PREDIÇÃO DE DIAGNÓSTICO DE DIABETES COM INTELIGÊNCIA ARTIFICIAL APLICANDO MODELOS DE MACHINE LEARNING

Eduardo Durieux Lopes
Renato Cardoso Zimmer

SUMÁRIO

Resumo

Este trabalho descreve o desenvolvimento de uma solução de Inteligência Artificial para auxiliar no diagnóstico médico, especificamente na predição de diabetes feminina. O estudo utilizou um conjunto de dados clínicos estruturados, disponível publicamente em "https://www.kaggle.com/datasets/pentakrishnakishore/diabetes-csv".

A metodologia incluiu uma análise exploratória detalhada dos dados, abrangendo a identificação e tratamento de valores ausentes, a avaliação de correlações entre variáveis e a definição precisa da variável alvo.

Foram implementados e comparados diversos modelos de Machine Learning para classificação binária, tais como Regressão Logística, Árvore de Decisão, Random Forest, SVM, KNN e Redes Neurais. A escolha e avaliação dos modelos focaram em métricas cruciais para o contexto médico e para bases desbalanceadas, como *Recall*, *Precision*, *F1-Score* e ROC-AUC, ponderando entre o alto custo de falsos positivo e a necessidade de assertividade nos verdadeiros positivos.

Os resultados obtidos nos mostraram que o desempenho da solução não depende apenas da escolha do modelo, mas também das decisões no pré-processamento e nos ajustes para confluência com as regras de negócio.

1. Descrição de dados

1.1. Origem e escopo

Fonte Primária	https://www.kaggle.com/datasets/pentakrishnakishore/diabetes-csv
Nome	Diabetes Prediction Dataset
Data da Extração	15/12/2025
Período	*Não identificado*
Formato	csv
Quantidade de registros	769
Quantidade de variáveis	9

1.2. Dicionário Completo

	Coluna	**Tipo**	**Descrição**
1	Pregnancies	int64	Número de gestações
2	Glucose	int64	Concentração de glicose no plasma
3	Blood Pressure	int64	Pressão sanguínea
4	Skin Thickness	int64	Espessura da dobra cutênea no tríceps
5	Insulin	int64	Nível de insulina no sangue
6	BMI (Body Mass Index)	float64	Índice de gordura corporal baseado na altura x peso
7	Diabetes Pedigree Function	float64	Função da taxa de probabilidade de diabetes conforme histórico familiar
8	Age	int64	Idade da Mulher
9	Outcome	int64	Indicativo da diabetes ou não 0 - Sem ocorrência 1 - com ocorrência

Estes 9 campos compõem o dataset bruto.

1.3. Descrição da base

	Pregnancies	Glucose	BloodPressure	SkinThickness	Insulin	BMI	DPF	Age
25%	1	99	62	0	0	27.3	0.2437	24
50%	3	117	72	23	30.5	32	0.3725	29
75%	6	140.25	80	32	127.25	36.6	0.6262	41
min	0	0	0	0	0	0	0.078	21
max	17	199	122	99	846	67.1	2.42	81
média	3.8450	120.8945	69.1054	20.5364	79.7994	31.9925	0.4718	33.2408
desvio	3.3695	31.9726	19.3558	15.9522	115.2440	7.8841	0.3313	11.7602
nulos	0	5	35	227	0	5	35	227

1.4. Valores faltantes

A base continha alguns campos com valor zero onde não condiz com a realidade, indicando não coleta dos dados

Campo	**Qtde nulos**
Glucose	5
BloodPressure	35
SkinThickness	227
BMI	5
DiabetesPedigreeFunction	35
Age	227

Iremos alterar estes valores para Nan e posteriormente alterar novamente para mediana ou média conforme formos aplicar os modelos

1.5. Variável Target

A variável target definida é a coluna **OUTCOME.** Aqui temos um ponto de atenção:

- Outcome=0: 500 (65,1%) ***(Não presença de diabetes)***
- Outcome=1: 268 (34,9%) ***(Presença de diabetes)***

Observamos que a presença de valores negativos para presença de diabetes é o dobro da presença de valores positivos, sendo assim podemos dizer que o dataset está desbalanceado. Neste caso, a acurácia pode enganar um pouco. Usaremos **ROC-AUC, recall, F1, precision**.

2. Métricas

Accuracy *(Acurácia)*

De maneira bem simples este número indica o percentual das previsões acertadas, tanto para positivo quanto para negativo. Por exemplo, para uma acurácia de 0.7, entende-se que 70% das previsões estão corretas, sem fazer distinção se são as previsões negativas ou positivas.

Precision *(Precisão)*

Esta métrica indica o percentual de positivos que são verdadeiros. Aqui temos uma separação da métrica anterior. Usando exemplo do caso acima, para uma precisão de 0.7, significa que 70% das previsões que foram identificadas como positivas estão corretas. Não faz alusão às previsões negativas.

Recall *(Sensibilidade)*

Esta métrica indica o percentual de positivos reais que estamos conseguindo encontrar. Continuando com a utilizar o mesmo número dos exemplos acima, um Recall de 0.7, indica que houve uma perda de 30% de resultados positivos que não conseguiram ser detectados pelo modelo aplicados..

F1-Score *(Pontuação F1)*

F1-Score mede a harmonia entre Precision e Recall. Ele é prejudicado quando uma das duas métricas é muito pior que a outra. Ele busca evitar falsos positivos e falsos negativos

ROC-AUC - Area Under the Curve

Métrica em Machine Learning para avaliar modelos de classificação binária, mostrando a capacidade de distinguir positivo e negativo, plotando a Taxa de Verdadeiros Positivos (TPR) vs. a Taxa de Falsos Positivos (FPR) em diferentes limiares, com AUC 1.0 sendo perfeito e 0.5 aleatório.

Curva ROC (Receiver Operating Characteristic): Gráfico que mostra a performance de um classificador binário variando seu limiar de decisão.

Eixo Y (vertical) Taxa de Verdadeiros Positivos (TPR) ou Sensibilidade;

Eixo X (horizontal) Taxa de Falsos Positivos (FPR) ou (1 - Especificidade).

AUC (Area Under the Curve): A área total sob a curva ROC, fornece uma medida única do desempenho geral do modelo.

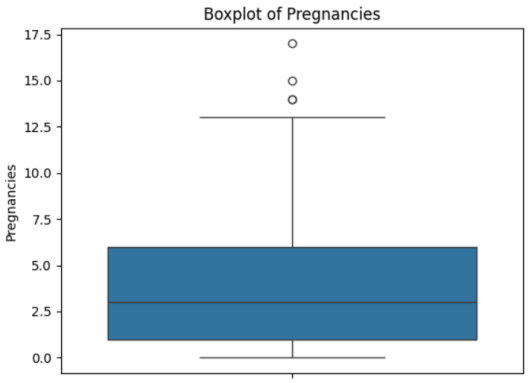
Interpretação:

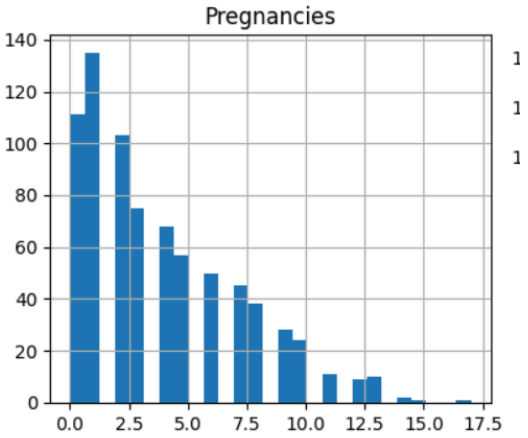
AUC = 1.0: Modelo perfeito (distingue classes perfeitamente).
AUC = 0.5: Desempenho aleatório (como jogar uma moeda).
AUC < 0.5: Pior que aleatório (modelo previsivelmente ruim).
Quanto maior a AUC (mais perto de 1), melhor o modelo.

3. Análise das variáveis isoladamente

3.1. Pregnancies

Este campo permite valores zero





- A variável Pregnancies representa o número de gestações por indivíduo. Trata-se de variável discreta de contagem, limitada inferiormente por zero. Associada a um tipo específico de diabetes, a gestacional.

Boxplot

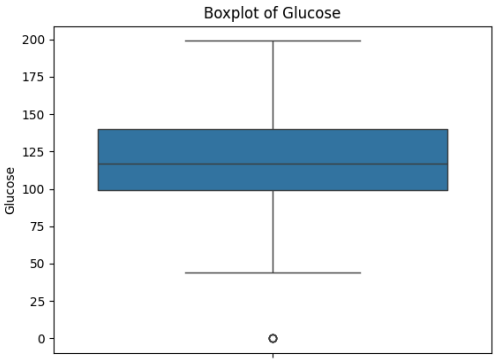
- Mediana: ~3 gestações, Q1: ~1 gestação, Q3: ~6 gestações, IQR: ~5 → variabilidade moderada
- Presença de outliers superiores, acima de 13 gestações, atingindo valores máximos próximos de 17.
- Não há outliers inferiores pois a variável é limitada em zero.

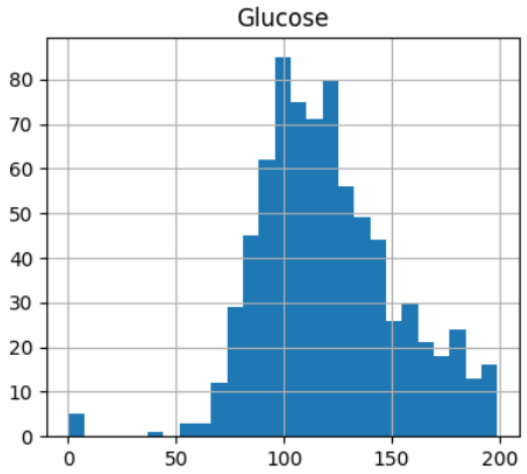
Histogram

- Distribuição assimétrica à direita
- Alta concentração de valores baixos, especialmente entre 0 e 3 gestações.
- Frequência decrescente à medida que o número de gestações aumenta.
- Cauda longa à direita, com valores chegando a aproximadamente 17 gestações.
- Padrão típico de variáveis de contagem onde quais eventos elevados são raros..

- Coeficiente de assimetria = 0.7524

3.2. Glucose





- Esta variável representa a concentração de glicose no sangue (mg/dL), sendo um indicador clínico relevante.

Boxplot

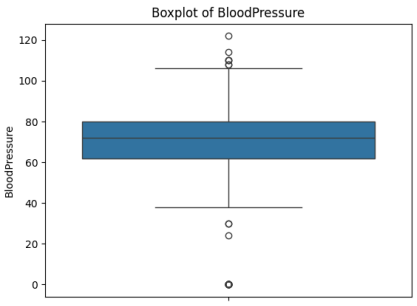
- Mediana: Aproximadamente entre 115 e 120 mg/dL, indicando que metade da amostra apresenta valores acima desse intervalo.
- Primeiro quartil (Q1): Em torno de 100 mg/dL.
- Terceiro quartil (Q3): Aproximadamente 140 mg/dL.
- Intervalo interquartil (IQR): Cerca de 40 mg/dL.
- Valores mínimos e máximos sem atipicidade.
- Existe um valor próximo a zero, o que é inviável fisiologicamente. Provável erro ou não existência de coleta.

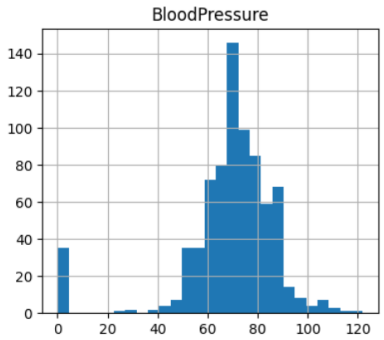
Histogram

- A distribuição assimétrica positiva à direita
- Maior concentração de valores entre 90 e 140 mg/dL.
- Há uma extensão gradual até valores elevados (180–200 mg/dL), sugerindo presença de indivíduos com hiperglicemia.

- Coeficiente de assimetria = 0.3654

3.3. BloodPressure





- Pressão arterial diastólica (mmHg) é muito utilizada como indicador de risco cardiovascular.

Boxplot

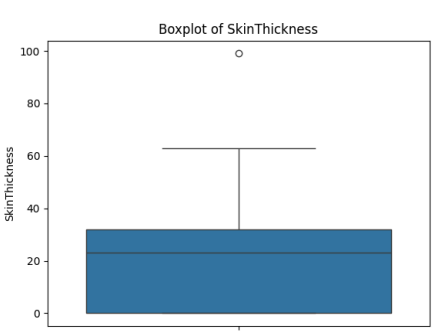
- Mediana: ~72 mmHg; Q1: ~62 mmHg; Q3: ~80 mmHg; IQR: ~18 mmHg → baixa a moderada variabilidade
- Outliers inferiores: valores próximos de 0 mmHg e entre 20–30 mmHg
- Outliers superiores: valores acima de 105 mmHg, chegando a ~122 mmHg
- Presença de zeros indicando também, não coleta ou erro.

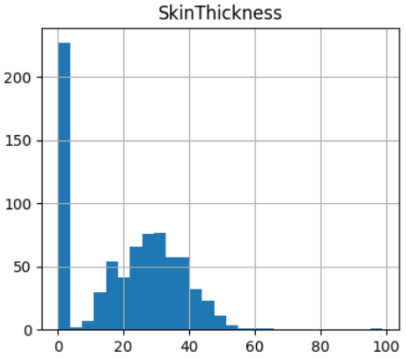
Histogram

- A maior concentração de observações está entre 60 e 85 mmHg.
- A distribuição apresenta cauda mais longa à esquerda, causada pelos valores próximos de zero e leve alongamento à direita devido aos valores elevados (>100 mmHg).
- A presença de múltiplos outliers e assimetria indica que a variável não segue perfeitamente uma distribuição normal.

- Coeficiente de assimetria = -0.4486 (principal causa são os valores zerados - que neste caso são valores artificiais)

3.4. SkinThickeness





- Espessura da prega cutânea do tríceps (mm) - indicativo de adiposidade corporal

Boxplot

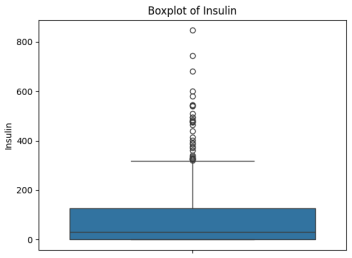
- Mediana: ~23 mm; Q1: ~0 mm; Q3: ~32 mm; IQR: elevado, refletindo mistura de zeros com valores reais
- Outliers superiores: valores próximos de 100 mm
- Sem outliers inferiores reais, pois os zeros dominam a base da distribuição

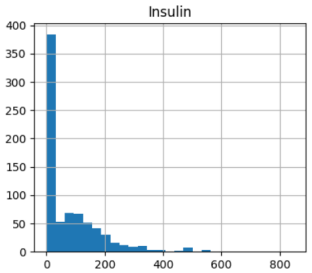
Histogram

- Alta concentração de valores em zero
- Pico muito elevado em 0 mm representando uma fração significativa da amostra
- Distribuição principal entre ~10 e 50 mm
- Pico central em torno de 20–30 mm
- Cauda longa à direita, alcançando valores próximos de 100 mm

- Coeficiente de assimetria = -0.4633 (principal causa são os valores zerados - que neste caso são valores artificiais e a longa cauda a direita)

3.5. Insulin





- Concentração sérica de insulina (µU/mL) é utilizada em estudos de metabolismo glicídico, resistência à insulina e diabetes mellitus.

Boxplot

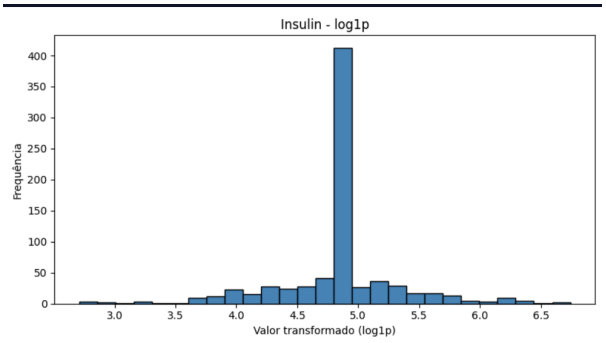
- Mediana: baixa, próxima da região inferior da escala (≈ 30 µU/mL)
- Q1: muito próximo de zero.
- Q3: aproximadamente entre 120 e 130 µU/mL.
- IQR elevado, refletindo alta variabilidade.
- Número elevado de outliers superiores, acima de **300 µU/mL**, com máximas próximas de **850 µU/mL**.
- Esses outliers indicam possivelmente indivíduos com resistência à insulina.

Histogram

- Padrão fortemente assimétrico à direita
- Grande concentração de valores próximos de zero, formando um pico muito elevado na região inicial.
- A maioria dos valores observados encontra-se abaixo de 150 µU/mL.
- Presença de cauda longa à direita, estendendo-se até valores extremamente elevados (acima de 800 µU/mL).
- Valores zero ou próximos de zero para insulina não são fisiologicamente possíveis - indicando falta de coleto ou erro.

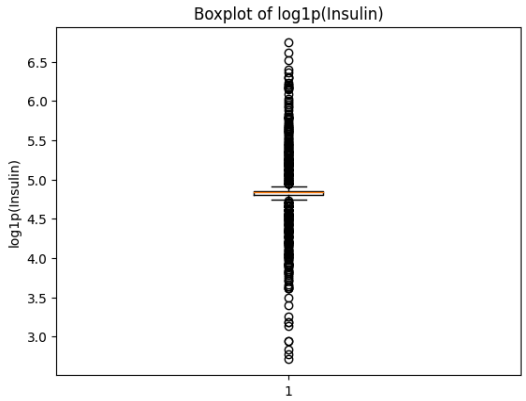
- Coeficiente de assimetria = 1.2834 (principal causa são os valores zerados e a longa cauda a direita)

Ações Pré-processamento

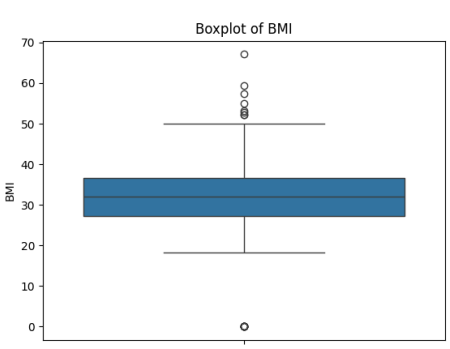


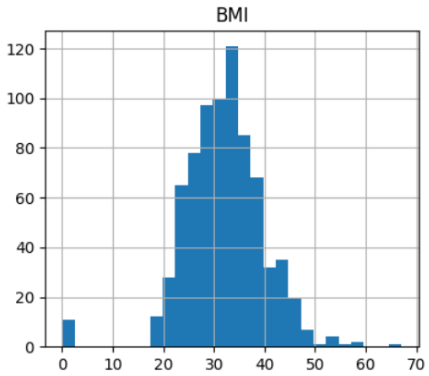
Aplicando log1p a esta variável e plotando novamente os gráficos vemos que a assimetria foi reduzida. Aquela cauda a direita não está mais presente. Existe um pico um pouco antes de 5.0 no histograma, este pico está presente pois havia muitos zeros que foram substituídos pela mediana - isso acabou gerando um acúmulo de valores iguais que está agora representado por este pico no gráfico.

Usaremos esta variável com esta alteração na regressão logística, knn e svm. Nos outros modelos manteremos sem esta modificação.



3.6. BMI (Índice de massa corporal)





- O Índice de Massa Corporal (BMI) é uma medida utilizada para classificar o estado nutricional de indivíduos, sendo calculado pela razão entre o peso (kg) e o quadrado da altura (m²). É amplamente empregado em estudos associados a obesidade, risco cardiometabólico e diabetes mellitus.

Boxplot

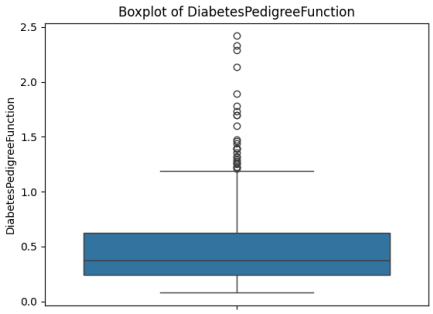
- Mediana: ~31 kg/m², Q1: ~27 kg/m², Q3: ~36 kg/m² e IQR: ~9 kg/m² → variabilidade moderada
- Outlier inferior: valor próximo de 0 kg/m², não plausível clinicamente.
- Outliers superiores: valores acima de 50 kg/m², alcançando aproximadamente 67 kg/m², indicativos de obesidade mórbida.

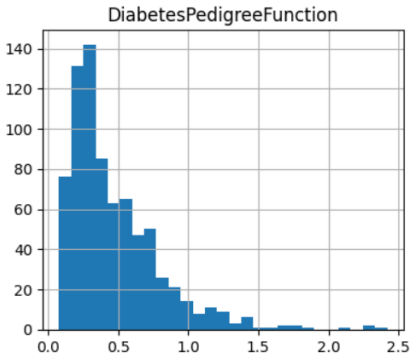
Histogram

- Formato aproximadamente unimodal, com concentração central entre 25 e 35 kg/m².
- Pico principal em torno de 30–32 kg/m², sugerindo predominância de indivíduos com sobrepeso ou obesidade grau I.
- Cauda à direita, estendendo-se até valores elevados (acima de 60 kg/m²), indicando presença de indivíduos com obesidade severa.
- Um pequeno pico próximo de 0 kg/m², que não é fisiologicamente plausível.

- Coeficiente de assimetria = -0.0028 - pode-se dizer que esta variável é simétrica

3.7. DiabetesPedigreeFunction





- Esta variável indica a predisposição genética a desenvolver diabetes - Histórico familiar

Boxplot

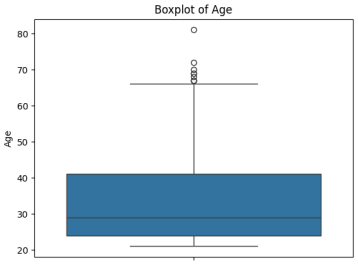
- Mediana: ~0,35–0,40, Q1: ~0,25, Q3: ~0,60, IQR: ~0,35 → variabilidade moderada
- Grande quantidade de outliers superiores, acima de 1,2, chegando a valores próximos de 2,5.
- Não há outliers inferiores relevantes, pois a variável é limitada inferiormente por valores próximos de zero.

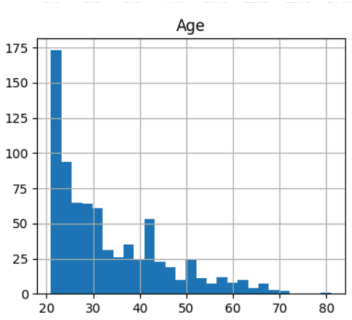
Histogram

- Distribuição fortemente assimétrica à direita
- Alta concentração de observações em valores baixos, principalmente entre 0,2 e 0,6.
- Frequência decrescente à medida que os valores aumentam.
- Cauda longa à direita, estendendo-se até aproximadamente 2,5.
- Essa configuração indica que a maior parte da população apresenta baixo risco hereditário, enquanto poucos indivíduos concentram valores elevados de predisposição genética.

- Coeficiente de assimetria = 0.8998 - Grande cauda à direita

3.8. Age





- Idade dos pacientes em anos

Boxplot

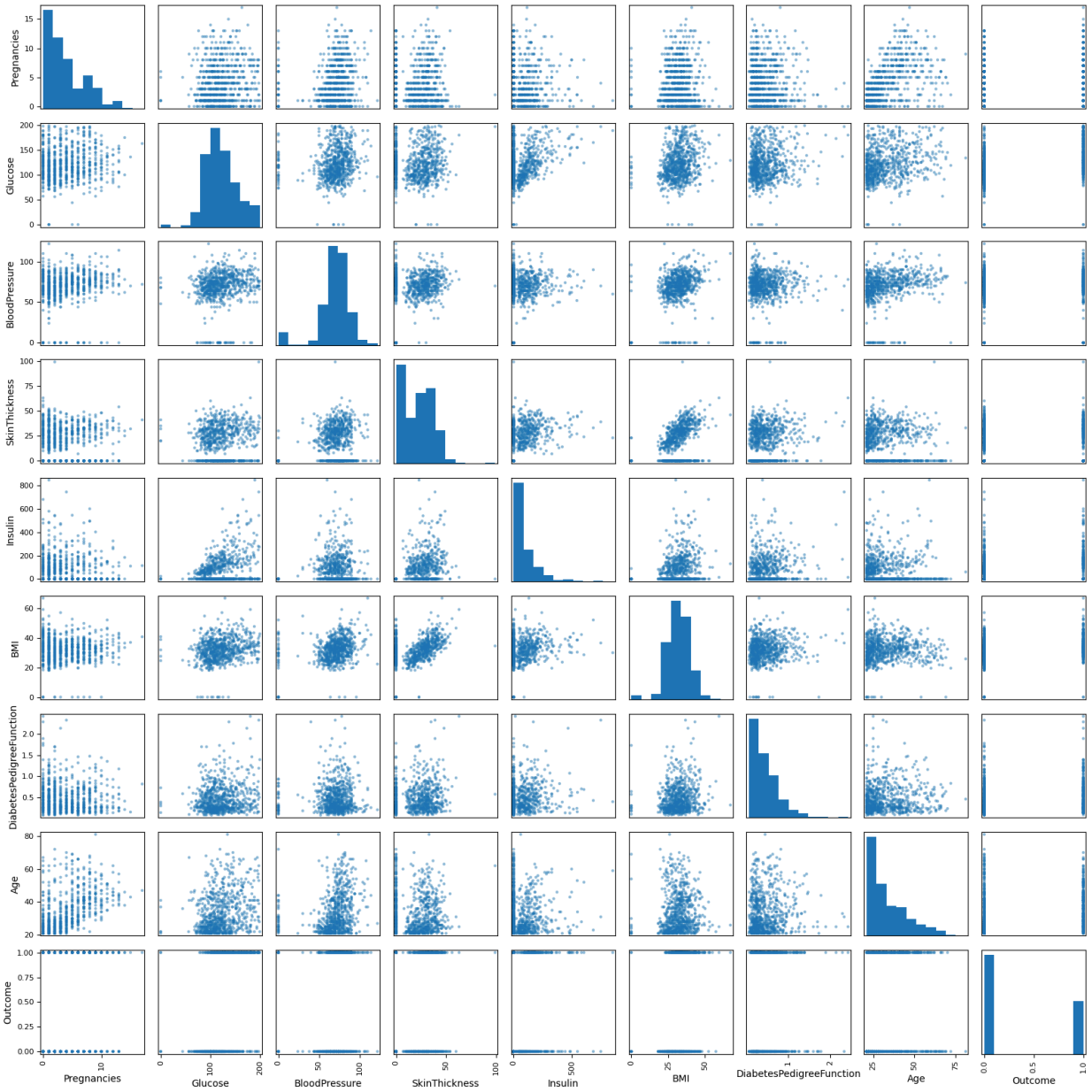
- Mediana: ~29 anos, Q1: ~24 anos, Q3: ~41 anos, IQR: ~17 anos → variabilidade moderada
- Observam-se outliers superiores a partir de aproximadamente 66 anos, chegando a valores acima de 80 anos.
- Não há outliers inferiores relevantes, pois a idade mínima inicia próximo a 20 anos

Histogram

- Distribuição assimétrica à direita
- Alta concentração de indivíduos entre 21 e 35 anos, formando o núcleo da distribuição.
- Frequência progressivamente menor à medida que a idade aumenta.
- Cauda longa à direita, com observações chegando a aproximadamente 81 anos.
- Coleta representação de indivíduos jovens com menor presença de idosos.

- Coeficiente de assimetria = 1.0818 - Grande cauda à direita

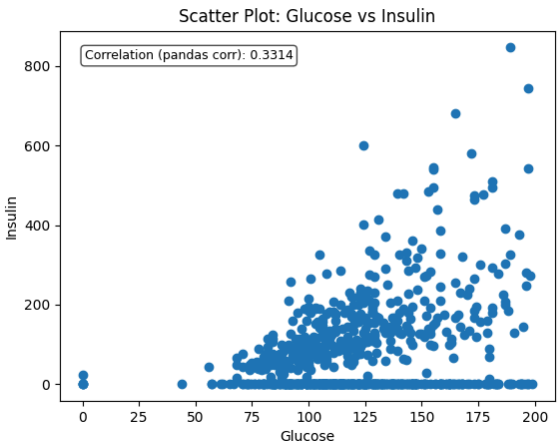
4. Matriz de correlação dos campos



Nesta matriz identificamos 2 gráficos de correlação que podem ser analisados com mais cuidado.

2.● Glucose x Insulim
2.● SkinThickness x BMI

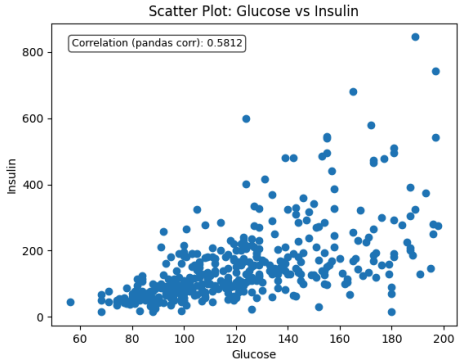
4.1. Glucose x Insulim



À medida que a glicose aumenta, a insulina tende a aumentar, isso é fisiologicamente esperado
O gráfico apresenta correlação positiva não muito forte, parece existir um pouco de dispersão quando os valores tendem a aumentar

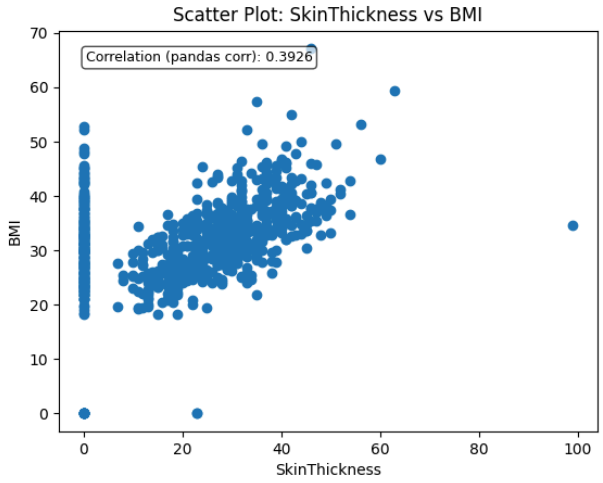
Presença de outliers no canto superior direito do gráfico e presença dos zeros inválidos.

Após o tratamento dos zeros



A correlação fica um pouco mais evidente e percebe-se que não existe mais a presença da linha horizontal no valor zero do eixo y

4.2. SkinThickness x BMI

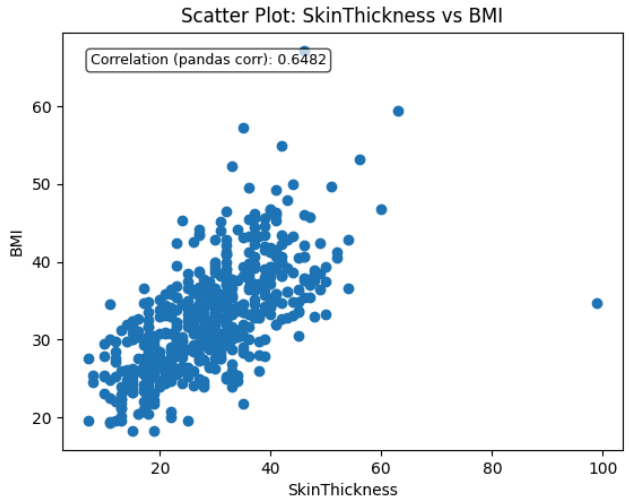


Tendência ascendente confirmando a correlação positiva.
A maior concentração de pontos está aproximadamente entre, SkinThickness: 15–45 mm e BMI: 25–40 kg/m²

Existe dispersão considerável em torno da tendência média.

Há uma concentração vertical em SkinThickness = 0, associada a dados ausentes codificados como zero.

Observa-se também a presença de outliers (ex.: SkinThickness ≈ 100 mm), que podem influenciar a correlação.



A remoção dos zeros eliminou a coluna vertical artificial no eixo X.

O padrão reflete melhor a relação real entre gordura subcutânea e massa corporal relativa.

Ainda aparecem alguns outliers (ex.: SkinThickness ≈ 100 mm),

5. Modelos

5.1. Regressão linear

Este modelo foi aplicado e posteriormente removido pois não é adequado seu uso quando a variável Target é binária.

Este modelo retorna uma predição linear - como o próprio nome diz - sendo mais adequado, por exemplo, quando vamos determinar uma probabilidade, um valor de vendas, uma temperatura,etc. Resumidamente ele calcula a relação entre 2 ou mais variáveis para prever valores futuros ou entender tendências.

5.2. Regressão Logística

Regressão Logística - de maneira bem sucinta - calcula a probabilidade de algo acontecer e dados este valor transforma em 0 ou 1, para isto ele se vale de um limiar (0.5) . Quanto mais longe deste limiar mais confiança existe no resultado.

Para este modelo criamos um Pipeline executando algumas alterações nos dados

Para as colunas **"Glucose", "BloodPressure", "SkinThickness", "Insulin", "BMI"**, trocamos os zeros por NaN e em seguida pelas medianas para garantir que não tenhamos dados “sujos” que possam prejudicar o uso do modelo.

Para a coluna **"Insulin"** foi aplicado log1p para melhorar a questão da assimetria. Por ser neste caso positiva a direita causada pela presença de valores elevados associados a resistência à insulina e uma distribuição concentrada em valores baixos. Tentamos com isso diminuir a influência dos valores extremos diminuindo a cauda direita.

Efetuamos normalização das variáveis Pregnancies, SkinThickness, BMI, BloodPressure, Glucose, Insulin, e Age utilizando StandardScaler e DiabetesPedigreeFunction utilizando robustScaler - esta última utilizamos um método diferente por ter uma assimetria mais forte

Rodando o modelo (threshold padrão 0.5) e aplicando para base de testes 20%, obtivemos as métricas

Obs: Este threshold aqui não é o limiar utilizado pelo algoritmo de regressão logística. Ele é um um valor utilizado no fit. Após o grid search identificar qual a melhor combinação de hiperparâmetros ele pega a probabilidade de classe positiva gerada pelo melhor modelo identificado e compara com o threshold definido manualmente - isso serve como ajuste fino. Em todos os modelos validados neste trabalho esta mesma técnica será utilizada, portanto mesmo modelos que trabalham com “limiares” utilizaremos o threshold comparativamente com o predição como “método de ajuste fino”

Accuracy: 0.7078
Precision: 0.6000
Recall: 0.5000
F1-Score: 0.5455
ROC-AUC: 0.8130

O Modelo apresentou uma baixa acurácia, 70,78% das previsões são acertadas. Precisão baixa e uma Recall muito ruim, Não temos um número muito ruim mas estamos longe de podermos afirmar que este modelo é bom. A harmonia Precision e Recall acima de 0.5 pode ser considerada razoável, mesmo com ROC-AUC indicando boa capacidade de separar positivos de negativos

Analisando todos os números o modelo tem baixa acurácia e recall - temos um grande problema nos falsos negativos - como tratamos de diabetes falsos negativos são muito ruins - vamos ajustar o modelo e rever os números.

Threshold	Resultados
0.9	Accuracy: 0.6753 Precision: 0.8333

	Recall: 0.0926 F1-score: 0.1667 ROC AUC: 0.8130
0.3	Accuracy: 0.74033 Precision: 0.5972 Recall: 0.7963 F1-score: 0.6825 ROC AUC: 0.8130

O Threshold indica o “limiar” do que irá diferenciar o positivo de negativo, ou seja, quando o modelo faz o cálculo para indicar se deve considerar 0 ou 1.

Ajustando o Threshold podemos ver que aumentando este limiar nosso falso negativo diminuiu muito - chegando o modelo a afirmar que tem precisão de 83%) porém outras métricas foram muito prejudicadas. A harmonia entre Precision e Recall caiu drasticamente e a acurácia foi para 67%. Modelo perdeu totalmente a capacidade de diferenciar negativos de positivos (F1-score)

Ajustando este valor para baixo conseguimos ter um grande ganho nos falsos negativos - somente 21% dos positivos reais não foram identificados. Houve um ganho de 5% na acurácia, a harmonia do modelo se manteve. A capacidade de diferenciar positivos de negativos voltou a melhorar.

Rodamos o modelo mais uma vez - agora com threshold de 0.2 e obtivemos

0.1	Accuracy: 0.6883 Precision: 0.5319 Recall: 0.9259 F1-score: 0.6757 ROC AUC: 0.8130

Percebemos que conforme diminuímos o valor de threshold pequenas perdas na acurácia, na harmonia e na precisão, mas o ganho na questão de não perder positivos que são verdadeiros aumenta significativamente. No caso de uma aplicação que seja crucial em identificar os casos positivos for muito importante e o prejuízo em identificar casos negativos como positivos não for oneroso podemos dizer que este modelo pode ser aplicado, necessitando apenas de um correto balanceamento do threshold

Para modelos onde é muito importante evitar perda de positivos o ideal é trabalhar com threshold baixo - algo em torno de 0.1 a 0.2, porém em cenários onde será considerado que o custo é muito grande de avaliar um valor negativo que foi falsamente identificado como positivo devemos cuidar com o valor de threshold

5.3. **Árvore de decisão**

A árvore de decisão é uma técnica que toma uma decisão numa séria de perguntas, semelhante a uma brincadeira de crianças existentes que inicia fazendo perguntas simples e a partir das respostas faz perguntas mais específicas até que consiga tomar uma decisão.

Para este modelo criamos um Pipeline executando algumas alterações nos dados

Para as colunas **"Glucose", "BloodPressure", "SkinThickness", "Insulin", "BMI"**, trocamos os zeros por NaN e em seguida pelas medianas.

Rodando o modelo (threshold padrão 0.5) e utilizamos os parâmetros

- max_depth=10 (A profundidade máxima da árvore)
- min_samples_split=5 (O número mínimo de amostras necessárias para dividir um nó interno)
- min_samples_leaf=2 (O número mínimo de amostras necessárias para estar em um nó folha - nó terminal)
- max_features="sqrt" (O número de features a considerar na busca pela melhor divisão)
- class_weight="balanced" (pesos de classe)

Estas foram as métricas retornadas inicialmente

Accuracy: 0.6948
Precision: 0.5479
Recall: 0.7407
F1-score: 0.6299
ROC AUC: 0.7294

Fizemos uma análise da maneira que construímos o modelo está apenas razoável. Esperávamos um resultado bem melhor para este modelo; estamos perdendo quase 25% dos positivos; quase metade dos valores que estamos identificando como positivo, na verdade não o são e também baixa acurácia. Os números mostram ainda pouca harmonia na aplicação do modelo (F1-Score).

Pesquisando um pouco mais nos deparamos com o método ***GridSearchCV*** que faz ajuste ***(fit)*** e treinamento do modelo exaustivamente para encontrar a melhor combinação de parâmetros. Efetuamos as alterações e rodamos novamente o modelo mantendo o threshold padrão 0.5. Esta função nos retornou que os melhores parâmetros são:

classifier__ccp_alpha: 0.0
classifier__class_weight: 'balanced',
classifier__max_depth: 5,
classifier__max_features: None,
classifier__min_samples_leaf: 5
classifier__min_samples_split: 2

0.5	Accuracy: 0.738 Precision: 0.6066 Recall: 0.6852 F1-score: 0.6435 ROC AUC: 0.8189
0.9	Accuracy: 0.7468 Precision: 0.7419 Recall: 0.4259 F1-score: 0.5412 ROC AUC: 0.8189
0.3	Accuracy: 0.7078 Precision: 0.5506 Recall: 0.9074 F1-score: 0.6853 ROC AUC: 0.8189
0.15	Accuracy: 0.6753 Precision: 0.5208 Recall: 0.9259 F1-score: 0.6667 ROC AUC: 0.8189

Percebemos uma pequena perda na acurácia e precisão mas com bastante ganho na diminuição da perda dos positivos. A harmônia do modelo e a capacidade em diferenciar os positivos dos negativos basicamente se mantém.

5.4. Random forest

A Random Forest toma uma decisão a partir da utilização de diversas Árvores de decisão, mas aqui há uma diferença, em vez de utilizar diversas árvores iguais, ele cria as árvores de decisão utilizando "partes dos dados" - ou seja, cada Árvore utilizada trabalha de maneira diferente. Com as respostas de cada uma destas árvores ele toma a sua decisão.

Único pre processamento utilizado foi nas colunas **"Glucose", "BloodPressure", "SkinThickness", "Insulin", "BMI"**, trocamos os zeros por NaN e em seguida pelas medianas.

Aqui começamos a perceber mais necessidade de capacidade computacional para execução do modelo. Cada execução começou a demorar em torno de 40 minutos.

Usando os thresholds 0.5, 0.9, 0.3 e 0.15

0.5	Accuracy: 0.7208 Precision: 0.6410 Recall: 0.4630 F1-score: 0.5376 ROC AUC: 0.7965
0.9	Accuracy: 0.6494 Precision: 0.0000 Recall: 0.0000 F1-score: 0.0000 ROC AUC: 0.7965
0.3	Accuracy: 0.7078 Precision: 0.5570 Recall: 0.8148 F1-score: 0.6617 ROC AUC: 0.7965
0.15	Accuracy: 0.5844 Precision: 0.4554 Recall: 0.9444 F1-score: 0.6145 ROC AUC: 0.7965

O *GridSearchCV* nos retornou que os melhores parâmetros são:

classifier__bootstrap: True
classifier__class_weight: None
classifier__max_depth: 5
classifier__max_features: sqrt
classifier__min_samples_leaf: 4
classifier__min_samples_split: 10
classifier__n_estimators: 400

De maneira geral podemos dizer que co threshold padrão de 0.5 temos 72,08% de taxa de acerto (Accuracy), porém as previsões **positivas** tem acerto de somente 64%. O que parece ser mais problemático são os positivos que estão sendo “perdidos”, 53,70% dos casos que realmente são positivos estão sendo identificados como negativos. Neste tipo de aplicação isto pode ser bem problemático.

Conforme abaixamos o threshold a taxa de perda de positivos reduziu drasticamente, com 0.3 já está em aproximadamente 19% e com 0.15 chegou a mais ou menos 6%. A perda da acurácia estava sob controle porém ao chegar em Threshold 0.15 ganhou força e a precisão que foi se prejudicando gradualmente. Como é esperado a taxa de positivos falsos teve um incremento mas em função do objetivo o ganho e não perder positivos foi maior que o prejuízo em identificar negativos como positivos (Precision).

5.5. **SVM**

O próximo modelo implementado foi SVM

O SVM (Support Vector Machine) é um algoritmo utilizado para classificação binária. (Sim e não; 0 e 1). Utiliza uma ideia bem simples, ele desenha uma linha que irá "separar" os dados.

A ideia é encontrar um padrão diferenciador e desenhar uma linha que consiga da melhor maneira possível separar os dados em 2 conjuntos distintos para que quando chegue um novo dados ele consiga, a partir dessa delimitação, determinar em qual dos conjuntos o dado será colocado.

Os pontos que ficam mais próximos dessa linha são os mais importantes para o SVM. Eles são chamados de vetores de suporte, porque são eles que "seguram" a posição da linha. Se você mover esses pontos, a linha muda; se mover outros pontos mais distantes, quase nada acontece.

Fazendo sempre o mesmo roteiro de transformações com apenas 1 alteração, na variável DiabetewsPedigreeFunction mudamos o escalonamento, no lugar de standardScaler utilizamos RobustScaler, para as outras variáveis mantivemos como estava.

Voltamos a utilizar log1p para melhorar assimetria de insulin

Executamos o modelo com os thresholds de 0.5, 0.9, 0.3 e 0.15 sempre para fins comparativos entre os modelos.

0.5	Accuracy:0.7078 Precision:0.6000 Recall:0.5000 F1-score:0.5455 ROC AUC:0.8063
0.9	Accuracy:0.6688 Precision: 1.0000 Recall: 0.0556 F1-score: 0.1053 ROC AUC: 0.8063
0.3	Accuracy: 0.7338 Precision: 0.5890 Recall: 0.7963 F1-score: 0.6772 ROC AUC 0.8063
0.15	Accuracy: 0.6494 Precision: 0.500 Recall: 0.9444 F1-score: 0.6538 ROC AUC: 0.8063

Grid search nos retornou que os melhores parâmetros são:

classifier__C:1
classifier__class_weight:None
classifier__gamma:0.01
classifier__kernel:rbf

Com threshold padrão de 0.5 recebemos uma acurácia baixa 70% com pouca precisão 60% (acerto de positivos realmente positivos) e metade dos positivos não são identificados. Valores iniciais bem ruins, diferente do que esperávamos. Novamente executamos o modelo com threshold de 0.15. O ganho na acurácia foi modesto e a taxa de precisão se manteve. Podemos perceber um ganho significativo na perda dos positivos, o modelo passou a perder somente 5%. Novamente estamos na decisão de balancear a necessidade de não perder os positivos com o custo de detectar negativos como positivos.

5.6. **KNN**

O k-nearest neighbors (KNN), é o algoritmo classificador mais utilizado atualmente. É um algorítimo de aprendizado supervisionado que utiliza a proximidade para fazer classificações ou previsões sobre agrupamentos. De uma maneira bem simples pode-se dizer que ele recebe um número k que irá usar para comparação e para decidir a qual conjunto um dado pertence ele utiliza os k dados mais próximos e compara, conforme a maioria determinar será feita a escolha.

Aplicamos o Knn usando as mesmas transformações de pré-processamento do SVM. As justificativas se mantém Rodamos o modelo com threshold padrão 0.5, 0.3 e 0.15 para comparação:

0.5	Accuracy: 0.7143 Precision: 0.6042 Recall: 0.5370 F1-score: 0.5686 ROC AUC: 0.8001
0.9	Accuracy: 0.6494 Precision: 0.0000 Recall:0.0000 F1-score: 0.0000 ROC AUC: 0.8001
0.3	Accuracy: 0.6623 Precision: 0.5125 Recall: 0.7593 F1-score: 0.6119 ROC AUC: 0.7689
0.15	Accuracy: 0.6494 Precision: 0.500 Recall: 0.8704 F1-score: 0.6351 ROC AUC: 0.8001

O grid search nos retorno que os melhores parâmetros são:

classifier__n_neighbors:15
classifier__p: 2
'classifier__weights':'uniform

Mesmo utilizando o threshold 0.15 o desempenho deste modelo um pouco mais modesto que SVM, uma grande perda de positivos com baixa acurácia e baixa precisão.

Para valores maiores de threshold um modelo vai sendo fortemente prejudicado. No teste feito com 0.9 trouxe valores queimpossibilitam o uso deste modelo.

5.7. **Redes Neurais**

Aqui no tópico redes neurais utilizamos o MLPClassifier (Multilayer Perceptron Classifier): um tipo de algoritmo de aprendizado de máquina supervisionado usado para tarefas de classificação. Ela é inspirada na estrutura do cérebro e é uma das formas mais fundamentais de redes neurais.

Para este modelo utilizamos robustScaler em DiabetesPedigreeFuncton (maior problema de assimetria) e nas outras variáveis utilizamos StandardScaler, uma vez que outras variáveis com assimetria foram corrigidas via log1p(Insulin) e Age não consideramos presença de outliers

A Variável Insulin tratamos com log1p na tentativa de correção do longa cauda.

Foi efetuada a correção dos zeros nas colunas de sempre.

Como padrão rodamos com threshold de 0.9, 0.5, 0.3 e 0.15

0.5	Precision:0.6078 Recall:0.5741 F1-score:0.5905 ROC AUC:0.8217
0.9	Accuracy:0.7013 Precision:0.9000 Recall:0.1667 F1-score:0.2812 ROC AUC:0.8217
0.3	Accuracy:0.7662 Precision:0.6286 Recall:0.8148 F1-score:0.7097 ROC AUC:0.8217
0.15	Accuracy:0.6753 Precision:0.5217 Recall:0.8889 F1-score:0.6575 ROC AUC:0.8217

6. Conclusão

Executando os modelos e comparando os resultados, descobrimos que muito mais do que os modelos, precisamos nos atentar muito ao limiar de decisão (threshold) pois fazendo ajustes finos podemos ter ganhos expressivos. O pré processamento das variáveis é processo trabalhoso e deve ser efetuado com cuidado necessitando de bastante conhecimento técnico para que seja feita a melhor escolha.

O melhor modelo depende do objetivo da aplicação:

- quando não podemos perder positivos verdadeiros a melhor escolha é SVM com threshold = 0.15

  Recall: 0,9444 (perde pouquíssimos positivos)
  Precision: 0,500
  F1-score: 0,6538

  Vale notar que Random Forest também atingiu recall 0,9444 com threshold 0,15, porém a precisão mais baixa (0,4554) e com custo computacional alto (execuções ~40 min).

  Redes Neurais se aproximou bastante com Recall de 0.889 (threshold 0.15) e com uma precisão um pouco maior (0.5217). O ponto de atenção foi o tempo de processamento muito mais elevado.

- quando a aplicação não pode ter custo alto investigando falsos positivos a melhor escolha é Árvore de Decisão com threshold = 0,9 pois entrega:

  Precision: 0,7419
  Recall: 0,4259
  Accuracy: 0,7468

  Importante notar que Regressão Logística com threshold 0,9 chegou a precisão ainda maior (0,8333), mas com recall extremamente baixo (0,0926) o que na prática indica que praticamente marca quase todos como negativos tornando inadequado para qualquer tipo de aplicação.

  Outra vez destacamos a Rede Neural aqui, com precisão de 0.900 (threshold 0.9) porém com um Recall extremamente baixo 0.1667 - o que torna o modelo inviável.

7. Referência bibliográfica

- https://scikit-learn.org/stable/modules/preprocessing.html
- https://www.ibm.com/br-pt/think/topics/logistic-regression
- https://didatica.tech/o-que-e-e-como-funciona-o-algoritmo-knn/
- https://www.ibm.com/br-pt/think/topics/knn
- https://medium.com/brasil-ai/knn-k-nearest-neighbors-1-e140c82e9c4e
- https://www.ibm.com/br-pt/think/topics/support-vector-machine
- https://www.ibm.com/br-pt/think/topics/decision-trees
- https://medium.com/data-hackers/%C3%A1rvore-de-decis%C3%A3o-88c7d0fd7a31
- https://www.ibm.com/br-pt/think/topics/random-forest
- https://didatica.tech/o-que-e-e-como-funciona-o-algoritmo-randomforest/
- https://scikit-learn.org/stable/modules/generated/sklearn.ensemble.RandomForestClassifier.html
- https://ebaconline.com.br/blog/random-forest-seo
- https://www.cienciaedados.com/normalizacao-em-machine-learning/
- https://medium.com/@carlosalbertoff/mlp-classifier-526978d1c638
- https://www.deeplearningbook.com.br/as-principais-arquiteturas-de-redes-neurais/