## Apresentação Final Diabetes – PIMA

Aprendizagem Estatística em Altas Dimensões (MAE5904-MAE0501-IBI5904)

Ícaro Maia Santos de Castro Rayssa de Carvalho Roberto Rodrigo Aoyama Nakahara Rodrigo Marcel Araujo Oliveira Vitor Hugo Vieira de Lima

> IME-USP 25 de Novembro de 2020



#### Agenda

- Introdução
  - Descrição dos Dados
  - Partição dos Dados
- 2 Análise Descritiva
  - Dados de Treino
- 3 Análise de *Missings* e Imputações
  - Missings na Partição 1
  - Estratégia de Imputação
- Modelagem
  - Análise Discriminante
  - Regressão Logística
  - Random Forest
  - Support Vector Machine
- D Comparação dos Modelos
- Outras Implementações
- Comentários Finais
  - Referências

#### Objetivo e Desafios

#### Objetivo

Prever se a pessoa possui ou não diabetes *mellitus*, com base em uma série de variáveis preditoras.

#### Desafio

Classificação em banco de dados com muitos dados faltantes.

#### Banco de Dados PIMA: Variáveis

#### Variáveis

Variável	Explicação
Diabetes	Variável resposta categórica (1 se diabético, 0 se não diabético)
Pregnancies	Quantidade de gestações
Glucose	Concentração de glicose no plasma após 2 horas em um teste oral de tolerância a glicose
BloodPressure	Pressão arterial diastólica (mm Hg)
SkinThickness	Espessura da dobra da pele do tríceps (mm)
Insulin	Insulina sérica de 2-horas (mu U/ml)
BMI	Índice de massa corporal (peso em kg/(altura em m) <sup>2</sup> )
DiabetesPedigreeFunction	Função "pedigree" de diabetes
Age	Idade (anos)

#### Conjuntos de Treinamento e de Teste

#### Partição 1: Imputação dos Dados

Total de 768 Observações (100%)

- Treinamento: 537 (70%)
- Validação: 161 (21%)
- Teste (out-of-sample): 70 (9%)

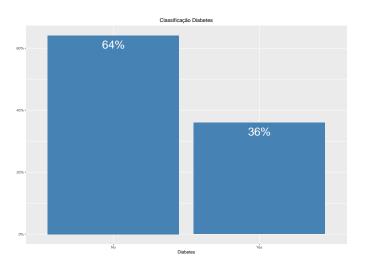
#### Partição 2: Eliminação de Missings

Total de 382 Observações (100%)

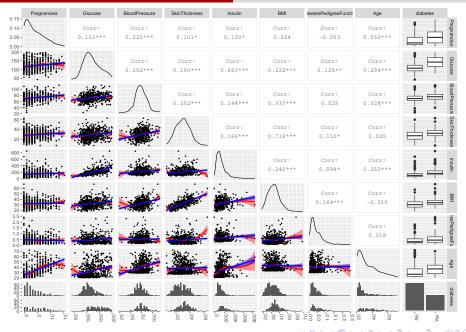
- Treinamento: 266 (70%)
- Validação: 89 (23%)
- Teste (out-of-sample): 27 (7%)



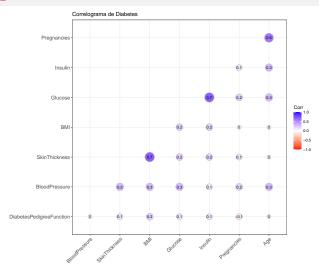
### Nos Dados de Treinamento (Sem *Data Snooping*)



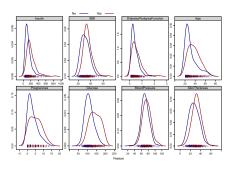
#### Análise Descritiva Dados de Treino

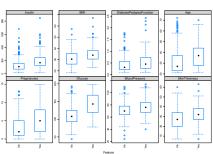


#### Correlograma

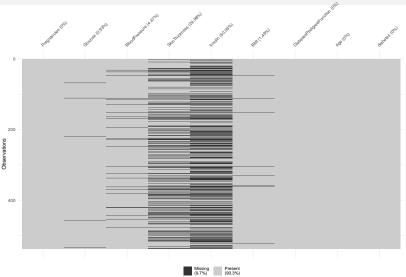


#### Distribuição por Categoria de Diabetes



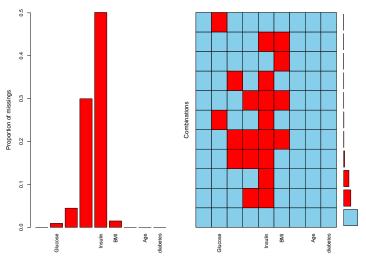


#### Padrões nos *Missings*?

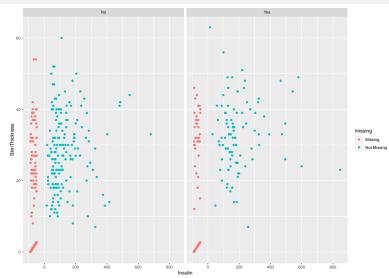


#### Padrões nos *Missings*?

Figura: Frequência de Missings e Plot de Combinações



## Variáveis com Mais *Missings*

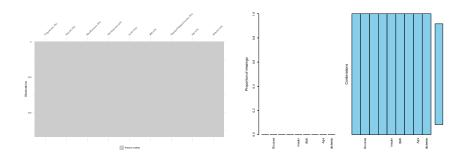


### Estratégia de Imputação (Partição 1)

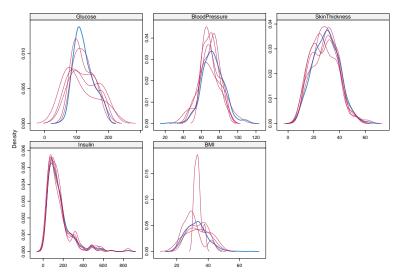
#### Pacote mice

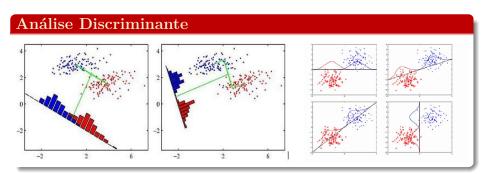
Multivariate Imputation by Chained Equations (MICE) Método pmm (predictive mean matching)

https://cran.r-project.org/web/packages/miceRanger/vignettes/miceAlgorithm.html



# Estratégia de Imputação (Partição 1)

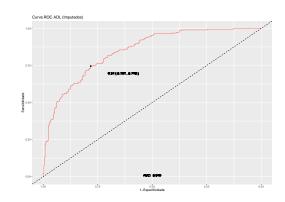




# Análise Discriminante Linear (Partição 1)

	Referência		
Predito	No	Yes	
No	99	28	
$\mathbf{Yes}$	9	25	

- Validação cruzada (k = 15)
- Dados imputados

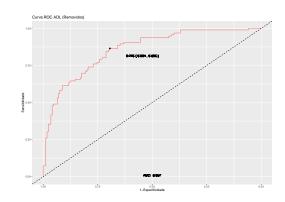


Desempenho do Modelo				
Accuracy	0.7702	Sensitivity	0.9167	
95% CI	(0.6974, 0.8327)	Specificity	0.4717	
No Information Rate	0.6708	Pos Pred Value	0.7795	
P-Value $[Acc > NIR]$	0.003815	Neg Pred Value	0.7353	
		Prevalence	0.6708	
Kappa	0.4274	Detection Rate	0.6149	
		Detection Prevalence	0.7888	
Mcnemar's Test P-Value	0.003085	Balanced Accuracy	0.6942	

## Análise Discriminante Linear (Partição 2)

	Refer	ência
Predito	No	Yes
No	64	12
Yes	4	9

- Validação cruzada (k = 15)
- Dados sem *missings*

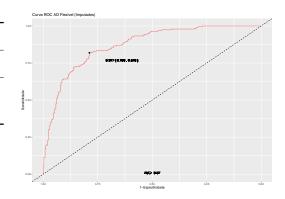


Desempenho do Modelo				
Accuracy	0.8202	Sensitivity	0.9412	
95% CI	(0.7245, 0.8936)	Specificity	0.4286	
No Information Rate	0.764	Pos Pred Value	0.8421	
P-Value $[Acc > NIR]$	0.12910	Neg Pred Value	0.6923	
		Prevalence	0.7640	
Карра	0.4258	Detection Rate	0.7191	
		Detection Prevalence	0.8539	
Mcnemar's Test P-Value	0.08012	Balanced Accuracy	0.6849	

#### Análise Discriminante Flexível (Partição 1)

	Referência	
Predito	No	Yes
No	95	25
Yes	13	28

- Validação cruzada (k = 15)
- Dados imputados

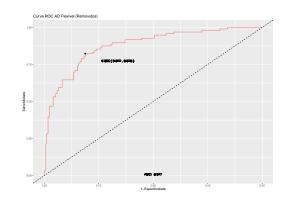


Desempenho do Modelo				
Accuracy	0.764	Sensitivity	0.8796	
95% CI	(0.6907, 0.8272)	Specificity	0.5283	
No Information Rate	0.6708	Pos Pred Value	0.7917	
P-Value [Acc >NIR]	0.006397	Neg Pred Value	0.6829	
		Prevalence	0.6708	
Карра	0.4329	Detection Rate	0.5901	
		Detection Prevalence	0.7453	
Mcnemar's Test P-Value	0.074353	Balanced Accuracy	0.7040	

### Análise Discriminante Flexível (Partição 2)

	Referência	
Predito	No	Yes
No	61	11
$\mathbf{Yes}$	7	10

- Validação cruzada (k = 15)
- Dados sem *missings*

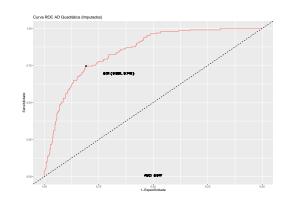


Desempenho do Modelo				
Accuracy	0.7978	Sensitivity	0.8971	
95% CI	(0.6993, 0.8755)	Specificity	0.4762	
No Information Rate	0.764	Pos Pred Value	0.8472	
P-Value [Acc >NIR]	0.2709	Neg Pred Value	0.5882	
		Prevalence	0.7640	
Карра	0.3996	Detection Rate	0.6854	
		Detection Prevalence	0.8090	
Mcnemar's Test P-Value	0.4795	Balanced Accuracy	0.6866	

#### Análise Discriminante Quadrática (Partição 1)

	Referência	
Predito	No	Yes
No	96	27
$\mathbf{Yes}$	12	26

- Validação cruzada (k = 15)
- Dados imputados

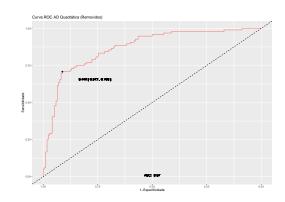


Desempenho do Modelo				
Accuracy	0.7578	Sensitivity	0.8889	
95% CI	(0.6841, 0.8217)	Specificity	0.4906	
No Information Rate	0.6708	Pos Pred Value	0.7805	
P-Value [Acc >NIR]	0.01039	Neg Pred Value	0.6842	
		Prevalence	0.6708	
Kappa	0.4089	Detection Rate	0.5963	
		Detection Prevalence	0.7640	
Mcnemar's Test P-Value	0.02497	Balanced Accuracy	0.6897	

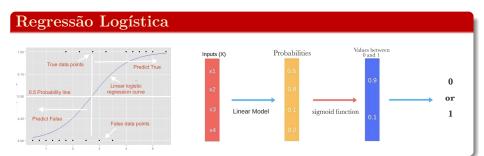
#### Análise Discriminante Quadrática (Partição 2)

	Referência	
Predito	No	Yes
No	60	6
Yes	8	15

- Validação cruzada (k = 15)
- Dados sem *missings*



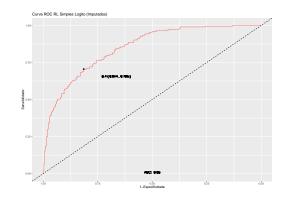
Desempenho do Modelo			
Accuracy	0.8427	Sensitivity	0.8824
95% CI	(0.7502, 0.9112)	Specificity	0.7143
No Information Rate	0.764	Pos Pred Value	0.9091
P-Value $[Acc > NIR]$	0.04778	Neg Pred Value	0.6522
		Prevalence	0.7640
Карра	0.5776	Detection Rate	0.6742
		Detection Prevalence	0.7416
Mcnemar's Test P-Value	0.78927	Balanced Accuracy	0.7983



# Regressão Logística Simples (Partição 1)

	Referência		
Predito	No	Yes	
No	99	27	
$\mathbf{Yes}$	9	26	

- Validação cruzada (k = 10)
- Dados imputados

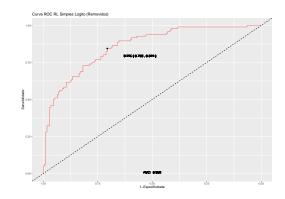


Desempenho do Modelo			
Accuracy	0.7764	Sensitivity	0.9167
95% CI	(0.7041, 0.8382)	Specificity	0.4906
No Information Rate	0.6708	Pos Pred Value	0.7857
P-Value $[Acc > NIR]$	0.002203	Neg Pred Value	0.7429
		Prevalence	0.6708
Kappa	0.4458	Detection Rate	0.6149
		Detection Prevalence	0.7826
Mcnemar's Test P-Value	0.004607	Balanced Accuracy	0.7036

# Regressão Logística Simples (Partição 2)

	Referência		
Predito	No	Yes	
No	64	11	
$\mathbf{Yes}$	4	10	

- Validação cruzada (k = 10)
- Dados sem *missings*

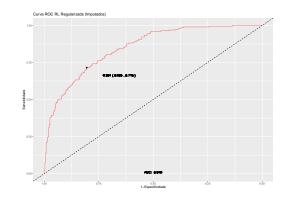


Desempenho do Modelo			
Accuracy	0.8315	Sensitivity	0.9412
95% CI	(0.7373, 0.9025)	Specificity	0.4762
No Information Rate	0.764	Pos Pred Value	0.8533
P-Value $[Acc > NIR]$	0.08127	Neg Pred Value	0.7143
		Prevalence	0.7640
Kappa	0.4717	Detection Rate	0.7191
		Detection Prevalence	0.8427
Mcnemar's Test P-Value	0.12134	Balanced Accuracy	0.7087

#### Regressão Logística Regularizada (Partição 1)

	Referência		
Predito	No	Yes	
No	99	28	
Yes	9	25	

- Validação cruzada (k = 10)
- Dados imputados

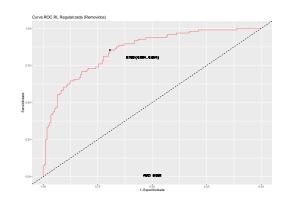


Desempenho do Modelo				
Accuracy	0.7702	Sensitivity	0.9167	
95% CI	(0.6974, 0.8327)	Specificity	0.4717	
No Information Rate	0.6708	Pos Pred Value	0.7795	
P-Value $[Acc > NIR]$	0.003815	Neg Pred Value	0.7353	
		Prevalence	0.6708	
Карра	0.4274	Detection Rate	0.6149	
		Detection Prevalence	0.7888	
Mcnemar's Test P-Value	0.003085	Balanced Accuracy	0.6942	

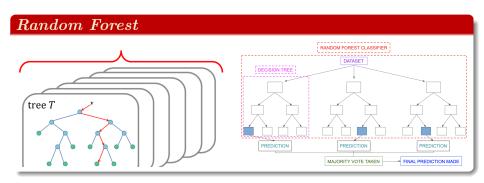
#### Regressão Logística Regularizada (Partição 2)

	Referência		
Predito	No	Yes	
No	64	11	
$\mathbf{Yes}$	4	10	

- Validação cruzada (k = 10)
- Dados sem *missings*



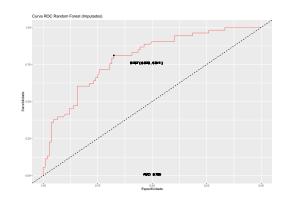
Desempenho do Modelo			
Accuracy	0.8315	Sensitivity	0.9412
95% CI	(0.7373, 0.9025)	Specificity	0.4762
No Information Rate	0.764	Pos Pred Value	0.8533
P-Value [Acc $>$ NIR]	0.08127	Neg Pred Value	0.7143
		Prevalence	0.7640
Карра	0.4717	Detection Rate	0.7191
		Detection Prevalence	0.8427
Mcnemar's Test P-Value	0.12134	Balanced Accuracy	0.7087



# Random Forest (Partição 1)

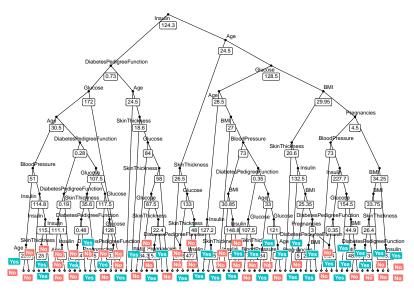
	Refer	ência
Predito	No	Yes
No	93	28
Yes	15	25

- Validação cruzada (k = 10)
- Dados imputados



	Desempenho do N	Modelo	
Accuracy	0.7329	Sensitivity	0.8611
95% CI	(0.6576, 0.7995)	Specificity	0.4717
No Information Rate	0.6708	Pos Pred Value	0.7686
P-Value [ $Acc > NIR$ ]	0.05368	Neg Pred Value	0.6250
		Prevalence	0.6708
Kappa	0.355	Detection Rate	0.5776
		Detection Prevalence	0.7516
Mcnemar's Test P-Value	0.06725	Balanced Accuracy	0.6664

#### Partição 1: Menor árvore com imputação 250

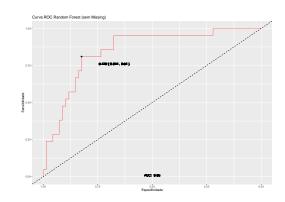


25 de Novembro de 2020

# Random Forest (Partição 2)

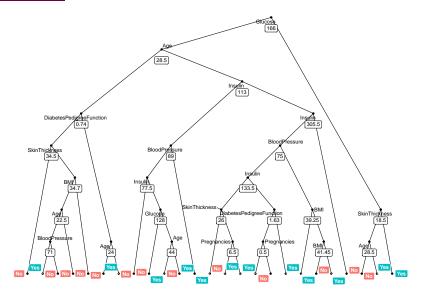
	Referência		
Predito	No	Yes	
No	59	9	
$\mathbf{Yes}$	9	12	

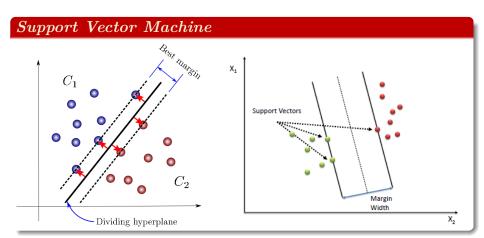
- Validação cruzada (k=10)
- Dados sem *missings*



	Desempenho do N	Modelo	
Accuracy	0.7978	Sensitivity	0.8676
95% CI	(0.6993, 0.8755)	Specificity	0.5714
No Information Rate	0.764	Pos Pred Value	0.8676
P-Value [ $Acc > NIR$ ]	0.2709	Neg Pred Value	0.5714
		Prevalence	0.7640
Kappa	0.4391	Detection Rate	0.6629
		Detection Prevalence	0.7640
Mcnemar's Test P-Value	1.0000	Balanced Accuracy	0.7195

#### Partição 2: Menor árvore sem imputação: 250

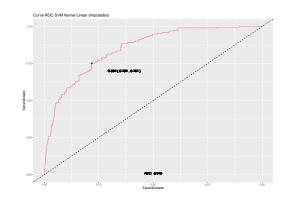




# SVM Kernel Linear (Partição 1)

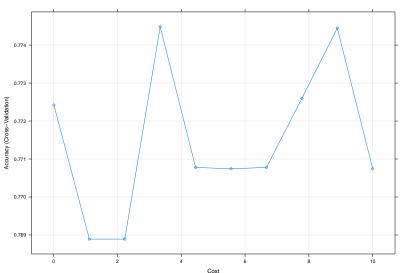
	Referência		
Predito	No	Yes	
No	98	27	
Yes	10	26	

- Validação cruzada (k = 10)
- Dados imputados



_	Desempenho do M	Modelo	
	0.7702		0.9074
Accuracy		Sensitivity	
95% CI	(0.6974, 0.8327)	Specificity	0.4906
No Information Rate	0.6708	Pos Pred Value	0.7840
P-Value [Acc $>$ NIR]	0.003815	Neg Pred Value	0.7222
		Prevalence	0.6708
Kappa	0.4334	Detection Rate	0.6087
		Detection Prevalence	0.7764
Mcnemar's Test P-Value	0.008529	Balanced Accuracy	0.6990

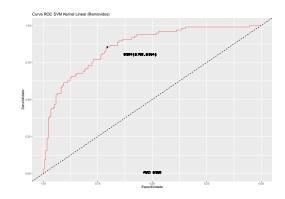
SVM Kernel Linear - Acurácia vs Valores de Cost (Imputados)



# SVM Kernel Linear (Partição 2)

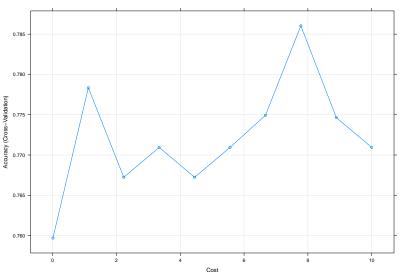
	Referência		
Predito	No	Yes	
No	64	12	
Yes	4	9	

- Validação cruzada (k=10)
- Dados sem *missings*



	Desempenho do N	Modelo	
Accuracy	0.8202	Sensitivity	0.9412
95% CI	(0.7245, 0.8936)	Specificity	0.4286
No Information Rate	0.764	Pos Pred Value	0.8421
P-Value [ $Acc > NIR$ ]	0.12910	Neg Pred Value	0.6923
		Prevalence	0.7640
Kappa	0.4258	Detection Rate	0.7191
		Detection Prevalence	0.8539
Mcnemar's Test P-Value	0.08012	Balanced Accuracy	0.6849

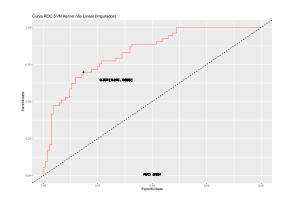
SVM Kernel Linear - Acurácia vs Valores de Cost (Removidos)



## SVM Kernel Não-Linear (Partição 1)

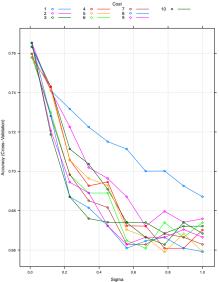
	Referência		
Predito	No	Yes	
No	99	26	
$\mathbf{Yes}$	9	27	

- Validação cruzada (k = 10)
- Dados imputados



	Desempenho do N	Modelo	
Accuracy	0.7826	Sensitivity	0.9167
95% CI	(0.7109, 0.8437)	Specificity	0.5094
No Information Rate	0.6708	Pos Pred Value	0.7920
P-Value [ $Acc > NIR$ ]	0.001230	Neg Pred Value	0.7500
		Prevalence	0.6708
Kappa	0.464	Detection Rate	0.6149
		Detection Prevalence	0.7764
Mcnemar's Test P-Value	0.006841	Balanced Accuracy	0.7131

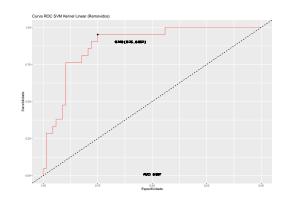




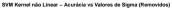
## SVM Kernel Não-Linear (Partição 2)

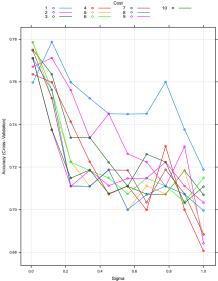
	Referência		
Predito	No	Yes	
No	63	13	
$\mathbf{Yes}$	5	8	

- Validação cruzada (k = 10)
- Dados sem *missings*



	Desempenho do N	Modelo	
Accuracy	0.7978	Sensitivity	0.9265
95% CI	(0.6993, 0.8755)	Specificity	0.3810
No Information Rate	0.764	Pos Pred Value	0.8289
P-Value [ $Acc > NIR$ ]	0.27088	Neg Pred Value	0.6154
		Prevalence	0.7640
Kappa	0.354	Detection Rate	0.7079
		Detection Prevalence	0.8539
Mcnemar's Test P-Value	0.09896	Balanced Accuracy	0.6537





### Comparação dos Modelos

Métricas: Acurácia, Sensibilidade, Especificidade e Acurácia Balanceada

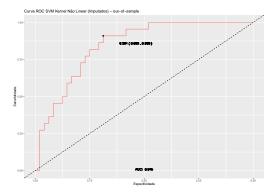
-	Imputados			Removidos				
Modelo	Acuracia	Sensibilidade	Especificidade	Acurácia Balanceada	Acurácia	Sensibilidade	Especificidade	Acurácia Balanceada
AD Linear	0.77	0.91	0.47	0.69	0.82	0.94	0.43	0.68
AD Flexível	0.76	0.88	0.53	0.70	0.80	0.90	0.48	0.69
AD Quadrática	0.76	0.89	0.49	0.69	0.84	0.88	0.71	0.8
RL Simples	0.78	0.91	0.49	0.70	0.83	0.94	0.48	0.71
RL Regularizada	0.77	0.91	0.47	0.69	0.83	0.94	0.48	0.71
Random Forest	0.73	0.86	0.47	0.67	0.80	0.87	0.57	0.72
SVM Linear	0.77	0.91	0.49	0.7	0.82	0.94	0.43	0.68
SVM Ñ Linear	0.78	0.92	0.51	0.71	0.80	0.93	0.38	0.65

### SVM Kernel Não-Linear (Partição 1)

#### Teste: Desempenho sobre out-of-sample

	Referência			
Predito	No	Yes		
No	38	8		
$\mathbf{Yes}$	10	14		

- Validação cruzada (k=10)
- Dados imputados



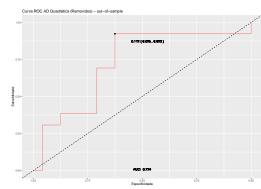
	Desempenho do M	Modelo	
Accuracy	0.7429	Sensitivity	0.7917
95% CI	(0.6244, 0.8399)	Specificity	0.6364
No Information Rate	0.6857	Pos Pred Value	0.8261
P-Value [ $Acc > NIR$ ]	0.1846	Neg Pred Value	0.5833
-		Prevalence	0.6857
Kappa	0.4177	Detection Rate	0.5429
		Detection Prevalence	0.6571
Mcnemar's Test P-Value	0.8137	Balanced Accuracy	0.7140

### Análise Discriminante Quadrática (Partição 2)

#### Teste: Desempenho sobre out-of-sample

	Referência		
Predito	No	Yes	
No	17	5	
Yes	7	8	

- Validação cruzada (k = 10)
- Dados sem *missings*



Desempenho do Modelo					
Accuracy	0.6757	Sensitivity	0.7083		
95% CI	(0.5021, 0.8199)	Specificity	0.6154		
No Information Rate	0.6486	Pos Pred Value	0.7727		
P-Value [ $Acc > NIR$ ]	0.4384	Neg Pred Value	0.5333		
		Prevalence	0.6486		
Kappa	0.3127	Detection Rate	0.4595		
		Detection Prevalence	0.5946		
Mcnemar's Test P-Value	0.7728	Balanced Accuracy	0.6619		

#### Outras implementações...



#### Dúvidas, comentários ou sugestões?

#### Envie-nos um e-mail

- icaromsc@usp.br
- rayscarvalho@usp.br
- nakahara@usp.br
- rodrigo.marcel.oliveira@usp.br
- vitorhugo@usp.br

#### Referências:

Smith, J.W., Everhart, J.E., Dickson, W.C., Knowler, W.C., & Johannes, R.S. (1988). *Using the ADAP Learning Algorithm to Forecast the Onset of Diabetes Mellitus*. In: Proceedings of the Symposium on Computer Applications and Medical Care (pp. 261–265). IEEE Computer Society Press.

Gareth James, Daniela Witten, Trevor Hastie, Robert Tibshirani (2014). An Introduction to Statistical Learning: with Applications in R. Springer New York.

Trevor Hastie, Robert Tibshirani, Jerome Friedman (2009). *The Elements of Statistical Learning: Data Mining, Inference, and Prediction.* 2 ed. Springer New York.