

Instituto de Biociências – Câmpus de Botucatu
Programa de Pós-graduação em Biometria



Uso do mapeamento em grafos de quantis bidimensional para a classificação de imagens de ultrassonografia de mama

Fernando Henrique Bechelli Gonçalves

Botucatu
2026

Fernando Henrique Bechelli Gonçalves

Uso do mapeamento em grafos de quantis bidimensional para a classificação de imagens de ultrassonografia de mama

Dissertação de Mestrado apresentada ao Curso de Programa de Pós-graduação em Biometria da UNESP, como parte dos requisitos necessários para a obtenção do título de Mestre em Biometria.

Orientador: Profa. Dra. Andriana Susana Lopes de Oliveira Campanharo

Botucatu
2026

B391u

Bechelli Gonçalves, Fernando Henrique
Uso do mapeamento em grafos de quantis bidimensional para a classificação de imagens de ultrassonografia de mama / Fernando Henrique Bechelli Gonçalves. -- Botucatu, 2026
81 p.

Dissertação (mestrado) - Universidade Estadual Paulista (UNESP), Instituto de Biociências, Botucatu
Orientadora: Andriana Susana Lopes de Oliveira Campanharo

1. Redes complexas. 2. Grafos de quantis. 3. Aprendizado de máquina. 4. Ultrassonografia de mama. 5. Visão computacional. I. Título.

Sistema de geração automática de fichas catalográficas da Unesp. Dados fornecidos pelo autor(a).

É precisamente na fronteira do conhecimento que a imaginação tem seu papel mais importante;
o que ontem foi apenas um sonho, amanhã poderá se tornar realidade.
Marcelo Gleiser

Resumo

O câncer de mama é uma das principais causas de mortalidade entre mulheres no mundo e a ultrassonografia é um importante exame complementar na detecção e caracterização de lesões mamárias. No entanto, a análise desse exame é dependente da interpretação do corpo clínico e, desta forma, suscetível à subjetividade no diagnóstico. Neste contexto, o presente trabalho propõe o uso do mapeamento das imagens em grafos como uma abordagem alternativa para a classificação de imagens de ultrassonografia de mama. A partir de uma base de dados pública, a saber a MedMNIST V2, as imagens de ultrassonografia foram mapeadas em redes complexas a partir dos quantis e intervalos dos pixels das imagens. Medidas estruturais de redes complexas, como o grau de conectividade média, o coeficiente de agrupamento, o índice Estrada, o comprimento do salto médio, a energia do grafo e a centralidade laplaciana, foram exploradas como possíveis preditores para as imagens classificadas como benignas/normais e malignas. Os preditores, selecionados após testes estatísticos, foram utilizados em diferentes métodos de aprendizado de máquina, com o intuito de encontrar os melhores parâmetros e métodos para a tarefa. Diferentes classificadores foram avaliados, sendo o XGBoost o método que apresentou melhor desempenho. Os melhores resultados foram obtidos com o mapeamento em grafos de bins, alcançando precisão de 88,5% e AUC-PR de 0,97 no conjunto de validação. Adicionalmente, foram analisados o impacto dos parâmetros de mapeamento da imagem em grafos no desempenho dos modelos e a robustez do método frente à inserção de ruídos artificiais nas imagens, com destaque ao mapeamento em grafos de quantis. Os resultados indicam que o mapeamento de imagens tanto em grafos de quantis quanto em grafos de bins constitui uma abordagem promissora para a classificação de imagens médicas, apresentando eficiência computacional e maior interpretabilidade dos descritores em comparação a métodos tradicionais de visão computacional, embora estudos adicionais sejam necessários para viabilizar a sugestão de implementação na prática clínica.

Palavras-chave: Redes complexas; Grafos de quantis; Aprendizado de máquina; Ultrassonografia de mama; Visão computacional; Câncer de mama.

Abstract

Breast cancer is one of the leading causes of mortality among women worldwide, and ultrasonography is an important complementary exam for the detection and characterization of breast lesions. However, the analysis of this exam depends on clinical interpretation and is therefore susceptible to subjectivity in diagnosis. In this context, the present study proposes the use of image mapping into graphs as an alternative approach for the classification of breast ultrasound images. Using a public database, namely MedMNIST V2, ultrasound images were mapped into complex networks based on pixel quantiles and intervals. Structural measures of complex networks, such as average degree, clustering coefficient, Estrada index, average path length, graph energy, and Laplacian centrality, were explored as potential predictors for images classified as benign/normal and malignant. The predictors, selected after statistical tests, were used in different machine learning methods in order to identify the best parameters and approaches for the task. Different classifiers were evaluated, with XGBoost achieving the best performance. The best results were obtained using bin-based graph mapping, reaching an accuracy of 88.5% and an AUC-PR of 0.97 on the validation set. Additionally, the impact of image-to-graph mapping parameters on model performance and the robustness of the method to the insertion of artificial noise into the images were analyzed, with particular emphasis on quantile-based graph mapping. The results indicate that mapping images into both quantile-based and bin-based graphs constitutes a promising approach for medical image classification, offering computational efficiency and greater interpretability of descriptors compared to traditional computer vision methods, although further studies are required before suggesting its implementation in clinical practice.

Keywords: Complex networks; Quantile graphs; Machine learning; Breast ultrasonography; Computer vision; Breast cancer.

Lista de figuras

Figura 1 – Taxas estimadas padronizadas por idade de incidência (a) e mortalidade (b) por câncer de mama feminino por 100.000 habitantes em 2022, para 185 países. Fonte: (Kim et al., 2025). 2

Figura 2 – Fluxograma ilustrativo da implementação de métodos computacionais para auxílio diagnóstico. Fonte: (Gonçalves, 2023). 4

Figura 3 – Ilustração de uma operação de convolução (*kernel*) em uma imagem (Entrada) e seu respectivo mapa de característica (Saída). Fonte: autoria própria. . . . 6

Figura 4 – Ilustração visual da aplicação de filtros convolucionais e seus respectivos mapas de características. Fonte: (Ponti; Costa, 2018). 6

Figura 5 – Ilustração visual das camadas convolucionais presentes em uma CNN. Fonte: (Ponti; Costa, 2018). 7

Figura 6 – Ilustração das camadas de uma CNN para classificação de nódulos pulmonares. Fonte: (Gonçalves, 2023). 7

Figura 7 – Ilustração das (a) sete pontes de Königsberg e (b) respectiva representação por um grafo. Fonte: (Boguslawski, 2011). 8

Figura 8 – Mapeamento da rede em um vetor de características e sua correspondência. Fonte: imagem adaptada de (Costa et al., 2007). 9

Figura 9 – Representação de uma rede complexa. Fonte: imagem adaptada de (McBride, 2025). 9

Figura 10 – Mapeamento de uma série temporal em rede complexa. Fonte: imagem adaptada de (Campanharo; Ramos, 2016). 10

Figura 11 – Ilustração matricial de uma imagem de ultrassom de mama. Fonte: autoria própria. 11

Figura 12 – Fluxograma das etapas metodológicas utilizadas neste estudo. Fonte: próprio autor. 12

Figura 13 – Exemplo de imagens rotuladas no banco de dados. Fonte: imagem adaptada de (Al-Dhabyani et al., 2020). 14

Figura 14 – Exemplos de imagens de ultrassom de câncer de mama presentes no banco de dados BUSI, incluindo casos benignos, malignos e normais, juntamente com suas máscaras. Fonte: imagem adaptada de (Hekal et al., 2024). 15

Figura 15 – Dados em larga escala, no estilo MNIST, de imagens biomédicas padronizadas em 2D e 3D com rótulos de classificação. Fonte: (Yang et al., 2023). 16

Figura 16 – Imagem representativa da classe maligna sob adição de diferentes tipos de ruídos presentes no banco de dados. Fonte: autoria própria. 17

Figura 17 – Ilustração da metodologia proposta para mapear uma imagem aleatória com 6×6 pixels em GQs com 7 vértices. Fonte: (Vicchietti, 2025). 18
Figura 18 – Ilustração do mapeamento em GQs em uma imagem de US de 28x28 pixels. Fonte: autoria própria. 19
Figura 19 – Distribuição dos valores dos pixels em uma imagem 224x224 pixels, antes e depois da discretização. Fonte: autoria própria. 20
Figura 20 – Exemplo de aumento de dados em imagem radiológica. Fonte: imagem adaptada de (Elgendi et al., 2021). 20
Figura 21 – Ilustração da identificação dos vizinhos dos pixels usando a vizinhança de Moore com raio r para uma imagem de entrada com 6×6 pixels. Os quadrados em cinza escuro representam os pixels principais, enquanto os em cinza claro representam os seus respectivos vizinhos. Fonte: (Vicchietti, 2025). 21
Figura 22 – Ilustração das redes complexas geradas e suas respectivas matrizes de adjacência por meio da variação do raio adotado para a vizinhança de Moore durante o mapeamento de uma imagem em GQs. Fonte: autoria própria. . . 22
Figura 23 – Rede complexa hipotética. Fonte: autoria própria. 24
Figura 24 – Ilustração das métricas de avaliação do classificador. Fonte: próprio autor. . 28
Figura 25 – Caracterizadores globais provenientes do mapeamento em GQs com $r = 1$. Fonte: próprio autor. 30
Figura 26 – Caracterizadores globais provenientes do mapeamento em GBs com $r = 1$. Fonte: próprio autor. 30
Figura 27 – Caracterizadores locais proporcionados pelo mapeamento em GQs com $r = 1$. Fonte: próprio autor. 31
Figura 28 – Caracterizadores locais proporcionados pelo mapeamento em GBs com $r = 1$. Fonte: próprio autor. 32
Figura 29 – Caracterizadores locais proporcionados pelo mapeamento em GQs com $r = 1$. Fonte: próprio autor. 32
Figura 30 – Caracterizadores locais proporcionados pelo mapeamento em GBs com $r = 1$. Fonte: próprio autor. 32
Figura 31 – Caracterizadores locais proporcionados pelo mapeamento em GQs com $r = 1$. Fonte: próprio autor. 33
Figura 32 – Caracterizadores locais proporcionados pelo mapeamento em GBs com $r = 1$. Fonte: próprio autor. 33
Figura 33 – Distribuição dos dados conforme variação do raio do mapeamento em GQs. Fonte: próprio autor. 36
Figura 34 – Distribuição dos dados conforme variação do raio do mapeamento em GBs. Fonte: próprio autor. 37
Figura 35 – Ciclos de aprendizado de máquina realizados na validação cruzada. Fonte: próprio autor. 44

Figura 36 – Precisão e AUC-ROC de classificação em função do número de quantis e do raio máximo do mapeamento em GQs. Fonte: próprio autor. 45
Figura 37 – Precisão e AUC-ROC de classificação em função do número de *bins* e do raio máximo do mapeamento em GBs. Fonte: próprio autor. 45
Figura 38 – Metodologia proposta para a identificação de regiões de interesse. Fonte: próprio autor. 49

Lista de tabelas

Tabela 1 – Quantidade de imagens disponíveis na base de dados. 16
Tabela 2 – Testes estatísticos sobre os caracterizadores calculados nos GQs em redes com 74 vértices 34
Tabela 3 – Testes estatísticos sobre os caracterizadores calculados nos GBs em redes com 74 vértices 35
Tabela 4 – Quantidade de caracterizadores selecionados após critério de inclusão . . . 38
Tabela 6 – Melhores raios do mapeamento em GBs para cada caracterizador global. . . 39
Tabela 5 – Melhores raios do mapeamento em GQs para cada caracterizador global. . . 39
Tabela 7 – Desempenho dos modelos de ML para diferentes resoluções e caracterizadores proporcionados pelos GQs. 40
Tabela 8 – Desempenho dos modelos de ML para diferentes resoluções e caracterizadores proporcionados pelos GBs. 41
Tabela 9 – Métricas de desempenho do classificador XGBoost utilizando os caracterizadores dos GQs. 42
Tabela 10 – Métricas de desempenho do classificador XGBoost utilizando os caracterizadores dos GBs. 42
Tabela 11 – Comparação dos resultados provisórios com a literatura. 43
Tabela 12 – Custo computacional do mapeamento em grafos de quantis. 43
Tabela 13 – Melhores parâmetros de mapeamento da imagem em redes complexas com base da precisão e AUC-ROC média. 46
Tabela 14 – Comparação dos resultados entre GQs e GBs. 47

Lista de abreviaturas e siglas

CNN	*Convolutional Neural Network* (Redes Neurais Convolucionais
US	Ultrassonografia
GQs	Grafos de Quantis
GBs	Grafos de *Bins*
XGBoost	*Extreme Gradient Boosting*
PR	*Precision-Recall*
ROC	*Receiver Operating Characteristic Curve*
AUC	*Area Under Curve* (área sob a cruva)
SVM	*Support Vector Machine*
MNIST	*Modified National Institute of Standards and Technology*

Sumário

	1 INTRODUÇÃO	**1**
1.1	**Câncer de mama**	**1**
1.2	**Visão computacional**	**4**
1.3	**Redes complexas**	**8**
1.3.1	**Grafos de quantis**	**10**
1.4	**Objetivos**	**11**
	2 METODOLOGIA	**12**
2.1	**Base de Dados**	**13**
2.1.1	**BUSI (*Breast Ultrasound Images Dataset*)**	**14**
2.1.2	**BreastMNIST**	**15**
2.1.3	**MedMNIST-C**	**17**
2.2	**Mapeamento da imagem em grafos**	**18**
2.2.1	**Grafos de Quantis (GQs)**	**18**
2.2.2	**Grafos de Bins (GBs)**	**19**
2.3	**Incremento de dados**	**20**
2.4	**Caracterizadores Estruturais**	**22**
2.4.1	**Grau de conectividade média**	**23**
2.4.2	**Coeficiente de Agrupamento**	**24**
2.4.3	**Índice Estrada**	**25**
2.4.4	**Comprimento do Salto Médio**	**25**
2.4.5	**Energia do grafo**	**26**
2.4.6	**Centralidade Laplaciana**	**26**
2.5	**Métricas de Avaliação**	**27**
	3 RESULTADOS E DISCUSSÃO	**29**
3.1	**Seleção dos caracterizadores**	**29**
3.2	**Impacto do parâmetro r**	**35**
3.3	**Aprendizado de máquina**	**40**
3.4	**Custo Computacional**	**43**
3.5	**Análise de sensibilidade**	**44**
3.6	**Análise de estabilidade**	**46**
3.7	**Aplicações futuras**	**48**
	4 CONCLUSÕES	**50**

Referências **52**

Apêndices **60**

APÊNDICE A – - ACESSO AOS DADOS E EXTRAÇÃO DOS CARACTERIZADORES **61**

APÊNDICE B – - ANÁLISE E SELEÇÃO DOS CARACTERIZADORES **66**

1 Introdução

1.1 Câncer de mama

O câncer de mama é um grande problema de saúde pública em todo o mundo, dada a sua magnitude epidemiológica, social e econômica. Globalmente, entre os tipos de câncer, o carcinoma mamário é o mais comum entre as mulheres, estimado em 2,3 milhões de novos casos em 2022 (Organization, 2025). No Brasil, salvo os tumores de pele não melanoma, o câncer de mama é o mais incidente em mulheres de todas as regiões, com taxas mais altas nas regiões Sul e Sudeste. Segundo o Instituto Nacional de Câncer (INCA), aproximadamente 74 mil novos casos foram estimados para cada ano do triênio de 2023 a 2025 (Instituto Nacional de Câncer (Brasil), 2025).

Nos Estados Unidos, embora o câncer de mama representa 15,5% de todos os novos casos anuais de câncer, a taxa de sobrevida em 5 anos é de 91,7% (National Cancer Institute (NIH), 2025), destacando a relação entre o prognóstico da doença e o nível de desenvolvimento do país. Enquanto que as taxas de incidência são mais altas nos países com Índices de Desenvolvimento Humano (IDH) muito elevados, devido a uma maior prevalência de fatores de risco conhecidos, os países com IDH mais baixos enfrentam taxas de mortalidade desproporcionalmente maiores (Kim et al., 2025), conforme apresentado na Figura 1, refletindo desigualdades na detecção precoce, no diagnóstico oportuno e no acesso ao manejo abrangente do câncer de mama (Arzanova; Mayrovitz, 2022).

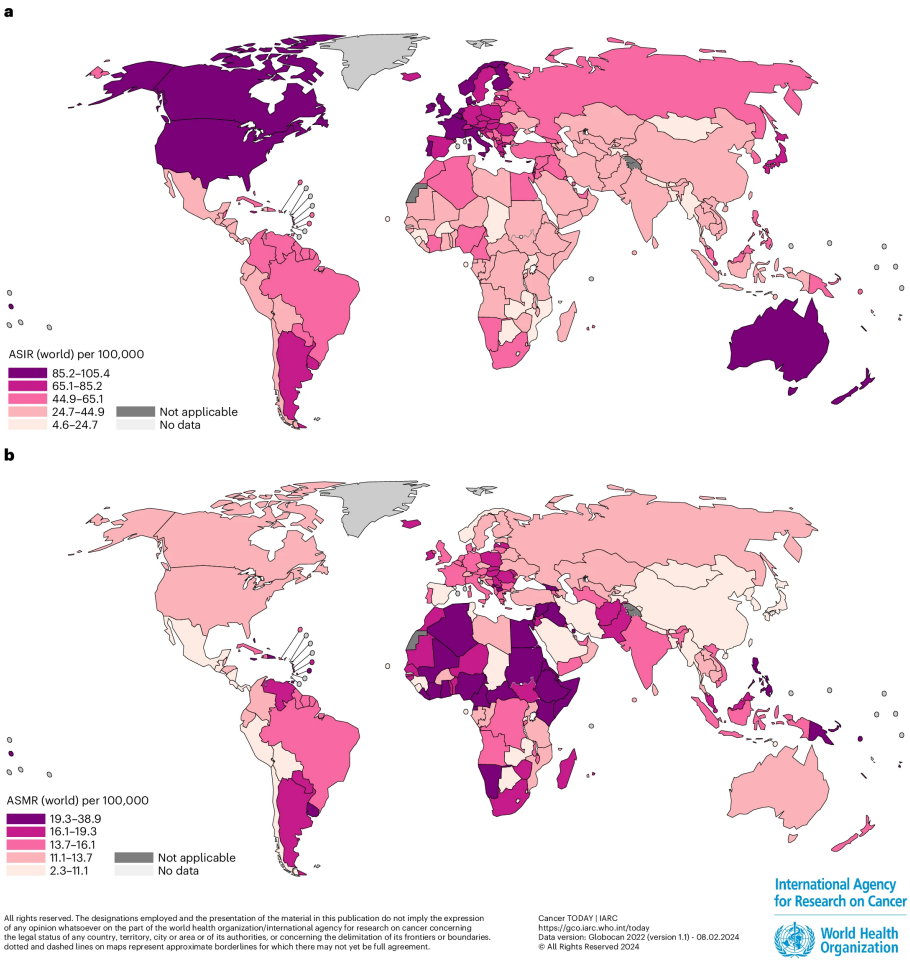


Figura 1 – Taxas estimadas padronizadas por idade de incidência (a) e mortalidade (b) por câncer de mama feminino por 100.000 habitantes em 2022, para 185 países. Fonte: (Kim et al., 2025).

Atualmente, existem 21 tipos histologicamente distintos de câncer de mama, sendo que cada subtipo apresenta diferenças quanto ao desenvolvimento tumoral e às estratégias de manejo clínico do paciente (Winters et al., 2017). Os principais fatores de risco associados ao câncer de mama incluem idade, predisposição genética, sedentarismo, exposições hormonais endógenas e exógenas, consumo de álcool, exposição à radiação (Katsura et al., 2022) e, principalmente, a densidade mamográfica, considerada um dos fatores de risco mais relevantes (Bodewes et al., 2022).

Entre os vários exames, os exames de imagem da mama são o principal meio de rastreamento e diagnóstico do câncer, principalmente a mamografia, considerada padrão ouro para a detecção e diagnóstico do câncer de mama, embora a qualidade de imagem, exposição à radiação e acesso à tecnologia ainda representam desafios à saúde (Santos; Santos; Abreu, 2024). Outros exames de imagem como a sonografia, ressonância magnética, tomografia computadorizada, tomografia por emissão de pósitrons e por emissão de fóton único também podem ser utilizados para diagnóstico e acompanhamento de pacientes com câncer de mama, embora a maioria desses métodos tenham aplicações limitadas (Jafari et al., 2018).

No contexto diagnóstico de câncer de mama, dois tópicos são importantes na discussão sobre escolha do exame de imagem: o rastreamento do carcinoma mamário e o diagnóstico de lesões benignas ou malignas na mama (Milosevic et al., 2018). O rastreamento refere-se à identificação do carcinoma mamário, relacionado a detecção precoce, enquanto que o diagnóstico se refere a caracterização e manejo dos achados radiológicos, ambos acarretando um melhor prognóstico da doença (Cedolini et al., 2014).

A eficácia da triagem mamográfica na redução de mortalidade por câncer de mama está intrinsecamente relacionada à precisão, sensibilidade e especificidade das técnicas mamográficas empregadas, cujos estudos recentes relatam variação de sensibilidade entre 55% a 91% e de especificidade de 84% a 97% (Shi et al., 2025). Essa variabilidade reforça a importância sobre a avaliação dos fatores de risco associados à patologia (Gheller; Tuttle; Oxenberg, 2025), realização de exames complementares (Seely; Alhassan, 2018) e conscientização sobre o câncer de mama (Jacobsen; Jacobsen, 2011).

Com o objetivo de padronizar a avaliação de dados das imagens da mama pelo corpo clínico, o colégio americano de radiologia propôs um sistema de classificação de achados radiológicos denominado BI-RADS (*Breast Imaging Reporting and Data System*) (Balleyguier et al., 2007). A partir de uma série de critérios, os achados radiológicos são classificados em seis categorias distintas e progressivas, conforme probabilidade de malignidade, que variam desde a categoria BI-RADS 1, que se refere a um exame sem massas ou calcificações suspeitas, até a categoria BI-RADS 6, cuja patologia é comprovadamente maligna (Magny; Shikhman; Keppke, 2023). Nesse sistema, também é prevista a anotação temporária de exames na categoria BI-RADS 0, cuja análise dos exames apresentaram resultados incompletos e/ou inconclusivos, sendo necessária a realização de mais estudos (Garza-Rugerio et al., 2024). Devido a sua eficiência, esse sistema tem sido adotado por vários países ao redor do mundo, incluindo o Brasil (Merjane et al., 2024).

A ultrassonografia de mama não é considerada adequada para o rastreamento de câncer de mama. As microcalcificações, um biomarcador importante para a detecção precoce do câncer de mama, são retratadas de forma inconsistente na US. A investigação de biomarcadores nas imagens de US depende da qualidade da imagem e da *expertise* do corpo clínico, favorecendo a mamografia como modalidade diagnóstica (Kim et al., 2023). Entretanto, a ultrassonografia se destaca na detecção de carcinomas de mama ocultos impalpáveis. A sonografia aumenta a especificidade da mamografia e é um exame importante na caracterização dessas massas (Rumack; CHARBONEAU, 2006).

Quando utilizada em conjunto com a mamografia e o exame clínico, a ultrassonografia da mama é indispensável para o diagnóstico. Além da capacidade de identificação de cistos, os avanços tecnológicos favoreceram a caracterização de massas sólidas e a indicação dos níveis de suspeição dessas massas (Guo et al., 2018). Além disso, o conforto do paciente, ausência de

radiação ionizante, acessibilidade ao exame e a visualização em tempo real do exame corroboram a favor da modalidade.

A ultrassonografia mamária é comumente indicada para mulheres jovens, gestantes, lactantes, pacientes com traumatismos ou processos inflamatórios mamários e, especialmente, para a investigação de casos com resultados mamográficos inconclusivos (Evans et al., 2018). A aquisição e, principalmente, a interpretação das imagens dependem da experiência e da avaliação do corpo clínico. Entre as principais características analisadas nos achados radiológicos ultrassonográficos destacam-se o formato da lesão, seu contorno e margens, a ecogenicidade, a textura, a presença de sombra acústica, bem como sua dimensão e localização (Whitman, 2021). Entretanto, essas avaliações visuais são inerentemente subjetivas e suscetíveis a erros, havendo relatos na literatura de variabilidade tanto interobservador quanto intraobservador durante a interpretação dos exames (Rocha et al., 2025).

Essas limitações têm impulsionado o desenvolvimento de sistemas de diagnóstico auxiliados por computador (CAD) e de métodos baseados em inteligência artificial (IA), que atuam como uma segunda opinião na análise dos exames, podendo influenciar diretamente a conduta clínica do paciente (Figura 2). Tais abordagens visam fornecer diagnósticos mais precisos, rápidos e consistentes, resultando em um melhor prognóstico da doença (Hassan; Hamad; Mahar, 2022).

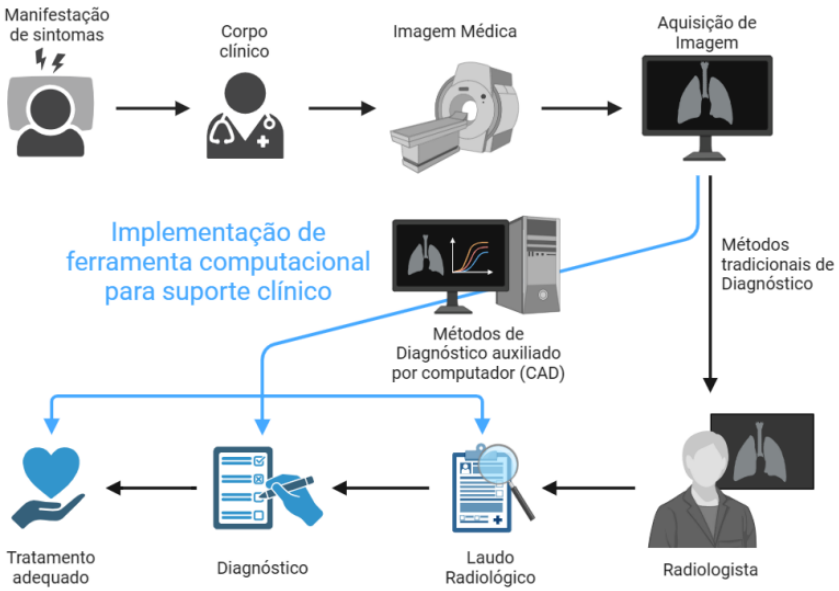


Figura 2 – Fluxograma ilustrativo da implementação de métodos computacionais para auxílio diagnóstico. Fonte: (Gonçalves, 2023).

1.2 Visão computacional

A radiômica é um ramo emergente de pesquisa entre a medicina e a computação que visa, por meio de métodos computacionais, extrair parâmetros quantitativos e qualitativos de imagens

médicas para solucionar problemas clínicos (Binczyk et al., 2021), propondo o desenvolvimento de ferramentas computacionais que, a partir de grandes conjuntos de dados, modelam e correlacionam sutis características da imagem com o estado e prognóstico da doença (Tomaszewski; Gillies, 2021).

Com o avanço tecnológico e científico observado, principalmente nas últimas décadas, a importância do desenvolvimento de ferramentas computacionais para auxiliar profissionais, em diversas áreas técnicas, têm aumentado significativamente. Uma das áreas de desenvolvimento que mais tem atraído a atenção de pesquisadores e entusiastas é a visão computacional, responsável pela automação de organização e classificação de dados, reconhecimento de padrões, identificação e segmentação de estruturas de interesse em sinais e imagens, reconstrução e geração de séries, imagens, vídeos, entre outros (Zhao et al., 2024).

Em especial, observa-se um crescimento notável do interesse da comunidade científica pelo desenvolvimento e aplicação de métodos de aprendizado de máquina, um ramo da IA que visa reproduzir ações humanas na análise e detecção de tendências nos dados, por meio da coleta e processamento de dados, treinamento e validação de tomadas de decisões (Mahadevkar et al., 2022). O aprendizado de máquina é particularmente útil quando o conjunto de dados que se deseja analisar é muito extenso ou complexo para análise manual ou quando a velocidade, reprodutibilidade e precisão são aspectos importantes na tarefa designada (Greener et al., 2022).

De modo geral, os algoritmos de aprendizado de máquina supervisionados buscam solucionar problemas por meio da modelagem de parâmetros e relações entre conjuntos de dados e suas respectivas variáveis-alvo (respostas esperadas pelo modelo) (Choi et al., 2020). Independentemente da abordagem utilizada, o desempenho desses algoritmos está intrinsecamente ligado a quantidade e a qualidade das características (ou atributos) extraídas dos dados, e seguem algumas premissas lógicas para sua implementação, como a separação dos dados em grupos de treino e teste, que serão utilizados durante a fase de "aprendizado", a indicação da variável-alvo como rótulo do problema e a indicação do tipo de tarefa computacional (classificação ou regressão) (Asnicar et al., 2024). Os principais algoritmos de classificação incluem classificadores lineares, regressão logística, Naïve Bayes, support vector machines (SVM), redes neurais, árvores de decisão (decision trees), random forest, K-Nearest Neighbors (KNN) e Gradient Boosting (Osisanwo et al., 2017).

Entre os diversos métodos computacionais, as redes neurais convolucionais (*CNN's*) ganharam grande destaque recentemente devido ao excelente desempenho, em geral, na extração e ponderação de características, sendo amplamente utilizadas na diferenciação e classificação de imagens, inclusive, na área médica. Através de suas camadas convolucionais, as *CNN's* podem extrair automaticamente características dos dados, que posteriormente são utilizados para identificar os parâmetros distintivos mais eficazes entre diferentes tipos de imagens (O'Shea, 2015).

Os filtros convolucionais, que operam sobre as imagens, conforme exemplificado na Figura 3, são os principais responsáveis pelo sucesso do método. Essa inclusão aumenta diretamente o desempenho de classificação das redes neurais artificiais, capazes de extrair automaticamente recursos da imagem com eficiência e robustez, que serão posteriormente ponderados pelas redes neurais artificiais para a classificação de imagens (Sarıgül; Ozyildirim; Avci, 2019).

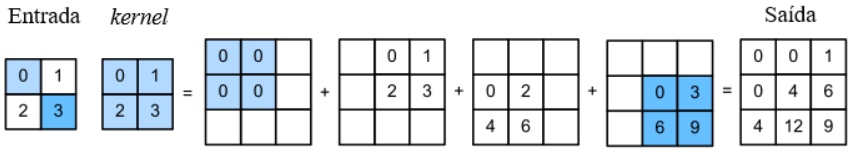


Figura 3 – Ilustração de uma operação de convolução (*kernel*) em uma imagem (Entrada) e seu respectivo mapa de característica (Saída). Fonte: autoria própria.

Na prática, diversos filtros convolucionais são aplicados às imagens, tal que cada filtro corresponde a uma matriz de pesos. Ao utilizar a convolução processa-se informações locais utilizando cada pixel da imagem como centro do filtro uma vez, conforme ilustrado na Figura 4, proporcionando diferentes mapas de características. A extração de recursos torna-se ainda mais rica quando operações de convolução são aplicadas nos mapas de características, investigando associações entre recursos espaciais das imagens, porém perdendo significado e correspondência visual, conforme Figura 5.

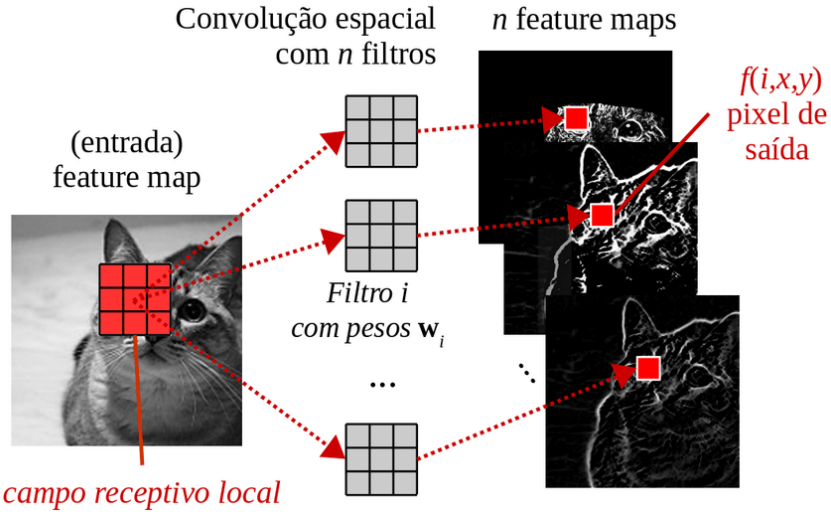


Figura 4 – Ilustração visual da aplicação de filtros convolucionais e seus respectivos mapas de características. Fonte: (Ponti; Costa, 2018).

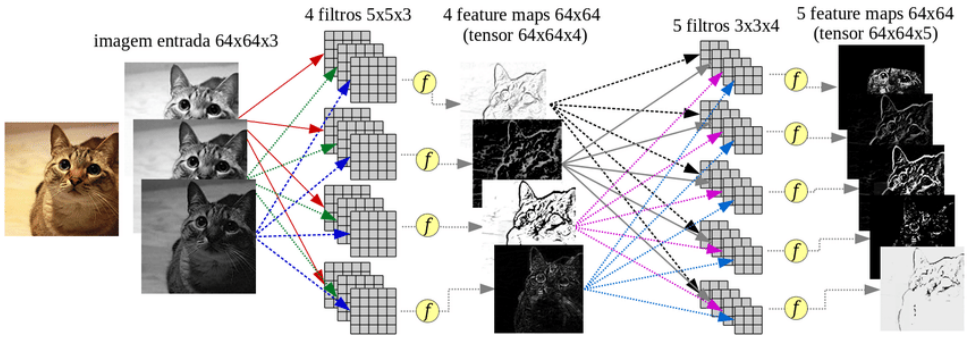


Figura 5 – Ilustração visual das camadas convolucionais presentes em uma CNN. Fonte: (Ponti; Costa, 2018).

De maneira simplificada, as redes neurais convolucionais são uma construção matemática/computacional composta por três tipos de camadas, sendo elas as camadas de convoluções, de amostragem (*Pooling*) e de "neurônios" totalmente conectados, tal que as duas primeiras camadas são responsáveis pela extração de recursos da imagem enquanto que a terceira classifica-os (Figura 6).

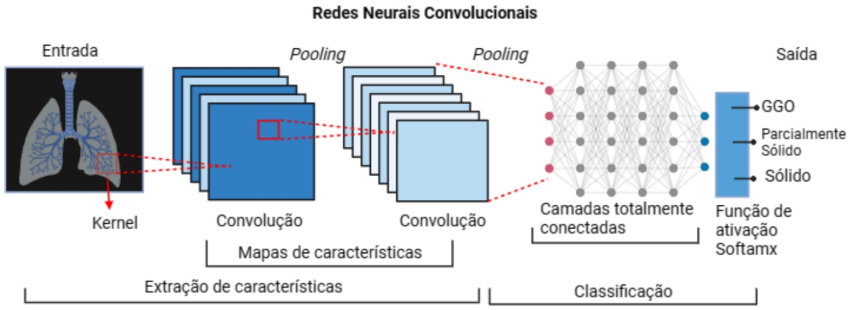


Figura 6 – Ilustração das camadas de uma CNN para classificação de nódulos pulmonares. Fonte: (Gonçalves, 2023).

Embora os avanços recentes do aprendizado de máquina tenham entusiasmado a comunidade científica, ainda há muitos desafios para sua aplicação em imagens médicas. A necessidade de grandes bancos de dados organizados e rotulados com qualidade, ausência de métodos que expliquem as conclusões propostas pelos modelos e a alta susceptibilidade à ruídos nas imagens são os principais fatores que contrapõe a discussão sobre a implementação desses modelos na rotina clínica (Yamashita et al., 2018).

Nesse contexto, métodos alternativos têm sido estudados com o intuito de contornar as limitações encontradas nos métodos vigentes e proporcionar uma nova perspectiva na área da visão computacional. Uma das vertentes exploradas pela comunidade científica concentra-se na classificação por meio de redes complexas e suas propriedades dinâmicas, estruturais

e sistêmicas provenientes dessas representações ((Xin; Zhang; Shao, 2020),(Carneiro; Gama; Ribeiro, 2021),(Chire; Mahmood; Liang, 2025)).

1.3 Redes complexas

Em meados do século XVIII, um problema aparentemente simples foi proposto à comunidade científica, os moradores de Königsberg se perguntavam se era possível realizar um passeio pela cidade passando por cada ponte uma única vez, conforme ilustrado pela Figura 7a. Na ocasião, o matemático Leonhard Euler apresentou uma abordagem inédita para representar o problema, considerou as porções de terra como vértices (nós) e as pontes como arestas (conexões entre os nós), conforme Figura 7b, provando que o problema não havia solução (Euler, 1953). Tal representação fez Euler ser considerado por muitos como o fundador da teoria dos grafos, teoria amplamente estudada pela comunidade científica que deu origem a outros campos importantes de pesquisa, como as redes complexas (Diestel, 2025).

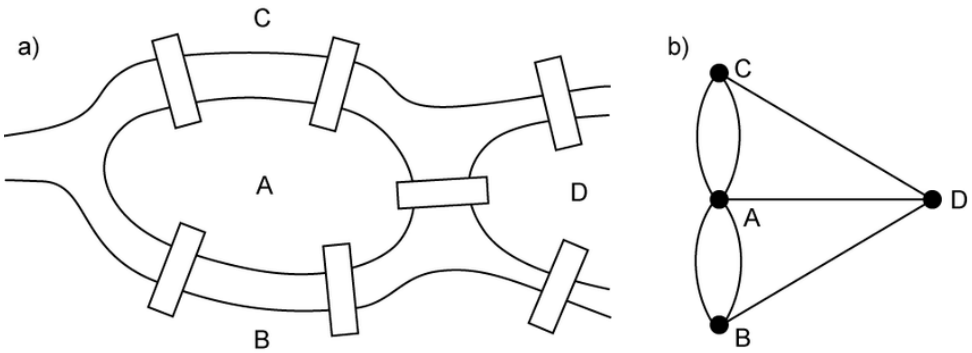


Figura 7 – Ilustração das (a) sete pontes de Königsberg e (b) respectiva representação por um grafo. Fonte: (Boguslawski, 2011).

Redes complexas são, portanto, estruturas matemáticas provenientes da teoria dos grafos e da mecânica estatística que modelam e caracterizam diversos sistemas dinâmicos biológicos, físicos e sociais a partir da interação entre suas componentes, representado por vértices e arestas (Barabási, 2014a).

Nas ciências sociais, por exemplo, as interações sociais reais podem ser modeladas a partir de diferentes perspectivas de interesse, possibilitando a análise das relações sociais e dos processos de difusão de informações ou interesses na sociedade. Essas redes podem representar tanto interações presenciais quanto associações estabelecidas em redes sociais virtuais. Nesse contexto, a utilização de redes complexas para modelar as relações na sociedade humana pode contribuir para um fluxo de informação mais eficiente, por meio da identificação de rotas rápidas de disseminação e da redução de custos. Tal abordagem pode auxiliar na elaboração de políticas públicas voltadas ao conhecimento populacional sobre determinadas patologias, à promoção de campanhas de vacinação e conscientização e ao combate à disseminação de informações falsas (Silva; Santos et al., 2024).

Outro exemplo de utilização de redes complexas pode ser encontrado na biologia sistêmica, que busca compreender os sistemas interagentes presentes na natureza e nos organismos por meio da análise das interações entre seus agentes biológicos. Seu objetivo central é identificar padrões não apenas nas partes componentes do sistema, mas principalmente nas relações estabelecidas entre esses elementos. Nesse contexto, as redes complexas constituem uma importante ferramenta matemática, capaz de representar grandes volumes de dados e de fomentar a formulação de hipóteses na investigação de fenômenos biológicos sob uma perspectiva sistêmica. (Lemke, 2011).

Uma das principais razões por trás da popularidade das redes complexas é sua flexibilidade e capacidade de generalização para representar quaisquer sistemas, estáticos ou dinâmicos, a partir de grafos, assim diversos aspectos do mundo real podem ser representados por meio de redes complexas a partir de analogias para a resolução de problemas específicos (Rubinov; Sporns, 2010). Outra razão é sua capacidade de compactar, com robustez, grandes bancos de dados e preservar suas propriedades como distribuição e intensidade de interações, estruturas das comunidades e a dinâmica adjacente, destacando-se como um método matemático reducionista, capaz de sintetizar o problema modelado em estruturas simples (Cheng; Kawano; Scherpen, 2016).

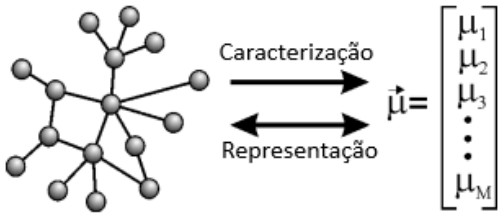
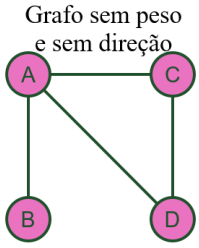


Figura 8 – Mapeamento da rede em um vetor de características e sua correspondência. Fonte: imagem adaptada de (Costa et al., 2007).



Matriz de adjacência

	A	B	C	D
A	0	1	1	1
B	1	0	0	0
C	1	0	0	1
D	1	0	1	0

Figura 9 – Representação de uma rede complexa. Fonte: imagem adaptada de (McBride, 2025).

Matematicamente, um grafo é uma estrutura formada por dois conjuntos V e A, sendo cada elemento de A corresponde a um par não-ordenado de elementos de V. Os elementos do conjunto V são chamados vértices e os elementos do conjunto A são chamados de arestas. Quando uma aresta a corresponde a um par $\{v_i, v_j\}$ de vértices, denotamos isso escrevendo $a_i = \{v_i, v_j\}$ (Barabási, 2014b). Tais conexões ($a_i = \{v_i, v_j\}$) podem ser salvas em uma lista, denominada lista de adjacência, em que cada linha da lista corresponde a uma aresta da rede, contendo os vértices de interação e o peso associado a essa interação (Ruggiero et al., 2011).

Computacionalmente, as redes complexas podem ser armazenadas em matrizes, a partir das listas de adjacência, tal que cada elemento a_{ij} em uma matriz de adjacência A, conforme ilustrado na Figura 9, corresponde a uma aresta entre os vértices v_i e v_j. A representação matricial de uma rede viabiliza o cálculo de diversos caracterizadores estruturais que podem ser explorados no estudo do comportamento e dinâmica de diferentes sistemas (Kashtan; Alon, 2005).

As redes complexas possuem propriedades estruturais específicas que caracterizam suas conexões e podem representar a dinâmica dos processos que ocorrem nessas redes (Figura 8). Nesse contexto, o cálculo de caracterizadores estruturais, obtidas a partir das redes, torna-se importante ferramenta para compreensão e diferenciação desses sistemas.

1.3.1 Grafos de quantis

Em estudos recentes, uma nova estratégia de visão computacional foi proposta com base no mapeamento de séries temporais em redes complexas a partir dos quantis de um sinal temporal. Esse mapeamento se mostrou eficiente na caracterização da dinâmica de diferentes tipos de séries temporais (Campanharo et al., 2011).

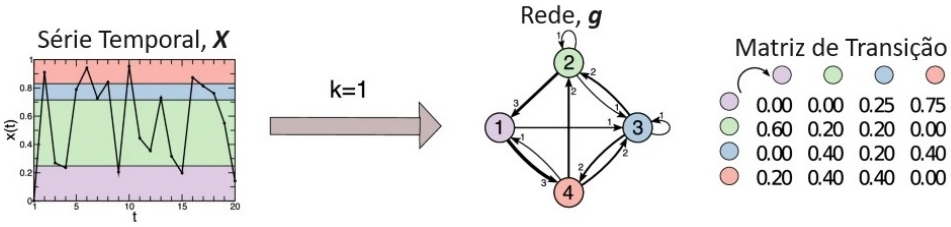


Figura 10 – Mapeamento de uma série temporal em rede complexa. Fonte: imagem adaptada de (Campanharo; Ramos, 2016).

Nesse mapeamento, uma série temporal X com T pontos é dividida em Q quantis de mesmo tamanho, cada quantil com T/Q pontos. Assim, cada ponto $x(i)$ da série temporal é associado a um quantil q_i, de maneira que

$$q_i = \left\{ x\left(j - Q + \frac{T*i}{Q}\right), \ldots, x\left(\frac{T*i}{Q}\right) \right\}, \quad i = 1, 2, \ldots Q, \quad j = 1, 2, \ldots, Q. \tag{1.1}$$

Dessa forma, cada quantil q_i é representado por um vértice n_i na rede correspondente, o que resulta em uma rede com $N = Q$ vértices. Dois vértices n_i e n_j estarão conectados por uma aresta direcionada, cujo peso é dado pelo número de vezes que um ponto $x(t) \in q_i$ é seguido por um ponto $x(t+k) \in q_j$ na série temporal, com $k = 1, 2, \ldots, k_{\max}$ e $t = 1, 2, \ldots, T - k_{\max}$, onde k é o atraso temporal. Em decorrência desse processo, tal mapeamento dá origem a $k_{\max}$ matrizes de adjacência com direção e com peso, denotadas por $W^k, k = 1, 2, \cdots, k_{\max}$.. Por essa razão, os grafos obtidos por meio deste mapeamento são chamados de grafos de quantis (GQs), o que torna possível o estudo da dinâmica de uma série temporal por meio da estrutura das redes complexas associadas à série, cujas propriedades podem ser quantificadas em termos de medidas estruturais das redes.

Tendo em vista que as imagens médicas são matrizes bidimensionais em escala de cinza, conforme ilustrado na Figura 11, elas representam um campo promissor para aplicação e validação de uma extensão do método do mapeamento em grafo de quantis cuja eficiência foi comprovada em séries temporais. Nesse caso, o pixel $x(i)$ da imagem será associada a um quantil

q_i representativo de um vértice das redes complexas. Além disso, um mapeamento alternativo de sinal, inspirado no mapeamento em grafos de quantis, denominado mapeamento em *bins*, será testado e que, junto ao mapeamento em GQs, poderá proporcionar redes complexas a partir de imagens ultrassonográficas com o potencial de agregar uma nova perspectiva de classificação no campo da visão computacional.

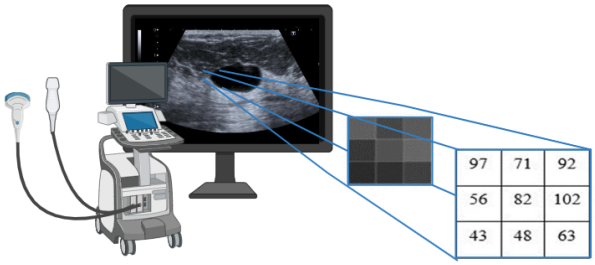


Figura 11 – Ilustração matricial de uma imagem de ultrassom de mama. Fonte: autoria própria.

1.4 Objetivos

O presente trabalho teve como objetivos:

- Aplicar o mapeamento em grafos de quantis e o mapeamento em grafos de *bins* nas imagens ultrassonográficas de mama;
- Explorar medidas estruturais e dinâmicas das redes complexas geradas que sejam potenciais preditores de malignidade nos exames de US;
- Utilizar diferentes métodos de aprendizado de máquina e comparar seu desempenho com base nos mesmos caracterizadores estruturais;
- Avaliar o impacto do parâmetro r nos caracterizadores globais extraídos por meio dos mapeamentos propostos;
- Realizar uma análise de sensibilidade dos parâmetros do mapeamento adotado;
- Realizar uma análise de estabilidade no desempenho da metodologia frente a ruídos artificiais inseridos nas imagens.

2 Metodologia

A metodologia empregada neste estudo foi estruturada com base em três etapas principais frequentemente abordadas em trabalhos na área de aprendizagem de máquina, sendo elas: pré-processamento das imagens, seleção dos caracterizadores para classificação e avaliação do desempenho dos classificadores após simulações (*benchmark*). O fluxograma apresentado na Figura 12 resume todas as etapas envolvidas neste estudo, desde a organização das imagens até a avaliação dos classificadores e as melhores combinações de parâmetros do mapeamento das imagens em redes complexas.

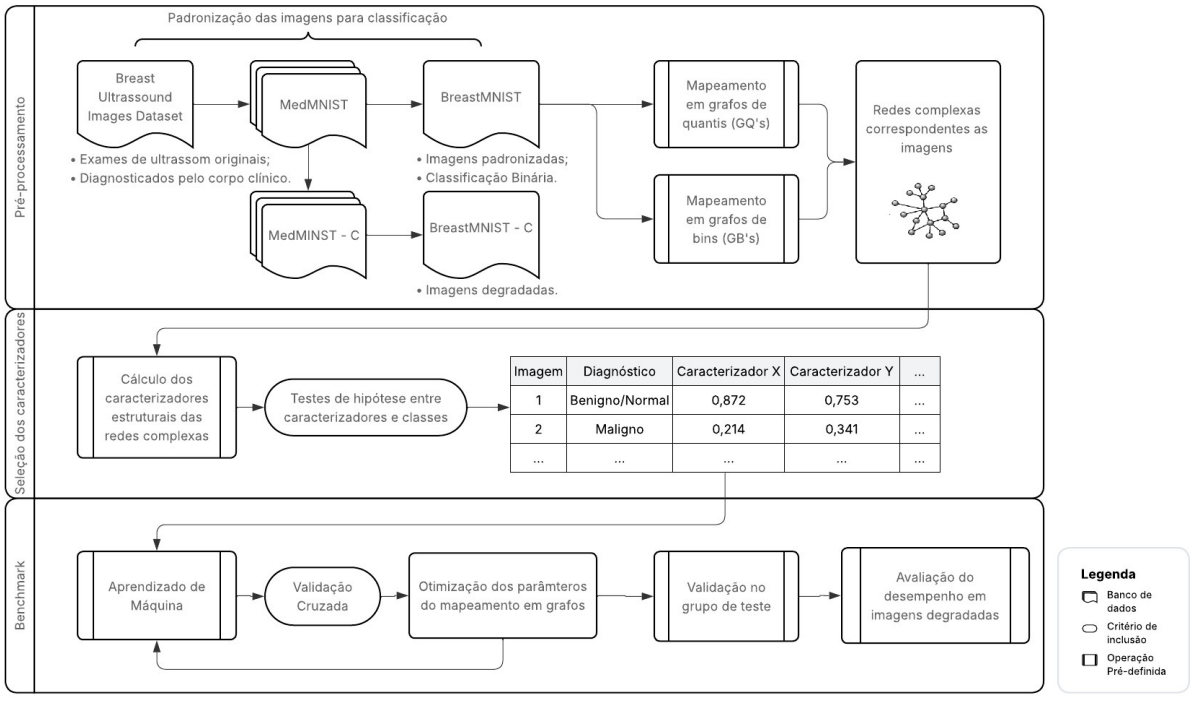


Figura 12 – Fluxograma das etapas metodológicas utilizadas neste estudo. Fonte: próprio autor.

Na etapa de pré-processamento, o conjunto de imagens de ultrassonografia de mamas denominado *Breast Ultrassound Images Dataset* (*BUSI*), composto por exames previamente diagnosticados por profissionais da área, foi utilizado para a criação de outros bancos de dados cujo objetivo era a padronização desses exames para a utilização em estudos sobre métodos de aprendizado de máquina. Os bancos de dados derivados do *BUSI*, sendo eles o *BreastMNIST* e o *BreastMNIST - C*, foram utilizados em diferentes etapas deste estudo. O banco de dados

BreastMNIST foi utilizado para aplicação do mapeamento em grafos, que proporcionaram redes complexas associadas às imagens dos exames, enquanto o banco de dados *BreastMNIST - C* foi utilizado para avaliar a robustez dos métodos classificadores frente a imagens ruidosas. A organização das imagens e o objetivo de cada banco de dados neste estudo estão descritos no capítulo 2.1 e a metodologia utilizada para o mapeamento das imagens radiológicas em redes complexas está descrita no capítulo 2.2.

A partir das redes complexas geradas na etapa de pré-processamento, diversos caracterizadores estruturais dessas redes foram calculados, conforme descrito na seção 2.4, avaliados e selecionados com base em testes estatísticos, conforme descrito na seção 2.5. Esses caracterizadores, juntamente com o diagnóstico do corpo clínico, constituíram o conjunto de dados propostos para a classificação dos exames.

Na etapa de *benchmark*, os caracterizadores selecionados foram utilizados como dados de entrada para algoritmos de aprendizado de máquina desenvolvidos para a classificação das imagens. Durante o treinamento do modelo, a técnica de validação cruzada foi empregada para estimar o desempenho dos classificadores e evitar o sobreajuste aos dados.

Além disso, diferentes combinações de parâmetros do mapeamento em grafos, como quantidade de vértices da rede e raio máximo de mapeamento da imagem, foram testadas para avaliar a sensibilidade do modelo, ou seja, a susceptibilidade do desempenho dos classificadores à escolha dos parâmetros utilizados no mapeamento.

Após a definição da melhor configuração de parâmetros do mapeamento, os modelos foram avaliados em um conjunto de teste independente, permitindo mensurar sua capacidade de generalização. Por fim, o desempenho obtido com imagens padronizadas foi comparado ao desempenho em imagens degradadas, possibilitando analisar a robustez da metodologia diante de diferentes condições de qualidade das imagens e a estabilidade do desempenho do classificador proposto.

2.1 Base de Dados

Neste trabalho, imagens de ultrassonografia de mama foram utilizadas para a investigação de possíveis descritores do câncer de mama presentes em suas redes complexas associadas. Três bancos de dados, que continham as mesmas imagens dos mesmos pacientes, foram utilizados em diferentes etapas desse estudo, explorando particularidades de cada um desses bancos de dados, sendo eles nomeados:

1. BUSI (*Breast Ultrasound Images Dataset*);
2. BreastMNIST;
3. MedMNIST-C.

2.1.1 BUSI (*Breast Ultrasound Images Dataset*)

O banco de dados BUSI foi um dos primeiros bancos de dados de livre acesso a propor a utilização de imagens de ultrassonografia para tarefas de classificação. Para composição desse banco de dados, exames de ultrassonografia de mama, de mulheres entre 25 e 75 anos, realizados ao longo do ano de 2018, por meio dos aparelhos Logic E9 e Logic Agile, no hospital de Baheya foram salvos, totalizando 780 imagens. Os dados foram coletados, pré-processados, organizados e rotulados, conforme Figura 13, pelo corpo clínico do Hospital e foram disponibilizados publicamente em 2020 (Al-Dhabyani et al., 2020).

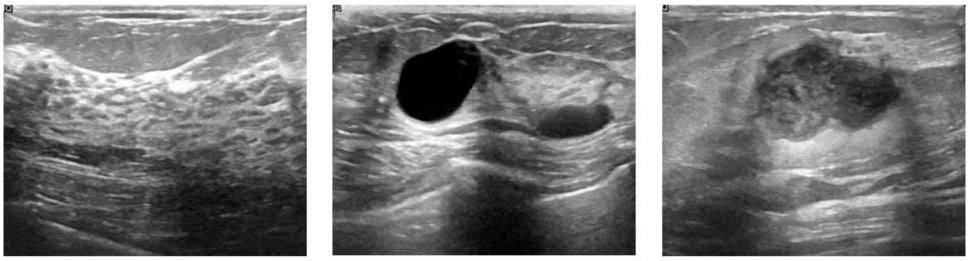


Figura 13 – Exemplo de imagens rotuladas no banco de dados. Fonte: imagem adaptada de (Al-Dhabyani et al., 2020).

Nesse banco de dados, além das imagens classificadas pelo corpo clínico em lesões benignas, malignas e exames normais, com aproximadamente 56,1%, 27% e 16,9% imagens de cada classe respectivamente, há também a máscara de cada imagem, ou seja, o delineamento dos achados radiológicos encontrados pelo corpo clínico. Essas máscaras possibilitaram a visualização das estruturas encontradas, demonstrando a heterogeneidade do banco de dados e dos achados radiológicos, que variam em tamanho e forma, conforme ilustrado na Figura 14. Entretanto, uma particularidade desse banco de dados é que as imagens e máscaras ofertadas possuem diferentes dimensões, pixels não normalizados e anotações radiológicas contidas nas imagens.

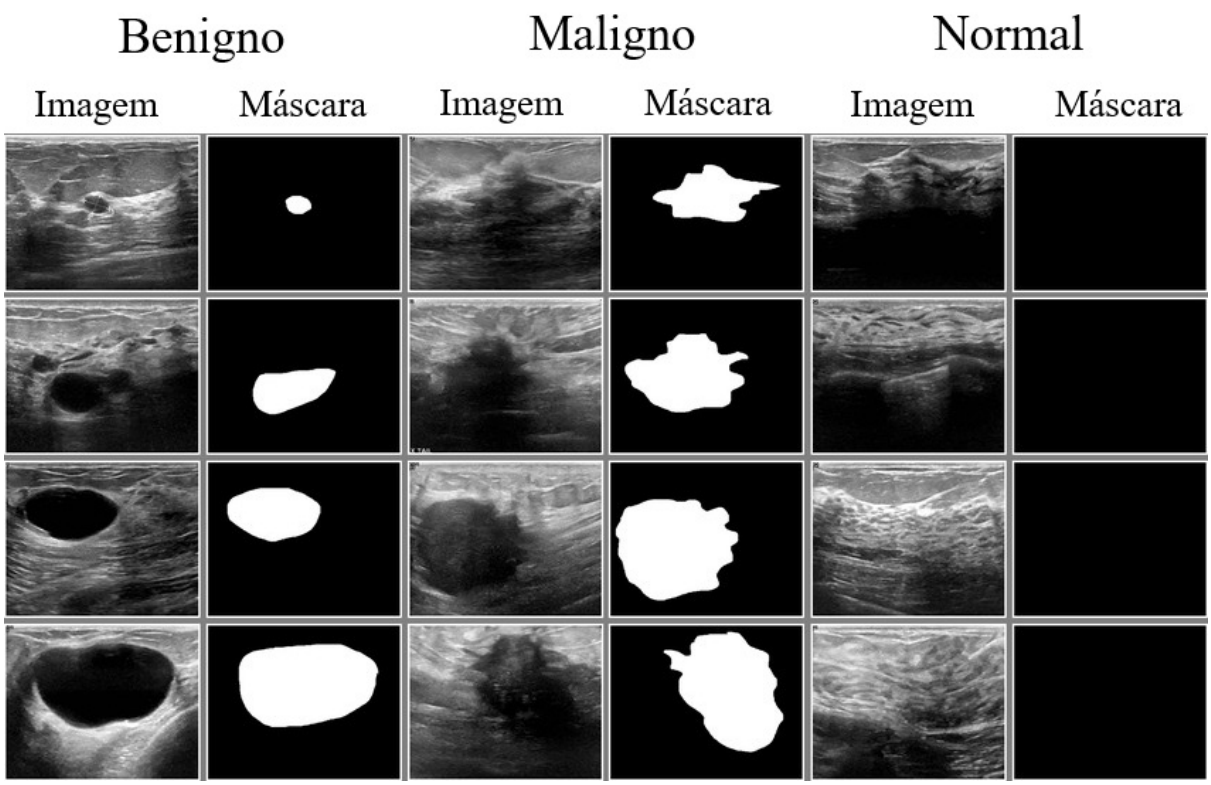


Figura 14 – Exemplos de imagens de ultrassom de câncer de mama presentes no banco de dados BUSI, incluindo casos benignos, malignos e normais, juntamente com suas máscaras. Fonte: imagem adaptada de (Hekal et al., 2024).

2.1.2 BreastMNIST

Em 2023, o banco de dados BUSI foi agregado a uma base de dados maior, proposta e padronizada pela comunidade científica para o desenvolvimento de métodos computacionais aplicados à resolução de diferentes desafios biomédicos. Essa base de dados, conhecida como "MedMNIST" tem sido amplamente utilizada na validação de modelos matemáticos e computacionais devido a sua diversidade de modalidades médicas e parâmetros nas imagens que compõe a base de dados, demonstrado na Figura 15, variando em resolução, quantidade de imagens, padrão de cores, dimensões das imagens e tipos de modalidades diagnósticas (Yang et al., 2023).

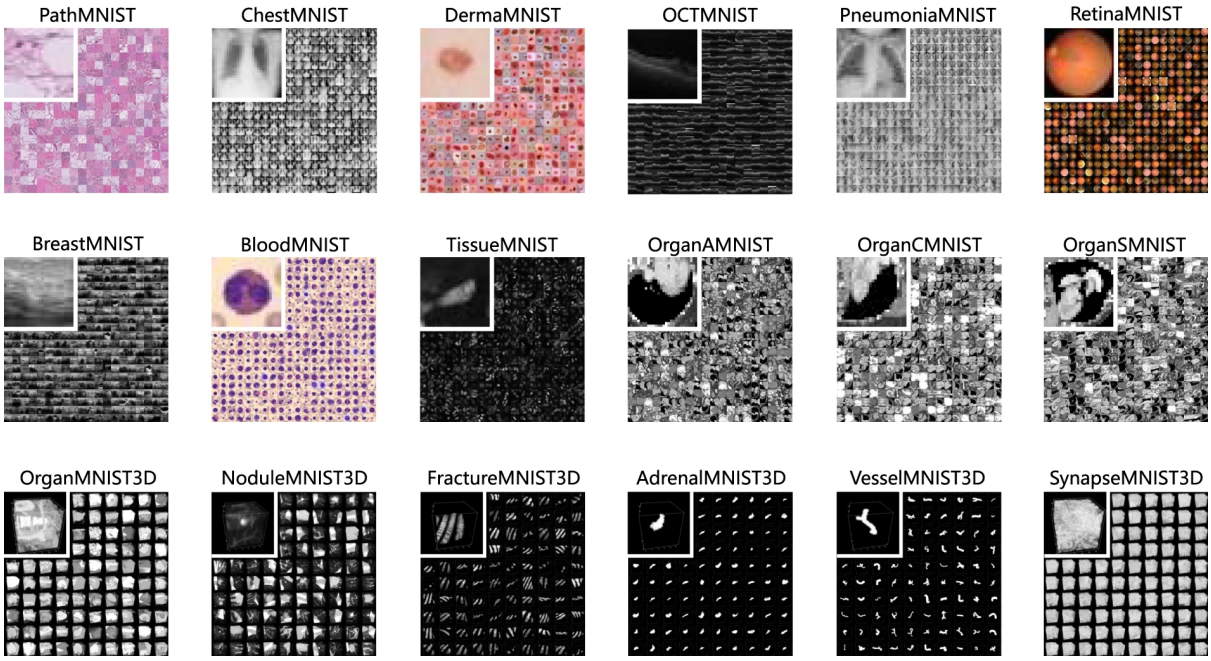


Figura 15 – Dados em larga escala, no estilo MNIST, de imagens biomédicas padronizadas em 2D e 3D com rótulos de classificação. Fonte: (Yang et al., 2023).

Em nosso estudo, optamos por utilizar as imagens provenientes do subgrupo BreastMNIST, presente no banco de dados MedMNIST devido a sua padronização na resolução da imagem e distribuição em classes para o uso de métodos de aprendizado de máquina, com o intuito de facilitar a posterior comparação com outros trabalhos encontrados na literatura e validar a metodologia adotada. As imagens padronizadas nesse banco de dados foram disponibilizadas para uso em quatro tamanhos distintos (28x28, 64x64, 128x128, 224x224 pixels), rotuladas para um problema de classificação binária, tal que o grupo anteriormente distinto no banco de dados BUSI, denominados normal e benigno foram fundidos para serem diferenciados das imagens malignas, e separadas em grupo de treino, validação e teste, distribuídas conforme Tabela 1.

Tabela 1 – Quantidade de imagens disponíveis na base de dados.

Grupos	**Maligno (0)**	**Benigno/Normal (1)**	**Total**
Treino	147	399	546 (70%)
Teste	21	57	78 (10%)
Validação final	42	114	156 (20%)
	210 (27%)	**570 (73%)**	**780**

A distribuição de dados em grupos de treino, teste e validação segue uma conduta de boas práticas adotadas pela comunidade científica e estabelece uma função para cada grupo dentro do aprendizado de máquina. O grupo de treino é empregado na investigação dos melhores parâmetros e associações extraídas dos caracterizadores (preditores) para a distinção entre as

classes objetivadas, no caso, maligno ou benigno/normal. O grupo de teste é utilizado para estabelecer o melhor conjunto de parâmetros e limiar de classificação entre os modelos propostos, visando otimizar a diferenciação entre as classes. Enquanto que o grupo de validação final é adotado para comprovar a eficiência do modelo proposto, a partir de dados independentes, que não foram utilizados em nenhuma das etapas anteriores, utilizado para avaliar a capacidade efetiva de classificação, ausente de viés.

2.1.3 MedMNIST-C

O banco de dados MedMNIST-C é um banco de dados, baseado no MedMNIST, que contém as mesmas imagens dos bancos anteriores com adição de diferentes ruídos e corrupções nas imagens (Salvo; Doerrich; Ledig, 2024). O MedMNIST-C foi proposto para avaliar a robustez dos modelos a corrupções visuais sintéticas, mantendo inalterados os rótulos originais e a distribuição dos dados do BreastMNIST. Dessa forma, com base no desempenho dos modelos propostos, esse banco de dados possibilita analisar o impacto que diferentes tipos de ruídos podem causar na capacidade de diferenciação dos modelos propostos em nosso estudo.

Esse banco de dados contém as mesmas 780 imagens em escala de cinza, com resolução de 224x224 pixels, incluindo os rótulos de classificação entre imagens malignas e benignas/normais, com sete tipos de ruídos artificiais distintos sobre a mesma imagem, conforme apresentado na Figura 16, sendo eles: aumento de brilho, redução do brilho, redução de contraste, adição de ruído granular, pixelização, desfoque de movimento e compressão JPEG.

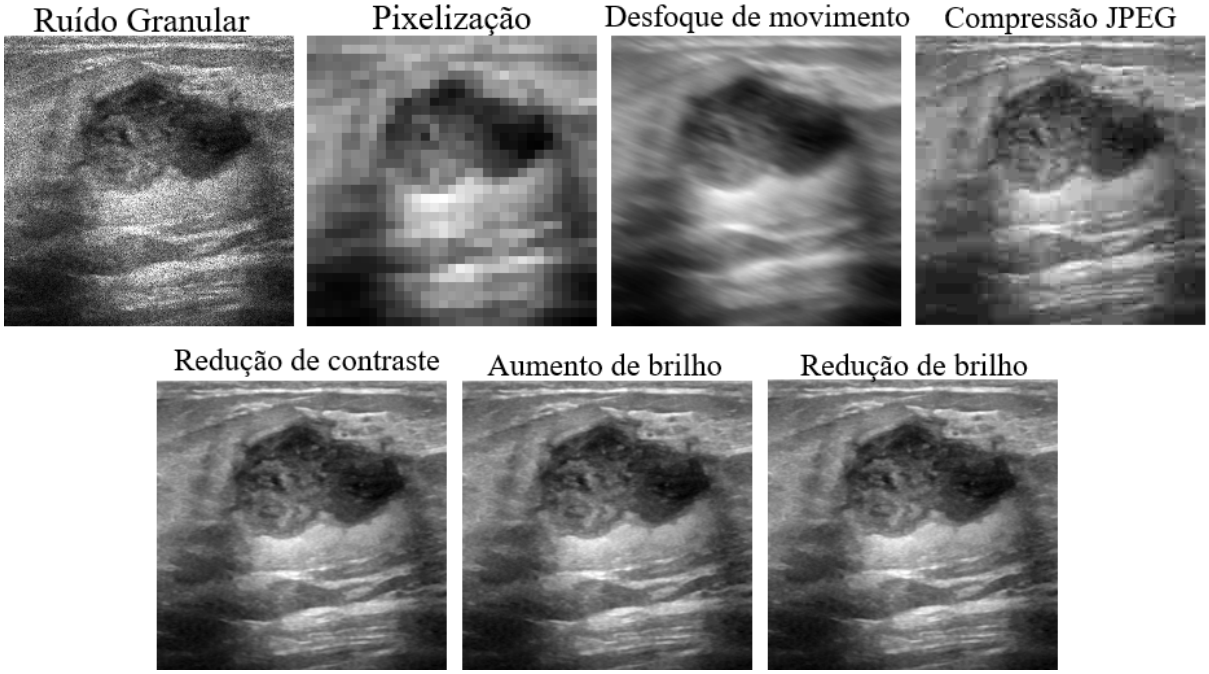


Figura 16 – Imagem representativa da classe maligna sob adição de diferentes tipos de ruídos presentes no banco de dados. Fonte: autoria própria.

2.2 Mapeamento da imagem em grafos

2.2.1 Grafos de Quantis (GQs)

Inicialmente proposto para a análise de séries temporais, o mapeamento em grafos de quantis é um método matemático/computacional que visa a redução de dimensionalidade e complexidade do problema computacional a um grafo, capaz de sintetizar com robustez as propriedades estruturais e dinâmicas da série. Neste trabalho, foi explorada a expansão do método para aplicação em imagens, proposto por (Vicchietti, 2025).

O mapeamento em grafos de quantis de imagens bidimensionais em escala de cinza consiste basicamente no referenciamento de cada pixel da imagem a um vértice da rede complexa correspondente a seu quantil, calculado a partir da distribuição desses pixels na imagem. A partir dessa correspondência, a vizinhança do pixel é mapeada, de maneira que, para cada pixel vizinho observado, uma aresta de conexão entre vértices é contabilizada, conforme Figura 17. Esse processo é realizado para cada pixel, realizando uma varredura em toda a imagem (Vicchietti; Ramos; Campanharo, 2025).



(a) Imagem de entrada em escala de cinza.

(b) Identificação dos quantis.

(c) Grafo resultante para $r = 1$.

Figura 17 – Ilustração da metodologia proposta para mapear uma imagem aleatória com 6×6 pixels em GQs com 7 vértices. Fonte: (Vicchietti, 2025).

A construção dessas redes complexas está intrinsecamente ligadas à parâmetros previamente selecionados referentes à distribuição dos dados. O número de vértices da rede depende da quantidade de Quantis (Q) em que a imagem será discretizada e a intensidade de uma aresta que conecta dois vértices é proporcional ao número de vezes que eles se conectam na imagem. Inspirado por (Morris; Langari, 2011), o número de quantis padronizado para aplicação do método em séries temporais seria dado por $Q \approx 2\sqrt[3]{T^2}$ (Lohaka, 2007), onde T o número de pontos da série e que, adaptando para imagens, a relação pode ser expressa por $Q \approx 2\sqrt[3]{L_1 L_2}$ onde L_1 e L_2 são as dimensões da imagem. Para aplicação em uma imagem de US de 28x28 pixels, por exemplo, a rede resultante terá 18 vértices, conforme Figura 18.

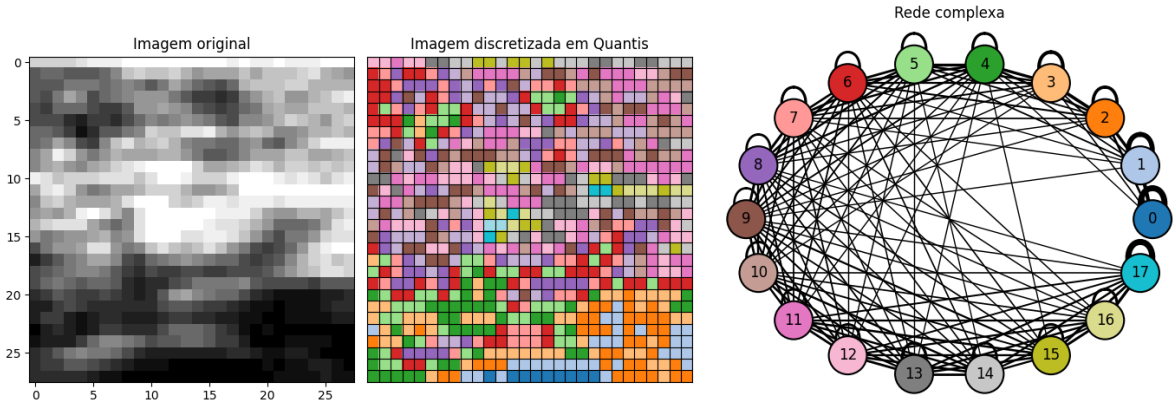


Figura 18 – Ilustração do mapeamento em GQs em uma imagem de US de 28x28 pixels. Fonte: autoria própria.

2.2.2 Grafos de Bins (GBs)

Nesse estudo, uma alternativa ao método do mapeamento de imagens em grafos de quantis será avaliada, denominada mapeamento em grafos de *bins*, com o intuito de comparar as duas metodologias e o comportamento dos seus caracterizadores frente ao problema de classificação.

O mapeamento em GQs discretiza os pixels da imagem com base nos quantis dos seus valores presentes no histograma da imagem. Por princípio, no mapeamento em GQs, um pixel $x(i, j)$ pode estar associado ora a um vértice A, B ou C dependendo da distribuição dos valores dos pixels da imagem. O mapeamento em grafos de *bins* proposto, visa contornar essa particularidade estabelecendo intervalos fixos de valores para associação aos vértices.

Considerando que as imagens dos bancos de dados utilizados possuem valores finitos possíveis de pixels, normalizados entre -1 (pixel com intensidade mínima) e 1 (pixel com intensidade máxima), são estabelecidos intervalos fixos de intensidade de valores de pixels, denominados *bins*, para cada vértice da rede gerada. Diferentemente da discretização por quantis, a discretização por *bins* não exige que cada *bin* contenha a mesma quantidade de pixels, permitindo que um único *bin* reúna apenas pixels associados a um determinado intervalo. Essa propriedade é particularmente interessante sob a perspectiva de reprodutibilidade da distribuição de pixels presentes nas imagens.

Na prática, a discretização do pixel em quantil ou em *bin* assemelha-se a um filtro de imagem (Figura 19) e proporciona redes complexas majoritariamente conectadas, possibilitando o cálculo de caracterizadores estruturais específicos, importantes para a classificação das imagens em estudo.

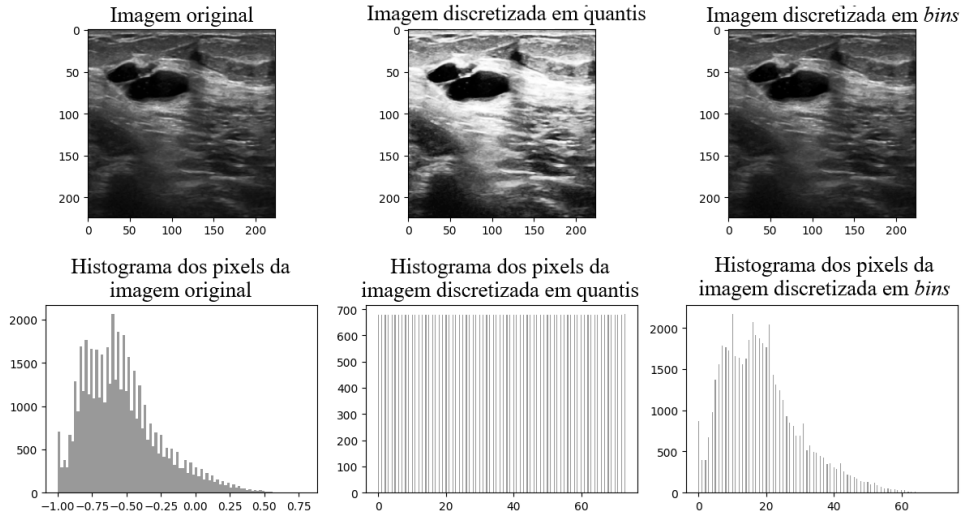


Figura 19 – Distribuição dos valores dos pixels em uma imagem 224x224 pixels, antes e depois da discretização. Fonte: autoria própria.

2.3 Incremento de dados

O incremento de dados é uma técnica amplamente utilizada para mitigar uma dificuldade recorrente em tarefas de aprendizado de máquina, que é a escassez de dados de qualidade rotulados ou a baixa diversidade do conjunto de treinamento (Kumar et al., 2024). O incremento de dados abrange um conjunto de técnicas que aumentam a quantidade e a qualidade dos conjuntos de dados de treinamento através de algoritmos de aumento de imagens que utilizam transformações geométricas, conforme Figura 20, como inversão e rotação das imagens, alterações na distribuição dos valores dos pixels, como variação do brilho e contraste, adição de ruídos nas imagens e apagamento aleatório de regiões (Shorten; Khoshgoftaar, 2019).

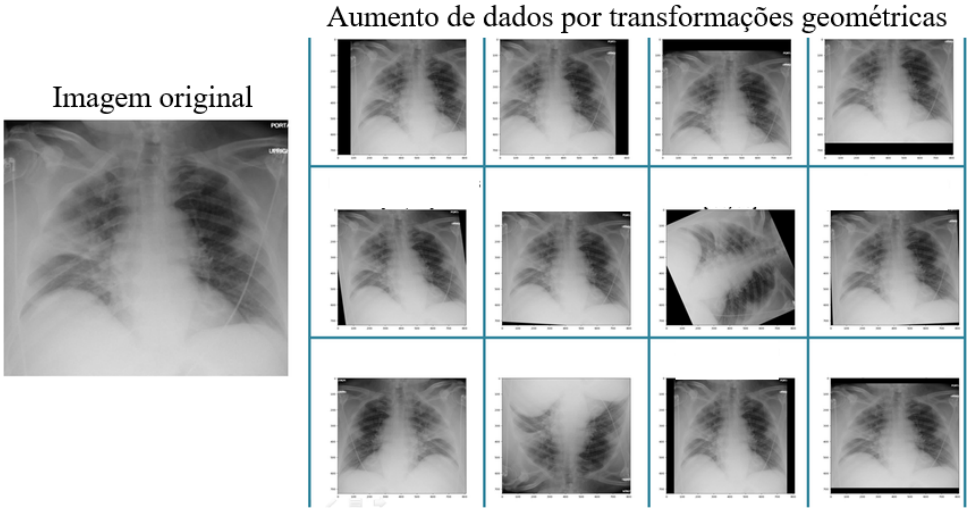
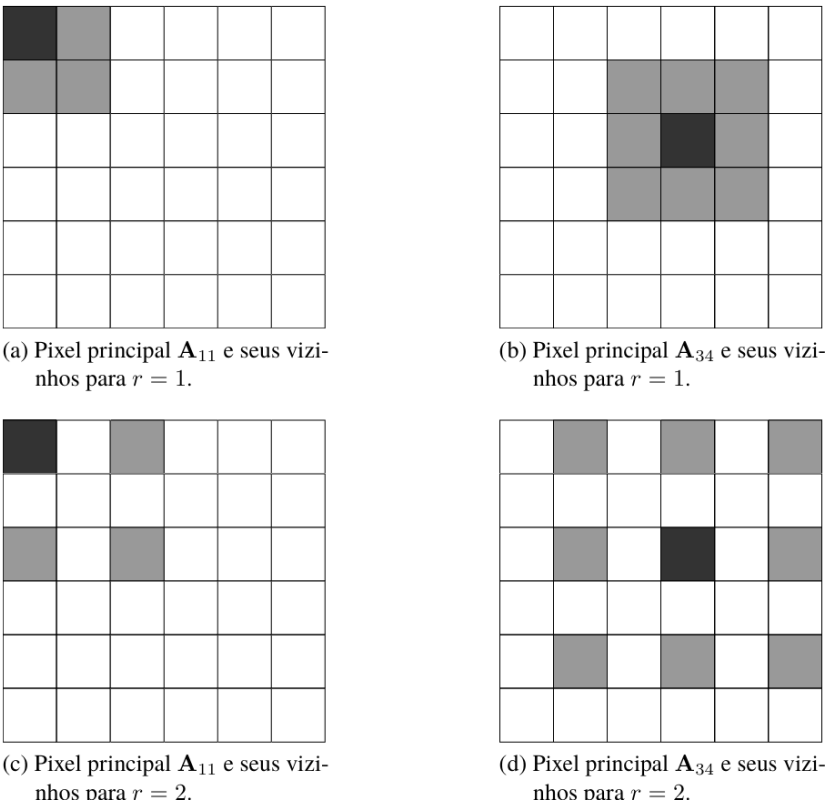


Figura 20 – Exemplo de aumento de dados em imagem radiológica. Fonte: imagem adaptada de (Elgendi et al., 2021).

Entretanto, para a metodologia empregada nesse estudo, as alterações geométricas fre-

quentemente utilizadas na área (Yang et al., 2022), podem não ser muito efetivas na geração das redes complexas proporcionadas pelo mapeamento utilizadas para a classificação. Como o mapeamento da imagem em grafo explora a relação entre um pixel principal e seus oito vizinhos imediatos, para todos os pixels da imagem, a inversão completa da imagem, por exemplo, irá proporcionar exatamente a mesma rede complexa proveniente da imagem original, assim como, de maneira análoga, o deslocamento e rotação podem gerar redes muito similares, favorecendo o potencial surgimento de viés de treinamento (Alomar; Aysel; Cai, 2023). Da mesma forma, técnicas de aumento de dados que exploram alterações sutis na distribuição dos valores de pixels, como a variação de brilho e contraste na imagem, podem ser pouco expressivas na alteração da dinâmica das redes geradas, principalmente pelo mapeamento em grafos de quantis, tendo em vista que a discretização da imagem em quantis preserva significativamente o brilho e realça o contraste das imagens como nas imagens originais (Tiwari; Gupta; Shrivastava, 2015).

Com o intuito de se extrair propriedades espaciais e dinâmicas dos pixels, contornar a problemática envolvendo a baixa quantidade de amostras de imagens ultrassonográficas e a baixa diferenciação das redes geradas pelos métodos tradicionais de aumento de dados, foi proposta a variação do raio durante o mapeamento da imagem, adotando-se a vizinhança de Moore (Figura 21). Neste trabalho, consideramos arbitrariamente a variação do raio r conforme a dimensão LxL da imagem utilizada, variando de 1 até $R_{máx}$, sendo $R_{máx} \approx \frac{1}{8}L$.



(a) Pixel principal $\mathbf{A}_{11}$ e seus vizinhos para $r = 1$.

(b) Pixel principal $\mathbf{A}_{34}$ e seus vizinhos para $r = 1$.

(c) Pixel principal $\mathbf{A}_{11}$ e seus vizinhos para $r = 2$.

(d) Pixel principal $\mathbf{A}_{34}$ e seus vizinhos para $r = 2$.

Figura 21 – Ilustração da identificação dos vizinhos dos pixels usando a vizinhança de Moore com raio r para uma imagem de entrada com 6×6 pixels. Os quadrados em cinza escuro representam os pixels principais, enquanto os em cinza claro representam os seus respectivos vizinhos. Fonte: (Vicchietti, 2025).

Ao final desse processo, para cada imagem mapeada, haverá R redes complexas associadas, uma de cada raio distinto. Nessas redes, os pesos de cada aresta, que conecta os vértices v_i e v_j corresponde ao número de vezes que o quantil q_i foi identificado como vizinho do quantil q_j na imagem mapeada. Ou seja, a partir de uma imagem, podemos extrair $R_{máx}$ redes complexas, conforme demonstrado na Figura 22. Esse processo garante uma varredura ampla de toda a imagem, de tal forma que as relações espaciais e a dinâmica de transição entre seus valores sejam capturadas na estrutura de conexões das redes resultantes e contribui para a extração de mais recursos das imagens, por meio das redes complexas, para aplicação desses preditores durante a classificação das imagens.

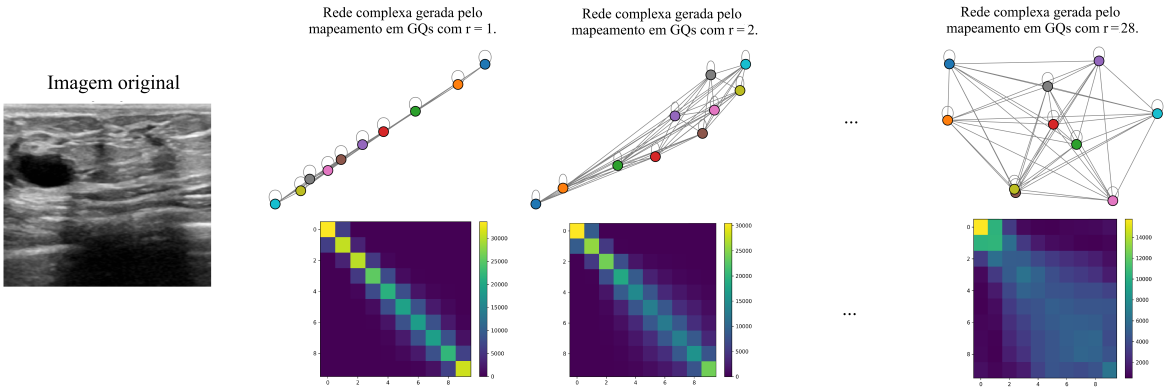


Figura 22 – Ilustração das redes complexas geradas e suas respectivas matrizes de adjacência por meio da variação do raio adotado para a vizinhança de Moore durante o mapeamento de uma imagem em GQs. Fonte: autoria própria.

2.4 Caracterizadores Estruturais

Redes complexas podem apresentar diferentes formatos dependendo de sua estrutura e dinâmica, cujas ligações podem fornecer informações importantes sobre o sistema modelado. Para a extração dessas informações, faz-se o uso de diversos caracterizadores estruturais, tais como, o comprimento do menor caminho, o coeficiente de agrupamento, grau de conectividade, entre outros. Caracterizadores estruturais são, portanto, um recurso essencial no estudo das redes complexas, responsáveis por representar, caracterizar, classificar e modelar diversos problemas (Carneiro; Gama; Ribeiro, 2021).

A classificação de redes pode ser realizada agrupando-se caracterizadores cujas medidas apresentem valores estatisticamente semelhantes em uma mesma classe e, portanto, a escolha das medidas utilizadas é um aspecto fundamental nesse processo, uma vez que o uso de um conjunto reduzido de métricas, ou a inclusão de medidas redundantes, pode levar a classificações equivocadas (Costa et al., 2007).

Neste trabalho, seis medidas estruturais globais de redes foram exploradas, sendo elas o grau de conectividade média, o coeficiente de agrupamento médio, o índice Estrada, o comprimento do salto médio, a energia do grafo e a centralidade laplaciana (Carneiro; Gama; Ribeiro,

2021). Esses caracterizadores, descritos a seguir, foram selecionados devido ao seu desempenho em outros trabalhos da literatura na classificação de redes com peso e ao custo computacional (Pineda et al., 2023). Além das medidas globais proporcionadas por esses caracterizadores, neste trabalho também foram utilizadas as medidas estruturais locais dos vértices. As medidas globais referem-se a medidas extraídas sobre a dinâmica da rede como um todo, enquanto que as medidas estruturais locais referem-se a medidas extraídas sobre a dinâmica de cada vértice pertencente à rede, tal diferenciação foi ilustrada em um caso hipotético na seção 2.4.1.

2.4.1 Grau de conectividade média

O grau de conectividade média de uma rede corresponde à média do número de arestas incidentes sobre os vértices que a compõem, sendo definido por:

$$\langle k \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i} k_i = \frac{1}{N} \sum_{i,j} a_{ij}, \tag{2.1}$$

em que N representa o número total de vértices da rede, k_i o grau do vértice i e a_{ij} os elementos da matriz de adjacência sem peso (Silva; Zhao, 2012) (Cupertino et al., 2018).

Para redes ponderadas, cada elemento w_{ij} da matriz de adjacência representa o peso da aresta entre os vértices i e j. Visando a consideração apenas das conexões de um vértice, sem levar em conta os pesos, uma matriz binária $A = [a_{ij}]$ é utilizada de tal forma que:

$$a_{ij} = \begin{cases} 1, & \text{se } w_{ij} > 0, \\ 0, & \text{caso contrário.} \end{cases} \tag{2.2}$$

Dada uma rede simétrica ponderada hipotética, ilustrada na Figura 23, o grau de conectividade de cada vértice pode ser mensurado a partir da relação entre quantidade de conexões presentes no vértice de interesse e a quantidade de vértices presentes na rede desconsiderando o vértice de interesse. Por exemplo, o vértice A possui uma conexão com o vértice D e, na rede, há outros 3 vértices além do vértice A, logo seu grau de conectividade é $\frac{1}{3}$. O mesmo raciocínio se estende para os demais vértices B, C e D, cujos valores são, respectivamente, $\frac{2}{3}$, $\frac{2}{3}$ e 1, compondo o conjunto de caracterizadores locais da rede, enquanto que o caracterizador global "grau de conectividade média" da rede é $\frac{2}{3}$.

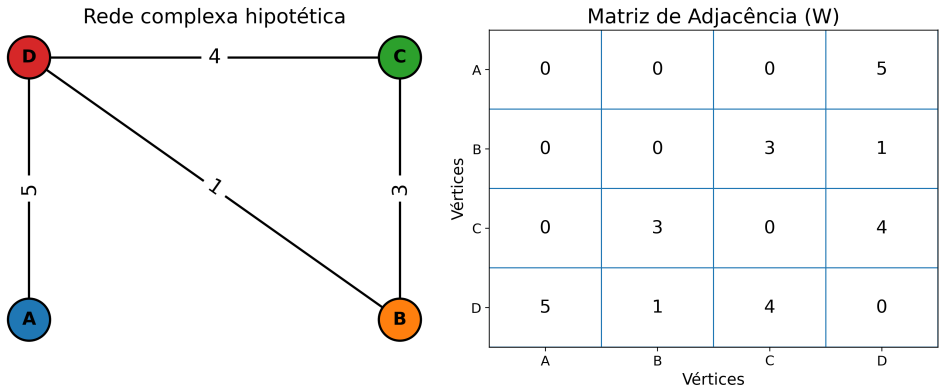


Figura 23 – Rede complexa hipotética. Fonte: autoria própria.

2.4.2 Coeficiente de Agrupamento

O coeficiente de agrupamento (C^w) é uma medida global da rede calculada a partir da média dos coeficientes locais de agrupamento de cada vértice. Representa uma tendência de conexão entre os vértices da rede, quantificando os triângulos (vizinhos de um mesmo vértice) de interação existente nas redes frente a todos que poderiam ser formados (Kaiser, 2008).

Para uma rede ponderada, o coeficiente de agrupamento de um vértice pode ser mensurado por:

$$c_i^w = \frac{1}{k_i(k_i-1)} \sum_{j,k} \left(\hat{w}_{ij}\, \hat{w}_{ik}\, \hat{w}_{jk}\right)^{1/3} , \tag{2.3}$$

tal que k_i é o grau (número de vizinhos) do vértice i, w_{ij} é o peso da aresta entre os vértices i e j e $\hat{w}_{ij} = \dfrac{w_{ij}}{\max(w)}$ é o peso normalizado pela maior aresta da rede.

O coeficiente de agrupamento médio pode ser expresso por:

$$C^w = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} c_i^w , \tag{2.4}$$

sendo N é o número total de vértices na rede (Saramäki et al., 2007).

Considerando que a rede hipotética ilustrada na Figura 23 fosse uma rede sem peso em suas arestas, poderíamos dizer que os coeficientes de agrupamento locais dos vértices A, B, C e D seriam respectivamente, 0, 1, 1 e $\frac{1}{3}$. No caso do vértice A, por exemplo, seu coeficiente de agrupamento local é nulo, uma vez que seus vizinhos (exclusivamente o vértice D) não estão conectados entre si. Já no caso dos vértices B e C, seus coeficientes de agrupamento são máximos tendo em vista que todos os seus vizinhos possuem conexão entre si. Enquanto que no vértice D, dentre seus três vizinho, apenas os vértices B e C possuem conexão entre si resultando em um coeficiente de agrupamento local de $\frac{1}{3}$.

De maneira análoga ao cálculo dos coeficientes de agrupamento da rede hipotética sem peso e com base na expressão 2.3, os coeficientes de agrupamento da rede ponderada ilustrada na Figura 23 são, aproximadamente, 0, $0,46$, $0,46$ e $0,15$ para os vértices A, B, C e D, respectivamente.

2.4.3 Índice Estrada

O índice Estrada ($EE(G)$) é uma medida global da rede, proposta originalmente para a caracterização de proteínas, capaz de sintetizar informações sobre a distribuição de conectividade e a força de interação entre os vértices da rede (Estrada, 2000). Para a mensuração do caracterizador, os autovalores da matriz de adjacência da rede são utilizados. Computacionalmente, o índice Estrada (Peña; Gutman; Rada, 2007) pode ser calculado por meio da expressão:

$$EE(G) = \sum_{i=1}^{N} e^{\lambda_i} \,, \tag{2.5}$$

tal que λ_i são os autovalores da matriz de adjacência e i representa os vértices da rede complexa.

2.4.4 Comprimento do Salto Médio

O comprimento do salto médio (Δ) é uma medida que mensura a dinâmica da rede, sintetizando a probabilidade de transição e interação entre os vértices.

Para uma rede ponderada, a matriz de transição de Markov (V), que representa a probabilidade de transição entre um vértice i para um j, é dada por:

$$V_{i,j} = \frac{w_{ij}}{\sum_{j=1}^{N} w_{ij}} \tag{2.6}$$

em que w_{ij} representa o peso da aresta que conecta os vértices i e j, e N é a quantidade total de vértices da rede. Essa matriz de transição de Markov por ser empregada para a mensuração do comprimento do salto médio (Campanharo; Doescher; Ramos, 2020), expresso por:

$$\Delta = \frac{tr(PV)^T}{N} \,, \tag{2.7}$$

tal que P é uma matriz expressa por $P_{ij} = |i - j|$ com mesma dimensão de W e N é a quantidade de vértices da rede.

Considerando a rede hipotética ilustrada na Figura 23, a matriz de transição de Markov V e a matriz de probabilidade de transição P são dadas por:

$$V \approx \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0.75 & 0.25 \\ 0 & 0.43 & 0 & 0.57 \\ 0.50 & 0.10 & 0.40 & 0 \end{bmatrix} \qquad P = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 2 & 3 \\ 1 & 0 & 1 & 2 \\ 2 & 1 & 0 & 1 \\ 3 & 2 & 1 & 0 \end{bmatrix}$$

Logo, o comprimento do salto médio para a rede hipotética é de $\Delta = 1,8375$.

2.4.5 Energia do grafo

A energia ($E(G)$) é uma medida espectral do grafo que mensura a complexidade da rede (Balakrishnan, 2004). Para a mensuração desse caracterizador, os autovalores da matriz de adjacência da rede são utilizados.

Semelhante ao índice Estrada, mas com significados distintos, a energia espectral de um grafo pode ser computada a partir da expressão:

$$E(G) = \sum_{i}^{N} |\lambda_i| \,, \tag{2.8}$$

sendo que λ_i são os autovalores da matriz de adjacência e i representa os vértices da rede complexa (Gutman; Li; Zhang, 2009).

Dado a rede complexa hipotética da Figura 23, cuja matriz de adjacência é dada por

$$W = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 5 \\ 0 & 0 & 3 & 1 \\ 0 & 3 & 0 & 4 \\ 5 & 1 & 4 & 0 \end{bmatrix},$$

os autovalores dessa matriz são $\lambda_1 \approx -7,063$,$\lambda_2 \approx 1,943$,$\lambda_3 \approx -6,475$ e $\lambda_4 \approx -2,531$. Logo, a energia do grafo é $E(G) \approx 18,013$.

2.4.6 Centralidade Laplaciana

Na análise de redes complexas, a centralidade dos vértices também é uma questão fundamental de estudo, capaz de sintetizar informações estruturais importantes dos sistemas modelados. Para redes ponderadas, o caracterizador de centralidade laplaciana ganhou destaque devido a sua eficácia em descrever a estrutura, considerando a informação entre vértices vizinhos imediatos e vértices vizinhos de vizinhos, agregando densidade, grau e força de conexão entre os vértices ao caracterizador (Qi et al., 2012).

Matematicamente, a centralidade laplaciana (C_L) de cada vértice (i) pode ser calculada a partir da expressão:

$$C_L(u_i, G) = \frac{(\Delta E)_i}{E_L(G)} = \frac{E_L(G) - E_L(G_i)}{E_L(G)} \,, \tag{2.9}$$

tal que $C_L(u_i, G)$ é a centralidade laplaciana de cada vértice, $E_L(G)$ é a energia laplaciana do grafo com todos os vértices e $E_L(G_i)$ é a energia laplaciana do grafo sem o vértice i.

A energia laplaciana do grafo pode ser mensurada por meio da expressão:

$$E_L(G) = \sum_{i=0}^{n} \lambda_i^2 \,, \tag{2.10}$$

em que λ_i representa os autovalores da matriz laplaciana do grafo.

A matriz laplaciana (Langville; Meyer, 2011), por sua vez, pode ser calculada como:

$$L = D - A\,, \tag{2.11}$$

tal que D é a matriz de graus dos vértices e A é a matriz de adjacência do grafo.

Por fim, a centralidade laplaciana média pode ser obtida através da média entre as centralidades laplacianas dos vértices da rede.

2.5 Métricas de Avaliação

A validação da metodologia empregada neste estudo é um ponto crucial no desenvolvimento de algoritmos mais eficientes e, para isso, métricas de avaliação foram utilizadas tanto para inspeção de potencial preditivo em cada caracterizador calculado quanto para análise dos métodos de aprendizado de máquina na resolução do problema.

Nestas etapas, é de suma importância que os caracterizadores e os modelos sejam validados em um grupo de imagens previamente reservado para essa finalidade (Cortes; Vapnik, 1995). A avaliação em imagens exclusivas, alheias a fase de aprendizado e modelagem dos modelos, reforça a confiabilidade sobre a metodologia adotada, assegurando que não há viés em suas predições (Ludermir, 2021).

Dentre as métricas utilizadas para avaliação dos caracterizadores estruturais calculados, pode-se destacar a AUC-PR (*Area Under Curve - Precision-Recall*) (Khan; Rana, 2019), o teste Qui-quadrado (Pandis, 2016) e o teste F (Tiku, 1971). O desempenho dos modelos de aprendizado de máquina foi analisado por meio das curvas AUC-ROC (*Area Under Curve - Receiver Operator Characteristic*) e AUC-PR (*Area Under Curve - Precision Recall*), precisão global e local e F1-Score (Chicco; Jurman, 2020).

As áreas sob as curvas ROC e PR representam uma relação entre taxas de casos de verdadeiro positivo, verdadeiro negativo, falso positivo e falso negativo para diferentes limiares de classificação, e sintetizam o desempenho geral dos caracterizadores e modelos, tal que valores próximos a 1 indicam excelente desempenho para ambas as áreas (Powers, 2020). A diferença entre as curvas está relacionada aos eixos que as compõe. A curva ROC é expressa através da relação da taxa de verdadeiros positivos e falsos positivos, enquanto que a curva PR expressa a relação entre precisão e sensibilidade.

Ambas as curvas são construídas a partir de métricas derivadas da matriz de confusão proporcionadas pelo classificador, porém cada uma destaca uma particularidade diferente do classificador, conforme ilustrado na Figura 24, e possibilita a mensuração de indicadores de desempenho. A curva PR é especialmente útil para casos em que as amostras de cada classe

estão desbalanceadas (Davis; Goadrich, 2006), como é o caso do banco de dados utilizados nesse estudo que conforme Tabela 1, conta com 27% das imagens representativas do grupo rotulado como maligno e 73% das imagens rotuladas como sendo imagens benignas ou normais.

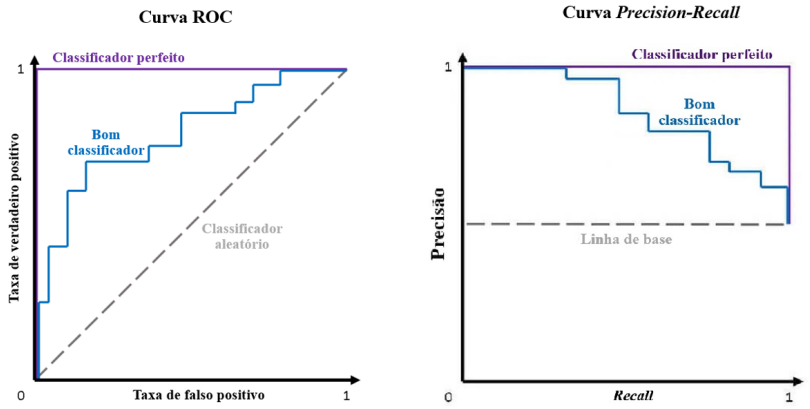


Figura 24 – Ilustração das métricas de avaliação do classificador. Fonte: próprio autor.

Os testes estatísticos Qui-quadrado e F foram utilizados para verificar a hipótese de dependência entre os caracterizadores e as classes rotuladas, e a hipótese de igualdade de médias entre as classes, respectivamente (Dash; Liu, 1997). Esses testes mostraram-se especialmente úteis na etapa de seleção das variáveis que seriam utilizadas no ML, permitindo identificar quais caracterizadores apresentavam maior diferenciação entre as classes (Jović; Brkić; Bogunović, 2015).

As medidas de precisão global e local nas métricas de avaliação representam a proporção de classificações corretas realizadas pelos modelos durante a fase de validação. A precisão global expressa o desempenho geral do modelo, calculado pelo número total de imagens corretamente classificadas, enquanto que a precisão local avalia o desempenho em cada classe. Já o F1-Score é um indicador que combina precisão e sensibilidade de cada classe, sendo extremamente útil sob a perspectiva biomédica, tendo em vista o interesse na identificação de indícios de malignidade nas imagens.

3 Resultados e Discussão

3.1 Seleção dos caracterizadores

A seleção dos caracterizadores que serão utilizados na caracterização das redes complexas geradas, antes de serem utilizados por métodos de aprendizado de máquina, é uma etapa fundamental na modelagem e inferência dos dados em estudo. Para a análise dessas medidas, os testes Qui-quadrado, teste F, área sob a curva *presion-recall* e a inspeção visual dos dados foram utilizados (Bussab; Morettin, 2010).

A análise visual dos boxplots dos caracterizadores mensurados pelo algoritmo, presente no Apêndice 1, fornece um indicativo se os mesmos satisfazem a hipótese de serem potenciais preditores das classes maligna e benigna/normal e se há algum viés na amostragem de imagens para os grupos de treino, teste e validação proposto pelo banco de dados, embora durante o aprendizado de máquina deve ser utilizado apenas o grupo de treino (Wang, 2025). A Figura 25, apresenta os boxplots referentes aos caracterizadores globais proporcionados pelo mapeamento, com raio de vizinhança de Moore equivalente a 1, em GQs (grau de conectividade média, coeficiente de agrupamento médio, centralidade laplaciana média, índice Estrada, energia do grafo e comprimento do salto médio) e a Figura 26 apresenta os mesmos caracterizadores proporcionados pelo mapeamento em GBs com os mesmos parâmetros.

A amostragem realizada no banco de dados BreastMNIST para os grupos de treino, teste e validação, com 70%, 10% e 20% das imagens respectivamente, não possui indícios de viés de seleção, pois as medidas apresentam a mesma dispersão aparente dos dados, evidenciada pelos boxplots, entre os grupos e as classes. Contudo, a dinâmica dos sistemas que elas modelam e representam é distinta, dado a utilização dos valores dos pixels ora discretizado em quantis, ora discretizados em *bins*, afetando consideravelmente a escala e distribuição dos caracterizadores mensurados.

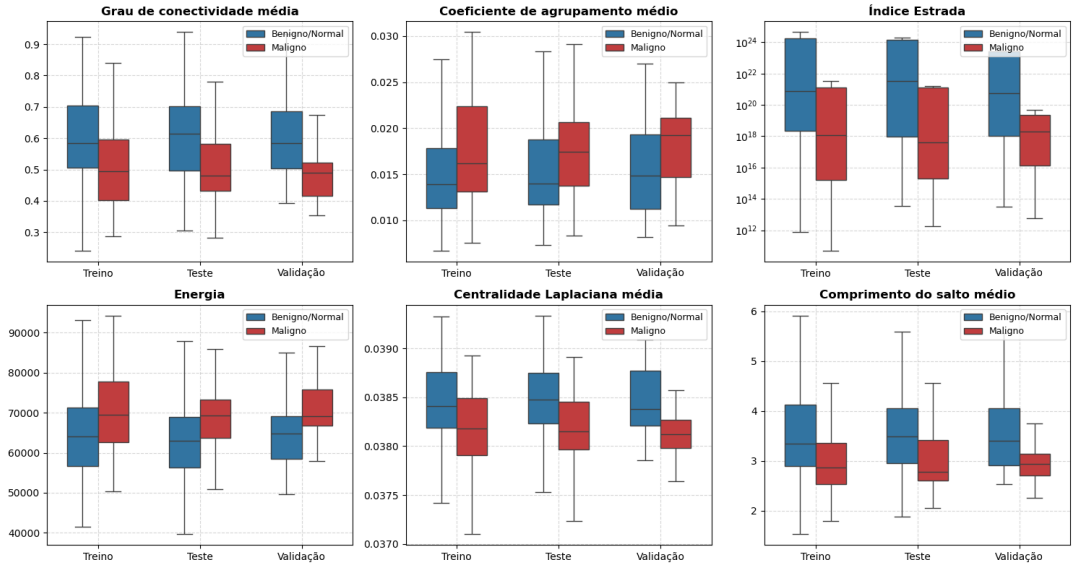


Figura 25 – Caracterizadores globais provenientes do mapeamento em GQs com $r = 1$. Fonte: próprio autor.

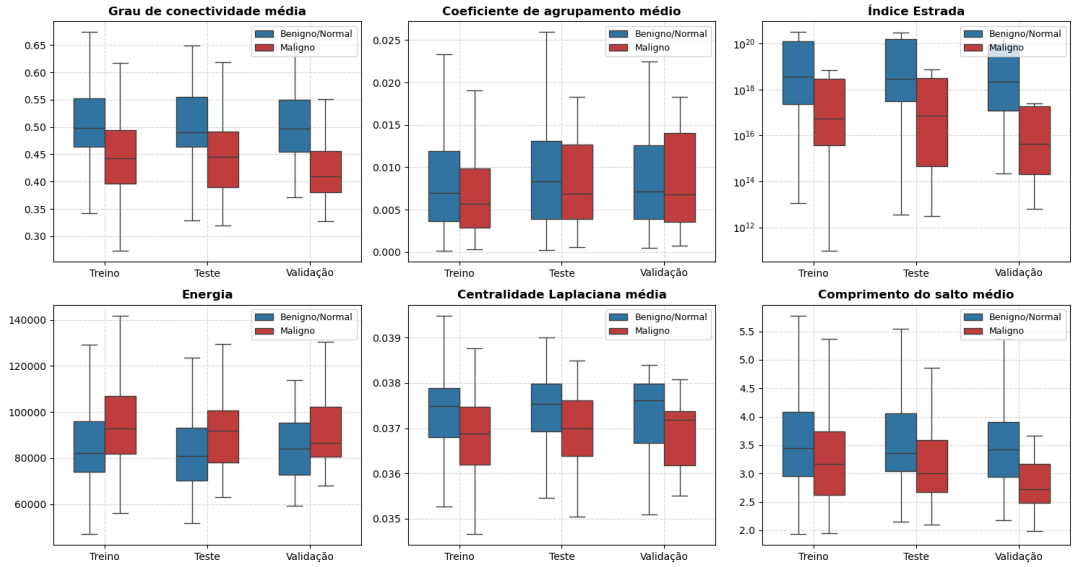


Figura 26 – Caracterizadores globais provenientes do mapeamento em GBs com $r = 1$. Fonte: próprio autor.

Os boxplots são gráficos extremamente úteis para representação da dispersão dos dados e possibilitam uma compreensão visual da concentração dos dados. A análise da dispersão dos caracterizadores é um fator importante na escolha dos caracterizadores que serão utilizados para modelar ou inferir sistemas. A variabilidade dos dados assegura maior reprodutibilidade de desempenho de modelos estatísticos e matemáticos, ampliando capacidade de generalização deles (Pagano; Gauvreau; Mattie, 2022). O intervalo interquartil (distância entre o primeiro e terceiro quartil), por sua vez, é uma métrica útil para inspeção de capacidade de diferenciação entre as classes, sendo desejável que os intervalos interquartis das distintas classes apresentem diferença

entre si, indicando concentração dos dados de cada classes em torno de valores diferentes (Magalhães; Lima, 2002).

De modo geral, os caracterizadores globais de grau de conectividade média, a centralidade laplaciana média, a energia do grafo e o comprimento do salto médio apresentaram potencial aplicabilidade para a distinção das classes devido a boa variabilidade de dados em suas distribuições, evidenciado pela amplitude (altura das hastes) entre os limites inferiores e superiores das caixas, e pela diferença entre os intervalos interquartis das classes, demonstrando distinção da concentração dos dados entre as classes. Em contrapartida, o coeficiente de agrupamento médio não demonstrou o mesmo potencial de desempenho na diferenciação entre as classes para o mapeamento com $r = 1$ devido à grande semelhança na dispersão dos dados entre as classes malignas e benignas/normal, indicando boa variabilidade dos dados, mas baixa diferença do intervalo interquartil entre as classes, especialmente nos grafos de bins, conforme 26. Contudo, o método de mapeamento adotado não afetou expressivamente o comportamento dos caracterizadores globais mensurados, mas nota-se uma menor dispersão dos dados de salto médio dos grafos de quantis do grupo maligno.

Os caracterizadores locais por sua vez, apresentados nas Figuras 27, 28, 29, 30, 31 e 32, referentes ao grau de conectividade média, coeficiente de agrupamento e centralidade laplaciana de cada vértice dos GQs e GBs também apresentaram boa variabilidade e potencial aplicabilidade nos classificadores de aprendizado de máquina e, diferentemente dos caracterizadores globais, apresentaram distintas distribuições dado o método de mapeamento adotado.

As Figuras 27 e 28 demonstram a concentração de dados relacionada ao grau de conectividade de cada vértice. Nelas, é possível observar que os vértices mais extremos, representativos dos menores e maiores quantis ou *bins*, apresentam grau de conectividade inferior ao dos vértices associados aos quantis ou *bins* intermediários. Esse comportamento é esperado, uma vez que, em uma imagem radiológica, é natural que um pixel com valor intermediário na escala de cinza possua, em sua vizinhança, tanto valores superiores quanto inferiores. Em contrapartida, transições abruptas no gradiente de cor entre pixels adjacentes são menos comuns e, dependendo do contexto, podem inclusive ser interpretadas como regiões de artefatos na imagem (Hindi; Peterson; Barr, 2013).

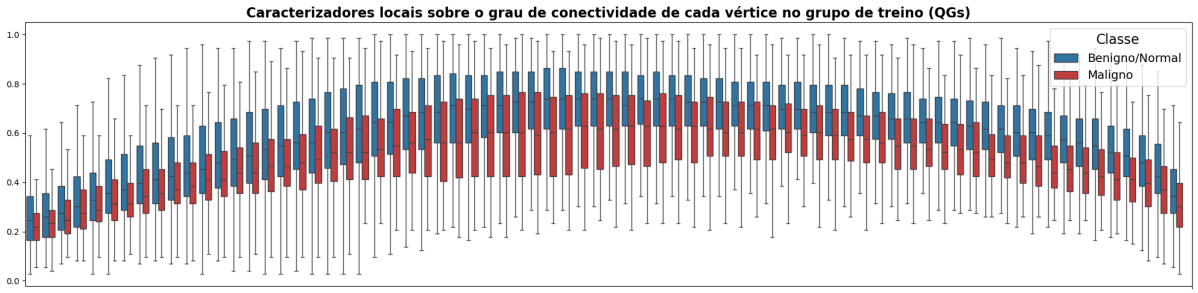


Figura 27 – Caracterizadores locais proporcionados pelo mapeamento em GQs com $r = 1$. Fonte: próprio autor.

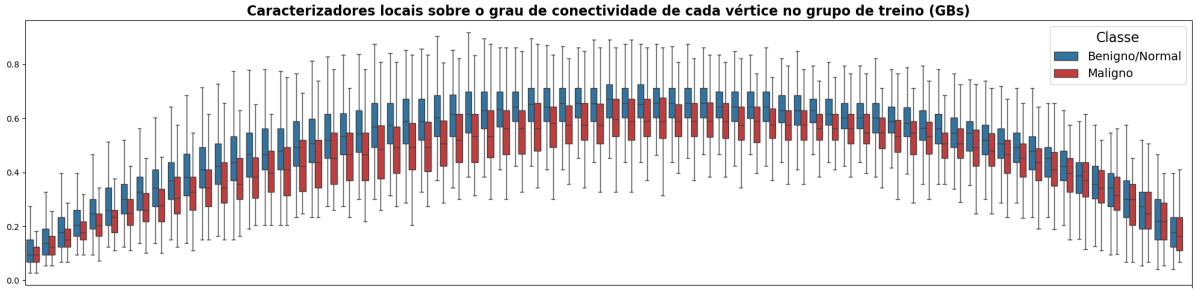


Figura 28 – Caracterizadores locais proporcionados pelo mapeamento em GBs com $r = 1$. Fonte: próprio autor.

As Figuras 29 e 30 ilustram a concentração de dados relacionada ao coeficiente de agrupamento dos vértices. Nota-se que a dispersão dos valores de coeficiente de agrupamento dos vértices é maior nos vértices representativos dos primeiros quantis da imagem e que a diferenciação entre as classes maligna e benigna/normal é mais evidente nos vértices representativos dos quantis intermediários e superiores (Figura 29) e nos vértices representativos dos *bins* intermediários (Figura 30) dado a diferença entre os intervalos interquartis dos boxplots. É evidente também que, para esse caracterizador, o método de mapeamento impactou a distribuição dos dados mensurados em cada vértice demonstrando uma variabilidade maior de dados nos primeiros vértices e uma maior diferenciação entre as classes maligna e benigna/normal nos vértices intermediários dos grafos de *bins* (Figura 30).

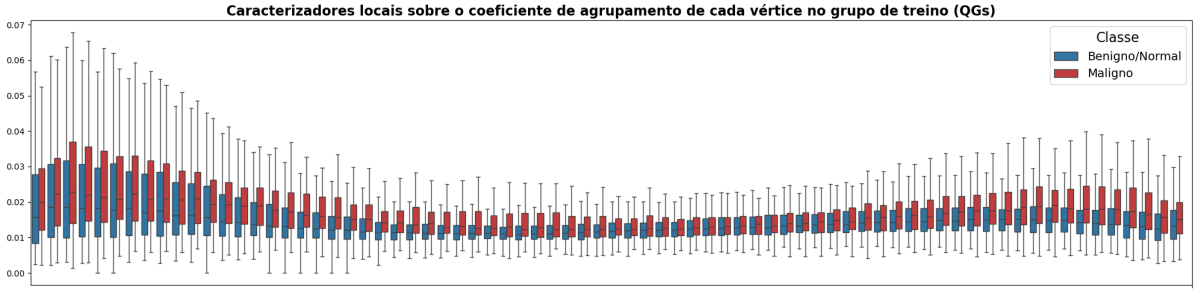


Figura 29 – Caracterizadores locais proporcionados pelo mapeamento em GQs com $r = 1$. Fonte: próprio autor.

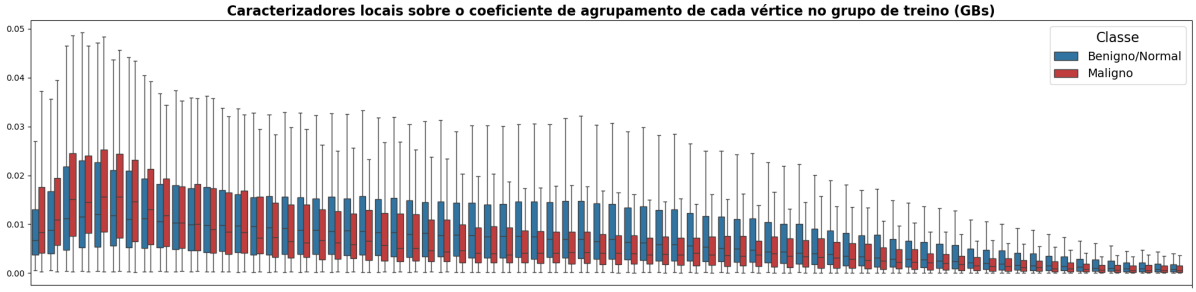


Figura 30 – Caracterizadores locais proporcionados pelo mapeamento em GBs com $r = 1$. Fonte: próprio autor.

As Figuras 31 e 32 apresentam a dispersão dos dados da centralidade laplaciana para cada vértice da rede. Essa medida reflete a importância que o vértice exerce na modelagem da dinâmica da rede com base em como a sua remoção afeta a energia laplaciana de toda a rede (Qi et al., 2012). Para as redes modeladas em grafos de quantis, a centralidade local apresentou valores e dispersões majoritariamente semelhante entre seus vértices, justificado pela quantidade de pixels associados a cada quantil, tal que cada vértice da rede está associado a mesma quantidade de pixels da imagem, proporcionando uma dinâmica mais homogênea deste caracterizador. Em contrapartida, a centralidade laplaciana dos vértices no grafo de bins, reflete propriedades acerca da distribuição dos valores de pixels na imagem (Figura 19). A remoção dos vértices representativos dos primeiros *bins* impactam significativamente a energia da rede que modela a dinâmica dos pixels da imagem, demonstrando maior grau de importância dentre os vértices da rede (Pauls; Remondini, 2012).

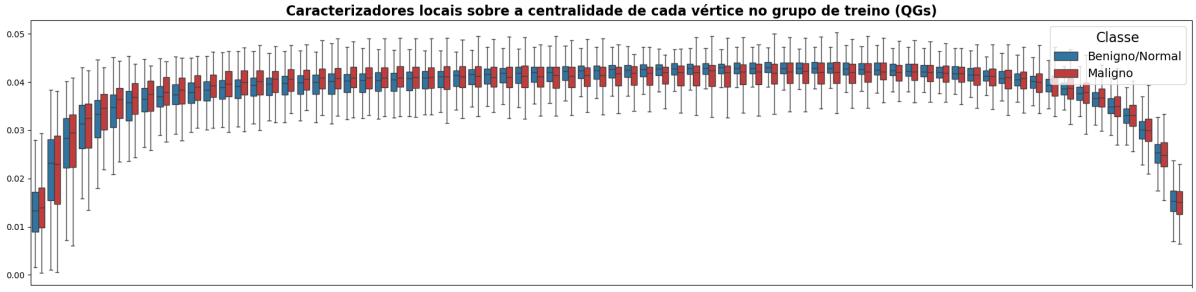


Figura 31 – Caracterizadores locais proporcionados pelo mapeamento em GQs com $r = 1$. Fonte: próprio autor.

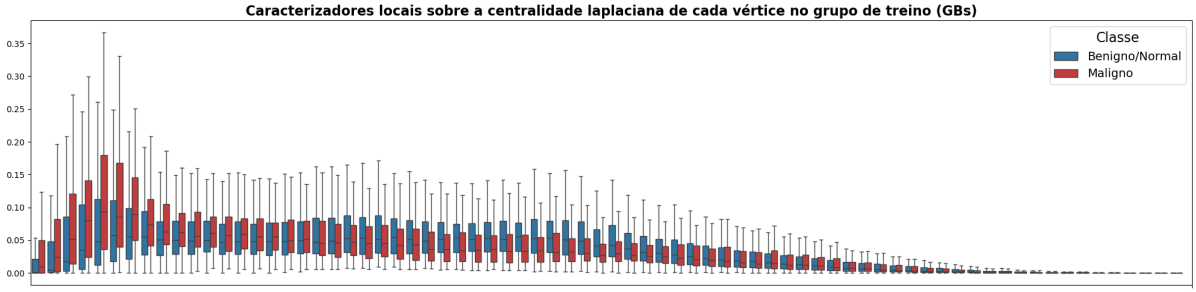


Figura 32 – Caracterizadores locais proporcionados pelo mapeamento em GBs com $r = 1$. Fonte: próprio autor.

Para assegurar a seleção dos caracterizadores propostos na metodologia como preditores de malignidade nas redes, os testes Qui-quadrado e F foram implementados. Com o objetivo de analisar a relação entre precisão e a sensibilidade e quantificar a capacidade discriminativa de cada caracterizador em estudo, foi calculada a área sob a curva precision-recall, por meio do modelo de regressão logística de uma variável, tal que a variável é o caracterizador de interesse.

A curva precision-recall fornece uma métrica útil de diagnóstico para modelos de classificação binária e pode ser empregada para quantificar o desempenho de classificadores, especialmente em problemas com classes desbalanceadas. Para seu cálculo, medidas de precisão e *recall*

do classificador são utilizadas adotando como classe positiva a classe minoritária, ou seja, as imagens malignas em nosso estudo (Tatbul et al., 2018). Os métodos classificadores necessitam de um limiar de decisão para suas conclusões, possibilitando a observações de diferentes cenários de precisão e *recall* para os mesmos dados e mesmo classificador, a partir da flexibilização entre as relações de casos verdadeiros positivos, verdadeiros negativos, falsos positivos e falsos negativos (Nick, 2007). As medidas de precisão e sensibilidade podem ser empregadas nos eixos de um gráfico, que representa o desempenho geral do classificador para diferentes limiares de classificação, favorecendo a escolha do limiar ótimo para o método. A área sob a curva precision-recall sintetiza esse desempenho em um valor numérico, e possibilita a comparação do método com resultados de outros classificadores e caracterizadores (Miao; Zhu, 2022).

As Tabelas 2 e 3 apresentam um resumo dos testes estatísticos realizados sobre cada caracterizador proporcionado pelo mapeamento em GQs e GBs, nas imagens do grupo de treino, com raio equivalente a um e reforçam a interpretação visual extraída acerca da distribuição dos dados, apresentados nas Figuras 25 e 26. Para testar a hipótese de associação entre as variáveis (caracterizadores) e a classe alvo (maligno ou benigno/normal), o p-valor do teste estatístico χ^2 foi adotado como critério de exclusão para variáveis cuja hipótese de dependência fossem rejeitadas. Nesse caso, foi arbitrariamente adotado um nível de significância de 5% do teste estatístico χ^2 (Bhoria; Dhankhar; Solanki, 2023), tal que o caracterizador, cuja hipótese de independência era aceita, deveria ser descartado com o intuito de melhorar a convergência dos métodos de ML (Jin et al., 2006).

Tabela 2 – Testes estatísticos sobre os caracterizadores calculados nos GQs em redes com 74 vértices

Caracterizadores		***AUC-PR***	**P-valor(χ^2)**	**P-valor(F)**
Globais	Grau de conectividade média	0,85	0,04	2,81E-12
	Coeficiente de agrupamento médio	0,81	0,16	6,03E-06
	Índice Estrada	0,85	0,24	0,127
	Salto médio	0,85	0,07	9,14E-11
	Energia do grafo	0,83	0,29	4,46E-04
	Centralidade Laplaciana média	0,84	0,17	1,16E-11
Locais	Conectividade do vértice 64	0,87	0,02	1,39E-17
	Conectividade do vértice 65	0,87	0,03	2,07E-17
	...			
	Coef. de agrupamento do vértice 64	0,82	0,04	8,92E-12
	Coef. de agrupamento do vértice 67	0,82	0,04	1,98E-11
	...			
	Centralidade Laplaciana do vértice 47	0,78	0,48	1,88E-07
	Centralidade Laplaciana do vértice 46	0,77	0,45	4,99E-07
	...			

Tabela 3 – Testes estatísticos sobre os caracterizadores calculados nos GBs em redes com 74 vértices

Caracterizadores		***AUC-PR***	**P-valor**(χ^2)	**P-valor**(F)
Globais	Grau de conectividade média	0,85	0,04	2,81E-12
	Coeficiente de agrupamento médio	0,81	0,16	6,03E-06
	Índice Estrada	0,85	0,24	0,127
	Salto médio	0,85	0,06	9,15E-11
	Energia do grafo	0,83	0,29	4,46E-04
	Centralidade Laplaciana média	0,84	0,17	1,16e-11
Locais	Conectividade do vértice 64	0,87	0,02	1,38E-17
	Conectividade do vértice 65	0,87	0,03	2,06E-17
	...			
	Coef. de agrupamento do vértice 64	0,81	0,04	1,98E-11
	Coef. de agrupamento do vértice 68	0,82	0,04	2,30E-10
	...			
	Centralidade Laplaciana do vértice 47	0,78	0,48	1,88E-07
	Centralidade Laplaciana do vértice 46	0,77	0,45	4,98E-07
	...			

Com base nos P-valores do teste χ^2 nas Tabelas 2 e 3, apenas o caracterizador global de grau de conectividade média apresenta evidências significativamente relevantes de dependência entre as variáveis, assim como os caracterizadores locais de conectividade do vértice e coeficiente de agrupamento, foram os únicos que apresentaram hipótese de dependência entre as variáveis. Dentre os caracterizadores locais de conectividade, destacam-se os caracterizadores calculados entre os vértices 33 e 69, conforme ilustrado na Figuras 27 e 28, enquanto que dentre os caracterizadores locais de coeficiente de agrupamento, destacam-se aqueles mensurados entre os vértices 64 e 69, conforme ilustrado nas Figuras 29 e 30. Nota-se também que, embora diferentes metodologias de discretização dos pixels da imagem tenham sido utilizadas no mapeamento da imagem em grafos, a dispersão e variabilidade dos seus caracterizadores são semelhantes.

Com o objetivo de extrair recursos adicionais significativamente relevantes para a inclusão nos métodos de aprendizado de máquina, o parâmetro r do raio da vizinhança de Moore foi expandido, e os mesmos testes foram aplicados para todos os caracterizadores calculados.

3.2 Impacto do parâmetro r

O parâmetro r do mapeamento em grafos impacta diretamente a estrutura das redes geradas e consequentemente, suas medidas estruturais mensuradas se alteram conforme o raio varia. Os boxplots plotados em função do raio r (Figuras 34 e 33), destacando a necessidade de tratá-los como um conjunto de variáveis distintas. Por exemplo, a concentração e variabilidade dos dados observada entre as classes pela centralidade laplaciana para $r = 1$ e $r = 10$ são diferentes e portanto, para a modelagem e inferência dos dados, devem ser tratadas como

variáveis independentes entre si, favorecendo o incremento de dados para o aprendizado de máquina.

De modo geral, a dispersão dos dados de cada caracterizador global segue a mesma tendência, independente da metodologia de mapeamento adotada. Nota-se uma convergência das distribuições dos dados entre as classes conforme o aumento do raio para os caracterizadores de grau de conectividade média, índice Estrada, energia e centralidade laplaciana. Em contrapartida, o coeficiente de agrupamento e o comprimento do salto médio apresentaram uma tendência de divergência entre as médias das classes, embora a dispersão dos dados também tenha aumentado. A constância de variabilidade dos dados em torno das médias e a distinção dessa dispersão entre as classes proporciona diferentes perspectivas e parâmetros para ajuste dos modelos. A partir de uma imagem, 168 (1 imagem $\times$ 28 raios distintos $\times$ 6 medidas estruturais) caracterizadores globais podem ser extraídos para serem utilizados como possíveis descritores de malignidade nas imagens. Entretanto, o aumento expressivo do raio, para incremento dos dados, pode favorecer o sobreajuste dos dados se utilizado sem parcimônia, prejudicando a capacidade de generalização dos modelos propostos (Ying, 2019).

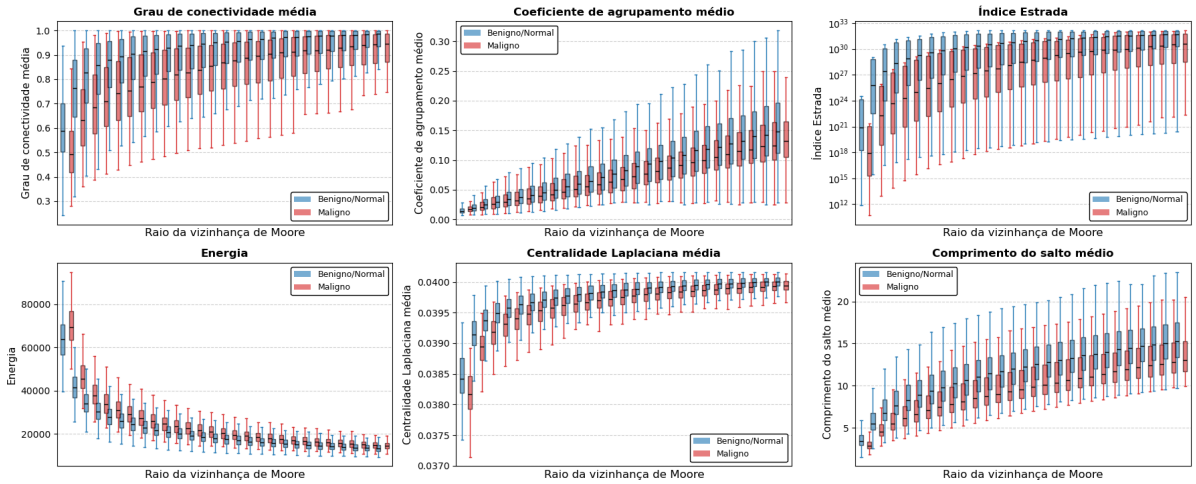


Figura 33 – Distribuição dos dados conforme variação do raio do mapeamento em GQs. Fonte: próprio autor.

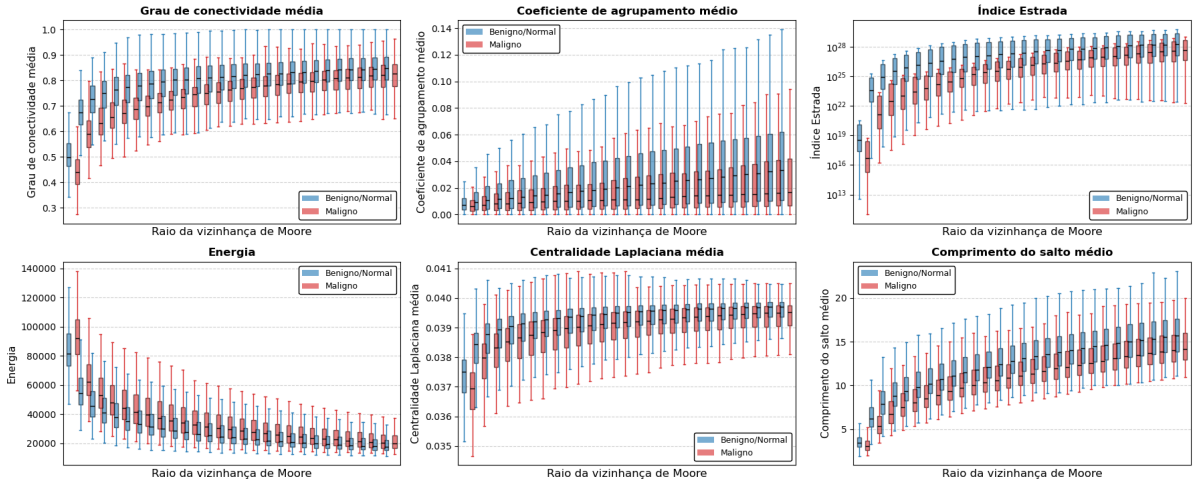


Figura 34 – Distribuição dos dados conforme variação do raio do mapeamento em GBs. Fonte: próprio autor.

O aumento do raio no mapeamento em GQs afeta diretamente a probabilidade de que conexões aleatórias, cujos pixels não possuam dependência espacial entre si, sejam associados às arestas e contabilizados na rede, conforme ilustrado pelas matrizes de adjacência da Figura 22. Supondo uma rede totalmente conectada, ou seja, que todos os vértices possuam pelo menos uma conexão entre si, seu grau de conectividade média é máximo, cujo valor é 1. Assim, conforme ilustrado nos gráficos das Figuras 33 e 34, o aumento do raio faz com que as redes geradas possuam cada vez mais conexões entre seus vértices, ou seja, cada vez mais quantis ou *bins* sem associação espacial são observados, embora a convergência do grau de conectividade média ao valor máximo permitido pelo caracterizador, pelo mapeamento em GBs, seja mais tardia frente ao mapeamento em GQs.

O comportamento de convergência entre as classes dos caracterizadores de energia, índice Estrada e centralidade laplaciana média podem ser explicados devido a suas medidas se basearem nos autovalores da matriz de adjacência das redes. Conforme o raio do mapeamento expande, a complexidade estrutural das redes aumenta e os autovalores da matriz de adjacência associada se alteram, ou seja, mais conexões com diferentes pesos entre os vértices são observados.

Dentre os caracterizadores, o comprimento de salto médio foi o que melhor performou na diferenciação entre as classes após a variação do raio da vizinhança de Moore, com os melhores p-valores do teste estatístico F, muito utilizado no ANOVA, que pondera a relação entre a média e variâncias das classes (St; Wold et al., 1989). O aumento do raio do mapeamento também impacta o caracterizador, entretanto esse caracterizador é menos sensível à variação do parâmetro r que os demais devido ao cálculo da matriz de distância entre vértices em sua formulação, que "pondera" as probabilidades de transição em função da distância entre os vértices da rede. A métrica garante, indiretamente, dispersões semelhantes dos dados conforme variações de raio do mapeamento e constância nos p-valores associados ao teste F.

Para a seleção dos caracterizadores que foram utilizados durante o aprendizado de máquina, o P-valor(χ^2) < 0,05 foi adotado foi adotado como critério de inclusão ao banco de dados que seria utilizado para os classificadores selecionados neste estudo (Bhoria; Dhankhar; Solanki, 2023)(Jin et al., 2006). Após os critérios de seleção serem aplicados, os caracterizadores foram organizados, conforme Tabela 4, e implementados nos modelos de aprendizado de máquina.

Tabela 4 – Quantidade de caracterizadores selecionados após critério de inclusão

Método de mapeamento	Conjuntos de caracterizadores globais	Conjunto de caracterizadores locais
Grafos de Quantis	59	226
Grafos de *bins*	59	256

Os três melhores caracterizadores globais, para cada método de mapeamento, foram ranqueados com base no P-Valor do teste F e elencados nas Tabelas 5 e 6. As tabelas demonstram a boa capacidade de diferenciação entre as classes por meio do caracterizador de grau de conectividade média, especialmente sobre aqueles calculados sobre as redes geradas pelo mapeamento com menores raios de vizinhança, do caracterizador de índice Estrada com boa capacidade de diferenciação entre as classes especialmente sobre as redes geradas pelo mapeamento com raio em torno de 16 e o caracterizador de comprimento de salto médio, que demonstrou ser um caracterizador consistente e de boa capacidade de diferenciação, independentemente do raio no mapeamento adotado. As tabelas também refletem a baixa eficácia de diferenciação entre as classes por meio dos caracterizadores globais de energia do grafo, centralidade laplaciana média e coeficiente de agrupamento médio. Todavia os caracterizadores locais de centralidade laplaciana e coeficiente de agrupamento também se destacaram após os testes estatísticos utilizados, proporcionando caracterizadores adicionais consistentes para a diferenciação entre as classes.

Tabela 6 – Melhores raios do mapeamento em GBs para cada caracterizador global.

Caracterizador global	**Raio**	**AUC-PR**	**P-Valor(chi)**	**P-valor(F)**
Grau de conectividade média	4	85,7%	0,041	2,0E-14
	3	85,6%	0,038	3,0E-14
	5	85,6%	0,048	3,1E-14
Coeficiente de agrupamento médio	1	81,0%	0,160	6,0E-06
	30	79,4%	0,379	2,2E-03
	29	79,7%	0,386	2,3E-03
Índice Estrada	16	85,2%	0,000	1,9E-08
	15	85,4%	0,000	2,2E-08
	17	84,7%	0,000	2,9E-08
Energia do grafo	5	83,0%	0,221	3,5E-05
	4	83,0%	0,209	3,7E-05
	8	83,0%	0,262	9,9E-05
Centralidade Laplaciana média	1	84,3%	0,170	1,2E-11
	2	84,7%	0,373	4,2E-09
	4	84,6%	0,451	2,5E-08
Salto médio	11	85,5%	0,017	7,1E-14
	12	85,5%	0,016	7,2E-14
	10	85,6%	0,018	7,6E-14

Tabela 5 – Melhores raios do mapeamento em GQs para cada caracterizador global.

Caracterizador global	**Raio**	**AUC-PR**	**P-Valor(chi)**	**P-valor(F)**
Grau de conectividade média	1	84,9%	0,041	2,8E-12
	2	85,5%	0,033	6,8E-14
	5	85,6%	0,048	3,1E-14
Coeficiente de agrupamento médio	1	81,0%	0,160	6,0E-06
	27	78,9%	0,449	5,5E-03
	26	78,8%	0,422	5,5E-03
Índice Estrada	16	85,2%	0,000	1,9E-08
	15	85,4%	0,000	2,2E-08
	17	84,7%	0,000	2,9E-08
Energia do grafo	5	83,0%	0,221	3,5E-05
	4	83,0%	0,209	3,7E-05
	8	83,0%	0,262	9,9E-05
Centralidade Laplaciana média	1	84,3%	0,170	1,2E-11
	2	84,7%	0,373	4,2E-09
	4	84,6%	0,451	2,5E-08
Salto médio	11	85,5%	0,017	7,1E-14
	12	85,5%	0,016	7,2E-14
	10	85,6%	0,018	7,6E-14

3.3 Aprendizado de máquina

Os caracterizadores selecionados após a aplicação de testes estatísticos amplamente utilizados na literatura, foram submetidos a métodos de aprendizado de máquina (ML), mais especificamente a regressão logística, *random forest*, *Support Vector Machine* e *XGBoost*. As Tabelas 7 e 8 apresentam os valores de precisão (ACC), AUC-ROC e AUC-PR obtidos para o grupo de imagens reservado de validação dos modelos. As imagens do grupo de validação não foram utilizadas durante o aprendizado de máquina, ficando exclusivas à validação dos modelos para representar o desempenho da metodologia empregada, ausente de viés de treinamento.

Nessa etapa, diferentes resoluções disponíveis no banco de dados das mesmas imagens foram experienciados, com o objetivo de verificar o impacto da resolução da imagem e a quantidade de vértices e arestas da rede que modelam a dinâmica dos pixels na imagem. As melhores métricas de avaliação foram observadas para o método do XGBoost em imagens de diferentes resoluções e métodos de mapeamento, conforme Tabelas 7 e 8, cujas métricas foram calculadas sobre o grupo de validação, inerente a fase de seleção de caracterizadores e ajuste dos modelos classificatórios.

Tabela 7 – Desempenho dos modelos de ML para diferentes resoluções e caracterizadores proporcionados pelos GQs.

Tamanho	**Modelo**	**AUC-PR (%)**	**AUC-ROC (%)**	**ACC (%)**
28x28	Regressão Logística	91,0	77,4	73,1
	Random Forest	85,3	76,9	79,5
	Support Vector Machine	80,1	62,3	74,3
	XGBoost	90,3	77,9	78,2
64x64	Regressão Logística	94,6	87,5	82,1
	Random Forest	91,0	80,0	83,3
	Support Vector Machine	94,9	88,1	82,1
	XGBoost	95,5	88,5	87,2
128x128	Regressão Logística	91,3	77,8	71,8
	Random Forest	89,5	80,5	85,9
	Support Vector Machine	89,9	80,3	80,8
	XGBoost	92,3	84,9	87,2
224x224	Regressão Logística	93,3	86,7	87,1
	Random Forest	90,9	83,5	84,6
	Support Vector Machine	92,1	84,9	84,6
	XGBoost	95,2	88,9	84,6

Tabela 8 – Desempenho dos modelos de ML para diferentes resoluções e caracterizadores proporcionados pelos GBs.

Tamanho	Modelo	AUC-PR (%)	AUC-ROC (%)	ACC (%)
28x28	Regressão Logística	85,8	72,2	76,9
	Random Forest	79,4	65,7	78,2
	Support Vector Machine	77,6	64,7	75,6
	XGBoost	80,9	67,3	80,7
64x64	Regressão Logística	91,5	83,0	82,1
	Random Forest	95,2	88,7	89,7
	Support Vector Machine	95,3	87,9	83,3
	XGBoost	94,6	89,0	85,9
128x128	Regressão Logística	94,1	84,5	78,2
	Random Forest	94,9	89,4	84,6
	Support Vector Machine	93,8	87,2	83,3
	XGBoost	94,8	89,2	88,5
224x224	Regressão Logística	93,5	85,2	78,2
	Random Forest	96,5	91,6	87,2
	Support Vector Machine	95,9	89,5	87,2
	XGBoost	97,1	93,1	88,5

De modo geral, dentre os diferentes métodos de aprendizado de máquina avaliados, o XGBoost foi o que melhor performou na classificação das imagens a partir dos caracterizadores de redes complexas propostos na metodologia. Embora o mapeamento em diferentes resoluções de imagem gere conjuntos distintos de caracterizadores, o XGBoost manteve desempenho superior de forma consistente. Esse comportamento pode estar relacionado à capacidade de convergência do método, bem como à sua menor suscetibilidade à variação na quantidade de caracterizadores utilizados, em comparação com os demais algoritmos analisados (Zhang; Jia; Shang, 2022).

Os testes estatísticos realizados na etapa de seleção de caracterizadores já indicavam um potencial maior, embora pouco expressivo, de classificação para imagens de maior resolução. A resolução das imagens, a partir da relação estabelecida entre a quantidade de pixels e de vértices da rede, arbitrariamente selecionada na metodologia como $Q = 2\sqrt[3]{L_1 * L_2}$, impacta diretamente a quantidade de vértices que modelam a dinâmica dos pixels dentro da rede e consequentemente afetam a quantidade de caracterizadores elegíveis à utilização no treinamento dos modelos após o critério de inclusão adotado, principalmente os caracterizadores locais.

Dentre os métodos de mapeamento das imagens em grafos, os grafos de *bins* apresentaram desempenho superior aos grafos de quantis, com melhores métricas de AUC-PR e precisão, embora a diferença seja pouco expressiva e ambos os métodos tenham apresentado bom desempenho em imagens de maior resolução por meio do XGBoost. A precisão e sensibilidade dos modelos em classificarem, especialmente, imagens cujas lesões sejam malignas, é de suma importância na validação do modelo. Nesse sentido, a capacidade de classificação dos melhores modelos, considerado o XGBoost(GQs) e XGBoost(GBs) nas imagens de 224x224 pixels, com base na

área sobre a curva *Precision-Recall* e precisão no grupo de validação, foram inspecionadas, conforme Tabelas 9 e 10.

Tabela 9 – Métricas de desempenho do classificador XGBoost utilizando os caracterizadores dos GQs.

	Precisão	Sensibilidade	F1-Score	Amostras
Maligno	80,0%	57,1%	0,667	21
Benigno/Normal	85,7%	94,7%	0,900	57

Tabela 10 – Métricas de desempenho do classificador XGBoost utilizando os caracterizadores dos GBs.

	Precisão	Sensibilidade	F1-Score	Amostras
Maligno	87,5%	66,6%	0,757	21
Benigno/Normal	88,7%	96,5%	0,924	57

Embora outros modelos apresentem valores superiores de precisão em classificar imagens com lesões benignas, a sensibilidade a essa classe é afetada drasticamente em outros modelos, sugerindo que o modelo não encontrou parâmetros suficientes para realizar essas classificações. Assim, uma métrica interessante de ser analisada para esse caso é a F1-Score, uma média harmônica entre precisão e sensibilidade dentro da classe, que indica quais modelos estão realmente sendo capazes de modelar o problema (Yacouby; Axman, 2020).

Para a classe maligna, a maior pontuação de F1-Score foi observada no XGBoost(GBs), atingindo razoáveis valores de precisão e sensibilidade, dado o baixo número de amostras reservadas para essa validação. Todavia, nesse mesmo modelo, boas métricas de classificação de imagens de lesões benignas ou exames normais foram observadas. Já para o XGBoost(GQs), embora a precisão no grupo validado de imagens malignas esteja razoável, a sensibilidade está baixa, indicando que o modelo não encontrou parâmetros suficientes para classificar o problema.

Os resultados preliminares encontrados, quando comparados com trabalhos recentes publicados na literatura mostram que o tamanho das imagens também afeta a classificação desses modelos, conforme demonstrado por (Yang et al., 2023), na Tabela 11. A comparação com outros trabalhos da literatura fica limitada devido a ausência de métricas trazidas nesse estudo. Salvo o trabalho de (Yang et al., 2023), os demais trabalhos inspecionados não forneceram seus algoritmos utilizados, tampouco métricas de avaliação para as classes, dificultando a compreensão sobre as limitações e vantagens dos outros modelos.

Entre os modelos apresentados na Tabela 11, quatro utilizaram arquiteturas de redes neurais convolucionais (CNNs) amplamente estudadas na literatura, a saber: ResNet-18, ResNet-50, EfficientNet e VGG19. Três modelos se referem a softwares pagos baseados em CNNs, sendo eles o auto-sklearn, AutoKeras e AutoML Vision. Um dos trabalhos explorou uma rede neural própria, desenvolvida para diversos problemas de classificação (MONONet), enquanto outro

adotou um modelo de aprendizado de máquina, o SVM, que utiliza descritores extraídos das imagens de forma semiautomática.

Tabela 11 – Comparação dos resultados provisórios com a literatura.

Autor	Modelo	ROC - AUC	Precisão
(Yang et al., 2023)	ResNet-18 (28)	90,1	86,3 %
	ResNet-18 (224)	89,1	83,3 %
	ResNet-50 (28)	85,7	81,2 %
	ResNet-50 (224)	86,6	84,2 %
	auto-sklearn	83,6	80,3 %
	AutoKeras	87,1	83,1 %
	AutoML Vision	91,9	86,1 %
(Nguyen et al., 2023)	MONONet	-	81,4%
(Alotaibi et al., 2023)	EfficientNet V2 B3	-	67,0 %
	VGG19	-	91,0 %
(Badawi; Yusof, 2024)	SVM	-	80,0 %
Nosso estudo	XGBoost + GQs(224x224)	88,9	84,6%
	XGBoost + GBs(224X224)	93,1	88,5%

O método do mapeamento em grafos de quantis e de *bins* em imagens de US de 224x224 pixels, aliado ao XGBoost, demonstrou uma boa precisão e área sobre a curva ROC nas imagens do grupo de validação, equiparável a outros métodos já estabelecidos na literatura. Atualmente, a maioria dos estudos na área concentra-se em inovações voltadas às redes neurais convolucionais, o que evidencia a necessidade de desenvolver métodos alternativos de visão computacional capazes de oferecer novas perspectivas, possivelmente negligenciadas pelos modelos vigentes, e contribuir para o aprimoramento das técnicas de classificação de imagens.

3.4 Custo Computacional

Os algoritmos foram desenvolvidos em linguagem Python e executados em um computador do departamento de Biodiversidade e Bioestatística, que contém em sua configuração, um processador intel i5 de 7ª geração e 8gb de memória RAM. O tempo de execução para cada simulação foi contabilizado automaticamente, conforme mostra o apêndice A.

Tabela 12 – Custo computacional do mapeamento em grafos de quantis.

Resolução das imagens	Quantidade de imagens	$R_{máx}$	Redes associadas	Conjunto de caracterizadores	Tempo de processamento
28x28	780	4	3120	24	$\approx$ 37,86s $\pm$ 1,9s
64x64	780	8	6240	48	$\approx$ 256,33s $\pm$ 5,9s
128x128	780	16	12480	96	$\approx$ 1736,05s $\pm$ 54,9s
224x224	780	28	21840	168	$\approx$ 5418,82s $\pm$ 349,8s

Conforme a Tabela 12, o tempo de processamento computacional aumenta expressivamente com o aumento das dimensões das imagens e principalmente, com o aumento do raio de vizinhança do mapeamento. A definição do raio impacta diretamente na quantidade de redes complexas cujos caracterizadores estruturais são estimados e é um parâmetro importante na otimização do algoritmo, caso necessário. Contudo, após a modelagem do problema e treinamento do método de aprendizado de máquina, o tempo de aplicação dos classificadores treinados em novas imagens é quase que imediata, fornecendo resultados instantâneos sobre as imagens. O custo computacional torna-se um aspecto relevante na escolha da metodologia para o desenvolvimento de novos algoritmos aplicados a problemas de interesse em cenários nos quais a capacidade computacional disponível é limitada (Justus et al., 2018).

3.5 Análise de sensibilidade

Para análise de sensibilidade dos parâmetros envolvidos no mapeamento das imagens em redes complexas, utilizamos o modelo de aprendizado de máquina XGBoost, que apresentou os melhores desempenhos relacionados à classificação nos grupo de dados previamente separado para a validação. Nesta etapa, o embaralhamento das imagens foi realizado com o objetivo de realizar uma validação cruzada dos dados e assegurar uma maior confiabilidade sobre o desempenho dos modelos em função da variação dos parâmetros do mapeamento, evitando viés de desempenho sobre os dados destinados à validação dos modelos (Yates et al., 2023). Ou seja, os caracterizadores estruturais extraídos dos GQs e GBs e selecionados após o teste estatístico χ^2, foram aleatoriamente separados em grupos de treinamento e validação, conforme ilustrado na Figura 35, e cinco ciclos de aprendizado de máquina foram realizados, destinando 80% das imagens para o treinamento e 20% das imagens para a validação (Wong; Yeh, 2019).

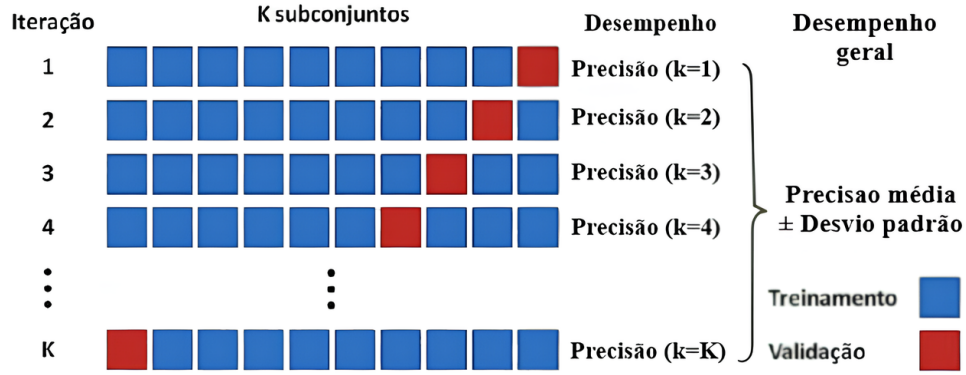


Figura 35 – Ciclos de aprendizado de máquina realizados na validação cruzada. Fonte: próprio autor.

O estudo sobre os parâmetros do mapeamento da imagem em redes complexas Q (Quantidade de vértices da rede) e r (Raio da vizinhança de Moore) proporciona perspectivas valiosas sobre o comportamento do mapeamento, principalmente sobre a perspectiva de otimização do

método de mapeamento. As Figuras 36 e 37 apresentam a precisão média e a área sobre a curva ROC (AUC-ROC) média juntamente com seus respectivos desvios-padrão após a validação cruzada em diferentes configurações de parâmetros, representados nos eixos dessas figuras.

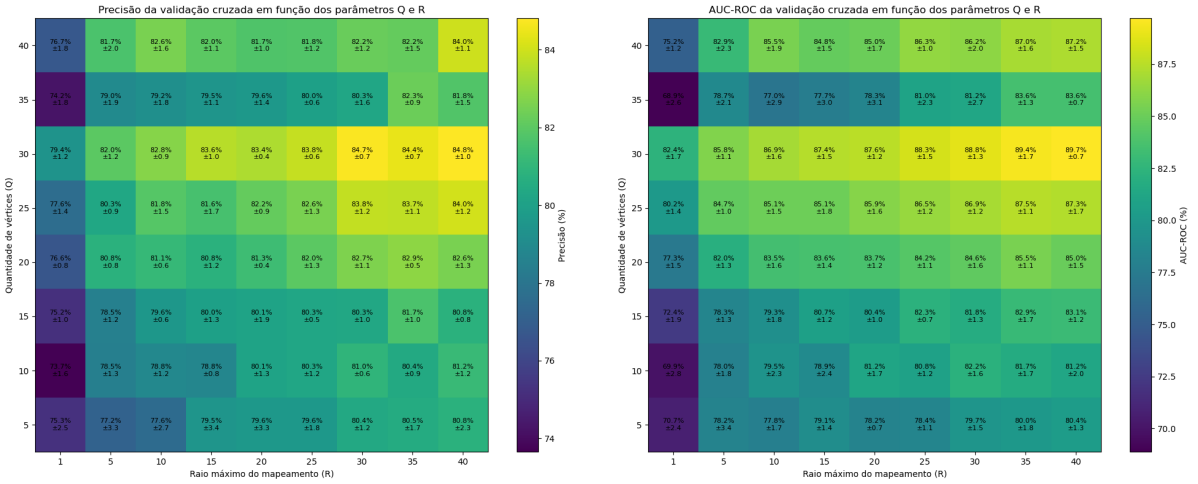


Figura 36 – Precisão e AUC-ROC de classificação em função do número de quantis e do raio máximo do mapeamento em GQs. Fonte: próprio autor.

Para o mapeamento em grafos de quantis, os valores de precisão e AUC-ROC permanecem relativamente estáveis para faixa de valores do mapeamento discretizado em trinta quantis, resultando em trinta vértices na rede complexa, e raio de mapeamento em GQs superior a quinze pixels vizinhos máximos. Os melhores parâmetros para esse método de mapeamento foram observados na faixa $Q = 30$ e $r = 30$, tal que o aumento do raio máximo, para esta mesma faixa de quantis, não contribuiu significativamente com a melhora de desempenho do classificador, indicando um platô de aprendizado. A Figura 36 também destaca a importância que a expansão do raio máximo do mapeamento desempenha na classificação dos dados, proporcionando um incremento nos dados para classificação e novas perspectivas (possíveis preditores) sobre o problema modelado.

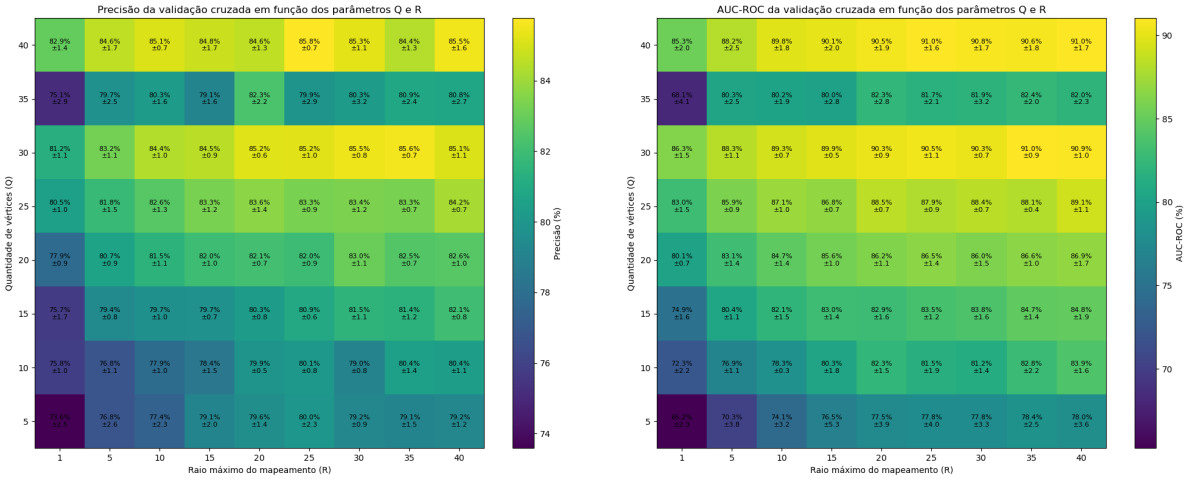


Figura 37 – Precisão e AUC-ROC de classificação em função do número de *bins* e do raio máximo do mapeamento em GBs. Fonte: próprio autor.

Para o mapeamento em grafos de bins, os valores de precisão e AUC-ROC foram majoritariamente superiores ao mapeamento em grafos de bins, embora tal superioridade seja pouco expressiva, e seguiram o mesmo padrão de aprimoramento conforme variação dos parâmetros Q e r. Os classificadores permaneceram relativamente estáveis para as faixas de 30 e 40 quantis e valores do raio máximo de mapeamento superiores a 10, cuja melhores combinações de parâmetros foram observadas para o mapeamento em GBs com $Q = 30$ e $r = 35$ e $Q = 40$ e $r = 25$, conforme Figura 37. Contudo, para ambos os classificadores com distintas estratégias de mapeamento, ora em GQs, ora em GBs, apresentaram uma perca, relativamente abrupta, de poder de classificação para as redes geradas com 35 vértices e tal fenômeno deverá ser estudado no futuro.

Tabela 13 – Melhores parâmetros de mapeamento da imagem em redes complexas com base da precisão e AUC-ROC média.

Mapeamento	**Q**	**r**	**Precisão**	**AUC-ROC**
GQs	30	30	84,7% $\pm$ 0,7%	0,89
GQs	30	40	84,8% $\pm$ 1,0%	0,90
GQs	40	40	84,0% $\pm$ 1,1%	0,87
GBs	30	35	85,6% $\pm$ 0,7%	0,91
GBs	40	25	85,8% $\pm$ 0,7%	0,91
GBs	40	40	85,5% $\pm$ 1,6%	0,91

Dentre os melhores parâmetros de mapeamento, apresentados na Tabela 13, um classificador de cada mapeamento foi selecionado para avaliar a importância de cada caracterizador na classificação das imagens. A relevância das características foi avaliada por meio da importância por permutação, que quantifica a contribuição de cada característica para o desempenho preditivo do modelo. Essa análise evidencia o poder discriminativo intrínseco dos caracterizadores de grafos propostos, cujo classificador com maior grau de importância, ou seja, cuja remoção apresentou maior impacto negativamente no poder de classificação, foi o comprimento do salto médio.

3.6 Análise de estabilidade

A análise de estabilidade do método é uma ferramenta extremamente útil para analisar o comportamento do modelo, previamente treinado com seus parâmetros otimizados, frente a imagens ruidosas, com diferentes tipos de ruídos artificiais introduzidos a imagem. Para esta análise, o banco de dados MedMNIT-C, descrito na seção 2.1.3, foi utilizado, contendo as mesmas 780 imagens com seus respectivos rótulos (maligno ou benigno/normal) usados nas etapas anteriores. Embora, idealmente, essa avaliação devesse ocorrer a partir de imagens exclusivas com o intuito de evitar possíveis vieses de classificação, a abordagem proporciona indícios relevantes sobre o impacto dos diferentes tipos de ruídos frente a metodologia adotada.

Com base nos modelos treinados, com parâmetros otimizados, o classificador foi empregado para classificar as mesmas imagens utilizadas no mapeamento com ruídos artificiais. A Tabela 14 apresenta a comparação do desempenho dos classificadores baseados em GQs e GBs sob diferentes tipos de ruído, considerando as métricas de precisão e AUC-ROC.

Tabela 14 – Comparação dos resultados entre GQs e GBs.

Classificação com base nos GQs.

Ruído	**Precisão**	**AUC-ROC**
Redução de brilho	95,1%	0,99
Aumento de brilho	88,2%	0,94
Redução de contraste	98,2%	0,99
Compressão JPEG	86,2%	0,94
Desfoque de movimento	84,5%	0,88
Pixelização	81,9%	0,87
Ruído granular	85,8%	0,92

Classificação com base nos GBs.

Ruído	**Precisão**	**AUC-ROC**
Redução de brilho	95,8%	0,99
Aumento de brilho	74,5%	0,62
Redução de contraste	97,9%	0,99
Compressão JPEG	84,6%	0,88
Desfoque de movimento	70,6%	0,76
Pixelização	71,1%	0,73
Ruído granular	77,8%	0,86

De forma geral, observa-se que os modelos baseados em grafos de quantis apresentam desempenho superior e mais consistente em praticamente todos os cenários avaliados, sendo menos suscetível a introdução de ruídos artificiais nas imagens, embora, nas etapas anteriores, os grafos de *bins* foram responsáveis pelos melhores valores de classificação, quando comparados a outros estudos, e melhores valores de classificação também com base na validação cruzada adotada durante a análise de sensibilidade (seção 3.5).

Para ruídos relacionados à iluminação (redução e aumento de brilho), ambos os métodos alcançam altas precisões no caso de redução de brilho, demonstrando baixo impacto do ruído no poder preditivo do classificador. No entanto, no aumento de brilho das imagens, os GQs mantêm um desempenho elevado (88,2% de precisão e AUC-ROC de 0,94), enquanto os GBs sofrem uma queda de métricas maiores, especialmente na AUC-ROC (0,62), indicando menor capacidade discriminativa.

Em relação à redução de contraste, ambos os métodos apresentam desempenho semelhante e elevado, com precisão próxima a 98% e AUC-ROC de 0,99, sugerindo que esse tipo de ruído é bem capturado por ambas as abordagens do mapeamento das imagens em redes complexas, provavelmente devido à utilização da discretização dos valores de pixels da imagem, ora em *bins*, ora em quantis, afetando pouco a distribuição desses valores no histograma da imagem (Queiroz; Gomes, 2006).

No caso da compressão JPEG, ambos os métodos apresentam uma redução moderada de desempenho quando comparados aos cenários de iluminação e contraste. O classificador baseado em GQs apresenta 86,2% de precisão e AUC-ROC de 0,94, enquanto o modelo baseado em GBs obtém 84,6% de precisão e AUC-ROC de 0,88. Embora a compressão JPEG explore ao máximo

as limitações do sistema de visão humana, para comprimir imagens preservando o detalhamento para interpretação humana, ela utiliza uma série de operações que, computacionalmente, afetam expressivamente os valores matriciais das imagens originais e sua distribuição (Hu; Raunheitte, 2000), prejudicando o desempenho dos nossos modelos.

Para ruídos mais severos, visivelmente impactantes conforme Figura 16, como desfoque de movimento, pixelização e ruído granular, a superioridade dos GQs torna-se mais evidente. Nessas situações, os GQs mantêm precisões acima de 80% e AUC-ROC superiores a 0,87, enquanto os GBs apresentam quedas significativas tanto em precisão quanto em AUC-ROC, indicando maior susceptibildade a esses ruídos.

Esses resultados sugerem que os GQs são mais robustos a diferentes tipos de ruído, especialmente aqueles que afetam a estrutura espacial da imagem, como o desfoque de movimento, tornando-os mais adequados para cenários onde a qualidade visual é mais ruidosa.

3.7 Aplicações futuras

Para a aplicação clínica, outros aspectos, além de desempenho do modelo, são extremamente relevantes para implementação na rotina clínica como ferramenta de suporte diagnóstico, como a capacidade de diferenciação entre as classes conforme protocolos clínicos vigentes, reprodutibilidade do modelo, interpretação dos parâmetros adotados pelos classificadores (Castellino, 2005) e interpretação visual das regiões de interesse nas imagens utilizadas para a classificação (Velden et al., 2022).

Visando o aprimoramento da capacidade de diferenciação entre as classes, os modelos propostos deverão explorar de forma mais abrangente as classes normal, benigna e maligna disponibilizadas pelo banco de dados BUSI (Seção 2.1.1), com o objetivo de distinguir não apenas imagens malignas, mas também imagens benignas das normais. Adicionalmente, novos bancos de dados de imagens ultrassonográficas que apresentem classificações baseadas no sistema BI-RADS deverão ser investigados, uma vez que esse sistema é amplamente adotado na prática clínica (Mendelson et al., 2013).

A reprodutibilidade do modelo está diretamente relacionada à sua capacidade de manter um bom desempenho quando aplicado a diferentes bancos de dados. Para esse fim, outros conjuntos de dados deverão ser utilizados na validação da metodologia proposta. Idealmente, a validação cruzada com profissionais especialistas também deverá ser realizada, garantindo confiabilidade ao diagnóstico (Liu et al., 2019).

A adoção de caracterizadores estruturais de redes complexas fornece informações relevantes sobre a dinâmica entre os pixels extraídos da imagem para a interpretação dos parâmetros adotados, contudo a tradução dessas métricas em significado anatômico e radiológico é relevante para a difusão da abordagem em redes complexas para uso clínico (Bullmore; Sporns,

2009)(Bassett; Bullmore, 2009).

A demonstração visual dos parâmetros e regiões de interesse extraídos das imagens para a classificação é uma ferramenta importante para a interpretabilidade médica, proporcionando novas perspectivas, possivelmente negligenciadas pelo corpo clínico ou erroneamente extraídas e utilizadas por meio dos classificadores, agregando maior confiabilidade ao diagnóstico (Tjoa; Guan, 2020). Nesse sentido, com base no, consideravelmente, bom desempenho em imagens de menor resolução, conforme apresentado nas Tabelas 7 e 8, um modelo para a localização de achados radiológicos nas imagens deverá ser proposto, utilizando as máscaras do banco de dados BUSI (Seção 2.1.1). A abordagem ainda tem o potencial de melhorar o desempenho de classificação, especialmente para a classe normal, removendo regiões da imagem que não agregam significado computacional e biomédico, otimizando a tarefa de visão computacional.

Para este fim, uma análise exploratória de viabilidade deverá ser realizada a partir do particionamento de uma imagem de maior resolução em subimagens, de forma que as subimagens extraídas deverão ser rotuladas com base no particionamento das máscaras, com o intuito de classificá-las em achado radiológico ou região de fundo, conforme Figura 38.

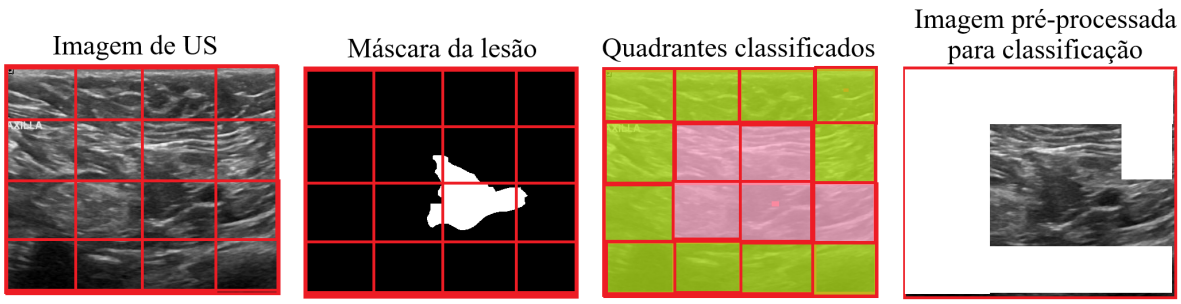


Figura 38 – Metodologia proposta para a identificação de regiões de interesse. Fonte: próprio autor.

4 Conclusões

O presente trabalho proporcionou um estudo sobre a viabilidade da utilização de redes complexas como ferramenta de visão computacional aplicada a classificação de imagens de ultrassonografia de mama, com foco na diferenciação entre lesões malignas e benignas/normais. O estudo também proporcionou uma maior compreensão sobre as vantagens da abordagem em redes complexas, bem como suas limitações, impacto dos parâmetros utilizados pela metodologia adotada e diferentes técnicas de discretização da imagem.

As redes complexas são ferramentas capazes de modelar sistemas complexos e inferir sobre a dinâmica e o funcionamento dos mesmos. Essa capacidade permite que as redes complexas tenham uma ampla aplicabilidade no sentido de detecção de padrões e extração de características de sistemas reais, que podem não ser claramente reveladas por meio de outras técnicas matemáticas/computacionais, inclusive no campo da visão computacional, tal que os valores de pixels associados a vértices das redes possibilitaram uma abordagem alternativa do uso de métodos de aprendizado de máquina para a classificação de imagens.

Dentre as vantagens da utilização de redes complexas para a classificação de imagens radiológicas, destacam-se o baixo custo computacional para sua implementação quando comparadas a métodos de visão computacional vigentes, interpretabilidade dos caracterizadores extraídos sobre a dinâmica dos pixels nas imagens, utilizados pelos classificadores, auxiliando a compreensão inicial do sistema e sugerindo um possível entendimento do problema proposto, com destaque a sua versatilidade, facilidade de implementação e robustez a alguns tipos de ruídos comumente presente em imagens, que afetam significativamente outros métodos de *deep learning*.

O mapeamento em grafos de quantis e em grafos de *bins* demonstrou ser uma técnica eficiente para a modelagem de imagens de ultrassonografia de mama, ao correlacionar os valores dos pixels dessas imagens com as componentes das redes complexas associadas. Essa abordagem amplia a interpretabilidade da dinâmica entre os pixels da imagem e fornece subsídios para a compreensão dos comportamentos entre a dinâmica de pixels observados nas diferentes etapas do processo de diagnóstico da imagem.

Convém ressaltar que alguns dos resultados obtidos pelos modelos em estudo se equipararam aos de trabalhos anteriores observados na literatura. No entanto, o número reduzido de

imagens utilizadas no estudo dado a magnitude do problema em estudo, o platô de desempenho dos modelos durante a validação cruzada, comparação do modelo com o corpo clínico, valores reduzidos do F1-Score dentro do grupo maligno e a representação visual dos padrões nas imagens utilizados para a classificação são desafios que devem ser superados antes da discussão sobre a implementação na rotina clínica.

Referências

AL-DHABYANI, Walid et al. Dataset of breast ultrasound images. *Data in brief*, Elsevier, v. 28, p. 104863, 2020. v, 14

ALOMAR, Khaled; AYSEL, Halil Ibrahim; CAI, Xiaohao. Data augmentation in classification and segmentation: A survey and new strategies. *Journal of Imaging*, MDPI, v. 9, n. 2, p. 46, 2023. 21

ALOTAIBI, Mohammed et al. Breast cancer classification based on convolutional neural network and image fusion approaches using ultrasound images. *Heliyon*, Elsevier, v. 9, n. 11, 2023. 43

ARZANOVA, Evelina; MAYROVITZ, Harvey N. The epidemiology of breast cancer. *Exon publications*, p. 1–19, 2022. 1

ASNICAR, Francesco et al. Machine learning for microbiologists. *Nature Reviews Microbiology*, Nature Publishing Group UK London, v. 22, n. 4, p. 191–205, 2024. 5

BADAWI, Ahmad A.; YUSOF, Mohd F. B. Private pathological assessment via machine learning and homomorphic encryption. *BioData Mining*, Springer, v. 17, n. 1, p. 33, 2024. 43

BALAKRISHNAN, R. The energy of a graph. *Linear Algebra and its Applications*, Elsevier, v. 387, p. 287–295, 2004. 26

BALLEYGUIER, Corinne et al. Birads™ classification in mammography. *European journal of radiology*, Elsevier, v. 61, n. 2, p. 192–194, 2007. 3

BARABÁSI, Albert-László. *Linked: How everything is connected to everything else and what it means for business, science, and everyday life*. [S.l.]: Basic books, 2014. 8

BARABÁSI, Albert-László. Network science book. *Network Science*, v. 625, 2014. 9

BASSETT, Danielle S; BULLMORE, Edward T. Human brain networks in health and disease. *Current opinion in neurology*, LWW, v. 22, n. 4, p. 340–347, 2009. 49

BHORIA, H; DHANKHAR, A; SOLANKI, K. Chi-square feature selection technique for student's performance prediction. *Indian J. Sci. Technol*, v. 16, n. 38, p. 3250–3257, 2023. 34, 38

BINCZYK, Franciszek et al. Radiomics and artificial intelligence in lung cancer screening. *Translational lung cancer research*, AME Publications, v. 10, n. 2, p. 1186, 2021. 5

BODEWES, FTH et al. Mammographic breast density and the risk of breast cancer: a systematic review and meta-analysis. *The Breast*, Elsevier, v. 66, p. 62–68, 2022. 2

BOGUSLAWSKI, Pawel. *Modelling and analysing 3d building interiors with the dual half-edge data structure*. [S.l.]: University of South Wales (United Kingdom), 2011. v, 8

BULLMORE, Ed; SPORNS, Olaf. Complex brain networks: graph theoretical analysis of structural and functional systems. *Nature reviews neuroscience*, Nature Publishing Group UK London, v. 10, n. 3, p. 186–198, 2009. 49

BUSSAB, Wilton de O; MORETTIN, Pedro A. Estatística básica. In: *Estatística básica*. [S.l.: s.n.], 2010. p. xvi–540. 29

CAMPANHARO, Andriana SLO; DOESCHER, Erwin; RAMOS, Fernando M. Application of quantile graphs to the automated analysis of eeg signals. *Neural Processing Letters*, Springer, v. 52, n. 1, p. 5–20, 2020. 25

CAMPANHARO, Andriana SLO; RAMOS, Fernando M. Hurst exponent estimation of self-affine time series using quantile graphs. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, Elsevier, v. 444, p. 43–48, 2016. v, 10

CAMPANHARO, Andriana SLO et al. Duality between time series and networks. *PloS one*, Public Library of Science San Francisco, USA, v. 6, n. 8, p. e23378, 2011. 10

CARNEIRO, Murillo G; GAMA, Barbara C; RIBEIRO, Otavio S. Complex network measures for data classification. In: IEEE. *2021 International Joint Conference on Neural Networks (IJCNN)*. [S.l.], 2021. p. 1–8. 8, 22, 23

CASTELLINO, Ronald A. Computer aided detection (cad): an overview. *Cancer Imaging*, v. 5, n. 1, p. 17, 2005. 48

CEDOLINI, Carla et al. Type of breast cancer diagnosis, screening, and survival. *Clinical breast cancer*, Elsevier, v. 14, n. 4, p. 235–240, 2014. 3

CHENG, Xiaodong; KAWANO, Yu; SCHERPEN, Jacquelien MA. Graph structure-preserving model reduction of linear network systems. In: IEEE. *2016 European Control Conference (ECC)*. [S.l.], 2016. p. 1970–1975. 9

CHICCO, Davide; JURMAN, Giuseppe. The advantages of the matthews correlation coefficient (mcc) over f1 score and accuracy in binary classification evaluation. *BMC genomics*, Springer, v. 21, n. 1, p. 6, 2020. 27

CHIRE, Josimar; MAHMOOD, Khalid; LIANG, Zhao. Complex networks for pattern-based data classification. *arXiv preprint arXiv:2503.05772*, 2025. 8

CHOI, Rene Y et al. Introduction to machine learning, neural networks, and deep learning. *Translational vision science & technology*, The Association for Research in Vision and Ophthalmology, v. 9, n. 2, p. 14–14, 2020. 5

CORTES, Corinna; VAPNIK, Vladimir. Support-vector networks. *Machine learning*, Springer, v. 20, n. 3, p. 273–297, 1995. 27

COSTA, L da F et al. Characterization of complex networks: A survey of measurements. *Advances in physics*, Taylor & Francis, v. 56, n. 1, p. 167–242, 2007. v, 9, 22

CUPERTINO, Thiago Henrique et al. A scheme for high level data classification using random walk and network measures. *Expert Systems with Applications*, Elsevier, v. 92, p. 289–303, 2018. 23

DASH, Manoranjan; LIU, Huan. Feature selection for classification. *Intelligent data analysis*, Elsevier, v. 1, n. 1-4, p. 131–156, 1997. 28

DAVIS, Jesse; GOADRICH, Mark. The relationship between precision-recall and roc curves. In: *Proceedings of the 23rd international conference on Machine learning*. [S.l.: s.n.], 2006. p. 233–240. 28

DIESTEL, Reinhard. *Graph theory*. [S.l.]: Springer Nature, 2025. 8

ELGENDI, Mohamed et al. The effectiveness of image augmentation in deep learning networks for detecting covid-19: A geometric transformation perspective. *Frontiers in Medicine*, Frontiers Media SA, v. 8, p. 629134, 2021. vi, 20

ESTRADA, Ernesto. Characterization of 3d molecular structure. *Chemical Physics Letters*, Elsevier, v. 319, n. 5-6, p. 713–718, 2000. 25

EULER, Leonhard. Leonhard euler and the königsberg bridges. *Scientific American*, JSTOR, v. 189, n. 1, p. 66–72, 1953. 8

EVANS, Andrew et al. Breast ultrasound: recommendations for information to women and referring physicians by the european society of breast imaging. *Insights into imaging*, Springer, v. 9, n. 4, p. 449–461, 2018. 4

GARZA-RUGERIO, Graciela et al. Birads 0 patient reclassification in a first-level of care unit. *Rev Med Inst Mex Seguro Soc*, p. 1–7, 2024. 3

GHELLER, April; TUTTLE, Rebecca; OXENBERG, Jacqueline. Breast cancer risk, screening, and risk reduction in young females. *The American Surgeon™*, SAGE Publications Sage CA: Los Angeles, CA, p. 00031348251331294, 2025. 3

GONÇALVES, Fernando Henrique Bechelli. Comparação de redes pré-treinadas para a segmentação e classificação de nódulos pulmonares em imagens tomográficas. Universidade Estadual Paulista (Unesp), 2023. v, 4, 7

GREENER, Joe G et al. A guide to machine learning for biologists. *Nature reviews Molecular cell biology*, Nature Publishing Group UK London, v. 23, n. 1, p. 40–55, 2022. 5

GUO, Rongrong et al. Ultrasound imaging technologies for breast cancer detection and management: a review. *Ultrasound in medicine & biology*, Elsevier, v. 44, n. 1, p. 37–70, 2018. 3

GUTMAN, Ivan; LI, Xueliang; ZHANG, Jianbin. Graph energy. *Analysis of Complex Networks: From Biology to Linguistics*, Wiley Online Library, p. 145–174, 2009. 26

HASSAN, Nada M; HAMAD, Safwat; MAHAR, Khaled. Mammogram breast cancer cad systems for mass detection and classification: a review. *Multimedia Tools and Applications*, Springer, v. 81, n. 14, p. 20043–20075, 2022. 4

HEKAL, Asmaa A et al. Breast cancer segmentation from ultrasound images using deep dual-decoder technology with attention network. *IEEE Access*, IEEE, v. 12, p. 10087–10101, 2024. v, 15

HINDI, Ammar; PETERSON, Cynthia; BARR, Richard G. Artifacts in diagnostic ultrasound. *Reports in Medical Imaging*, Taylor & Francis, p. 29–48, 2013. 31

HU, Osvaldo RT; RAUNHEITTE, Luís TM. Padrão jpeg de compactação de imagens. *Revista Mackenzie de Engenharia e Computação*, v. 1, n. 1, 2000. 48

Instituto Nacional de Câncer (Brasil). *Controle do câncer de mama no Brasil: dados e números 2025*. Rio de Janeiro: INCA, 2025. 85 p. : il. color. ISBN 978-65-88517-54-3. Disponível em: <https://ninho.inca.gov.br/jspui/handle/123456789/17733>. 1

JACOBSEN, Grant D; JACOBSEN, Kathryn H. Health awareness campaigns and diagnosis rates: evidence from national breast cancer awareness month. *Journal of health economics*, Elsevier, v. 30, n. 1, p. 55–61, 2011. 3

JAFARI, Seyed Hamed et al. Breast cancer diagnosis: Imaging techniques and biochemical markers. *Journal of cellular physiology*, Wiley Online Library, v. 233, n. 7, p. 5200–5213, 2018. 2

JIN, Xin et al. Machine learning techniques and chi-square feature selection for cancer classification using sage gene expression profiles. In: SPRINGER. *International workshop on data mining for biomedical applications*. [S.l.], 2006. p. 106–115. 34, 38

JOVIĆ, Alan; BRKIĆ, Karla; BOGUNOVIĆ, Nikola. A review of feature selection methods with applications. In: IEEE. *2015 38th international convention on information and communication technology, electronics and microelectronics (MIPRO)*. [S.l.], 2015. p. 1200–1205. 28

JUSTUS, Daniel et al. Predicting the computational cost of deep learning models. In: IEEE. *2018 IEEE international conference on big data (Big Data)*. [S.l.], 2018. p. 3873–3882. 44

KAISER, Marcus. Mean clustering coefficients: the role of isolated nodes and leafs on clustering measures for small-world networks. *New Journal of Physics*, IOP Publishing, v. 10, n. 8, p. 083042, 2008. 24

KASHTAN, Nadav; ALON, Uri. Spontaneous evolution of modularity and network motifs. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, National Academy of Sciences, v. 102, n. 39, p. 13773–13778, 2005. 9

KATSURA, Chie et al. Breast cancer: presentation, investigation and management. *British Journal of Hospital Medicine*, MA Healthcare London, v. 83, n. 2, p. 1–7, 2022. 2

KHAN, Shahzad Ali; RANA, Zeeshan Ali. Evaluating performance of software defect prediction models using area under precision-recall curve (auc-pr). In: IEEE. *2019 2nd International Conference on Advancements in Computational Sciences (ICACS)*. [S.l.], 2019. p. 1–6. 27

KIM, Joanne et al. Global patterns and trends in breast cancer incidence and mortality across 185 countries. *Nature Medicine*, Nature Publishing Group US New York, p. 1–9, 2025. v, 1, 2

KIM, Young Eun et al. The accuracy of mammography, ultrasound, and magnetic resonance imaging for the measurement of invasive breast cancer with extensive intraductal components. *Clinical Breast Cancer*, Elsevier, v. 23, n. 1, p. 45–53, 2023. 3

KUMAR, Teerath et al. Image data augmentation approaches: A comprehensive survey and future directions. *IEEE Access*, IEEE, 2024. 20

LANGVILLE, Amy N; MEYER, Carl D. Google's pagerank and beyond: The science of search engine rankings. Princeton university press, 2011. 27

LEMKE, Ney. Construção, caracterização global e local de redes biológicas. Universidade Estadual Paulista (Unesp), 2011. 9

LIU, Xiaoxuan et al. A comparison of deep learning performance against health-care professionals in detecting diseases from medical imaging: a systematic review and meta-analysis. *The lancet digital health*, Elsevier, v. 1, n. 6, p. e271–e297, 2019. 48

LOHAKA, Hippolyte O. *Making a grouped-data frequency table: development and examination of the iteration algorithm*. Tese (Doutorado) — Ohio University, 2007. 18

LUDERMIR, Teresa Bernarda. Inteligência artificial e aprendizado de máquina: estado atual e tendências. *Estudos avançados*, SciELO Brasil, v. 35, p. 85–94, 2021. 27

MAGALHÃES, Marcos Nascimento; LIMA, Antônio Carlos Pedroso D. *Noções de probabilidade e estatística*. [S.l.]: Editora da Universidade de São Paulo São Paulo, Brazil, 2002. v. 5. 31

MAGNY, Samuel J; SHIKHMAN, Rachel; KEPPKE, Ana L. Breast imaging reporting and data system. In: *StatPearls [Internet]*. [S.l.]: StatPearls publishing, 2023. 3

MAHADEVKAR, Supriya V et al. A review on machine learning styles in computer vision—techniques and future directions. *Ieee Access*, IEEE, v. 10, p. 107293–107329, 2022. 5

MCBRIDE, Martin. *Adjacency Matrices*. 2025. GraphicMaths – Computer Science / Graph Theory. Acesso em: 16 jul. 2026. Disponível em: <https://graphicmaths.com/computer-science/graph-theory/adjacency-matrices/>. v, 9

MENDELSON, Ellen B et al. Acr bi-rads® ultrasound. *ACR BI-RADS® atlas, breast imaging reporting and data system*, American College of Radiology Reston, VA, v. 2013, 2013. 48

MERJANE, Vanessa et al. Breast imaging reporting and data system (bi-rads®): a success history and particularities of its use in brazil. *Revista Brasileira de Ginecologia e Obstetrícia*, SciELO Brasil, v. 46, p. e–rbgo6, 2024. 3

MIAO, Jiaju; ZHU, Wei. Precision–recall curve (prc) classification trees. *Evolutionary intelligence*, Springer, v. 15, n. 3, p. 1545–1569, 2022. 34

MILOSEVIC, Marina et al. Early diagnosis and detection of breast cancer. *Technology and Health Care*, SAGE Publications Sage UK: London, England, v. 26, n. 4, p. 729–759, 2018. 3

MORRIS, A.S.; LANGARI, R. *Measurement and Instrumentation: Theory and Application*. Elsevier Science, 2011. ISBN 9780123819604. Disponível em: <https://books.google.com.br/books?id=arw7FIVkVb4C>. 18

National Cancer Institute (NIH). *Cancer stat facts: female breast cancer*. [S.l.]: National Cancer Institute, 2025. <https://seer.cancer.gov/statfacts/html/breast.html>. 1

NGUYEN, An-Phi et al. Mononet: enhancing interpretability in neural networks via monotonic features. *Bioinformatics advances*, Oxford University Press, v. 3, n. 1, p. vbad016, 2023. 43

NICK, Todd G. Descriptive statistics. *Topics in biostatistics*, Springer, p. 33–52, 2007. 34

ORGANIZATION, World Health. *Breast cancer*. 2025. Disponível em: <https://www.who.int/news-room/fact-sheets/detail/breast-cancer>. 1

O'SHEA, K. An introduction to convolutional neural networks. *arXiv preprint arXiv:1511.08458*, 2015. 5

OSISANWO, Folorunso Y et al. Supervised machine learning algorithms: classification and comparison. *International Journal of Computer Trends and Technology (IJCTT)*, v. 48, n. 3, p. 128–138, 2017. 5

PAGANO, Marcello; GAUVREAU, Kimberlee; MATTIE, Heather. *Principles of biostatistics*. [S.l.]: Chapman and Hall/CRC, 2022. 30

PANDIS, Nikolaos. The chi-square test. *American journal of orthodontics and dentofacial orthopedics*, Elsevier, v. 150, n. 5, p. 898–899, 2016. 27

PAULS, Scott D; REMONDINI, Daniel. Measures of centrality based on the spectrum of the laplacian. *Physical Review E—Statistical, Nonlinear, and Soft Matter Physics*, APS, v. 85, n. 6, p. 066127, 2012. 33

PEÑA, José Antonio D. L.; GUTMAN, Ivan; RADA, Juan. Estimating the estrada index. *Linear Algebra and its Applications*, Elsevier, v. 427, n. 1, p. 70–76, 2007. 25

PINEDA, Aruane M et al. Analysis of quantile graphs in egc data from elderly and young individuals using machine learning and deep learning. *Journal of Complex Networks*, Oxford University Press, v. 11, n. 5, p. cnad030, 2023. 23

PONTI, Moacir Antonelli; COSTA, Gabriel B Paranhos D. Como funciona o deep learning. *arXiv preprint arXiv:1806.07908*, 2018. v, 6, 7

POWERS, David MW. Evaluation: from precision, recall and f-measure to roc, informedness, markedness and correlation. *arXiv preprint arXiv:2010.16061*, 2020. 27

QI, Xingqin et al. Laplacian centrality: A new centrality measure for weighted networks. *Information Sciences*, Elsevier, v. 194, p. 240–253, 2012. 26, 33

QUEIROZ, José Eustáquio Rangel de; GOMES, Herman Martins. Introdução ao processamento digital de imagens. *Rita*, v. 13, n. 2, p. 11–42, 2006. 47

ROCHA, Naila Camila da et al. Enhancing breast density assessment in mammograms through artificial intelligence. *Journal of Imaging Informatics in Medicine*, Springer, p. 1–11, 2025. 4

RUBINOV, Mikail; SPORNS, Olaf. Complex network measures of brain connectivity: uses and interpretations. *Neuroimage*, Elsevier, v. 52, n. 3, p. 1059–1069, 2010. 9

RUGGIERO, Carlos Antônio et al. On the efficiency of data representation on the modeling and characterization of complex networks. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, Elsevier, v. 390, n. 11, p. 2172–2180, 2011. 9

RUMACK, Carol M; CHARBONEAU, J WILLIAM. *Tratado de Ultra-sonografia Diagnostica, 2v.* [S.l.]: Elsevier Brasil, 2006. 3

SALVO, Francesco D.; DOERRICH, Sebastian; LEDIG, Christian. Medmnist-c: Comprehensive benchmark and improved classifier robustness by simulating realistic image corruptions. *arXiv preprint arXiv:2406.17536*, 2024. 17

SANTOS, Joana Cristo; SANTOS, Miriam Seoane; ABREU, Pedro Henriques. Enhancing mammography: A comprehensive review of computer methods for improving image quality. *Progress in Biomedical Engineering*, IOP Publishing, 2024. 2

SARAMÄKI, Jari et al. Generalizations of the clustering coefficient to weighted complex networks. *Physical Review E—Statistical, Nonlinear, and Soft Matter Physics*, APS, v. 75, n. 2, p. 027105, 2007. 24

SARIGÜL, Mehmet; OZYILDIRIM, Buse Melis; AVCI, Mutlu. Differential convolutional neural network. *Neural Networks*, Elsevier, v. 116, p. 279–287, 2019. 6

SEELY, Jean M; ALHASSAN, T. Screening for breast cancer in 2018—what should we be doing today? *Current Oncology*, v. 25, n. Suppl 1, p. S115, 2018. 3

SHI, Jiyuan et al. The screening value of mammography for breast cancer: an overview of 28 systematic reviews with evidence mapping. *Journal of Cancer Research and Clinical Oncology*, Springer, v. 151, n. 3, p. 1–20, 2025. 3

SHORTEN, Connor; KHOSHGOFTAAR, Taghi M. A survey on image data augmentation for deep learning. *Journal of big data*, Springer, v. 6, n. 1, p. 1–48, 2019. 20

SILVA, Tandara Oliveira Benevides; SANTOS, Eslaine et al. Redes complexas: aspectos básicos, importância e aplicações. *Revista Educação e Ciências Sociais*, v. 6, n. 11, p. 28–49, 2024. 8

SILVA, Thiago Christiano; ZHAO, Liang. Network-based high level data classification. *IEEE Transactions on Neural Networks and Learning Systems*, IEEE, v. 23, n. 6, p. 954–970, 2012. 23

ST, Lars; WOLD, Svante et al. Analysis of variance (anova). *Chemometrics and intelligent laboratory systems*, Elsevier, v. 6, n. 4, p. 259–272, 1989. 37

TATBUL, Nesime et al. Precision and recall for time series. *Advances in neural information processing systems*, v. 31, 2018. 34

TIKU, Moti Lal. Power function of the f-test under non-normal situations. *Journal of the American Statistical Association*, Taylor & Francis, v. 66, n. 336, p. 913–916, 1971. 27

TIWARI, Mayank; GUPTA, Bhupendra; SHRIVASTAVA, Manish. High-speed quantile-based histogram equalisation for brightness preservation and contrast enhancement. *IET Image Processing*, Wiley Online Library, v. 9, n. 1, p. 80–89, 2015. 21

TJOA, Erico; GUAN, Cuntai. A survey on explainable artificial intelligence (xai): Toward medical xai. *IEEE transactions on neural networks and learning systems*, IEEE, v. 32, n. 11, p. 4793–4813, 2020. 49

TOMASZEWSKI, Michal R; GILLIES, Robert J. The biological meaning of radiomic features. *Radiology*, Radiological Society of North America, v. 298, n. 3, p. 505–516, 2021. 5

VELDEN, Bas HM Van der et al. Explainable artificial intelligence (xai) in deep learning-based medical image analysis. *Medical image analysis*, Elsevier, v. 79, p. 102470, 2022. 48

VICCHIETTI, Mário L; RAMOS, Fernando M; CAMPANHARO, Andriana SLO. Pattern and structural detection in grayscale images through the application of quantile graphs in higher-dimensional spaces. *Scientific Reports*, Nature Publishing Group UK London, v. 15, n. 1, p. 44356, 2025. 18

VICCHIETTI, Mário Lucas. Métodos de aprendizado de máquina com redes complexas aplicados à identificação precoce da doença de alzheimer. Universidade Estadual Paulista (Unesp), 2025. vi, 18, 21

WANG, Wenmin. *Principles of Machine Learning*. [S.l.]: Springer, 2025. 29

WHITMAN, Gary J. *Breast Ultrasound: An Essential Tool*. [S.l.]: LWW, 2021. 1–2 p. 4

WINTERS, Stella et al. Breast cancer epidemiology, prevention, and screening. *Progress in molecular biology and translational science*, Elsevier, v. 151, p. 1–32, 2017. 2

WONG, Tzu-Tsung; YEH, Po-Yang. Reliable accuracy estimates from k-fold cross validation. *IEEE Transactions on Knowledge and Data Engineering*, IEEE, v. 32, n. 8, p. 1586–1594, 2019. 44

XIN, Ruyue; ZHANG, Jiang; SHAO, Yitong. Complex network classification with convolutional neural network. *Tsinghua Science and technology*, TUP, v. 25, n. 4, p. 447–457, 2020. 8

YACOUBY, Reda; AXMAN, Dustin. Probabilistic extension of precision, recall, and f1 score for more thorough evaluation of classification models. In: *Proceedings of the first workshop on evaluation and comparison of NLP systems*. [S.l.: s.n.], 2020. p. 79–91. 42

YAMASHITA, Rikiya et al. Convolutional neural networks: an overview and application in radiology. *Insights into imaging*, Springer, v. 9, n. 4, p. 611–629, 2018. 7

YANG, Jiancheng et al. Medmnist v2-a large-scale lightweight benchmark for 2d and 3d biomedical image classification. *Scientific Data*, Nature Publishing Group UK London, v. 10, n. 1, p. 41, 2023. v, 15, 16, 42, 43

YANG, Suorong et al. Image data augmentation for deep learning: A survey. *arXiv preprint arXiv:2204.08610*, 2022. 21

YATES, Luke A et al. Cross validation for model selection: a review with examples from ecology. *Ecological Monographs*, Wiley Online Library, v. 93, n. 1, p. e1557, 2023. 44

YING, Xue. An overview of overfitting and its solutions. In: IOP PUBLISHING. *Journal of physics: Conference series*. [S.l.], 2019. v. 1168, p. 022022. 36

ZHANG, Ping; JIA, Yiqiao; SHANG, Youlin. Research and application of xgboost in imbalanced data. *International Journal of Distributed Sensor Networks*, SAGE Publications Sage UK: London, England, v. 18, n. 6, p. 15501329221106935, 2022. 41

ZHAO, Xia et al. A review of convolutional neural networks in computer vision. *Artificial Intelligence Review*, Springer, v. 57, n. 4, p. 99, 2024. 5

Apêndices

A - Acesso aos Dados e extração dos caracterizadores

[ ]:
```
!pip install networkx
!pip install medmnist
!pip install numpy
!pip install pandas
!pip install torchvision
```

[ ]:
```
import numpy as np
import pandas as pd
import networkx as nx
import torchvision.transforms as transforms
import copy
import math
import time
import medmnist
from medmnist import INFO, Evaluator
from networkx.algorithms.centrality import laplacian_centrality,␣
↪estrada_index
```

[ ]:
```
print(f"MedMNIST v{medmnist.__version__} @ {medmnist.HOMEPAGE}")
```

[ ]:
```
data_flag = 'breastmnist'
download = True
info = INFO[data_flag]
task = info['task']
n_channels = info['n_channels']
n_classes = len(info['label'])

DataClass = getattr(medmnist, info['python_class'])
BATCH_SIZE = 128
```

```
img_size=[28,64,128,224]

data_transform = transforms.Compose([
    transforms.ToTensor(),
    transforms.Normalize(mean=[.5], std=[.5])
])
```

[ ]:
```
def QGs(I, rmax):
    L1 = np.shape(I)[0]
    L2 = np.shape(I)[1]
    Q = int(round(2*pow(L1*L2, 1.0/3.0)))
    quant = np.zeros(L1*L2, dtype = int)
    X = np.copy(I)
    X = np.reshape(X, (1, L1*L2))
    a = int(np.floor(L1*L2/Q))
    ind = np.zeros((1, L1*L2))
    ind[0, :] = np.arange(np.shape(X)[1])
    O = np.lexsort((ind, X))
    aux = np.repeat(np.arange(Q), a)
    aux = np.concatenate((aux, np.full(L1*L2 - len(aux), Q - 1)))
    quant[O] = aux
    img_q = quant.reshape(-1, L1)
    W = np.zeros((Q, Q, rmax))
    i_v, j_v = np.indices((L1, L2))
    k1 = i_v * L2 + j_v
    for r in range(1, rmax + 1):
        ii_o = np.array([-r, -r, -r, 0, 0, r, r, r])
        jj_o = np.array([-r, 0, r, -r, r, -r, 0, r])
        ii = i_v[:, :, None] + ii_o
        jj = j_v[:, :, None] + jj_o
        msk = (ii >= 0) & (ii < L1) & (jj >= 0) & (jj < L2)
        ii = ii[msk]
        jj = jj[msk]
        k2 = ii * L2 + jj
        k1_new = np.repeat(k1[:, :, None], 8, axis=2)[msk]
        np.add.at(W[:, :, r - 1], (quant[k1_new], quant[k2]), 1)
        np.add.at(W[:, :, r - 1], (quant[k2], quant[k1_new]), 1)
    W = W/2
```

```
    return W, img_q

def create_named_graph(W_matrix):
    Q = len(W_matrix)
    labels = [str(i) for i in range(Q)]
    G = nx.from_numpy_array(W_matrix)
    mapping = {i: labels[i] for i in range(len(labels))}
    G = nx.relabel_nodes(G, mapping)
    return G
```

[ ]:
```
        def basic_information(G):
        U = G.copy()
        U.remove_edges_from(nx.selfloop_edges(U))
        degree_cent = list(nx.degree_centrality(U).values())
        _laplacian_centrality=list(laplacian_centrality(G,␣
↪weight='weight').values())

        return {
        'Nodes': G.number_of_nodes(),
        'average_degree_centrality': np.mean(degree_cent),
        'w_average_clustering':nx.average_clustering(G,␣
↪weight='weight'),
        'average_laplacian':np.mean(_laplacian_centrality),
        'estrada_index': estrada_index(G),
        }
```

[ ]:
```
def energy(G):
    MA = nx.to_numpy_array(G)
    eigenvalues = np.linalg.eigvals(MA)
    energy = np.sum(np.abs(eigenvalues))

    return{
       'energy': energy
    }
```

[ ]:
```
def jump_length(G):
    MA = nx.to_numpy_array(G)
    P = MA / MA.sum(axis=1, keepdims=True)
```

```
    P_t = P.T
    N = MA.shape[0]
    i = np.arange(N).reshape(N, 1)
    j = np.arange(N).reshape(1, N)
    H = np.abs(i - j)

    delta = np.trace(H @ P_t) / N

    return{
        'jump': delta
    }
```

[ ]:
```
for size in img_size:
        df = pd.DataFrame()
        start_time = time.time()
        index=0

        train_dataset = DataClass(split='train',␣
↪transform=data_transform, download=download, size=size,␣
↪mmap_mode='r')
        test_dataset = DataClass(split='test',␣
↪transform=data_transform, download=download, size=size,␣
↪mmap_mode='r')
        val_dataset = DataClass(split='val', transform=data_transform,␣
↪download=download, size=size, mmap_mode='r')

        sets = [('train', train_dataset), ('test', test_dataset),␣
↪('val', val_dataset)]
        rmax=math.ceil(size/8)

        for set_name, _set in sets:
            for i in range(len(_set)):
                img, label = _set[i]
                label_value = int(label) if isinstance(label, (int, np.
↪integer)) else int(label.item())
                img_np = np.array(img).squeeze()
                W, img_q = QGs(img_np, rmax)
                for r in range(rmax):
```

```
                    W_parc = W[:, :, r]
                    G = create_named_graph(W_parc)
                    new_row = {'index': index,'image': i,'r': r +␣
↪1,'label': label_value,'set': set_name}
                    new_row.update(basic_information(G))
                    new_row.update(energy(G))
                    new_row.update(jump_length(G))
                    df = pd.concat([df, pd.DataFrame([new_row])],␣
↪ignore_index=True)
                    index += 1
        end_time = time.time()
        elapsed_time = end_time - start_time
        print(f"Tempo gasto para o mapeamento das␣
↪{len(train_dataset)+len(test_dataset)+len(val_dataset)} imagens de␣
↪dimensão {size}x{size}: {elapsed_time} segundos")
        print(f"O mapeamento resultou em␣
↪{rmax*int(len(train_dataset)+len(test_dataset)+len(val_dataset))}␣
↪redes complexas associadas")
        print("")
        df.to_csv(f'C:/Users/FernandoHenriqueBech/Desktop/Mestrado/
↪IMG_BreastMNIST/Caracterizadores_mapeamento/Imagens_{size}x{size}.
↪csv', index=True)
print("end")
```

B - Análise e seleção dos caracterizadores

[ ]:
```
import pandas as pd
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
import seaborn as sns
from sklearn.metrics import roc_curve, auc, precision_recall_curve,␣
↪average_precision_score,roc_auc_score
from sklearn.feature_selection import chi2, f_classif, SelectKBest
from sklearn.preprocessing import MinMaxScaler
import os
import glob
import re

path="C:/Users/FernandoHenriqueBech/Desktop/Mestrado/IMG_BreastMNIST/
↪Caracterizadores_mapeamento/"
files = os.path.join(path, "*.csv")
csv_files = glob.glob(files)
```

[ ]:
```
def view_r_parameter(df, size_str):
    df = df.drop(['Unnamed: 0', 'index', 'image', 'Nodes'], axis=1,␣
↪errors='ignore')
    label_map = {0: 'maligno', 1: 'benigno/normal'}
    num_cols = df.select_dtypes(include='number').columns.drop(['r',␣
↪'label'], errors='ignore')
    fig, axes = plt.subplots(2, 3, figsize=(18,8))
    axes = axes.flatten()
    for i, col in enumerate(num_cols):
        ax = axes[i]
        stats = df.groupby(['label', 'r'])[col].agg(['mean', 'var']).
↪reset_index()
```

```
        for lbl in df['label'].unique():
            subset = stats[stats['label'] == lbl]
            mean_vals = subset['mean']
            std_vals = subset['var'] ** 0.5
            ax.errorbar(
                subset['r'], mean_vals, yerr=std_vals,
                fmt='-o', capsize=5, label=label_map[lbl]
            )
        ax.set_title(f'{col} - Img {size_str}')
        ax.set_xlabel('r')
        ax.grid(True, linestyle='--', alpha=0.6)
        ax.legend()
    plt.tight_layout()
    plt.show()
```

[ ]:
```
def boxplot_r1_feature(df, size_str):
    df=df[df['r']==1]
    num_cols = ['average_degree_centrality', 'w_average_clustering',
       'average_laplacian', 'estrada_index', 'energy', 'jump']
    fig, axes = plt.subplots(2, 3, figsize=(18,8))
    axes = axes.flatten()
    for i, col in enumerate(num_cols):
        sns.boxplot(x='set', y=col, hue='label', data=df, ax=axes[i],␣
↪showfliers=False)
        axes[i].set_title(f'{col} - Img {size_str}')
        axes[i].set_xlabel('')
        axes[i].set_ylabel('')
        axes[i].legend(title='Label')
    plt.tight_layout()
    plt.show()
```

[ ]:
```
def df_expansion(df):
    df_wide = df.pivot_table(
    index=['image', 'label', 'set'],
    columns='r',
    values=['average_degree_centrality', 'w_average_clustering',
       'average_laplacian', 'estrada_index', 'energy', 'jump']
    )
```

```
    df_wide.columns = [f"{col[0]}_r{col[1]}" for col in df_wide.
↪columns]
    df_wide = df_wide.reset_index()
    return df_wide
```

[ ]:
```
def statistical_test(df):
    df = df[df['set']=='train']
    X = df.drop(columns=['image', 'set', 'label'], errors='ignore')
    y = df['label']
    X_scaled = MinMaxScaler().fit_transform(X)

    chi2_scores, chi2_pvals = chi2(X_scaled, y)
    f_scores, f_pvals = f_classif(X, y)
    results = []

    for i, col in enumerate(X.columns):
        y_score = df[col]
        fpr, tpr, _ = roc_curve(y, y_score)
        roc_auc = auc(fpr, tpr)
        if roc_auc < 0.5:
            y_score = -y_score
            fpr, tpr, _ = roc_curve(y, y_score)
            roc_auc = auc(fpr, tpr)
        precision, recall, _ = precision_recall_curve(y, y_score)
        pr_auc = auc(recall, precision)

        results.append({
            'feature': col,
            'AUC_ROC': roc_auc,
            'AUC_PR': pr_auc*100,
            'chi2': chi2_scores[i],
            'chi2_pval': chi2_pvals[i],
            'F_score': f_scores[i],
            'F_pval': f_pvals[i]
        })
    df_results = pd.DataFrame(results).sort_values(by='F_score',␣
↪ascending=False).reset_index(drop=True)
```

```
    display(df_results[['feature','AUC_PR','chi2_pval','F_pval']].style.
↪format({
    'AUC_PR': "{:.2f}%",
    'chi2_pval': "{:.2g}",
    'F_pval': "{:.2g}"
    }))
    independent_features = df_results[df_results['chi2_pval'] > 0.
↪15]['feature'].tolist()

    return independent_features
```

[ ]:
```
for file in csv_files:
    df = pd.read_csv(file)
    match = re.search(r'Imagens_(.+)\.csv', file)
    size_str = match.group(1)
    boxplot_r1_feature(df, size_str)
    view_r_parameter(df, size_str)
    df_expanded=df_expansion(df)
    independent_features=statistical_test(df_expanded)
    df_expanded=df_expanded.drop(columns=independent_features)
    df_expanded.to_csv(f'C:/Users/FernandoHenriqueBech/Desktop/Mestrado/
↪IMG_BreastMNIST/filtred_features_{size_str}.csv', index=True)
```