Métrica para validação de modelos preditivos classificatórios para prever o risco de ataque cardíaco

Metric for validation of predictive classification models to predict the risk of heart attack

Recebimento: 29/11/2024 - Aceite: 06/02/25 - Publicação: 02/04/2025

Processo de Avaliação: Double Blind Review – <https://doi.org/10.22567/rep.v14i1.1072>

Márcio Belloni

mbelloni@alumni.usp.br

<https://orcid.org/0000-0002-0904-2632>

Centro Universitário ENIAC

José Antonio Dias de Carvalho

jose.carvalho@eniac.edu.br

<https://orcid.org/0000-0002-8143-7268>

Centro Universitário ENIAC

RESUMO

A presença dos métodos de aprendizado da máquina hoje é uma constante em todos os discursos referentes à relação entre o homem e a máquina, desde palestras em cursos universitários à discursos políticos. Todo o desenvolvimento deste trabalho foi efetuado em linguagem *Python*, utilizando bibliotecas pré-definidas, uma vez que já se conhece que a linguagem é propícia para análise de dados e *Data Science*. Destaca-se o potencial desses modelos de machine learning na previsão de eventos cardiovasculares, oferecendo uma oportunidade para identificar precocemente pacientes em risco e personalizar intervenções para melhorar os resultados e a qualidade de vida. Esta pesquisa buscou aplicar e avaliar as métricas de acurácia, precisão, *recall*, *f1-score*, FMI e AUC da curva ROC para validar os resultados da predição do Random Forest quanto ao risco de infarto do miocárdio em um banco de dados de 918 pacientes.

Palavras-chave: métrica estatística, *Machine Learning*, inteligência artificial, *F-score*, Acurácia.

ABSTRACT

Machine learning methods are a constant feature of today's discourse on the relationship between humans and machines, from university lectures to political speeches. This work was developed entirely in Python, using predefined libraries, as the language is already known to be well-suited for data analysis and data science. The potential of these machine learning models in predicting cardiovascular events stands out, offering an opportunity to identify at-risk patients early and personalize interventions to improve outcomes and quality of life. This research sought to apply and evaluate the metrics of accuracy, precision, recall, f1-score, FMI, and AUC of the ROC curve to validate the results of Random Forest prediction regarding the risk of myocardial infarction in a database of 918 patients.

Keywords: *statistical metrics, Machine Learning, artificial intelligence; F-score; Accuracy.*

1. INTRODUÇÃO

O ataque cardíaco ou infarto, é um evento resultado de uma complexa série de eventos acumulados durante os anos relacionados à formação de placas de gordura no sistema de irrigação sanguínea do coração. Segundo o site Dr. Drauzio Varella, fumo, obesidade, diabetes, hipertensão, níveis altos de colesterol, estresse, vida sedentária e/ou histórico pessoal ou familiar de doenças cardíacas (Bruna, 2023).

Por meio de um banco de dados disponível de forma gratuita, foi possível desenvolver um sistema de machine learning baseado em um modelo supervisionado na intenção de identificar a ocorrência de um ataque cardíaco baseado nas condições clínicas do paciente. Desta forma, utilizou-se um banco de dados tendo como variável de interesse a incidência do ataque cardíaco.

Nos conceitos de machine learning, o modelo *Random Forest* que acaba atualizar extrapolar as já conhecidas árvores de decisão, permite uma aproximação muito interessante para casos de problemas de classificação como o que se tem em tela. Contudo, todo modelo supervisionado necessita de um método de validação para comprovar que o treinamento e a própria lógica do modelo são eficientes (Ho, 1995).

Nesta pesquisa, os resultados encontrados nos trabalhos apresentados como monografia do curso de MBA em *Data Science e Analytics* da Esalq/USP, foram utilizados como fundamentos (Belloni & Righetto, 2024). Assim sendo, esta pesquisa ocupa-se em analisar as métricas conhecidas em Machine Learning e estatística aplicada, como meio de validação dos resultados do treinamento do método Random Forest no trabalho já mencionado. Procede-se com uma profunda análise para a compreensão e validação, não do modelo Random Forest, mas sim da métrica aplicada ao modelo treinado.

Objetiva-se desenvolver estudos na linguagem *Python* para uma análise das métricas de eficiência e validação para modelos supervisionados de machine learning *Random Forest*, utilizando um banco de dados público para identificar o risco de ataque cardíaco.

Especificamente objetiva-se analisar os resultados das métricas de validação para método preditivo de machine learning *Random Forest*, além de validar a Métrica de eficiência ótima para um modelo supervisionado de machine learning para identificar risco de ataque cardíaco.

2. REFERENCIAL TEÓRICO

Os prontuários médicos são sigilosos e o seu conteúdo diz apenas ao paciente e ao seu médico. Contudo, recorreu-se à informação constante na internet, para treinamento, teste e métrica de modelo de machine learning. Para tanto, tomou-se posse de um banco de dados do site *Kaggle*, mundialmente reconhecido banco de dados sobre inúmeros assuntos (Kaggle, 2024)

Baseia-se então, nos estudos efetuados no MBA em *Data Science and Analytics* da Universidade de São Paulo - ESALQ, efetuados pelo autor, na busca por um modelo de machine learning supervisionado, eficiente o suficiente para identificar, considerando os resultados dos seus exames laboratoriais e o modo de vida do paciente, uma alta possibilidade de ter um ataque cardíaco (Belloni & Righetto, 2024).

Baseia se no trabalho da cientista da computação Tin Kam Ho, quando denominou *Random Decision Forests* pois a autora explana sobre a alta velocidade das árvores de decisão para solução de problemas de classificação. Contudo, no mesmo artigo seminal, a autora indica a forte tendência à perda de acurácia conforme o problema se mostra mais complexo e o número de variáveis aumenta numa árvore de decisão. Essas árvores podem

ser dispostas e cultivadas em conjunto, criando assim o que se dominou *forest*, mas neste caso, cultivadas de forma randômica. Com isso, pode-se aumentar ou otimizar o desempenho deste modelo de classificação de maneira consistente e gradual, sem grandes variações ou oscilações. Ajusta-se o modelo de tal forma que o seu desempenho aumente de maneira constante em relação a determinada métrica de avaliação (Ho, 1995).

A intenção é observar o modelo Random Forest atuando e analisar a veracidade de suas conjecturas, ou sua eficiência, matematicamente. O interessante desta abordagem é que uma classificação pode ser fundamentada, além de se obter soluções baseando-se em inúmeras variáveis com inúmeros valores. Uma tabela com milhares de dados pode ser tomada como base para o modelo supervisionado na busca por uma solução à um problema de regressão qualquer. O desempenho dos modelos de machine learning supervisionados podem ser mensurados por meio de algumas técnicas matemáticas, quais sejam, *micro average*, acurácia, precisão e *recall* (Andrade, Santos, & Freitas, 2023). Mais completa é a assertiva que engloba *True Positive Rate*, *True Negative Rate*, *Accuracy*, *Precision*, *Recall* e *F-Score* (Olson & Delen, 2008). Algumas variáveis são na forma de *string*, categóricas, e não binárias, não sendo possível utilizá-las com esta biblioteca no modelo *random forest* em *Python*, como apresenta a Tabela 1.

Tabela 1

Variáveis que formam o banco de dados e seus tipos

Variável	Tipo
Sex	String
ExerciseAngina	String
ChestPainType	String
ST_Slope	String
RestingECG	String
Age	Float
RestingBP	Float
Cholesterol	Float
FastingBS	Float
MaxHR	Float
Oldpeak	Float
HeartDisease	Boolean

Elaborada pelos autores.

Foi efetuada uma análise de correlação, pois as variáveis consideradas devem ter 1º de importância na classificação em relação à variável de interesse. A análise de correlação

é uma técnica estatística utilizada para avaliar o grau de relação entre duas variáveis quantitativas em um conjunto de dados. Esse método permite identificar se existe uma associação linear entre as variáveis e a direção e intensidade dessa relação. A correlação é medida através do coeficiente de correlação, que varia de -1 a +1. Um valor próximo de +1 indica uma correlação positiva forte, enquanto um valor próximo de -1 indica uma correlação negativa forte. Um valor próximo de zero indica ausência de correlação.

Para iniciar os estudos, como uma forma de pré-processamento dos dados, foi efetuada análise de correlação dos dados. Ao aplicar a análise de correlação, busca-se entender como as variáveis se comportam conjuntamente e se uma variável é capaz de prever ou influenciar a outra. Isso é particularmente útil em áreas como ciências sociais, economia, biologia e outras disciplinas onde as relações entre variáveis são de interesse. Além disso, a análise de correlação pode fornecer insights importantes para a construção de modelos preditivos e para a identificação de padrões nos dados. Uma das principais vantagens da análise de correlação é sua simplicidade e facilidade de interpretação. Ela fornece uma medida quantitativa da relação entre as variáveis, permitindo uma avaliação objetiva do grau de associação entre elas (Mello, 2023.). No entanto, é importante ressaltar que correlação não implica causalidade - ou seja, apenas porque duas variáveis estão correlacionadas, não significa que uma causa a outra. Portanto, a análise de correlação deve ser complementada por outras técnicas estatísticas e conhecimento de domínio para uma compreensão mais completa dos dados.

Ferramenta essencial na avaliação do desempenho de modelos de classificação em aprendizado de máquina é a denominada Matriz de Confusão. Ela permite entender como o modelo está se saindo em relação aos dados reais do conjunto de dados de teste. Desta forma, pode-se envolver na relação métrica tanto erros quanto à afirmações positivas quanto erros em relação à afirmações negativas. A matriz é formada pelos valores declarados positivos e negativos e os acertos e erros como apresenta a Figura 1.

Figura 1 - Exemplo de Matriz de confusão

		Predição	
		Verdadeiro Positivo (VP)	Falso Negativo (FN)
Realidade	Verdadeiro Positivo (VP)	Verdadeiro Positivo (VP)	Falso Negativo (FN)
	Falso Positivo (FP)	Falso Positivo (FP)	Verdadeiro Negativo (VN)

Fonte: Vilela JR, 2022a.

O Verdadeiro Positivo (VP) representa o número de classificadas como positivas, ou seja, que indica a presença da doença, pelo modelo, e que foram corretas. Verdadeiro Negativo (VN) é o número de amostras negativas corretamente classificadas como negativas pelo modelo, ou seja, que nega a presença da doença, pelo modelo, e que foram corretas. Falso Positivo (FP) representa o número de amostras negativas erroneamente classificadas como positivas pelo modelo, ou seja, que indicaram a presença da doença, pelo modelo, e que foram incorretas pois eram casos negativos da doença. Falso Negativo (FN) indica o número de amostras positivas erroneamente classificadas como negativas pelo modelo, ou seja, que indicaram a ausência da doença, pelo modelo, e que foram incorretas pois a doença existia.

Com base nesses elementos, pode-se calcular algumas métricas importantes (Vilela JR, 2022a):

- **Acurácia (*Accuracy*):** Proporção de amostras classificadas corretamente em relação ao total de amostras. Neste sentido, conceitos como o vício exemplifica a diferença entre os valores verdadeiros e o conjunto de valores da amostra. Igualmente traz conceitos de linearidade e estabilidade, onde linear deve ser a curva que representa os valores de acertos e os valores ideais, e a estabilidade verifica a capacidade do modelo em manter-se estável frente à diversos valores (Fernando & et al, 2023). Sua formulação é representada na equação 1.

$$Accuracy = \frac{VP+VN}{VP+VN+FP+FN} \quad [1]$$

Onde:

$VP = Verdadeiro Positivo$

$FP = Falso Positivo$

$VN = Verdadeiro Negativo$

$FN = Falso Negativo$

- Precisão: Proporção de verdadeiros positivos em relação ao total de amostras classificadas como positivas. Em relação ao termo precisão, identifica-se o valor em relação ao rigor ou excelência absoluta do modelo. Na precisão existe a presença dos conceitos de repetibilidade e reprodutibilidade. Assim, quanto maior a precisão, maior também as chances de o modelo repetir suas métricas em diversos testes (Fernando & et al, 2023). Sua equação é representada como na equação 2.

$$Precision = \frac{VP}{VP+FP} \quad [2]$$

Onde:

$VP = Verdadeiro Positivo$

$FP = Falso Positivo$

- Revocação (*Recall*) ou Sensibilidade: Proporção de verdadeiros positivos em relação ao total de amostras positivas existentes. Esta métrica relaciona o acerto positivo com todos os casos verdadeiramente positivos na amostra e é representada pela fórmula da equação 3.

$$Recall = \frac{VP}{VP+FN} \quad [3]$$

Onde:

$VP = Verdadeiro Positivo$

$FN = Falso Negativo$

- *F-Score*: Média harmônica entre precisão e *recall*, fornecendo uma medida equilibrada do desempenho do modelo. A média harmônica é utilizada porque os valores de *Recall* e Precisão são inversamente proporcionais, e o f1-score identifica

o quão são confiáveis (Strauss, Bôas Junior, & Ferreira, 2022). Segue a equação 4 demonstrando como auferir f1-score.

$$F1 = \frac{2 \times \text{Recall} \times \text{Precisão}}{\text{Recall} + \text{Precisão}} \quad [4]$$

No entanto, este autor entende que outros elementos a estatística aplicada podem ser utilizados como meio de métrica para validação do modelo *Random Forest*. Essas métricas serão aplicadas no caso em tela, como Especificidade, FMI (Índice Fowlkes-Mallows) e a curva ROC e sua área.

Em Especificidade, detecta-se o quanto o modelo é eficiente em detectar os casos verdadeiramente negativos, isto é, os casos de indivíduos verdadeiramente sadios e não afetados pela doença. Percebe-se que essa métrica é tão importante quanto a Sensibilidade, não sendo o inverso dela, mas sim, uma métrica independente (Martins, 2023). Segue mais detalhes na equação 5.

$$\text{Especify} = \frac{VN}{VN+FP} \quad [5]$$

Onde:

FP = Falso Positivo

VN = Verdadeiro Negativo

O Índice Fowlkes-Mallows (FMI) demonstra a similaridade entre dois agrupamentos, sendo calculado à partir da matriz de confusão e funcionando como um método de avaliação externa. Valores calculados acima de 0,8 ou 80% são considerados satisfatórios por diversos autores e possui forte imunidade à ruídos de dados. É importante para corroborar as métricas em algoritmos classificadores como no caso em tela (Vilela Junior, 2022a): A equação 6 descreve esses detalhes.

$$FMI = \sqrt{\text{Sensibilidade} \times \text{Precisão}} \quad [6]$$

A curva ROC poderá entregar o quanto o modelo é tendencioso, ou seja, se ele pende para uma ou outra resposta levando o resultado à erro. Evidentemente que o caso em tela, sendo booleano, ou classificatório binário, faz com que dificilmente se observe que o modelo é tendencioso, pois a aproximação ou arredondamento do erro leva ao valor

verdadeiro. Além disto, o modelo *Random Forest* colabora para o resultado da curva ROC eficiente (Martinez & Louzada-Neto, 2003).

Observa-se que a forma como a curva ROC apresenta o seu cotovelo representa o quanto os valores oferecidos pela predição advinda do modelo é assertivo, ideal e eficiente. Assim, costuma-se calcular o Índice de Youden ou observa-se a forma como se comporta a curva ROC como na figura 2.

Figura 2 - Índice de Youden representado na forma da curva ROC

Fonte: Vilela Junior, 2022b

As métricas aqui apresentadas não devem ser observadas de forma isolada, como se costuma fazer nas análises dos resultados em modelos de machine learning, mas em conjunto entre elas, a matriz de confusão e próprio contexto dos dados. O cientista de dados deve fazer uma análise profunda e geral, e não somente confiar no resultado de uma ou duas métricas (Vilela Jr, 2022b).

3. METODOLOGIA

Esta pesquisa apresenta um estudo de caso baseado em uma abordagem descritiva e analítica, nos estudos de eficiência utilizando modelo preditivo de machine learning aplicado a um banco de dados referente o quadro clínico de pacientes que sofreram um ataque cardíaco, em busca de prever a ocorrência de um evento desses, baseado no quadro clínico do paciente. Assim, houve uma abordagem qualitativa para a obtenção das métricas utilizadas no caso da aplicação do modelo *Random Forest* e assim encontrar uma maneira de validar os resultados. Para tanto, utilizou-se do *Python* sob a *IDE Pycharm* devido ao fato de que esta *IDE* facilita o manuseio de bibliotecas por meio de instalação dinâmica e também mantém sempre o terminal no ambiente virtual de desenvolvimento (*venv*).

4. RESULTADOS

Os resultados dependeram dos valores de correlação que indicaram correlacionados dos dados de forma pouco proeminente, mas suficientes para que possam ser considerados pelo modelo segundo a Tabela 2.

Tabela 2

Matriz de correlação

HeartDisease	Age	RestingBP	Cholesterol	FastingBS	MaxHR	Oldpeak
1	0,282038506	0,10758898	-0,232740639	0,267291186	-0,400420769	0,403950722
0,282038506	1	0,254399356	-0,095281771	0,198039066	-0,382044675	0,258611536
0,10758898	0,254399356	1	0,100892942	0,070193336	-0,112134997	0,164803043
-0,232740639	-0,095281771	0,100892942	1	-0,260974328	0,235792403	0,050148109
0,267291186	0,198039066	0,070193336	-0,260974328	1	-0,131438491	0,05269786
-0,400420769	-0,382044675	-0,112134997	0,235792403	-0,131438491	1	-0,16069055
0,403950722	0,258611536	0,164803043	0,050148109	0,05269786	-0,16069055	1

Fonte: Os autores.

Considere-se a seguinte divisão do banco de dados para treinamento e teste do modelo:

- Ocorrências de ataque do coração: 164
- Não ocorrências de ataque do coração: 112

A interpretação da matriz de confusão permite a entender onde o modelo está acertando e onde está cometendo erros. A matriz de confusão evidencia uma métrica favorável de acertos positivos e negativos segundo a figura 3.

Figura 3 - Matriz de Confusão Resultante

Fonte: Os autores.

O gráfico indica que 84 em dos casos, o modelo acertou ao informar que não existe risco de infarto do miocárdio enquanto em 30 casos, ele errou. Em 140 casos o modelo detectou corretamente a incidência do infarto do miocárdio e errou em 26 casos. Com isso, é possível calcular os valores das principais métricas como se pode ver na figura 5.

Figura 4 - Resultado das métricas utilizadas.

Acurácia: 83.70%
Precisão: 84.47%
Recall: 87.18%
F1-score: 85.80%
Especificidade: 82.61%
FMI (Índice Fowlkes-Mallows): 85.82%

Fonte: Os autores.

A acurácia é a proporção de previsões corretas feitas pelo modelo em relação ao total de previsões o que significa que o modelo previu corretamente 83.70% das vezes. Na precisão, tem-se a proporção de previsões positivas corretas em relação ao total de previsões positivas. Ao indicar a precisão, percebe-se que o modelo prevê uma classe positiva corretamente 84.47% das vezes. Isto representa que o modelo possui repetibilidade aceitável e manter-se-á constante em suas predições.

Em sensibilidade ou recall, a proporção de previsões positivas corretas em relação ao total de valores positivos reais é conhecida. Trata-se da medida da capacidade que o modelo tem de detectar os indivíduos verdadeiramente doentes (Martins, 2023). Isto significa que o modelo identificou corretamente 87.18% dos valores positivos reais. Esta é uma das mais importantes das métricas pois indica quantos pacientes com infarto do miocárdio o modelo conseguiu prever em relação aos casos de infarto na amostra inteira.

O *f1-score* é a média harmônica entre precisão e recall. O *F1-score* leva em consideração tanto falsos positivos quanto falsos negativos. Um *F1-score* de 85.80% indica um bom equilíbrio entre precisão e recall. A Especificidade relaciona previsões negativas corretas com o total de valores negativos reais. Uma especificidade de 82.61% significa que o modelo identificou corretamente estes valores negativos reais. O FMI (Índice Fowlkes-Mallows) entregará a média geométrica entre precisão e recall como uma medida que considera tanto a precisão quanto a *recall* para calcular a precisão do modelo. Um FMI de 85.82% indica um bom equilíbrio entre precisão e recall e confirma o valor do F1-score.

Para uma análise completa, é interessante visualizar o desempenho do modelo em vários estados de análise. A AUC (Área sob a curva) da curva ROC (Curva de Característica de Operação do Receptor) mede toda a área bidimensional abaixo da curva ROC. Por sua vez, a curva ROC é um gráfico que mostra o desempenho de um modelo de classificação em todos os limiares de classificação. O modelo comporta-se satisfatoriamente em análise da AUC como apresenta a figura 5.

Figura 5 - Curva ROC e a área denunciando 83%.

Fonte: Os autores.

Um valor AUC de 0,83 significa que há 83% de chance de que o modelo seja capaz de distinguir entre uma previsão positiva aleatória e uma previsão negativa aleatória. AUC varia de 0 a 1, onde um valor de 0 indica um modelo ruim e um valor de 1 representa um modelo perfeito. Portanto, um AUC de 0,83 indica um bom desempenho do modelo. Ao analisar o formato da curva ROC, pode-se perceber um cotovelo alto e a consequente acomodação da curva, típicos de um valor aceitável de Índice de Younden. (Vilela Junior, 2022b)

Demonstra-se que o uso de diversas métricas em relação ao modelo classificatório é necessário pois os resultados necessitam ser analisados de forma ampla e relacionada considerando-se não somente casos de erro para negativos, mas também para positivos. O uso da AUC e FMI confirmam os resultados dando maior confiabilidade ao modelo. Recomenda-se pesquisas futuras para verificar qual o impacto de cada modelo sobre estas métricas, e como o pré-processamento dos dados pode impactar e melhorar os resultados das métricas apresentadas com ênfase na área de predição de diagnósticos.

REFERÊNCIAS

- Andrade, M., Santos, J. & Freitas, J. (2023). Sistema de detecção de intrusão utilizando métodos de aprendizagem de máquina em redes de computadores. *Revista de ciência e inovação do IFFAR*, 09. doi:10.26669/2448-4091.2023.388
- Belloni, M. & Righetto, A. J. (2024). *Random Forest para classificação em relação ao risco de infarto do miocárdio*. Monografia, Universidade de São Paulo / USP - Esalq, Data Science and Analytics.
- Bruna, M. H. (2023). *Infarto do miocárdio (ataque cardíaco)*. Acesso em 12 de 02 de 2024, disponível em drauzio varella - drauzio varella: <https://drauziovarella.uol.com.br/doencas-e-sintomas/infarto-do-miocardio-ataque-cardiaco/>
- Fernando, P. H. L.; Fabricio, D. A. K.; Trevisan, L.; Lixandrão, K. C. de L. & Lima, C. R. G. (2023). *Metrologia*. São Paulo: Grupo A.
- Ho, T. K. (1995). Random Decision Forests. *Proceedings of 3rd International Conference on Document Analysis and Recognition*, pp. 278-282. Fonte: <https://ieeexplore.ieee.org/stamp/stamp.jsp?tp=&arnumber=598994>
- Kaggle. (2024). *Your Machine Learning and Data Science Community*. Acesso em 26 de 11 de 24, disponível em <https://www.kaggle.com>
- Martinez, E. Z. & Louzada Neto, F. (2003). A curva ROC para testes diagnósticos. *Caderno de saúde coletiva*, pp. 7-31.
- Martins, A. d. (2023). *Epidemiologia*. São Paulo: Grupo A.
- Mello, J. F. (2023.). *Anotações de aula. Árvores, Redes e Ensemble Models I e II. MBA em Data Science & Analytics*. . Piracicaba/ SP.: USP/Esalq.
- Olson, D. & Delen, D. (2008). *Advanced Data Mining Techniques*. Heidelberg, Alemanha.: Springer.
- sklearn.ensemble.RandomForestClassifier. (2024). Acesso em 20 de 01 de 2024, disponível em Scikit learn 1.3: <https://scikit-learn.org/stable/modules/generated/sklearn.ensemble.RandomForestClassifier.html>
- Strauss, E., Bôas Junior, M. V., & Ferreira, W. L. (2022). A importância de utilizar métricas adequadas de avaliação de performance em modelos preditivos de machine learning. *Projectus*, 7, pp. 57-62. doi:10.15202/25254146.2022v7n2p52
- Vilela Junior, G. d. (2022a). Determinação das métricas usuais a partir da matriz de confusão de classificadores multiclasse em algoritmos inteligentes nas ciências do movimento humano. *Revista Centro de Pesquisas Avançadas em Qualidade de Vida*, 14(2). doi:10.36692/v14n2-01

Vilela Junior, G. d. (2022b). Importância do índice Fowlkes-Mallows (FMI), do coeficiente de correlação de Matthews (MCC) e do índice Youden (IY) nos classificadores de inteligência artificial na área da saúde. *Revista CPAQV – Centro de Pesquisas Avançadas em Qualidade de Vi*, 14(3). doi:10.36692/v14n3-01