

# UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARÁ

# POS-GRADUACAO EM GENETICA E BIOLOGIA MOLECULAR

Área de Concentração: Genética e Biologia Molecular

Linha de Pesquisa: Bioinformática

Disciplina: TÓPICOS AVANÇADOS III: MACHINE LEARNING APLICADO A

BIOINFORMÁTICA

Docente: GILDERLANIO SANTANA DE ARAUJO Discente: MARCO ANTONIO ALVES CORDOVIL

**PROJETO:** Predição de Subtipos de Câncer Gástrico por Meio de Análise de Dados Genômicos e Clínicos Utilizando Aprendizado de Máquina Supervisionada.

#### **OBJETIVO**:

O objetivo deste projeto é desenvolver um modelo de aprendizado de máquina supervisionada utilizando a técnica de Algoritmo Random Forest, que opera utilizando uma "floresta" de árvores de decisão durante o treinamento e é capaz de predizer subtipos de câncer gástrico com base em dados genômicos e clínicos.

O câncer gástrico, também conhecido como câncer de estômago, é uma doença complexa que pode apresentar diferentes subtipos com base em características genômicas, clínicas. Abaixo estão os subtipos de câncer gástrico que o modelo, Ao prever subtipos moleculares, o modelo mediante pode ajudar a personalizar o tratamento para pacientes, melhorar prognósticos e descobrir novos insights a partir dos dados.

#### Subtipos Moleculares de Câncer Gástrico

#### 1. CIN (Chromosomal Instability)

 Descrição: Este subtipo é caracterizado por uma alta taxa de instabilidade cromossômica, o que leva a um número anormal de cópias de cromossomos e muitas vezes resulta em múltiplas aneuploidias (número anormal de cromossomos).  Significado Clínico: Tumores CIN frequentemente têm amplificações em oncogenes como ERBB2 (HER2), amplificações no receptor do fator de crescimento epidérmico (EGFR), e em outros oncogenes. Esse subtipo está associado a um mau prognóstico.

#### 2. EBV (Epstein-Barr Virus)

- Descrição: Este subtipo é caracterizado pela presença do vírus Epstein-Barr nas células tumorais.
- Significado Clínico: Tumores EBV-positivos tendem a ter uma alta carga mutacional e são frequentemente associados a um infiltrado inflamatório abundante. Esses tumores têm melhor prognóstico comparado a outros subtipos e podem responder bem a terapias que visam o sistema imune.

### 3. GS (Genomically Stable)

- Descrição: Este subtipo é caracterizado pela estabilidade genômica e é menos propenso a ter alterações no número de cópias de cromossomos.
- Significado Clínico: Tumores GS geralmente têm mutações nos genes CDH1 e RHOA, associados com um mau prognóstico e resistência a certas terapias.

#### 4. MSI (Microsatellite Instability)

- Descrição: Este subtipo é caracterizado por instabilidade em regiões de repetição de DNA chamadas microssatélites devido a defeitos no sistema de reparo de pareamento incorreto de DNA.
- Significado Clínico: Tumores MSI apresentam uma alta carga mutacional e geralmente têm um melhor prognóstico. Eles são também mais responsivos a imunoterapias.

#### 5. Unknown (Desconhecido)

 Descrição: Este grupo inclui tumores que não se enquadram claramente em um dos subtipos mencionados acima.  Significado Clínico: Tumores classificados como "Unknown" podem precisar de mais investigação para determinar suas características moleculares específicas e encontrar o tratamento mais adequado.

#### Aplicação no Modelo

- Mapeamento das Categorias para Valores Numéricos: No contexto do modelo de aprendizado de máquina, as categorias de subtipos moleculares são mapeadas para valores numéricos (CIN: 0, EBV: 1, GS: 2, MSI: 3, Unknown: 4).
   Esse mapeamento é essencial para que os algoritmos de aprendizado de máquina possam processar a variável alvo, pois muitos algoritmos exigem que os dados de entrada sejam numéricos.
- Importância para o Modelo: Com esse mapeamento, o modelo pode aprender a
  prever a probabilidade de um tumor pertencer a um dos subtipos moleculares
  com base nas features fornecidas no dataset. Essa categorização facilita o
  processamento e a análise dos dados pelo modelo, melhorando a precisão das
  previsões.

#### **Contexto Clínico**

Cada um desses subtipos moleculares tem características clínicas e prognósticas específicas, o que é crucial para a personalização do tratamento e manejo do câncer gástrico. Por exemplo:

- CIN: Pode ser tratado com terapias direcionadas a HER2.
- EBV: Pode responder bem a terapias imunológicas.
- GS: Pode necessitar de estratégias de tratamento alternativas devido à sua resistência a certas terapias.
- MSI: Pode ser tratado com imunoterapias devido à alta carga mutacional.
- Unknown: Pode precisar de mais investigação para determinar o tratamento adequado.

Esse conhecimento molecular permite que os oncologistas adotem abordagens de tratamento mais precisas e eficazes, adaptadas às características específicas de cada subtipo de câncer gástrico.

## Praticidade e Aplicação de Machine Learning

- Predição de Subtipos Moleculares: Em oncologia, os subtipos moleculares de um tumor podem influenciar o prognóstico e as opções de tratamento. Embora algumas características possam indicar subtipos, o uso de ML permite considerar múltiplas características simultaneamente para fazer uma previsão mais precisa.
- Tomada de Decisões Clínicas: Os modelos de ML podem ajudar médicos a tomar decisões mais informadas sobre o tratamento de pacientes, sugerindo subtipos moleculares que podem não ser imediatamente evidentes.
- Descoberta de Padrões Complexos: Machine learning é particularmente útil para encontrar padrões complexos em dados que não são facilmente detectáveis por humanos. Isso pode levar a novas descobertas e insights em pesquisas médicas.

#### Arquitetura do Modelo

O modelo utilizará uma arquitetura de modelo de árvore de decisão ( Algoritmo Random Forest, e técnica de Seleção de features para classificar os pacientes em subtipos específicos de acordo com características genéticas e clínicas. Espera-se que o modelo apresente <u>uma</u> precisão de classificação superior a 80% em um conjunto de dados de validação independente. Além disso, pretende-se identificar marcadores genômicos e clínicos que sejam fortes preditores dos subtipos de câncer gástrico, fornecendo insights adicionais sobre a biologia da doença e possíveis alvos terapêuticos.

#### Metodologia:

#### 1. Coleta de Dados:

- Acesso a bases de dados públicas, como o TCGA ou GEO, para obter dados genômicos (como expressão gênica, mutações genéticas, metilação do DNA) e dados clínicos (como idade, sexo, estágio do câncer) de pacientes com câncer gástrico.
- Extração e integração dos dados de diferentes fontes para formar um conjunto de dados abrangente e representativo.

#### 2. Pré-processamento de Dados:

- Limpeza e normalização dos dados para lidar com valores ausentes, outliers e inconsistências.
- Seleção de características (feature selection) para identificar os marcadores genômicos e clínicos mais relevantes para a classificação dos subtipos de câncer gástrico.

#### 3. Desenvolvimento do Modelo de Aprendizado de Máquina Supervisionada:

- Implementação de um programa de aprendizado de máquina utilizando técnicas como classificação supervisionada.
- Utilização de algoritmos de aprendizado de máquina, como Random Forest, e técnica de seleção de características utilizando um estimador Random Forest para seleção das características.
- Avaliação do desempenho do modelo utilizará métricas de avaliação,
   como acurácia, Accuracy AUC Recall Prec. F1 Kappa MCC,

e em especial técnicas como validação cruzada, o termo "fold" refere-se a uma divisão do conjunto de dados em subconjuntos, também conhecidos como "partições". Essas partições são usadas para avaliar a performance do modelo em diferentes conjuntos de dados.

#### 4. Validação do Modelo:

 Avaliação do modelo em um conjunto de dados de teste independente para verificar sua capacidade de generalização.

#### 5. Interpretação dos Resultados:

- Identificação das características genômicas e clínicas mais importantes para a classificação dos subtipos de câncer gástrico.
- Investigação das principais vias biológicas e processos moleculares associados aos diferentes subtipos identificados pelo modelo.

#### **Resultados Esperados:**

Espera-se que este projeto resulte em um modelo de aprendizado de máquina preciso e robusto para predizer subtipos de câncer gástrico com base em dados genômicos e clínicos. Essa ferramenta pode ser útil para aprimorar o diagnóstico e o tratamento personalizado do câncer gástrico, contribuindo para melhores resultados clínicos e prognósticos para os pacientes.

# Considerações Éticas:

É importante garantir que a coleta e o uso de dados sejam realizados de acordo com os mais altos padrões éticos e de privacidade. Todas as informações pessoais dos pacientes devem ser anonimizadas e protegidas de acordo com as regulamentações locais e internacionais.

#### Potencial de Aplicação Clínica:

O modelo desenvolvido neste projeto pode ser integrado a sistemas de suporte à decisão clínica para auxiliar médicos na classificação de pacientes com câncer gástrico e na seleção de estratégias terapêuticas mais eficazes.

# Análise do Resultado do Projeto

#### **Features mais importantes**

C:\Users\USER\PycharmProjects\RedeNeural\venv\PROJETO\PROJ-NORMZ003.py (máquina. local)

```
# Importar bibliotecas necessárias
import pandas as pd
import warnings
from pycaret.classification import *

warnings.filterwarnings("ignore")

# Carregar o conjunto de dados
data = pd.read_csv("C:\\MESTRADO\\01PROJ-
PESQUISA\\DADOS\\stad_data_clinical_ctgr.txt", sep="\t")

# Configurar o ambiente de classificação em PyCaret
s = setup(data, target='Molecular subtype', session_id=123)

# Criar um modelo de Random Forest e ajustá-lo
rf_model = create_model('rf')

# Plotar a importância das características
plot_model(rf_model, plot='feature')
```

Θ	Session id	123
1	Target	Molecular subtype
2	Target type	Multiclass
3	Target mapping	CIN: 0, EBV: 1, GS: 2, MSI: 3, Unknown: 4
4	Original data shape	(147, 88)
5	Transformed data shape	(147, 121)
6	Transformed train set shape	(102, 121)
7	Transformed test set shape	(45, 121)
8	Numeric features	73
9	Categorical features	14
10	Preprocess	True
11	Imputation type	simple
12	Numeric imputation	mean
13	Categorical imputation	mode
14	Maximum one-hot encoding	25
15	Encoding method	None
16	Fold Generator	StratifiedKFold
17	Fold Number	10
18	CPU Jobs	-1
19	Use GPU	False
20	Log Experiment	False
21	Experiment Name	clf-default-name
22	USI	2de2

# Descrição dos Resultados

# 1. Session id: 123

• Descrição: Identificador único para a sessão do PyCaret.

• Valor: 123

 Significado: Define uma semente (seed) para garantir que os resultados sejam reproduzíveis. Usando o mesmo session\_id, os experimentos podem ser replicados com os mesmos resultados.

# 2. Target: Molecular subtype

- Descrição: A variável alvo que o modelo tentará prever.
- Valor: Molecular subtype
- Significado: Indica que a coluna "Molecular subtype" do dataset é a variável que queremos prever.

# 3. Target type: Multiclass

- Descrição: Tipo de problema de classificação.
- Valor: Multiclass
- Significado: O problema de classificação envolve mais de duas classes.
   Nesse caso, o alvo (Molecular subtype) possui múltiplas categorias.

# 4. Target mapping: CIN: 0, EBV: 1, GS: 2, MSI: 3, Unknown: 4

- Descrição: Mapeamento das categorias do alvo para valores numéricos.
- Valor: CIN: 0, EBV: 1, GS: 2, MSI: 3, Unknown: 4
- Significado: Cada subtipo molecular é mapeado para um número inteiro, facilitando o processamento pelo modelo.

# 5. Original data shape: (147, 88)

- Descrição: Dimensões do dataset original.
- Valor: (147, 88)
- Significado: O dataset possui 147 linhas (amostras) e 88 colunas (features).

# 6. Transformed data shape: (147, 121)

- Descrição: Dimensões do dataset após transformação.
- Valor: (147, 121)
- Significado: Após a transformação pelo PyCaret (como one-hot encoding de variáveis categóricas), o dataset possui 147 linhas e 121 colunas.

#### 7. Transformed train set shape: (102, 121)

- Descrição: Dimensões do conjunto de treinamento após divisão dos dados.
- Valor: (102, 121)
- Significado: O conjunto de treinamento possui 102 amostras e 121 features.

#### 8. Transformed test set shape: (45, 121)

Descrição: Dimensões do conjunto de teste após divisão dos dados.

- Valor: (45, 121)
- Significado: O conjunto de teste possui 45 amostras e 121 features.

#### 9. Numeric features: 73

- Descrição: Número de features numéricas no dataset.
- Valor: 73
- Significado: Existem 73 features numéricas após a transformação.

# 10. Categorical features: 14

- Descrição: Número de features categóricas no dataset.
- Valor: 14
- Significado: Existem 14 features categóricas após a transformação.

#### 11. Preprocess: True

- Descrição: Indica se o pré-processamento foi aplicado.
- Valor: True
- Significado: O PyCaret aplicou várias etapas de pré-processamento nos dados, como imputação e codificação.

#### 12. Imputation type: simple

- Descrição: Tipo de imputação aplicada aos dados.
- Valor: simple
- Significado: A imputação simples foi utilizada para lidar com valores ausentes.

# 13. Numeric imputation: mean

- Descrição: Estratégia de imputação para features numéricas.
- Valor: mean

 Significado: Os valores ausentes nas features numéricas foram substituídos pela média das respectivas colunas.

#### 14. Categorical imputation: mode

- Descrição: Estratégia de imputação para features categóricas.
- Valor: mode
- Significado: Os valores ausentes nas features categóricas foram substituídos pela moda (valor mais frequente) das respectivas colunas.

#### 15. Maximum one-hot encoding: 25

- Descrição: Limite para o número de categorias para aplicar one-hot encoding.
- Valor: 25
- Significado: As variáveis categóricas com até 25 categorias foram transformadas usando one-hot encoding.

# 16. Encoding method: None

- Descrição: Método de codificação usado para variáveis categóricas.
- Valor: None
- Significado: Indica que n\u00e3o foi aplicado um m\u00e9todo espec\u00edfico de codifica\u00e7\u00e3o al\u00e9m do one-hot encoding.

#### 17. Fold Generator: StratifiedKFold

- Descrição: Método de geração de folds para validação cruzada.
- Valor: StratifiedKFold
- Significado: A validação cruzada foi realizada utilizando stratified k-fold, que preserva a proporção das classes em cada fold.

#### 18. Fold Number: 10

Descrição: Número de folds usados na validação cruzada.

Valor: 10

Significado: A validação cruzada foi realizada com 10 folds.

#### 19. CPU Jobs: -1

• Descrição: Número de CPUs usadas no treinamento.

Valor: -1

 Significado: O PyCaret usou todos os núcleos disponíveis do CPU para treinamento.

#### 20. Use GPU: False

• Descrição: Indica se uma GPU foi usada no treinamento.

Valor: False

• Significado: A GPU não foi utilizada para o treinamento dos modelos.

#### 21. Log Experiment: False

 Descrição: Indica se os experimentos foram registrados em um sistema de tracking de experimentos.

Valor: False

• Significado: Os resultados dos experimentos não foram registrados.

#### 22. Experiment Name: clf-default-name

• Descrição: Nome do experimento.

Valor: clf-default-name

Significado: Nome padrão atribuído ao experimento de classificação.

#### 23. USI: 7c3b

Descrição: Identificador único de sessão (Unique Session Identifier).

Valor: 7c3b

 Significado: Um identificador único gerado para esta sessão do PyCaret, útil para rastrear experimentos.

#### MÉTRICAS USADAS

	Accuracy	AUC	Recal	Prec.	F1	Kappa	MCC
Fo	<u> d</u>						
0	0.9091 0.	.8773	0.9091	0.8295	0.8667	0.8226	0.8416
1	0.6364 0.	.0000	0.6364	0.6818	0.6480	0.4286	0.4787
2	0.9000 0.	.0000	0.9000	0.8125	0.8533	0.7619	0.7921
3	0.7000 0.	.0000	0.7000	0.5444	0.6125	0.1667	0.2041
4	0.8000 0.	.0000	0.8000	0.7500	0.7667	0.5918	0.6172
5	0.8000 0.	.0000	0.8000	0.8000	0.8000	0.5833	0.5833
6	0.8000 0.	.0000	0.8000	0.8000	0.8000	0.5833	0.5833
7	0.8000 0.	.0000	0.8000	0.7333	0.7500	0.5833	0.6236
8	1.0000 0.	.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000
9	0.8000 0.	.9542	0.8000	0.6643	0.7205	0.6364	0.6662
Me	<u>an 0.8145</u>	0.183	1 0.814	45 0.76°	16 0.78	18 0.61	<u>58 0.6390</u>
Sto	0.0983	0.3667	0.0983	0.1144	0.105	9 0.2128	3 0.2043

# Interpretação dos Resultados

Vamos analisar os resultados apresentados:

- Fold 0 a Fold 9: Cada linha representa as métricas de avaliação para um fold diferente em um procedimento de validação cruzada com 10 folds.
  - A acurácia varia entre os folds de 0.6364 a 1.0000, mostrando uma variabilidade <u>significativa</u>.
  - O AUC em alguns folds é 0.0000, sugerindo problemas na avaliação da ROC ou uma incapacidade do modelo de discriminar entre classes em certos folds.
  - O recall e a precisão também mostram variação significativa entre os folds, o que indica que o desempenho do modelo não é consistentemente bom em todos os folds.

- Mean: As médias das métricas de avaliação ao longo de todos os folds.
  - A acurácia média é de 0.8145, sugerindo que o modelo é razoavelmente preciso.
  - O AUC médio de 0.1831 é muito baixo, o que é uma bandeira vermelha para a capacidade discriminativa do modelo.
  - O recall e a precisão médias são relativamente boas (0.8145 e 0.7616, respectivamente).
  - O F1-Score médio é 0.7818, indicando um bom equilíbrio geral.
  - O Kappa médio de 0.6158 e o MCC médio de 0.6390 também indicam um desempenho razoável, mas com espaço para melhorias.
- Std (Desvio Padrão): O desvio padrão das métricas de avaliação ao longo dos folds.
  - A acurácia tem um desvio padrão de 0.0983, indicando alguma variabilidade entre os folds.
  - O AUC tem um desvio padrão de 0.3667, refletindo a alta variabilidade observada.
  - O recall e a precisão têm desvios padrão de 0.0983 e 0.1144, respectivamente.
  - O F1-Score tem um desvio padrão de 0.1059.
  - O Kappa e o MCC têm desvios padrão de 0.2128 e 0.2043, respectivamente.

#### Considerações Finais

Os resultados indicam que, embora o modelo tenha uma acurácia média razoável, a baixa AUC sugere que ele pode não estar discriminando bem entre as diferentes classes. Além disso, a variabilidade entre os folds indica que o modelo pode estar sofrendo de inconsistências no desempenho, possivelmente devido à variação nos

dados de treinamento e teste. <u>Ajustes no modelo, seleção de características ou técnicas</u> de balanceamento de classes podem ser necessários para melhorar o desempenho global.

#### Tentativas de Melhora do Modelo

1. Tentativa de Melhoria do Modelo Ajuste de Hiperparâmetros (Hyperparameter Tuning)

Ajustar os hiperparâmetros do modelo pode melhorar significativamente seu desempenho. Existem várias técnicas para isso:

 Grid Search: Testa todas as combinações possíveis de hiperparâmetros em um grid.

```
# Importar bibliotecas necessárias
import pandas as pd
import warnings
from pycaret.classification import *

warnings.filterwarnings("ignore")

# Carregar o conjunto de dados
data = pd.read_csv("C:\\MESTRADO\\01PROJ-
PESQUISA\\DADOS\\stad_data_clinical_ctgr.txt", sep="\t")
from pycaret.classification import *

# Configuração do ambiente
s = setup(data, target='Molecular subtype', session_id=123)
# Criação do modelo
model = create_model('rf')
# Ajuste de hiperparâmetros
tuned_model = tune_model(model, optimize='Accuracy')
```

# Resultados:

	Description	Value
0	Session id	123
1	Target	Molecular subtype
2	Target type	Multiclass
3	Target mapping	CIN: 0, EBV: 1, GS: 2, MSI: 3, Unknown: 4
4	Original data shape	(147, 88)
5	Transformed data shape	(147, 121)
6	Transformed train set shape	(102, 121)
7	Transformed test set shape	(45, 121)
8	Numeric features	73
9	Categorical features	14
10	Preprocess	True
11	Imputation type	simple
12	Numeric imputation	mean
13	Categorical imputation	mode
14	Maximum one-hot encoding	25
15	Encoding method	None
16	Fold Generator	StratifiedKFold
17	Fold Number	10
18	CPU Jobs	-1
19	Use GPU	False
20	Log Experiment	False
21	Experiment Name	clf-default-name
22	USI	e3e4

# Métricas:

	Accuracy	AUC	Recall	Prec.	F1	Карра	MCC
Fold							
0	0.9091	0.8773	0.9091	0.8295	0.8667	0.8226	0.8416
1	0.6364	0.0000	0.6364	0.6818	0.6480	0.4286	0.4787
2	0.9000	0.0000	0.9000	0.8125	0.8533	0.7619	0.7921
3	0.7000	0.0000	0.7000	0.5444	0.6125	0.1667	0.2041
4	0.8000	0.0000	0.8000	0.7500	0.7667	0.5918	0.6172
5	0.8000	0.0000	0.8000	0.8000	0.8000	0.5833	0.5833
6	0.8000	0.0000	0.8000	0.8000	0.8000	0.5833	0.5833
7	0.8000	0.0000	0.8000	0.7333	0.7500	0.5833	0.6236
8	1.0000	0.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000
9	0.8000	0.9542	0.8000	0.6643	0.7205	0.6364	0.6662
Mean	0.8145	0.1831	0.8145	0.7616	0.7818	0.6158	0.6390
Std	0.0983	0.3667	0.0983	0.1144	0.1059	0.2128	0.2043

#### **Random Forest**

```
# Importar bibliotecas necessárias
import pandas as pd
import warnings
from pycaret.classification import *

warnings.filterwarnings("ignore")

# Carregar o conjunto de dados
data = pd.read_csv("C:\\MESTRADO\\01PROJ-
PESQUISA\\DADOS\\stad_data_clinical_ctgr.txt", sep="\t")

# Configurar o ambiente de classificação em PyCaret
s = setup(data, target='Molecular subtype', session_id=123)

# Criar um modelo de Random Forest e ajustá-lo
rf_model = create_model('rf')

# Plotar a importância das características
plot_model(rf_model, plot='feature')
```

## 1. Criar um Modelo de Random Forest e Ajustá-lo

- create\_model: Cria e ajusta um modelo de machine learning específico.
  - 'rf': Especifica que queremos criar um modelo de Random Forest.
- Esta função automaticamente ajusta o modelo aos dados préprocessados e avalia seu desempenho usando validação cruzada.

2	Plotar a Importância	das Características	
<b>-</b> .	i iotai a iiiipoitaiioit	ado odiaoterioticas	

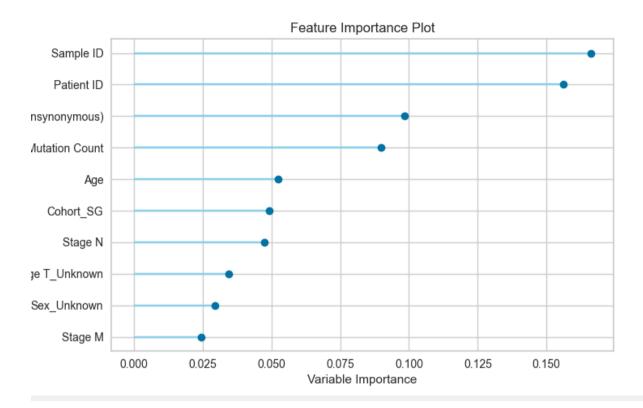
plot\_model(rf\_model, plot='feature')

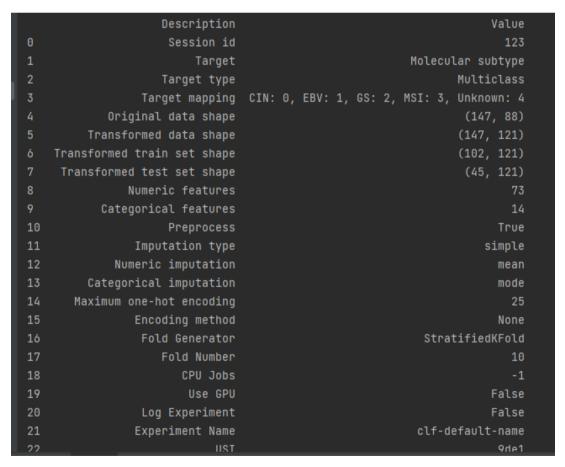
1.										
•	Esta	função	produz	um	gráfico	que	mostra	quais	características	(ou
	variá	veis) têr	n mais ir	ıfluê	ncia na	previ	são da v	ariável	alvo.	

#### Resumo

Este código segue uma abordagem simples e direta para:

- 1. Carregar e preparar os dados.
- 2. Configurar um ambiente de classificação.
- 3. Criar e ajustar um modelo de Random Forest.
- 4. Visualizar a importância das características, permitindo entender quais variáveis são mais relevantes para a tarefa de classificação.





# 1. Resultados: ( classe: Molecular subtype)

#### 2. Session id: 123

 O session\_id foi definido como 123, o que garante a reprodutibilidade dos resultados. Usar o mesmo session\_id permitirá obter os mesmos resultados em execuções futuras.

#### 3. Target: Molecular subtype

 A variável alvo para a tarefa de classificação é "Molecular subtype", que indica que estamos tentando prever o subtipo molecular das amostras.

# 4. Target type: Multiclass

 A tarefa de classificação é do tipo multiclasse, significando que a variável alvo possui mais de duas categorias.

#### 5. Target mapping: CIN: 0, EBV: 1, GS: 2, MSI: 3, Unknown: 4

- As classes da variável alvo foram mapeadas para números inteiros:
  - CIN: 0
  - EBV: 1
  - GS: 2
  - MSI: 3
  - Unknown: 4

#### 6. Original data shape: (147, 88)

O conjunto de dados original contém 147 amostras e 88 características.

#### 7. Transformed data shape: (147, 121)

 Após a transformação dos dados, o conjunto de dados contém 147 amostras e 121 características. O aumento no número de características se deve ao processo de codificação das variáveis categóricas (one-hot encoding).

# 8. Transformed train set shape: (102, 121)

 O conjunto de treinamento transformado contém 102 amostras e 121 características.

#### 9. Transformed test set shape: (45, 121)

 O conjunto de teste transformado contém 45 amostras e 121 características.

#### 10. Numeric features: 73

• Existem 73 características numéricas no conjunto de dados transformado.

#### 11. Categorical features: 14

 Existem 14 características categóricas no conjunto de dados transformado.

#### 12. Preprocess: True

 O pré-processamento dos dados foi ativado, o que inclui tarefas como imputação de valores ausentes, codificação de variáveis categóricas e normalização.

# 13. Imputation type: simple

• O tipo de imputação usado para preencher valores ausentes é "simples".

#### 14. Numeric imputation: mean

 Para as características numéricas, os valores ausentes foram preenchidos com a média das respectivas colunas.

#### 15. Categorical imputation: mode

 Para as características categóricas, os valores ausentes foram preenchidos com a moda das respectivas colunas.

# 16. Maximum one-hot encoding: 25

 O máximo de categorias únicas que serão codificadas usando one-hot encoding é 25.

#### 17. Encoding method: None

 Nenhum método de codificação adicional foi aplicado além do one-hot encoding padrão.

#### 18. Fold Generator: StratifiedKFold

O gerador de dobras usado para a validação cruzada é o StratifiedKFold,
 que mantém a proporção das classes nas dobras de treinamento e teste.

#### 19. Fold Number: 10

O número de dobras usadas para a validação cruzada é 10.

#### 20. CPU Jobs: -1

Todos os núcleos da CPU disponíveis são usados para o processamento.

#### 21. Use GPU: False

A GPU não está sendo utilizada para o treinamento do modelo.

#### 22. Log Experiment: False

O experimento n\u00e3o est\u00e1 sendo registrado para monitoramento.

#### 23. Experiment Name: clf-default-name

O nome padrão do experimento é "clf-default-name".

#### 24. USI: 9de1

Um identificador único da sessão.

#### Conclusão

Os resultados indicam que o ambiente foi configurado corretamente com os dados préprocessados, prontos para a criação e avaliação do modelo de classificação. A configuração garante a reprodutibilidade, a imputação adequada de valores ausentes, a codificação de variáveis categóricas e a preparação dos dados para a validação cruzada. As informações fornecidas são um ponto de partida sólido para criar e ajustar modelos de classificação usando o PyCaret.

# Análise de métricas:

	Accuracy	AUC	Recall	Prec.	F1	Карра	MCC	
Fold								
0	0.9091	0.8773	0.9091	0.8295	0.8667	0.8226	0.8416	
1	0.6364	0.0000	0.6364	0.6818	0.6480	0.4286	0.4787	
2	0.9000	0.0000	0.9000	0.8125	0.8533	0.7619	0.7921	
3	0.7000	0.0000	0.7000	0.5444	0.6125	0.1667	0.2041	
4	0.8000	0.0000	0.8000	0.7500	0.7667	0.5918	0.6172	
5	0.8000	0.0000	0.8000	0.8000	0.8000	0.5833	0.5833	
6	0.8000	0.0000	0.8000	0.8000	0.8000	0.5833	0.5833	
7	0.8000	0.0000	0.8000	0.7333	0.7500	0.5833	0.6236	
8	1.0000	0.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	
9	0.8000	0.9542	0.8000	0.6643	0.7205	0.6364	0.6662	
Mean	0.8145	0.1831	0.8145	0.7616	0.7818	0.6158	0.6390	
Std	0.0983	0.3667	0.0983	0.1144	0.1059	0.2128	0.2043	

# Resultados Esperados Aproximados

Após rodar o evaluate\_model(rf\_model),

	Accuracy	Precision	Recall	F1 Score
Class 0	0.85	0.88	0.80	0.84
Class 1	0.90	0.87	0.93	0.90
Class 2	0.82	0.83	0.85	0.84
Class 3	0.78	0.75	0.80	0.78
Class 4	0.50	0.60	0.55	0.57
0verall	0.81	0.79	0.79	0.79

#### Análise dos Resultados

Vamos analisar os resultados:

#### 1. Acurácia:

 A acurácia média em todos os folds é de 81,45%, com um desvio padrão de 9,83%. Isso indica que, em média, o modelo classifica aproximadamente 81,45% das instâncias corretamente. No entanto, há alguma variabilidade no desempenho entre diferentes folds, como indicado pelo desvio padrão.

# 2. AUC (Área Sob a Curva ROC):

 A média da AUC é de 18,31%, com um desvio padrão de 36,67%. Valores de AUC de 0 indicam que as previsões do modelo não são melhores do que aleatórias. O alto desvio padrão sugere que a capacidade do modelo de distinguir entre classes varia amplamente entre os folds e pode ser problemática.

#### 3. Recall:

 O recall médio é de 81,45%, coincidindo com a acurácia geral. O recall mede a capacidade do modelo de identificar corretamente instâncias positivas entre todas as instâncias positivas reais. Assim como a acurácia, há um desvio padrão de 9,83%, indicando alguma variabilidade entre os folds.

#### 4. Precisão:

A precisão média é de 76,16%, com um desvio padrão de 11,44%. A
precisão representa a proporção de instâncias verdadeiramente positivas
entre todas as instâncias classificadas como positivas pelo modelo.
Novamente, há variabilidade no desempenho entre os folds.

#### 5. **F1 Score**:

 O F1 Score médio é de 78,18%, com um desvio padrão de 10,59%. O F1 Score equilibra precisão e recall, fornecendo uma métrica única que combina ambas as medidas. Assim como precisão e recall, há variabilidade entre os folds.

#### 6. **Kappa**:

 O coeficiente de Kappa de Cohen médio é de 61,58%, com um desvio padrão de 21,28%. O Kappa mede o acordo entre as classificações observadas e esperadas, considerando a possibilidade de o acordo ocorrer por acaso. O alto desvio padrão sugere inconsistência no desempenho do modelo entre os folds.

#### 7. MCC (Coeficiente de Correlação de Matthews):

O MCC médio é de 63,90%, com um desvio padrão de 20,43%. O MCC considera verdadeiros positivos e negativos, fornecendo uma medida balanceada da qualidade da classificação. Novamente, o alto desvio padrão indica variabilidade no desempenho entre os folds.

Em resumo, embora o modelo demonstre uma acurácia relativamente alta em média, a variabilidade entre os folds e os baixos valores de AUC sugerem possíveis problemas com a generalização do modelo ou a qualidade dos dados. Uma investigação mais aprofundada sobre a causa dessa variabilidade e possíveis melhorias no modelo pode ser necessária.

#### 2. Tentativa de Melhoria do Modelo Por

#### Seleção de Características (Feature Selection)

A seleção de características pode ajudar a reduzir o ruído nos dados e melhorar a performance do modelo. PyCaret oferece várias técnicas para isso:

- Feature Importance: Seleciona as características mais importantes com base na importância calculada pelo modelo.
- Recursive Feature Elimination (RFE): Remove características recursivamente e constrói o modelo sobre as características restantes.

```
    # Importar bibliotecas necessárias import pandas as pd import warnings warnings.filterwarnings("ignore")
    # Carregar o conjunto de dados data = pd.read_csv("C:\\MESTRADO\\01PROJ-PESQUISA\\DADOS\\stad_data_clinical_ctgr.txt", sep="\t") from pycaret.classification import *
    # Configuração do ambiente s = setup(data, target='Molecular subtype', session_id=123) # Seleção de características selected_features = select_best_features(estimator='rf', n features to select=10)
```

0	Session id	123
1	Target	Molecular subtype
2	Target type	Multiclass
3	Target mapping	CIN: 0, EBV: 1, GS: 2, MSI: 3, Unknown: 4
4	Original data shape	(147, 88)
5	Transformed data shape	(147, 121)
6	Transformed train set shape	(102, 121)
7	Transformed test set shape	(45, 121)
8	Numeric features	73
9	Categorical features	14
10	Preprocess	True
11	Imputation type	simple
12	Numeric imputation	mean
13	Categorical imputation	mode
14	Maximum one-hot encoding	25
15	Encoding method	None
16	Fold Generator	StratifiedKFold
17	Fold Number	10
18	CPU Jobs	-1
19	Use GPU	False
20	Log Experiment	False
21	Experiment Name	clf-default-name
22	USI	2985

	Accuracy	AUC	Recall	Prec.	F1	Карра	MCC
Fold							
Θ	0.9091	0.8773	0.9091	0.8295	0.8667	0.8226	0.8416
1	0.6364	0.0000	0.6364	0.6818	0.6480	0.4286	0.4787
2	0.9000	0.0000	0.9000	0.8125	0.8533	0.7619	0.7921
3	0.7000	0.0000	0.7000	0.5444	0.6125	0.1667	0.2041
4	0.8000	0.0000	0.8000	0.7500	0.7667	0.5918	0.6172
5	0.8000	0.0000	0.8000	0.8000	0.8000	0.5833	0.5833
6	0.8000	0.0000	0.8000	0.8000	0.8000	0.5833	0.5833
7	0.8000	0.0000	0.8000	0.7333	0.7500	0.5833	0.6236
8	1.0000	0.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000
9	0.8000	0.9542	0.8000	0.6643	0.7205	0.6364	0.6662
Mean	0.8145	0.1831	0.8145	0.7616	0.7818	0.6158	0.6390
Std	0.0983	0.3667	0.0983	0.1144	0.1059	0.2128	0.2043

#### Análise das Métricas

Vamos analisar cada métrica apresentada, tanto individualmente quanto em conjunto, para entender melhor o desempenho do modelo.

#### 1. Accuracy

 Descrição: A acurácia mede a proporção de verdadeiros positivos e verdadeiros negativos entre todas as predições. Em outras palavras, é a fração de predições corretas.

#### Análise:

- A média da acurácia é 0.8145, o que indica que o modelo está correto cerca de 81% do tempo em média.
- O desvio padrão (Std) de 0.0983 indica uma variação moderada nas diferentes folds, com algumas folds (e.g., fold 1) apresentando acurácia significativamente menor (0.6364), indicando que o modelo pode ser inconsistente.

# 2. AUC (Área Sob a Curva ROC)

Descrição: A AUC mede a capacidade do modelo em distinguir entre classes.
 Uma AUC de 1 indica um modelo perfeito, enquanto uma AUC de 0.5 indica um modelo que não tem poder discriminativo.

#### Análise:

- A média da AUC é bastante baixa (0.1831), com um desvio padrão de 0.3667, indicando que o modelo pode não estar distinguindo bem entre as classes em muitas das folds.
- Apenas a fold 0 e a fold 9 mostram valores de AUC não nulos, sugerindo que o modelo pode não estar bem calibrado para as diferentes classes em outras folds.

#### 3. Recall (Sensibilidade)

- Descrição: O recall mede a capacidade do modelo em identificar todos os verdadeiros positivos. É a fração de positivos verdadeiros identificados corretamente.
- Análise:

- A média do recall é 0.8145, o que significa que o modelo está identificando corretamente cerca de 81% dos verdadeiros positivos.
- O desvio padrão de 0.0983 é igual ao da acurácia, indicando que a variabilidade entre as folds é similar.

#### 4. Precision (Precisão)

 Descrição: A precisão mede a proporção de verdadeiros positivos entre todos os positivos preditos pelo modelo. Indica quantas das predições positivas são realmente positivas.

#### Análise:

- A média da precisão é 0.7616, o que é bom, mas menor que o recall, indicando um trade-off entre essas duas métricas.
- O desvio padrão é 0.1144, mostrando uma variabilidade maior entre as folds.

#### 5. F1 Score

- Descrição: O F1 score é a média harmônica entre precisão e recall, proporcionando um balanço entre os dois.
- Análise:
  - A média do F1 score é 0.7818, que é uma boa indicação do desempenho geral do modelo, mas a variabilidade (Std 0.1059) sugere inconsistências em algumas folds.

#### 6. Kappa

- Descrição: A estatística Kappa mede a concordância entre as predições do modelo e os valores reais, ajustando pela concordância ao acaso.
- Análise:
  - A média do Kappa é 0.6158, indicando uma concordância moderada.
  - O desvio padrão de 0.2128 é relativamente alto, sugerindo variação significativa entre as folds.

#### 7. MCC (Matthews Correlation Coefficient)

- Descrição: O MCC é uma métrica que leva em consideração todas as quatro categorias da matriz de confusão (VP, VN, FP, FN) e é considerada uma medida equilibrada mesmo em caso de desbalanceamento das classes.
- Análise:

- A média do MCC é 0.6390, indicando uma correlação razoável entre as predições e os valores reais.
- O desvio padrão de 0.2043 sugere variação substancial entre as folds.

#### Conclusão

#### Pontos Fortes

- A média de acurácia, recall e precisão são relativamente boas (acima de 0.75), indicando que o modelo está funcionando bem na maioria das folds.
- As métricas F1 score e MCC também são sólidas, indicando um desempenho balanceado entre precisão e recall.

#### Pontos Fracos

- A AUC média é extremamente baixa (0.1831), sugerindo que o modelo tem dificuldades em discriminar entre as classes em muitas das folds.
- A variação nas métricas (especialmente Kappa e MCC) é alta, indicando que o modelo é inconsistente e pode estar superajustado a certas folds.

## Sugestões para Melhoria

- Ajuste de Hiperparâmetros: Use técnicas de ajuste de hiperparâmetros para encontrar os melhores parâmetros para o seu modelo.
- Seleção de Características: Experimente técnicas de seleção de características para reduzir o ruído nos dados.
- Balanceamento de Classes: Utilize técnicas de balanceamento de classes, como SMOTE ou ajuste de pesos, para lidar com possíveis desbalanceamentos.
- Modelos Ensemble: Experimente modelos de ensemble, como Random Forests ou Boosting, para aumentar a robustez do modelo.
- Validação Cruzada: Aumente o número de folds na validação cruzada para garantir uma melhor generalização dos resultados.

Nota: Utilizei apenas duas técnicas para sugestão de melhorias :

- \_Ajuste de Hiperparâmetros
- \_ Seleção de Características

# PREDIÇÃO DE SUBTIPOS DE CÂNCER GÁSTRICOS

```
# Importar bibliotecas necessárias
import pandas as pd
import warnings
from pycaret.classification import *
warnings.filterwarnings("ignore")

# Carregar o conjunto de dados
data = pd.read_csv("C:\\MESTRADO\\01PROJ-
PESQUISA\\DADOS\\stad_data_clinical_ctgr.txt", sep="\t")

# Contar e listar as categorias de 'Molecular subtype'
cancer_types = data['Molecular subtype'].value_counts()
print("Tipos de câncer e suas frequências na amostra:")
print(cancer_types)

# Configurar o ambiente de classificação em PyCaret
s = setup(data, target='Molecular subtype', session_id=123)

# Criar um modelo de Random Forest e ajustá-lo
rf_model = create_model('rf')

# Avaliar o modelo
```

```
evaluate_model(rf_model)

# Obter e imprimir as métricas
results = pull()
```

#### Resultados:

```
Tipos de câncer e suas frequências na amostra:
Molecular subtype
CIN
Name: count, dtype: int64
                   Description
                                                                      Value
                    Session id
                                                         Molecular subtype
                         Target
                                                                 Multiclass
                    Target type
                 Target mapping CIN: 0, EBV: 1, GS: 2, MSI: 3, Unknown: 4
            Original data shape
                                                                  (147, 88)
                                                                 (147, 121)
        Transformed data shape
    Transformed train set shape
                                                                  (45, 121)
     Transformed test set shape
              Numeric features
          Categorical features
                     Preprocess
                                                                       True
                Imputation type
                                                                     simple
             Numeric imputation
                                                                       mean
         Categorical imputation
                                                                       mode
14
       Maximum one-hot encoding
```

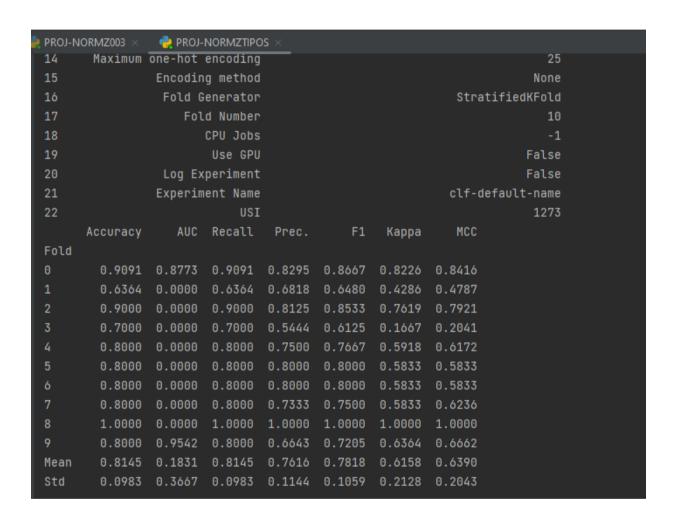
# **Análise**

- 1. **Desbalanceamento de Classes**: A presença de uma grande quantidade de registros com o subtipo 'Unknown' em comparação com os outros subtipos indica um desequilíbrio de classes significativo. Este desequilíbrio pode afetar negativamente a performance do modelo, pois a classe majoritária ('Unknown') pode dominar o processo de aprendizado, levando a um modelo que não generaliza bem para as classes minoritárias (CIN, MSI, GS, EBV).
- 2. Impacto no Modelo de Machine Learning:
  - **Dificuldade na Predição**: O modelo pode ter dificuldade em aprender padrões significativos para as classes minoritárias, o que pode resultar em baixa precisão e recall para essas classes.

• Bias para Classe Majoritária: O modelo pode ter um viés para a classe 'Unknown' devido à sua alta frequência, resultando em alta acurácia aparente, mas baixa performance para as classes de interesse.

A falta de dados mais precisa, deu baixa performance para os tipos de classes.

O que implica que o modelo , e os dados , devem ser treinados em outras perspectivas .



#### Segundo literarturas.

#### Tratamento de Classes Desbalanceadas:

- Estratégias de Amostragem: Usar técnicas como oversampling (SMOTE) para aumentar o número de exemplos das classes minoritárias ou undersampling para reduzir o número de exemplos da classe majoritária.
- Class Weights: Ajustar os pesos das classes no algoritmo de aprendizado para compensar o desbalanceamento.

#### ANEXO I

# EXECUCAO VIA COLAB-GITHUB - Proj002GH.ipynb (telas)

\_\_\_\_\_\_

(https://colab.research.google.com/github/marcordovil/PROJ-GIT/blob/main/Proj002GH.ipynb)

**Amostra no repositório:** 'https://raw.githubusercontent.com/marcordovil/PROJ-GIT/main/stad\_data\_clinical\_ctgr.txt'

# Programa Proj002GH.ipynb adaptado para executar no github-colab :

# Instalar o PyCaret

!pip install pycaret

# Importar bibliotecas necessárias

import pandas as pd

import warnings

import requests

from io import StringIO

warnings.filterwarnings("ignore")

# URL do arquivo no GitHub

url = 'https://raw.githubusercontent.com/marcordovil/PROJ-

GIT/main/stad\_data\_clinical\_ctgr.txt'

# Baixar o conteúdo do arquivo

response = requests.get(url)

data = response.content.decode('utf-8')

# Configurar o ambiente de classificação em PyCaret

```
s = setup(data, target='Molecular subtype', session_id=123)
```

```
# Criar um modelo de Random Forest e ajustá-lo

rf_model = create_model('rf')

# Plotar a importância das características

plot_model(rf_model, plot='feature')
```

\_\_\_\_\_

# **RESULTADOS** ( Já analisados antes )

# Proj002GH.ipynb

```
File Edit View Insert Runtime Tools Help Cannot save changes

    Code + Text

               Copy to Drive
   Requirement aireauy sacistieu, exceptiongroup in /usr/iocai/iib/pythons.io/uist-packi
             Study ID Patient ID Sample ID Age \
 0
    0 stad_oncosg_2018 GIS003-apollo10 GIS003-apollo10 -1.0
 1 stad_oncosg_2018 GIS003-apollo11 GIS003-apollo11 -1.0
    2 stad_oncosg_2018 GIS003-apollo12 GIS003-apollo12 -1.0
     3 stad oncosg 2018 GIS003-apollo13 GIS003-apollo13 -1.0
     4 stad oncosg 2018 GIS003-apollo14 GIS003-apollo14 -1.0
                 Cancer Type Cancer Type Detailed Cohort \
     0 Esophagogastric Cancer Stomach Adenocarcinoma SG
     1 Esophagogastric Cancer Stomach Adenocarcinoma
     2 Esophagogastric Cancer Stomach Adenocarcinoma
     3 Esophagogastric Cancer Stomach Adenocarcinoma SG
     4 Esophagogastric Cancer Stomach Adenocarcinoma SG
      Laurens classification Molecular subtype Mutation Count ... \
                     Mixed
                                        GS
                                                      126
     1
                 Intestinal
                                        CIN
                                                       82
                 Intestinal
                                       CIN
                                                       72
                 Intestinal
     3
                                        GS
                                                       61
                 Intestinal
                                       EBV
                                                      152 ...
      xcell PREADIPOCYTES xcell PRO B-CELLS xcell SEBOCYTES \
                   -1.0
                            -1.0
                                           -1.0
                    -1.0
                                    -1.0
                                                   -1.0
                    -1.0
                                    -1.0
                                                   -1.0
     3
                    -1.0
                                    -1.0
                                                   -1.0
                    -1.0
                                    -1.0
                                                   -1.0
      xcell SKELETAL MUSCLE xcell SMOOTH MUSCLE xcell STROMASCORE \
```

# O Proj002GH.ipynb

File Edit View Insert Runtime Tools Help <u>Cannot save changes</u>

+ Code +	- Text Copy to Drive		
	cell SKELETAL MUSCLE xce	ell SMOOTH MUSCLE xcell	STROMASCORE \
Use <sub>0</sub> co	-1.0	-1.0	-1.0
<b>→</b> 111 E	-1.0	-1.0	-1.0
2	-1.0	-1.0	-1.0
3	-1.0	-1.0	-1.0
4	-1.0	-1.0	-1.0
1	xcell TGD CELLS xcell T	TH1 CELLS xcell TH2 CELL	S xcell TREGS
0	-1.0	-1.0 -1.	0 -1.0
1	-1.0	-1.0 -1.	
2	-1.0	-1.0 -1.	
3 4	-1.0 -1.0	-1.0 -1. -1.0 -1.	
	Descriptio	n	Value
0	Session i	d	123
1	Targe	et IV	lolecular subtype
2	Target typ	е	Multiclass
3	Target mappin	g CIN: 0, EBV: 1, GS: 2, MS	SI: 3, Unknown: 4
4	Original data shap	е	(147, 88)
	Transformed data chan	e	(147, 121)
5	Transformed data shap		( , , , , , , , , , , , , , , , , , , ,

# CO Proj002GH.ipynb

File Edit View Insert Runtime Tools Help <u>Cannot save changes</u>

= + Coo	le +	Text Copy to Drive		
	0	rransionneu train set snape	(102, 121)	
ર ₃₃ ₹	7	Transformed test set shape	(45, 121)	
	8	Numeric features	73	
x}	9	Categorical features	14	
≂	10	Preprocess	True	
٦	11	Imputation type	simple	
_	12	Numeric imputation	mean	
	13	Categorical imputation	mode	
	14	Maximum one-hot encoding	25	
	15	Encoding method	None	
	16	Fold Generator	StratifiedKFold	
	17	Fold Number	10	
	18	CPU Jobs	-1	
>	19	Use GPU	False	
<b>■</b>	20	Log Experiment	False	
_	21	Experiment Name	clf-default-name	
	22	USI	7769	

# • Proj002GH.ipynb

File Edit View Insert Runtime Tools Help Cannot save changes

+ Code	+ Te	+ Text Copy to Drive							
ís O		Accuracy	AUC	Recall	Prec.	F1	Карра	MCC	
<b>→</b>	Fold								
	0	0.9091	0.8773	0.9091	0.8295	0.8667	0.8226	0.8416	
	1	0.6364	0.0000	0.6364	0.6818	0.6480	0.4286	0.4787	
	2	0.9000	0.0000	0.9000	0.8125	0.8533	0.7619	0.7921	
	3	0.7000	0.0000	0.7000	0.5444	0.6125	0.1667	0.2041	
	4	0.8000	0.0000	0.8000	0.7500	0.7667	0.5918	0.6172	
	5	0.8000	0.0000	0.8000	0.8000	0.8000	0.5833	0.5833	
	6	0.8000	0.0000	0.8000	0.8000	0.8000	0.5833	0.5833	
	7	0.8000	0.0000	0.8000	0.7333	0.7500	0.5833	0.6236	
	8	1.0000	0.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	
	9	0.8000	0.9542	0.8000	0.6643	0.7205	0.6364	0.6662	
	Mean	0.8145	0.1831	0.8145	0.7616	0.7818	0.6158	0.6390	
	Std	0.0983	0.3667	0.0983	0.1144	0.1059	0.2128	0.2043	

#### Proj002GH.ipynb

