Paper Title\* (use style: paper title)

\*Note: Sub-titles are not captured in Xplore and should not be used

1st João Pinto  
*Departamento de Engenharia Informática*  
*Instituto Superior de Engenharia do Porto*Porto, Portugal  
1220663@isep.ipp.pt

2nd Luis Estebainha  
*Departamento de Engenharia Informática*  
*Instituto Superior de Engenharia do Porto*Porto, Portugal  
1220664@isep.ipp.pt

3rd Nuno Marinho  
*Departamento de Engenharia Informática*  
*Instituto Superior de Engenharia do Porto*Porto, Portugal  
1220665@isep.ipp.pt

*Abstract*—Este artigo foi concebido no âmbito da unidade curricular de Análise de Dados em Informática, e teve como objetivo a aplicação de algoritmos de aprendizagem automática na exploração de dados e respetiva comparação usando os testes estatísticos mais adequados

Keywords—Poluição Atmosférica, Aprendizagem Automática, Regressão Linear, Árvores de Decisão, Máquinas de Vetores de Suporte (SVM), K-Vizinhos Mais Próximos (KNN), Redes Neuronais Artificiais, Validação Cruzada k-fold, Análise Exploratória de Dados, Métricas de Avaliação de Modelos

# Introduction

O presente trabalho tem como foco a análise de dados referentes aos níveis de poluentes atmosféricos em várias regiões da Europa no ano de 2022, com o objetivo de explorar e modelar relações entre poluição, doenças associadas e número de mortes prematuras. Os dados analisados, disponibilizados pelos docentes da unidade curricular de Análise de Dados em Informática, encontram-se no ficheiro ‘AIRPOL\_data.csv’ e foram tratados com recurso à linguagem Python e bibliotecas como Pandas, Scikit-learn e Matplotlib.

O estudo organiza-se em três grandes componentes. A primeira corresponde à análise exploratória dos dados, com o intuito de compreender a distribuição dos poluentes (PM2.5, NO₂ e O₃) por região e a sua associação com doenças específicas [1]. A segunda componente foca-se na aplicação de modelos de regressão para prever o número de mortes prematuras a partir de variáveis como a população afetada e os níveis médios de poluição. Por fim, a terceira componente consiste no desenvolvimento de modelos de classificação para prever a presença de doenças respiratórias com base em atributos selecionados.

A validação dos modelos foi realizada com o método de k-fold cross-validation [2], e o seu desempenho avaliado através de métricas apropriadas, como MAE, RMSE, Accuracy, Sensitivity e F1-score. Este trabalho visa aplicar conhecimentos de aprendizagem automática em problemas reais, promover a interpretação crítica dos resultados obtidos e contribuir para uma melhor compreensão dos impactos da poluição atmosférica na saúde pública.

# Algoritmos e Métricas de Avaliação

Para confronto e avaliação neste estudo, selecionámos cinco algoritmos de aprendizagem automática. Na secção que se segue descrevemos brevemente o funcionamento de cada um.

## Algoritmos

Regressão Linear: A regressão linear é um modelo estatístico que procura modelar a relação entre uma variável dependente contínua e uma ou mais variáveis independentes. Na sua forma simples, é descrita pela equação Y=β0+β1X+, sendo útil para inferência e previsão quando a relação entre as variáveis é aproximadamente linear[3]

Árvores de Decisão: As árvores de decisão são modelos baseados em divisões recursivas dos dados com base em atributos. Cada nó interno representa um teste, cada ramo representa um resultado do teste e cada folha representa uma previsão. A construção da árvore é guiada por medidas como a entropia e o ganho de informação, e pode ser utilizada tanto para regressão como para classificação**.**

Máquinas de Vetores de Suporte (SVM): As SVM são algoritmos que constroem um hiperplano ótimo no espaço das características, maximizando a margem entre as classes. Podem ser aplicadas em problemas lineares e não-lineares, através da utilização de funções *kernel* (e.g. linear, RBF). São eficazes em espaços de alta dimensão e podem também ser usadas para regressão (SVR) [4].

K-Vizinhos Mais Próximos (KNN**)**: O algoritmo KNN é um método baseado em instâncias que classifica ou estima valores com base nos k exemplos mais próximos de um ponto de teste. Utiliza medidas de distância (como a euclidiana) para encontrar os vizinhos mais próximos e realiza uma votação (classificação) ou média (regressão) para prever o resultado. É um modelo não paramétrico e de *lazy learning [5].*

Redes Neuronais Artificiais (RNA): s RNA consistem em camadas de neurónios artificiais interligados. Uma rede neuronal típica possui uma camada de entrada, uma ou mais camadas escondidas, e uma camada de saída. A aprendizagem é feita através do algoritmo de *backpropagation*, que ajusta os pesos com base na minimização do erro. As RNA são adequadas para a modelação de padrões não lineares complexos, mas requerem uma boa escolha de parâmetros para evitar o *overfitting [6].*

## Validação Cruzada k-fold e Métricas de Avaliação:

A validação cruzada k-fold é uma técnica fundamental utilizada neste trabalho para avaliar o desempenho dos modelos desenvolvidos. Esta técnica consiste em dividir o conjunto de dados em k subconjuntos de igual dimensão. Em cada uma das k iterações, um dos subconjuntos é utilizado como conjunto de teste, enquanto os restantes k−1 subconjuntos servem para treino. No final, os resultados das várias iterações são agregados, permitindo uma estimativa mais fiável da capacidade de generalização do modelo e reduzindo a variabilidade associada à escolha de uma partição específica dos dados.

Para os modelos de regressão, foram usadas as seguintes métricas de avaliação:

* MAE (Erro Médio Absoluto): mede a média dos erros absolutos entre os valores previstos e os reais;
* RMSE (Raiz do Erro Quadrático Médio): penaliza mais fortemente erros maiores e dá uma visão da magnitude média do erro;

Nos modelos de classificação, as métricas utilizadas incluem:

* *Accuracy*: proporção de previsões corretas;
* *Sensitivity (Recall*): capacidade de identificar corretamente os casos positivos;
* *Specificity*: capacidade de identificar corretamente os casos negativos;
* *F1-score*: média harmónica entre a precisão e o *recall*.

Estas métricas, combinadas com a validação cruzada k-fold, garantem uma avaliação rigorosa e comparável entre os diversos modelos aplicados.

# Realização do projeto

## Regressão

Nesta secção iremos demonstrar os métodos aplicados para prever a variável *Premature\_Deaths* utilizando apenas os dados dos países do sul da europa representados no *dataset*. Para isso, foram aplicados diversos algoritmos de regressão, com validação cruzada (k-fold) para garantir a robustez do ajuste. Em seguida, compararemos o desempenho de cada modelo por meio de métricas de erro, de modo a identificar qual abordagem é mais eficaz na previsão do número de mortes prematuras.

### Diagrama de correlação com Premature\_Deaths

Numa fase inicial, com a intenção de identificar quais as variáveis mais influenciam a variável Premature\_Deaths, procurou-se desenvolver um mapa de calor (heatmap) com os coeficientes de correlação de Pearson entre a variável dependente e as restantes variáveis do conjunto de dados.

É importante também destacar que foi feito um isolamento das variáveis numéricas (foram apenas escolhidas variáveis com valores quantitativos) uma vez que a correlação de Pearson só se aplica a atributos numéricos.

Uma imagem com texto, captura de ecrã, Retângulo

Os conteúdos gerados por IA podem estar incorretos.

Figura 1 - Matriz de correlação com Premature\_Deaths

Através da análise da Figura 1 podemos constatar que todas as varáveis apresentam coeficientes de correlação positivos o que indica que à medida que as variáveis independentes crescem a nossa variável dependente também cresce, porém, são valores de correlação baixos, levando-nos apenas a inferir que a população afetada, área populacional e os níveis médios de poluição têm uma relação direta, mas não muito forte, com o número de mortes prematuras com destaque para a população afetada por apresentar o coeficiente mais elevado.

### Regressão linear simples

No ponto seguinte é realizado um modelo de regressão linear simples para prever o número de mortes prematuras com base na variável Affected\_Population.

A avaliação do modelo foi realizada utilizando o método de validação cruzada k-fold, permitindo obter métricas médias de desempenho mais fiáveis. Além disso, foi gerado um diagrama de dispersão com os dados observados, sobreposto pela reta de regressão obtida, o que permite visualizar de forma clara a tendência linear existente entre as duas variáveis.

Os resultados da validação permitiram calcular os valores médios do erro absoluto (MAE) e da raiz do erro quadrático médio (RMSE), que servem de referência para a comparação com modelos de maior complexidade explorados nas etapas seguintes.

Uma imagem com texto, captura de ecrã, Tipo de letra, número

Os conteúdos gerados por IA podem estar incorretos.

Figura 2 - MAE e RMSE e Função Linear final

É possível constatar que os valores de MAE e RMSE em cada *fold* são muito semelhantes o que indica que o modelo é estável. O valor de MAE médio de 99 indica que as previsões erram, em média, por 99 mortes prematuras. O RMSE indica que há alguns pontos onde o desvio entre previsto e real chega a ser bem superior a 99, puxando a raiz quadrada para valores em torno de 150.

Relativamente a equação final, revela-nos que, para valores nulos de população afetada, prevê-se que o número de mortes prematuras fosse algo em torno de 55 e que cada 10000 aumentos da variável independente, gera, em média, um acréscimo de 1 morte prematura.

Uma imagem com captura de ecrã, texto, file, Saturação de cores

Os conteúdos gerados por IA podem estar incorretos.

Figura 3 - Regressão Linear Simples (Mortes Prematuras com População Afetada)

Quanto ao gráfico, a linha reforça a correlação positiva entre as variáveis, mas a dispersão dos pontos em torno da linha é muito elevada o que indica uma força de associação baixa, limitando o poder preditivo. Posto isto, houve a necessidade de optar por diferentes modelos de regressão para aumentar a precisão.

### Modelos de regressão alternativos para prever Premature\_Deaths

De forma a melhorar o nosso estudo preditivo das mortes prematuras foram abordadas quatro alternativas mais complexas para permitir uma previsão mais precisa da variável em estudo, recorrendo, igualmente, a validação cruzada e calculando os erros como no modelo anterior.

Para todos os modelos, exceto a árvore de regressão, foi aplicada normalização (standard *scaling)* a todas as variáveis de entrada, de modo a evitar que variáveis com maior escala dominassem o processo de aprendizagem do modelo e para garantir que contribuem, todas, proporcionalmente para o ajuste do modelo.

A avaliação do modelo foi realizada com validação cruzada k-fold (k=5), sendo calculadas as métricas MAE e RMSE em cada iteração, bem como no conjunto total de dados.

#### Regressõa linear múltipla

Um dos modelos utilizados foi a regressão linear múltipla que é uma extensão natural do modelo simples. integrando variáveis quantitativas e categóricas. As variáveis explicativas incluíram as variáveis numéricas usadas na matriz de correlação bem como variáveis categóricas codificadas relativas ao tipo de poluente e à doença associada.

Uma imagem com texto, captura de ecrã, Tipo de letra, documento

Os conteúdos gerados por IA podem estar incorretos.

Figura 4 - Valores para regressão linear múltipla

Conseguimos observar, através dos coeficientes, quais as variáveis têm maior efeito-médio sobre mortes prematuras, destacando-se a população afetada e a média de poluição no ar como variáveis que mais fazem crescer, em média, a variável alvo. Por outro lado, a doença de Asma tem tendência a fazer decrescer as mortes prematuras.

#### Árvore de regressão

De seguida, foi implementado um modelo de árvore de regressão, permitindo capturar relações não lineares entre as variáveis explicativas e o número de mortes prematuras. Tal como no modelo anterior, foram consideradas variáveis quantitativas e categóricas. Para garantir um equilíbrio entre capacidade preditiva e generalização, a configuração da árvore foi previamente otimizada com recurso a *GridSearchCV*, avaliando diferentes combinações de profundidade máxima (*max\_depth*), número mínimo de amostras para divisão (*min\_samples\_split*) e número mínimo de amostras por folha (*min\_samples\_leaf*). A estrutura da árvore final é gerada graficamente, permitindo a interpretação das regras de decisão extraídas pelos dados.

É importante destacar que não foi aplicada a normalização nas variáveis de entrada deste modelo uma vez que dividem os dados com base em limiares absolutos, e não dependem da escala das variáveis. A normalização não melhora o desempenho e pode até prejudicar a interpretabilidade das divisões feitas pela árvore.

Uma imagem com texto, diagrama, Esquema, Paralelo

Os conteúdos gerados por IA podem estar incorretos.

Figura 8 - Árvore de Regressão

Relativamente à árvore, é novamente confirmado que as variáveis Affected\_Population (aparece no nó da raiz), Air\_Pollution\_Average e Outcome\_Asthma (aparecem nos primeiros níveis) são as que fazem mais diferença no valor das mortes prematuras como era destacado pelos coeficientes do modelo anterior. Embora a segmentação detalhada permita captar padrões não lineares, a profundidade da árvore sugere alguma complexidade que deve ser considerada na análise do desempenho e na comparação com outros modelos.

#### SVM

O próximo modelo utilizado foi o SVM, com o objetivo de explorar se as relações entre os preditores e as mortes prematuras beneficiariam de uma abordagem não linear. Para tal, foi realizada uma otimização do tipo de *kernel* através de *GridSearchCV*, testando os três principais tipos de *kernel* (*linear*, *rbf* e *polynomial*) com valores fixos de C=10 e outros parâmetros apropriados (como *gamma* e *degree*).

#### Rede neuronal

Por fim, foi desenvolvido um modelo de regressão neuronal, recorrendo ao algoritmo *MLPRegressor*. Antes de aplicar o modelo final, procedeu-se à otimização da sua configuração através de uma grelha de parâmetros testada com *GridSearchCV*. A grelha contemplou diferentes estruturas de camadas ocultas, bem como duas funções de ativação (*relu* e *tanh*). O solver adam foi mantido fixo, com um número máximo de 5000 iterações, tendo sido igualmente aplicados o ajuste adaptativo da taxa de aprendizagem e a paragem antecipada (*early stopping*) para prevenir o sobre ajuste.

### Comparar resultados obtidos pelos modelos

Neste ponto, de forma a apresentar, de forma clara e comparável, as métricas de erro dos quatro modelos, foi armazenado num *DataFrame* todos valores médios e globais de MAE e RMSE de cada deles.

Uma imagem com texto, Tipo de letra, file, número

Os conteúdos gerados por IA podem estar incorretos.

Figura 11 - Tabela com métricas de erro para os quatro modelos

Com estes resultados conseguimos verificar que o SVM é o modelo que apresenta, em média, menor erro absoluto entre os valores previstos e os reais, porém também apresenta o maior RMSE o que sugere que o modelo pode estar a cometer alguns erros grandes (*outliers*) com impacto significativo na média quadrática.

O modelo da Rede Neuronal MLP é o que consegue prever com menor dispersão de erro em relação aos valores reais (RMSE mais baixo) e mantém um MAE baixo (segundo melhor).

Os restantes modelos apresentam valores intermédios quando comparados aos restantes, com a árvore de regressão a apresentar melhor erro médio absoluto que a regressão linear.

### Identificar o(s) melhor(es) modelo(s)

Com o objetivo de identificar os melhores modelos começamos por definir o menor MAE médio como critério para melhor desempenho dos modelos. Posto isto, armazenamos em listas os valores de MAE de cada fold para cada modelo e isolamos os dois melhores modelos (modelos que teriam melhor média de MAE nas listas).

Para o teste estatístico decidimos usar o teste de *Shapiro-Wilk* para definir qual seria o teste mais adequado com base na normalidade.

Usaremos o t *Student* pareado para amostras normais ou teste *Wilcoxon* pareado caso o contrário se verifique, sobre os valores de MAE dos modelos.

Estes testes foram escolhidos por estarmos a testar uma amostra pequena (5 pares) e ser usual para verificar se um modelo tende a apresentar MAE significativamente menor que o outro. Com isto definiu-se a H0 como “Não há diferenças significativas de desempenho entre os valores de MAE dos modelos” que poderá ser rejeitado caso o p-value apresente valores menores que os 5% de significância definidos.

Uma imagem com texto, captura de ecrã, Tipo de letra, número

Os conteúdos gerados por IA podem estar incorretos.

Figura 12 - Teste estatístico entre os dois melhores modelos

Através destes resultados conseguimos verificar que o melhor modelo (com MAE menor) foi o SVM.

No teste de Shapiro-Wilk aplicado às diferenças entre os MAE dos dois modelos resultou num p-value de 0.7463 (> 0.05), o que indica que as diferenças seguem uma distribuição normal, levando-nos a escolher o teste t de Student para verificar se as diferenças são estatisticamente significativas.

No referido teste, o valor do p-value foi muito inferior ao nível de significância, levando-nos a rejeitar a hipótese nula e a concluir que o modelo SVM é o que apresenta um melhor nível de desempenho.

# Conclusões do Trabalho

##### References

[1] E. E. Agency., “Air quality in Europe 2022. Report no. 05/2022. European Environmental Agency,” 2022, Accessed: Jun. 14, 2025. [Online]. Available: https://www.eea.europa.eu/publications/air-quality-in-europe-2022

[2] G. James, D. Witten, T. Hastie, R. Tibshirani, and J. Taylor, “An Introduction to Statistical Learning,” 2023, doi: 10.1007/978-3-031-38747-0.

[3] “Pattern Recognition and Machine Learning | SpringerLink.” Accessed: Jun. 14, 2025. [Online]. Available: https://link.springer.com/book/9780387310732

[4] V. N. Vapnik, “The Nature of Statistical Learning Theory,” *The Nature of Statistical Learning Theory*, 1995, doi: 10.1007/978-1-4757-2440-0.

[5] T. M. Cover and P. E. Hart, “Nearest Neighbor Pattern Classification,” *IEEE Trans Inf Theory*, vol. 13, no. 1, pp. 21–27, 1967, doi: 10.1109/TIT.1967.1053964.

[6] “Deep Learning.” Accessed: Jun. 14, 2025. [Online]. Available: https://www.deeplearningbook.org/