до 0.84. Зокрема, зміщення порогу для TSH (Tuning) дозволило моделі коректно класифікувати "граничні" випадки субклінічного гіпотиреозу, які раніше потрапляли у "сліпу зону". Отримана модель не лише демонструє високу прогностичну точність, але й залишається повністю інтерпретованою: лікар може простежити вплив кожного симптому на фінальний діагноз.

Таким чином, розроблена Байєсівська мережа є перспективним прототипом для системи підтримки прийняття клінічних рішень (CDSS), яка може використовуватися для автоматизованого скринінгу та верифікації діагнозів. Подальший розвиток дослідження вбачається у інтеграції динамічних Байєсівських мереж для моніторингу стану пацієнтів у часі та застосуванні нечіткої логіки для більш гнучкої обробки граничних значень аналізів.

СПИСОК ВИКОРИСТАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ

1. Rodinkova V., Yuriev S., Mokin V., Kryvopustova M., Shmundiak D., Bortnyk M., Kryzhanovskiy Y., Kurchenko A. Bayesian analysis suggests independent development of sensitization to different fungal allergens. World Allergy Organization Journal. 2024. Vol. 17, no. 5. P. 100908, [Електронний ресурс] – Режим доступу: <https://doi.org/10.1016/j.waojou.2024.100908>
2. Мокін В. Б., Жуков С. О., Куперштейн Л. М., Слободянюк О. В. Інформаційна технологія прогнозування курсу криптовалют на основі комплексної інженерії ознак. Вісник Вінницького політехнічного інституту. 2022. № 2. С. 81–93., [Електронний ресурс]. – Режим доступу: <https://doi.org/10.31649/1997-9266-2022-161-2-81-93>
3. Rudin C. Stop explaining black box machine learning models for high stakes decisions and use interpretable models instead. Nature Machine Intelligence. 2019. Vol. 1, no. 5. P. 206–215, [Електронний ресурс]. – Режим доступу: <https://doi.org/10.1038/s42256-019-0048-x>
4. Al-masni M. A., Al-antari M. A., Park J.-M., Kim T.-S. A Hybrid Bayesian-Based Deep-Learning-Enabled Model for the Prediction of Diabetes. Sensors. 2023. Vol. 23, no. 1. Article 489, [Електронний ресурс]. – Режим доступу: <https://doi.org/10.3390/s23010489>
5. Deo R. C. Machine Learning in Medicine. Circulation. 2015. Vol. 132, no. 20. P. 1920–1930, [Електронний ресурс]. – Режим доступу: <https://doi.org/10.1161/CIRCULATIONAHA.115.001593>
6. Roman Bralatan notebook [Електронний ресурс] – Режим доступу: <https://www.kaggle.com/code/romantick/optimization-of-bayesian-networks-for-thyroid-dise>
7. Lung Cancer Risk & Trends Across 25 Countries Dataset. Kaggle. 2023 [Електронний ресурс]. – Режим доступу: <https://www.kaggle.com/datasets/emmanuelfwerr/thyroid-disease-data>

Бралан Роман Андрійович – студент групи 124-24а, факультет інтелектуальних інформаційних технологій та автоматизації, Вінницький національний технічний університет, Вінниця, e-mail: bralatan.roman@gmail.com

Жуков Сергій Олександрович – к.т.н., доцент кафедри системного аналізу та інформаційних технологій, Вінницький національний технічний університет, e-mail: sazhukov@vntu.edu.ua

Bralatan Roman A. - student of Faculty of Intelligent Information Technologies and Automation, 124-24a, Vinnytsia National Technical University, Vinnytsia, e-mail bralatan.roman@gmail.com

Zhukov Serhii O. - Ph.D., Assistant Professor of the Department of System Analysis and Information Technologies, Vinnytsia National Technical University, Vinnytsia, e-mail: sazhukov@vntu.edu.ua