

Aprendizado de Máquina na Detecção de Doença de Alzheimer utilizando Espectroscopia de Plasma

Maria Eduarda G. Miguel¹
 ICN/UNIFAL-MG, Alfenas, MG
 Reginaldo J. Silva²
 FEIS/UNESP, Ilha Solteira, SP
 Angela L. Moreno³
 DEMAT/UNIFAL-MG, Alfenas, MG

As doenças neurodegenerativas representam um grupo de distúrbios progressivos do sistema nervoso e incluem a Doença de Parkinson (DP), a Doença de Alzheimer (DA) e a Esclerose Lateral Amiotrófica (ELA) [2]. Apesar das diferenças na patofisiologia, essas condições incluem características como o acúmulo de proteínas mal dobradas e agregadas no cérebro, contribuindo para a degeneração neuronal. Conforme destacado por Feng [1], essas doenças estão intimamente ligadas ao envelhecimento populacional, tornando-se um desafio crescente para a saúde pública. Dessa forma, compreender os mecanismos moleculares e celulares envolvidos é essencial para o desenvolvimento de novas estratégias terapêuticas e métodos de diagnóstico precoce.

Assim, o presente estudo busca comparar três abordagens de aprendizado de máquina: *Random Forest* (RF), *Gradient Boosting* e *Multilayer Perceptron* (MLP), buscando o melhor método para investigar distúrbios neurodegenerativos em um nível mais profundo utilizando o espectro de plasma sanguíneo. O *Random Forest* utiliza um conjunto de árvores de decisão para reduzir o sobreajuste (*overfitting*) e aumentar a robustez. O *Gradient Boosting* constrói árvores de forma sequencial, otimizando gradualmente os erros do modelo. E, por fim, o MLP, focado em redes neurais artificiais, utiliza de padrões mais complexos através de múltiplas camadas ocultas [3]. Deste modo, ao comparar estes três modelos pode-se avaliar a eficiência do estudo em um conjunto de dados específico.

Os dados utilizados nos experimentos computacionais estão disponíveis em Paraskevaidi et al. [4]. Observa-se que o estudo em questão utilizou análises espectroscópicas de amostras de plasma sanguíneo, com o escopo contando com o total de 549 indivíduos, dos quais 164 pacientes com Alzheimer (AD) e 202 indivíduos saudáveis como grupo controle (HC).

Portanto, a metodologia adotada envolve o pré-processamento dos dados, seguido da divisão destes dados em 70% para treino/validação e 30% para teste. Os modelos foram ajustados por meio de busca em grade (*grid search*) no conjunto de treinamento, buscando otimizar hiperparâmetros como, neste caso, `n_estimators`, `max_depth` e `learning_rate` para o *Gradient Boosting* e *Random Forest*, e diferentemente para o MLP, que foi ajustado com arquiteturas de camadas ocultas e funções de ativação. Com isso, a avaliação de desempenho foi realizada utilizando as seguintes métricas: acurácia (ACC), precisão (Pre), sensibilidade (Se), especificidade (Esp), *F1-Score* e AUC, conforme a base metodológica descrita por Müller e Guido [3] em sua abordagem comparativa de diferentes algoritmos de aprendizado de máquina.

Os resultados são apresentados na Tabela 1. Além disso, foi gerada a curva ROC (Figura 1), permitindo uma análise detalhada dos erros de classificação. Assim, a partir dos resultados obtidos, foi possível comparar a eficácia de cada modelo, podendo ser observado abaixo a comparação entre esses valores nos diferentes modelos descritos.

¹maria.miguel@sou.unifal-mg.edu.br

²reginaldo.silva@unesp.br

³angela.moreno@unifal-mg.edu.br

Tabela 1: Resultados obtidos por cada modelo.

Métricas	ACC	Pre	Se	Esp	F_1 -Score	AUC
<i>Gradient Boosting</i>	79,69%	78,20%	75,81%	82,84%	76,99%	87,98%
<i>Multilayer Perceptron</i>	72,31%	72,93%	60,77%	81,68%	66,30%	77,91%
<i>Random Forest</i>	79,69%	79,05%	74,39%	83,99%	76,65%	89,01%

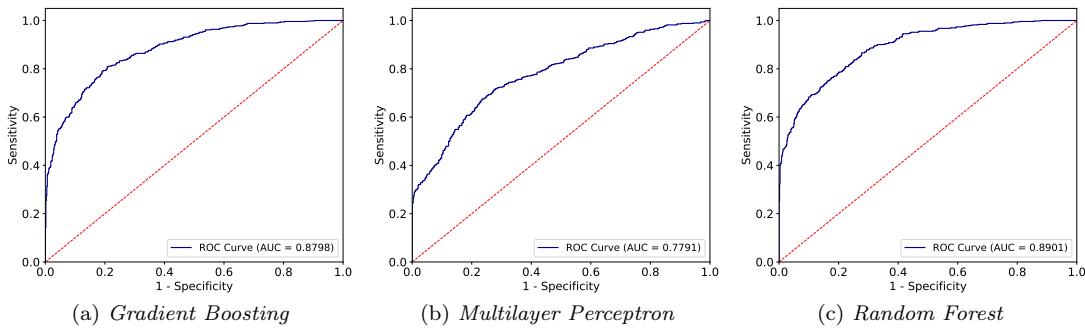


Figura 1: Curva ROC para os modelos testados. Fonte: Os próprios autores.

A análise comparativa dos resultados apresentados na tabela revela diferenças no desempenho dos três modelos. Ao considerar a acurácia, observa-se uma semelhança entre o *Gradient Boosting* e o *Random Forest*, indicando que ambos possuem uma boa capacidade de generalização dos dados. Apesar disso, o *Random Forest* se destacou ao alcançar a maior AUC, sugerindo um desempenho superior na distinção entre classes, enquanto o *Gradient Boosting* apresentou a maior sensibilidade, sendo mais vantajoso em cenários onde a identificação dos casos positivos é prioritária. Por outro lado, a MLP obteve o pior desempenho geral, com menor acurácia, F_1 -score e sensibilidade, o que indica dificuldades em capturar padrões relevantes nos dados e limita sua eficácia na detecção de casos positivos. No entanto, um ponto positivo é que sua especificidade permaneceu próxima à dos outros modelos, demonstrando um bom controle de falsos positivos.

Diante deste cenário, tem-se que os resultados sugerem que *Random Forest* e *Gradient Boosting* são as abordagens mais robustas para a tarefa de classificação, apresentando desempenhos equivalentes relacionados a alguns parâmetros. O MLP, por outro lado, teve um desempenho inferior, provavelmente devido à necessidade de otimização da rede e normalização dos dados. Assim, para aplicações que exigem alta precisão e estabilidade, o Random Forest pode ser a melhor escolha, com o *Gradient Boosting* sendo mais vantajoso em cenários de detecção de casos positivos.

Referências

- [1] T. Feng. “Applications of Artificial Intelligence to Diagnosis of Neurodegenerative Diseases”. Em: **Studies in Health Technology and Informatics** 308 (2023), pp. 648–655. DOI: 10.3233/SHTI230896.
- [2] S. Gonçalves e T. F. Outeiro. “A disfunção cognitiva nas doenças neurodegenerativas”. Em: **Revista Brasileira de Ciências do Envelhecimento Humano** 12.3 (2015). DOI: 10.5335/rbceh.v12i3.6007.
- [3] A.C. Müller e S. Guido. **Introduction to Machine Learning with Python: A Guide for Data Scientists**. O'Reilly Media, Incorporated, 2018. ISBN: 9789352134571.
- [4] M. Paraskevaidi et al. “Differential diagnosis of Alzheimer's disease using spectrochemical analysis of blood”. Em: **Proceedings of the National Academy of Sciences** 114.38 (2017), E7929–E7938. DOI: 10.1073/pnas.1701517114.