

Trabalho prático

Desenvolvimento e Avaliação de Modelos Preditivos em Aprendizado de Máquina: Metodologia, Reprodutibilidade e Interpretabilidade

Contexto

O trabalho prático da disciplina **CMP263 - Aprendizagem de Máquina** tem como objetivo capacitar os alunos no desenvolvimento de modelos preditivos com Aprendizado de Máquina (AM) para problemas de interesse próprio, com foco na aplicação prática dos conceitos abordados em aula. Através da realização de um projeto, o trabalho visa proporcionar uma oportunidade para que os alunos pratiquem aspectos essenciais do treinamento e avaliação de modelos de classificação ou regressão com AM, além da interpretação e da análise crítica dos modelos gerados, aprofundando e consolidando seu conhecimento ao longo de todo o fluxo de trabalho de AM. A metodologia a ser seguida abrange todas as etapas do desenvolvimento de modelos, dando ênfase à **reprodutibilidade**, um aspecto crucial na pesquisa científica moderna.

Os principais passos da metodologia incluem:

(i) Análise exploratória dos dados: Identificar as características principais e os possíveis problemas nos dados, como outliers, valores faltantes e padrões indesejados que possam impactar negativamente o desempenho dos modelos;

(ii) Pré-processamento dos dados: Aplicar tarefas como normalização de atributos, discretização de dados, codificação de variáveis categóricas, correção de outliers, tratamento de valores ausentes, balanceamento de classes e redução de dimensionalidade. Esses passos são fundamentais para garantir que os dados estejam adequados para o treinamento de modelos;

(iii) Treinamento e validação dos modelos: Aplicar estratégias robustas de divisão de dados, otimização de hiperparâmetros e seleção de modelos, utilizando as melhores práticas discutidas em aula. É sugerido o uso da estratégia de *spot-checking* de algoritmos como uma etapa inicial de escolha de algoritmos informada, refinando o conjunto de algoritmos que passarão por uma análise mais detalhada e aprofundada de otimização de hiperparâmetros e avaliação de desempenho.

(iv) Interpretação e análise crítica: Uma parte importante do projeto será a interpretação dos modelos treinados, visando obter *insights sobre o impacto* dos atributos na tomada de decisão (ou seja, descobrir os principais fatores que influenciam o desempenho preditivo). Esta etapa envolve tentar explicar as relações entre os atributos e as previsões realizadas pelo modelo, visando a descoberta de conhecimento ou extração de *insights* acionáveis acerca do problema atacado.

Os resultados do projeto deverão ser apresentados na forma de um **artigo científico**, respeitando normas de escrita e de formatação acadêmica. Esse artigo será submetido a um processo de revisão por pares (professora e colegas de turma), reforçando a prática de análise crítica e colaboração científica.

O trabalho deverá ser realizado em **grupos de 2 ou 3 alunos**.

Objetivo do Trabalho

O objetivo deste trabalho prático é selecionar um problema dentro do escopo de **tarefas preditivas** (classificação ou regressão) e desenvolver uma **metodologia baseada em AM** para resolvê-lo, abordando etapas da coleta e pré-processamento dos dados à análise e interpretação de modelos. Esta metodologia deve ser elaborada levando em consideração as melhores práticas sobre treinamento e avaliação de modelos, bem como reprodutibilidade de pesquisas. O resultado do trabalho será apresentado através de artigo científico e apresentação oral.

Dentre as experiências e competências que o trabalho visa exercitar com os alunos, aponta-se:

- i) desenvolver modelos preditivos de AM para um problema de interesse,
- ii) praticar a comunicação transparente e completa de metodologia e resultados de pesquisa em AM,
- iii) explorar o conceito de reprodutibilidade e o uso de ferramentas para facilitar a reprodutibilidade de pesquisas em AM,
- iv) atuar como revisor(a) de artigo científico escritos pelos pares.

Desenvolvimento do Trabalho

Definição do problema e coleta de dados

Pode ser utilizado qualquer conjunto de dados de interesse do grupo que esteja relacionado a uma tarefa de classificação ou regressão, incluindo dados utilizados em suas pesquisas de mestrado ou doutorado. Como sugestão para os alunos, alguns repositórios (genéricos) que podem ser buscados:

- PMLB : <https://epistasislab.github.io/pmlb/>
- Kaggle: <https://www.kaggle.com/>

- UCI ML Repository: <https://archive.ics.uci.edu/ml/datasets.php>

Solicita-se que, de preferência, os alunos utilizem conjuntos de dados que não foram explorados ao longo da disciplina (por exemplo, em atividades práticas). A tarefa a ser abordada deve estar bem descrita no artigo. Espera-se uma definição clara do objetivo do trabalho desenvolvido, ou seja, dos dados utilizados para treinamento dos modelos e da pergunta de pesquisa que o grupo visou investigar com algoritmos de AM. Por exemplo: "Nosso trabalho tem como objetivo desenvolver um modelo baseado em AM para prever o tipo de vinho (tinto ou branco) a partir de um conjunto de características físico-químicas. Para tanto, utilizamos o conjunto de dados <breve descrição> disponível em <link para download>." ...

Para os trabalhos que envolverem dados publicamente disponíveis, os grupos devem incluir o link para download no seu artigo.

Análise exploratória dos dados e pré-processamento

Os grupos deverão realizar e apresentar uma análise exploratória dos dados (EDA, de Exploratory Data Analysis) coletados¹. O objetivo é entender melhor e sumarizar as características dos dados, analisando quantidade e tipos de atributos, verificando distribuição do atributo alvo, identificando padrões e anomalias, removendo atributos que pareçam irrelevantes ou problemáticos, etc. Utilize gráficos e sumarizações estatísticas para a EDA. Verifique potenciais problemas nos dados, como por exemplo, a necessidade de normalizar os atributos, balancear classes, ou remover instâncias ou atributos por inconsistências nos dados.

Os dados deverão ser pré-processados conforme a demanda observada na EDA a fim de melhorar a qualidade dos mesmos por meio da eliminação ou minimização de problemas identificados². As técnicas de pré-processamento usadas, bem como a forma com que foram aplicadas na metodologia de desenvolvimento do modelo, serão pontos de avaliação do trabalho.

As características dos dados usados e as etapas envolvidas no pré-processamento dos dados devem estar bem discutidas no artigo a ser entregue. Nos casos de não haver necessidade de pré-processar os dados, os grupos devem mencionar e justificar isto no texto.

Definição da abordagem, dos algoritmos, e da estratégia de avaliação

A definição da abordagem a ser usada para resolver o problema deve estar bem descrita no artigo. A seleção de algoritmos de aprendizado supervisionado a serem aplicados é de livre escolha do grupo, mas solicita-se que englobe algoritmos que constem no conteúdo programático da disciplina (podendo incluir de forma

¹ Leia o Capítulo **2** do livro base da disciplina "Inteligência Artificial - Uma Abordagem de Aprendizado de Máquina", para referência.

² Leia o Capítulo **3** do livro base da disciplina "Inteligência Artificial - Uma Abordagem de Aprendizado de Máquina", para referência.

adicional outros algoritmos não abordados na disciplina). Além disso, sugere-se selecionar um conjunto diversificado de algoritmos (em termos de viés indutivo) e testar ao menos 5 algoritmos.

A escolha de métricas de desempenho deverá ser feita pelo grupo com base na definição da modelagem e na interpretação do problema abordado. Neste processo, é recomendado utilizar mais de uma métrica para avaliação e comparação de modelos, mas selecionar uma métrica como critério principal de seleção de modelos (ou seja, aquela que o grupo tentará otimizar na análise de desempenho dos modelos). Também deverá ser escolhida a estratégia a ser aplicada para realizar a divisão de dados para treinamento, validação (por exemplo, otimização de hiperparâmetros) e avaliação final (holdout, cross-validation, etc.), tendo em mente as boas práticas discutidas em aula. A avaliação do trabalho em relação a este aspecto incluirá não só as escolhas feitas, mas também como foram aplicadas pelo grupo.

Treinamento, ajuste e validação de modelos

Os grupos deverão realizar o treinamento e validação dos modelos seguindo as definições do item anterior. Serão avaliados aspectos como o uso de múltiplas repetições, corretude na divisão dos dados nos múltiplos pontos de verificação de desempenho para evitar *data leakage*, garantia da consistência dos resultados utilizando as mesmas divisões de dados em uma determinada iteração para todos os algoritmos, e reprodutibilidade das análises (por exemplo, através da definição manual de *seeds* em processos aleatórios – parâmetro *random_state*, no scikit-learn).

Os grupos podem optar por aplicar o conceito de spot-checking de algoritmos antes da etapa de otimização de hiperparâmetros. O termo "*spot-checking algorithms*" (em tradução livre, verificação pontual de algoritmos) diz respeito a rapidamente explorar diferentes métodos de aprendizado de máquina e tem como principal objetivo obter um conjunto inicial de informações sobre os algoritmos que potencialmente serão melhores para o desenvolvimento de modelos preditivos para um conjunto de dados, determinando em quais destes vale a pena dedicarmos mais tempo na otimização de hiperparâmetros e na análise mais aprofundada dos modelos. Portanto, *spot-checking* é diferente de realizar a otimização de um único algoritmo através do ajuste fino de seus hiperparâmetros. Podemos pensar no *spot-checking* como sendo uma primeira etapa no treinamento de modelos para possibilitar uma escolha informada de algoritmos, a qual irá refinar o conjunto de algoritmos a serem explorados em mais profundidade na etapa de otimização de hiperparâmetros. Neste processo de *spot-checking*, é sempre recomendado testar um conjunto diversificado de algoritmos, com diferentes tipos de viés indutivo, variando, por exemplo, o tipo de representação de hipóteses (e.g., árvores e instâncias), a estratégia de aprendizado (e.g., probabilística ou por otimização), o tipo de modelagem (e.g., linear ou não linear, paramétrica ou não paramétrica).

A estratégia implementada para treinamento e avaliação de modelos, incluindo a etapa de otimização de hiperparâmetros, visando a seleção da melhor estratégia, deve ser descrita adequadamente no artigo. Adicionalmente, os grupos deverão apresentar uma boa sumarização dos resultados da avaliação dos modelos, com uma discussão sobre estes dados e conclusões acerca dos melhores modelos, suportadas por dados (gráficos, tabelas, análise estatística, dentre outros).

Interpretação dos modelos

Os grupos deverão explorar algum método de interpretação de modelos e/ou modelos naturalmente interpretáveis (por exemplo, árvores de decisão), a fim de compreender ou extrair hipóteses sobre quais atributos são aparentemente mais relevantes para a tarefa de predição e/ou como eles impactam na decisão do modelo. Sugere-se que se faça esta investigação apenas para um modelo, a ser escolhido com base no seu desempenho preditivo (isto é, o melhor modelo conforme avaliação realizada pelo grupo). Os alunos deverão incluir no relatório informações obtidas desta análise, como gráficos, tabelas, etc, e discutir a respeito das relações encontradas na análise que mais chamaram a atenção, seja pela pertinência da associação ou por ser um resultado inesperado.

Nota sobre a reprodutibilidade

A reprodutibilidade na pesquisa empírica em Computação, especialmente em Aprendizado de Máquina (AM), refere-se à capacidade de um pesquisador independente reproduzir os mesmos resultados utilizando os mesmos materiais e métodos empregados pela equipe de pesquisa original. Embora a reprodutibilidade seja um princípio fundamental do método científico, que garante a consolidação de um resultado como conhecimento científico, muitos pesquisadores têm destacado uma possível "crise de reprodutibilidade" em diversas áreas, incluindo Inteligência Artificial (IA) e AM. No contexto dessas áreas, uma das principais causas é a falta de informações detalhadas sobre a metodologia nas publicações científicas, além da ausência de compartilhamento de dados (mesmo anonimizados), códigos e modelos, dificultando a reprodução dos estudos.

Embora a transparência e a completude nos relatos de pesquisas em AM sejam essenciais para sua reprodutibilidade, alguns autores argumentam que ela só é realmente alcançada quando materiais, métodos e modelos são disponibilizados para a comunidade acadêmica. Independentemente das variações na definição de reprodutibilidade nas áreas de Computação e AM, há um consenso de que os pesquisadores desempenham um papel central na promoção de uma maior reprodutibilidade. Essa mudança cultural deve ser construída gradualmente, incentivando-se e difundindo-se boas práticas de reprodutibilidade nas pesquisas.

Este trabalho visa permitir que os alunos compreendam na prática o conceito de reprodutibilidade e explorem formas de garanti-la, ao menos em algum nível, em

seus projetos e pesquisas. A escolha das ferramentas para promover a reprodutibilidade será de responsabilidade dos grupos e será um critério de avaliação. Os grupos têm liberdade para implementar o conceito de "reprodutibilidade" conforme discutido em aula. No entanto, durante a avaliação, será valorizada tanto a tentativa de disponibilizar códigos, dados e modelos, quanto a elaboração de um relato detalhado e transparente sobre os aspectos metodológicos do desenvolvimento do modelo. Assim, a disponibilização de materiais e métodos para download não exime o grupo de preparar um relato suficientemente detalhado no artigo sobre a metodologia de pesquisa e os resultados obtidos.

Entregáveis e Critérios de Avaliação

O trabalho prático será composto pelos seguintes itens entregáveis, cada qual contribuindo para parte da avaliação final:

1. **Artigo científico (5,5 pontos):** escrita de artigo científico para comunicação dos resultados obtidos, preferencialmente em inglês, e seguindo a [estrutura padrão de escrita científica](#).
 - a. O artigo deve contextualizar e motivar o trabalho, apresentar o objetivo da pesquisa, revisar a literatura relacionada, descrever claramente materiais, métodos e experimentos, e apresentar os resultados acompanhados de discussões dos principais achados, com conclusões.
 - b. Os alunos não devem ocupar longo espaço do artigo descrevendo conceitos básicos da disciplina ou aspectos teóricos dos métodos usados (por exemplo, explicando o algoritmo de Florestas Aleatórias caso optem por utilizá-lo). O referencial teórico pode ser apresentado de forma sucinta e objetiva
 - c. O artigo deve seguir, preferencialmente, o template **indicado no Moodle**, com coluna única, e deve conter até 20 páginas (incluindo referências). Outros templates podem ser seguido, caso se justifique em termos de submissão de trabalhos a eventos ou periódicos (neste caso, sugere-se conversar com a professora previamente).
 - d. A avaliação do artigo é por grupo.
 - e. A nota do artigo é composta pela avaliação da professora (4 pontos) e avaliação pelos colegas (1,5 pontos) na etapa de *peer review* (ver seção "Etapa de peer review" abaixo)
2. **Solução adotada e pipeline implementado (3,0 pontos):** o código ou notebook implementado pelo grupo deverá ser entregue, seja através do envio dos arquivos (com orientações de como executá-lo no caso de uso de linguagem distinta de Python), seja através de um link para Jupyter notebook

no Google Colab. Será feita uma avaliação crítica do pipeline desenvolvido pelo grupo em todas as etapas do fluxo de trabalho com AM previstas neste enunciado, verificando corretude metodológica, coerência e robustez da estratégia implementada.

3. **Apresentação oral (1,5 pontos):** será realizada em data previamente definida no cronograma da disciplina. Os grupos deverão seguir o formato de apresentação de trabalhos científicos, assegurando uma explicação clara do objetivo do trabalho, da metodologia adotada e dos resultados obtidos. Decisões relacionadas à reprodutibilidade também devem ser discutidas. Nesta etapa, a participação ativa nas discussões dos trabalhos de outros grupos será avaliada individualmente e contabilizada na nota. Espera-se que todos os integrantes contribuam em todas as etapas do projeto, incluindo a elaboração do trabalho, a escrita do artigo e a apresentação oral. O tempo máximo alocado para cada apresentação será informado pela professora, e o descumprimento desse limite resultará em descontos na nota da apresentação.

Critérios de Avaliação

A avaliação dos trabalhos levará em consideração a **i)** qualidade técnica do trabalho, averiguando se a metodologia proposta está correta e adequada para abordar o objetivo do projeto; a **ii)** originalidade da pergunta de pesquisa proposta pelo grupo, e a **iii)** comunicação, analisando se os autores são capazes de explicar o trabalho desenvolvido com bom equilíbrio entre clareza e abrangência, adotando boas práticas para fins de reprodutibilidade.

- **Atenção:** atrasos na entrega do trabalho serão penalizados proporcionalmente ao tempo de atraso, sendo descontado 1 (um) ponto por dia de atraso (o TP como um todo vale 10 pontos).

Etapa de Peer Review

Os alunos(as) irão atuar como revisores de artigos enviados por outros grupos. Cada aluno irá revisar dois artigos, e a entrega e qualidade da revisão serão objetos de avaliação nesta etapa. A avaliação neste quesito é individual, e não por grupo, e será contabilizada no grupo de notas AT ("Atividades Autônomas"), com peso de 30%.

A avaliação pelos pares será feita com base em formulário a ser disponibilizado posteriormente pela professora, de maneira anônima (*single blind*). Orientações e os critérios de avaliação pelos pares serão disponibilizados posteriormente.

No processo de revisão de artigos, serão avaliados aspectos gerais da qualidade técnico-científica de cada artigo, bem como características relacionadas ao grau de reprodutibilidade da pesquisa desenvolvida. Cada artigo deverá ser revisado por no mínimo dois alunos distintos, sendo a nota atribuída no quesito "avaliação pelos colegas" a média entre as notas recebidas dos revisores (ver item 1, acima).

Prazos

- Código e artigo científico com resultados da pesquisa: **07/11/2025 às 23:59h**. O artigo deve ser entregue em **pdf**, utilizando o template indicado, através do Moodle
- Revisão de artigos pelos pares: **10/11/2025 a 16/11/2025, às 23:59h**, utilizando o formulário online a ser disponibilizado pela professora através do Moodle
- Apresentação oral do trabalho: **19/11/2025**

Observações finais

O uso do **chatGPT é permitido como ferramenta de auxílio** aos grupos nas diferentes etapas do desenvolvimento do trabalho. Entretanto, **não deve ser usado para substituir o esforço humano**, e sim para complementá-lo ou para melhorar direcionar este esforço.

Sugere-se ler com bastante atenção os documentos disponibilizados no Moodle com diretrizes para uso de ferramentas de IA e orientações para citação. Salienta-se que caso sejam usadas ferramentas de IA como chatGPT, as mesmas devem ser citadas no artigo. Adicionalmente, nestes casos, pede-se que os grupos preparem um material suplementar ao artigo indicando os prompts usados e mencionando quaisquer limitações ou potenciais identificados ao empregar a ferramenta no desenvolvimento deste trabalho prático.

Dúvidas

Em caso de dúvidas sobre a realização do trabalho, incluindo a definição do tema de pesquisa, entre em contato com a professora através do e-mail mrmendoza@inf.ufrgs.br