UNIVERSIDADE FEDERAL DO ESPÍRITO SANTO CENTRO DE CIÊNCIAS JURÍDICAS E ECONÔMICAS PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ECONOMIA

ALBERSON DA SILVA MIRANDA

ENSAIOS EM MÉTODOS DE MACHINE LEARNING PARA RECONCILIAÇÃO ÓTIMA DE SÉRIES TEMPORAIS HIERÁRQUICAS E AGRUPADAS

VITÓRIA

ALBERSON DA SILVA MIRANDA

ENSAIOS EM MÉTODOS DE MACHINE LEARNING PARA RECONCILIAÇÃO ÓTIMA DE SÉRIES TEMPORAIS HIERÁRQUICAS E AGRUPADAS

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Economia da Universidade Federal do Espírito Santo, como requisito para a obtenção do título de Mestre em Economia.

Orientador: Prof. Dr. Guilherme A. de A. Pereira

VITÓRIA 2024

ALBERSON DA SILVA MIRANDA

ENSAIOS EM MÉTODOS DE MACHINE LEARNING PARA RECONCILIAÇÃO ÓTIMA DE SÉRIES TEMPORAIS HIERÁRQUICAS E AGRUPADAS/ ALBERSON DA SILVA MIRANDA. – VITÓRIA, 2024-

71p.: il. (algumas color.); 30 cm.

Orientador: Prof. Dr. Guilherme A. de A. Pereira

Dissertação (Mestrado) – UNIVERSIDADE FEDERAL DO ESPÍRITO SANTO CENTRO DE CIÊNCIAS JURÍDICAS E ECONÔMICAS PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ECONOMIA, 2024.

1. Economia Bancária. 2. Séries Temporais Hierárquicas. 3. Reconciliação Ótima. 4. Machine Learning. I. Pereira, Guilherme Armando de Almeida. II. Universidade Federal do Espírito Santo. III. Centro de Ciências Jurídicas e Econômicas. IV. Título

ALBERSON DA SILVA MIRANDA

ENSAIOS EM MÉTODOS DE MACHINE LEARNING PARA RECONCILIAÇÃO ÓTIMA DE SÉRIES TEMPORAIS HIERÁRQUICAS E AGRUPADAS

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Economia da Universidade Federal do Espírito Santo, como requisito para a obtenção do título de Mestre em Economia.

Aprovada em 29 de fevereiro de 2024.

COMISSÃO EXAMINADORA

Prof. Dr. Guilherme A. de A. Pereira Universidade Federal do Espírito Santo Orientador

Prof. Dr. Edson Zambon Monte Universidade Federal do Espírito Santo

Prof. Dr. Fernando Luiz Cyrino OliveiraPUC-Rio

RESUMO

O campo de pesquisa em métodos para previsões de séries temporais hierárquicas tem se mostrado fértil na última década, com seus avanços contribuindo para ganhos de acurácia na previsão de uma ampla gama de coleções de séries temporais. Recentemente, métodos de machine learning (ML) têm sido incorporados à literatura de séries temporais hierárquicas, com trabalhos como os de Spiliotis et al. (2021) e Makridakis, Spiliotis e Assimakopoulos (2022) demonstrando resultados promissores. Este trabalho estende a exploração desses métodos na reconciliação ótima de séries temporais hierárquicas e agrupadas, investigando abordagens como random forest, gradient boosting, elastic net e support vector machines, e avaliando tanto sua performance preditiva quanto sua praticidade em termos de tempo de processamento. Além disso, o trabalho explora os efeitos de diferentes estratégias de obtenção do conjunto de treinamento para os modelos de ML, utilizando previsões para dentro da amostra obtidas via rolling origin forecasting, valores ajustados de modelos reestimados (reduced fitted base) e valores ajustados dos modelos de previsão base (fitted base). Para avaliar a metodologia proposta, foram realizados três estudos de caso, sendo o primeiro relacionado a uma aplicação em economia bancária no Brasil, enquanto os demais envolvem bases de dados relacionadas ao setor de turismo doméstico australiano, amplamente utilizadas na literatura de séries temporais hierárquicas: 1. previsão de saldos de empréstimos e financiamentos do Banco do Estado do Espírito Santo; 2. previsão da quantidade trimestral de viagens; e 3. previsão da quantidade mensal de noites que os visitantes passam em viagens. Os resultados revelam que não há método ou estratégia que alcance consistentemente a melhor performance em todas as bases de dados ou níveis hierárquicos. Portanto, a escolha do método de reconciliação e da estratégia para obtenção do conjunto de treinamento depende não apenas da amostra, mas também do nível hierárquico de interesse do pesquisador. A combinação correta do método de ML e da estratégia pode resultar em até 91% de ganho de performance em relação aos métodos analíticos de reconciliação ótima.

Palavras-chave: Séries Temporais Hierárquicas. Reconciliação Ótima. *Machine Learning*. Economia Bancária.

ABSTRACT

In the past decade, the field of hierarchical time series forecasting has witnessed significant growth, marked by advancements that have enhanced accuracy of predicting a wide variety of time series. Recently, machine learning (ML) methods have been incorporated into the literature on hierarchical time series, with works such as those by Spiliotis et al. (2021) and Makridakis, Spiliotis e Assimakopoulos (2022) demonstrating promising results. This thesis builds upon these advancements, further exploring the potential of ML methods for optimal reconciliation of hierarchical and grouped time series by investigating approaches such as random forest, gradient boosting, elastic net and support vector machines. It assesses both their predictive performance and practical feasibility in terms of processing time. Moreover, the thesis investigates the impact of various training set acquisition strategies for ML models. These strategies include in-sample forecasts obtained through rolling origin forecasting, fitted values of reestimated models, and fitted values of base forecasts models. To evaluate the proposed methodology, three case studies were undertaken. The initial case study focuses on applying ML reconciliation in the context of Brazilian banking economics. Subsequent studies center on Australian domestic tourism datasets, which are frequently referenced in hierarchical time series literature. These include forecasting loan and financing balances for the State Bank of Espírito Santo (Brazil), quarterly overnight trips, and monthly visitor nights. The findings reveal that no single method or strategy consistently outperforms others across all datasets or hierarchical levels. Thus, the choice of reconciliation method and training set strategy hinges not only on the sample but also on the researcher's specific hierarchical level of interest. Nonetheless, the appropriate combination of ML method and strategy can yield up to a 91% improvement in accuracy compared to the best-performing analytical reconciliation method.

Keywords: Hierarchical Time-Series. Optimal Reconciliation. Machine Learning. Economics of Banking.

LISTA DE FIGURAS

| Figura 1 – Séries Hierárquicas | 16 |
|--|----|
| Figura 2 – Séries Agrupadas | 17 |
| Figura 3 – Séries Hierárquicas Agrupadas (a) | 18 |
| Figura 4 – Séries Hierárquicas Agrupadas (b) | 18 |
| Figura 5 - Previsões base a serem reconciliadas | 26 |
| Figura 6 – Esquema de modelagem rolling forecast | 27 |
| Figura 7 – Metodologia de combinação ótima via ML. Estratégia rolling forecast | 28 |
| Figura 8 – Metodologia de combinação ótima via ML. Estratégia <i>reduced fitted values</i> . | 29 |
| Figura 9 – Metodologia de combinação ótima via ML. Estratégia <i>fitted values</i> | 30 |
| Figura 10 — Validação k -fold aleatória | 32 |
| Figura 11 — Validação k -fold com origem móvel | 32 |
| Figura 12 — Validação k -fold não-dependente | 33 |
| Figura 13 – O Estado do Espírito Santo e suas meso e microrregiões | 38 |
| Figura 14 – Série temporal do agregado de crédito do Banestes no ES | 39 |
| Figura 15 – Séries temporais do agregado de crédito do Banestes por mesorregião do ES | 39 |
| Figura 16 – Séries temporais do agregado de crédito do Banestes por microrregião do ES | 40 |
| Figura 17 – Séries temporais dos verbetes no agregado do ES | 40 |
| Figura 18 – Séries temporais dos verbetes por mesorregião do ES | 41 |
| Figura 19 – Crescimento de árvores em algoritmos de <i>boosting</i> | 66 |
| Figure 20 - Support vector classifiers | 68 |

LISTA DE TABELAS

| Tabela 1 – Conjunto de treinamento para predição dos modelos de ML | 27 |
|--|----|
| Tabela 2 – Microrregiões por mesorregião | 37 |
| Tabela 3 – Municípios por microrregião | 38 |
| Tabela 4 — Resultados do teste de Ljung-box para as previsões base ($\alpha=0.05$) | 41 |
| Tabela 5 — Resultados Estban: Acurácia dos métodos analíticos de reconciliação | 44 |
| Tabela 6 – Resultados Estban: Acurácia dos métodos de ML de reconciliação, estratégia | |
| rolling forecast + validação cruzada aleatória | 44 |
| Tabela 7 – Resultados Estban: Acurácia dos métodos de ML de reconciliação, estratégia | |
| rolling forecast + validação cruzada com origem móvel | 44 |
| Tabela 8 – Resultados Estban: Acurácia dos métodos de ML de reconciliação, estratégia | |
| fitted values + validação cruzada aleatória | 45 |
| Tabela 9 – Resultados Estban: Acurácia dos métodos de ML de reconciliação, estratégia | |
| fitted values + validação cruzada com origem móvel | 45 |
| Tabela 10 – Resultados Estban: Acurácia dos métodos de ML de reconciliação, estratégia | |
| reduced fitted values + validação cruzada aleatória | 46 |
| Tabela 11 — Resultados Estban: Acurácia dos métodos de ML de reconciliação, estratégia | |
| reduced fitted values + validação cruzada com origem móvel | 46 |
| Tabela 12 — Resultados Estban: Tempo de processamento dos métodos de ML (em horas). | |
| Validação cruzada aleatória | 46 |
| Tabela 13 — Resultados Estban: Tempo de processamento dos métodos de ML (em horas). | |
| Validação cruzada com origem móvel | 47 |
| Tabela 14 – Resultados para "overnight trips": Acurácia dos métodos analíticos de recon- | |
| ciliação | 49 |
| Tabela 15 – Resultados para "overnight trips": Acurácia dos métodos de ML de reconci- | |
| liação, estratégia rolling forecast | 50 |
| Tabela 16 – Resultados para "overnight trips": Acurácia dos métodos de ML de reconci- | |
| liação, estratégia fitted values | 50 |
| Tabela 17 – Resultados para "overnight trips": Acurácia dos métodos de ML de reconci- | |
| liação, estratégia reduced fitted values | 51 |
| Tabela 18 – Resultados para "overnight trips": Tempo de processamento dos métodos de | |
| ML (em horas) | 51 |
| Tabela 19 – Resultados para "visitor nights": Acurácia dos métodos analíticos de recon- | |
| ciliação | 51 |
| Tabela 20 – Resultados para "visitor nights": Acurácia dos métodos de ML de reconcili- | |
| ação, estratégia rolling forecast | 52 |

| Tabela 21 – Resultados para "visitor nights": Acurácia dos métodos de ML de reconcili- | |
|--|----|
| ação, estratégia fitted values | 52 |
| Tabela 22 – Resultados para "visitor nights": Acurácia dos métodos de ML de reconcili- | |
| ação, estratégia reduced fitted values | 53 |
| Tabela 23 – Resultados para "visitor nights": Tempo de processamento dos métodos de | |
| ML (em horas) | 53 |
| Tabela 24 – Intervalos de hiperparâmetros para {xgboost} | 70 |
| Tabela 25 — Intervalos de hiperparâmetros para {lightgbm} | 70 |
| Tabela 26 – Intervalos de hiperparâmetros para {ranger} | 70 |
| Tabela 27 – Intervalos de hiperparâmetros para {e1071} (svm) | 71 |
| Tabela 28 — Intervalos de hiperparâmetros para {glmnet} | 71 |
| | |

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

Banestes BANco do ESTado do Espírito Santo

ETS Exponentional Smoothing

Favar Factor Augmented Vector Autoregression

Lasso Least Absolute Shrinkage and Selection Operator

LGBM Light Gradient Boosting Machine

MCRL Modelo Clássico de Regressão Linear

MASE Mean Absolute Scaled Error

MinT Minimum Trace

ML Machine Learning

MQGF Mínimos Quadrados Generalizados Factíveis

MQO Mínimos Quadrados Ordinários

MQP Mínimos Quadrados Ponderados

PIB Produto Interno Bruto

RF Random Forest

RMSSE Root Mean Squared Scaled Error

SFN Sistema Financeiro Nacional

SVM Support Vector Machines

SVR Support Vector Regression

XGBoost Extreme Gradient Boosting

LISTA DE SÍMBOLOS

| t | Tempo dentro da amostra |
|------------------|---|
| T | Último tempo dentro da amostra |
| h | Horizonte de previsão, tempo fora da amostra |
| Ω | Conjunto de dados dentro da amostra |
| y | Série temporal dentro da amostra |
| \hat{y} | Série temporal estimada |
| $	ilde{y}$ | Série temporal reconciliada |
| n | Número de séries na hierarquia |
| m | Número de séries no menor nível da hierarquia |
| k | Número de níveis na hierarquia |
| $oldsymbol{S}$ | Matriz de soma |
| \boldsymbol{G} | Matriz de reconciliação |
| {} | Conjunto |
| {} | Cardinalidade de um conjunto |

SUMÁRIO

| 1 | | 13 |
|-----|--|----|
| 1.1 | Contextualização da pesquisa | 13 |
| 1.2 | Outline | 15 |
| 2 | RECONCILIAÇÃO DE SÉRIES TEMPORAIS HIERÁRQUICAS E | |
| | AGRUPADAS | 16 |
| 2.1 | Notação algébrica | 16 |
| 2.2 | Abordagens de nível único | 18 |
| 2.3 | Coerência e reconciliação | 23 |
| 3 | ESTENDENDO O FRAMEWORK DE COMBINAÇÃO ÓTIMA VIA | |
| | MACHINE LEARNING | 25 |
| 3.1 | Introdução | 25 |
| 3.2 | Metodologia de combinação ótima via machine learning | 26 |
| 3.3 | Notas sobre otimização de hiperparâmetros na reconciliação ótima | 31 |
| 3.4 | Conclusão | 33 |
| 4 | PREVISÃO DE SALDOS DE EMPRÉSTIMOS E FINANCIAMEN- | |
| | TOS DO BANCO DO ESTADO DO ESPÍRITO SANTO | 34 |
| 4.1 | Introdução | 34 |
| 4.2 | Revisão de literatura | 36 |
| 4.3 | Metodologia | 36 |
| 4.4 | Resultados | 42 |
| 4.5 | Conclusão | 47 |
| 5 | PREVISÃO PARA O TURISMO DOMÉSTICO AUSTRALIANO | 48 |
| 5.1 | Introdução | 48 |
| 5.2 | Resultados | 49 |
| 6 | CONCLUSÃO | 53 |
| | REFERÊNCIAS | 55 |
| | APÊNDICES | 60 |
| | APÊNDICE A – DEMONSTRAÇÕES | 61 |
| | APÊNDICE B – MÉTODOS DE MACHINE LEARNING | 64 |
| 1 | Elastic Net | 64 |
| 2 | Gradient Boosting | 65 |

| 3 | Random Forest | 65 |
|---|---|----|
| 4 | Support Vector Machines | 66 |
| | APÊNDICE C – CONJUNTOS DE HIPERPARÂMETROS | 70 |

1 INTRODUÇÃO

1.1 Contextualização da pesquisa

Diversas indústrias se enquadram em categorias de negócio que requerem previsões de múltiplas séries temporais correlacionadas que são resultados de agregação. Por exemplo, o total de empréstimos de uma instituição financeira corresponde ao agregado dos empréstimos de cada uma de suas agências; o total de vendas de uma rede nacional de farmácias corresponde ao agregado de vendas de suas unidades em cada estado; o total da produção de uma petrolífica multinacional corresponde ao total produzido em cada país por cada uma de suas plataformas. A essas estruturas naturais de agregação dá-se o nome de *séries temporais hierárquicas* (HYN-DMAN; ATHANASOPOULOS, 2021).

No que concerne a elaboração dessas previsões, pode-se realizar previsões individualmente para todos os níveis da estrutura. No caso de uma empresa qualquer, isso significa realizar previsões, por exemplo, para cada filial, para o agregado das filiais de cada região e para o agregado da instituição. Infelizmente, não há qualquer razão matemática, exceto para métodos de previsão muito simples, para que essas previsões sejam *coerentes* (i.e. que a soma das previsões individuais seja igual às previsões do agregado). Para garantir previsões coerentes entre si foram desenvolvidos os chamados métodos de previsão hierárquicas (ATHANASOPOULOS; AHMED; HYNDMAN, 2009), sendo os mais simples o *top-down*, *bottom-up* e uma combinação das duas, o *middle-out*.

Ao menos desde a década de 1960, diversos trabalhos foram publicadas acerca das abordagens *bottom-up* e *top-down*, suas vantagens e desvantagens, e tentativas de se definir qual é o melhor método¹. A abordagem *top-down* envolve realizar previsões para o total e então distribuílas para cada nó filho da estrutura seguindo alguma lógica proporcional. Tomando o caminho inverso, a abordagem *bottom-up* consiste em realizar previsões para cada série do nível mais desagregado e, então, agregá-las para obter as previsões para os níveis superiores. Ambos métodos possuem suas vantagens e desvantagens e cabe ao analista avaliar o *trade-off* entre os ganhos de precisão percebidos com a geração de previsões individuais para todas as séries do menor nível hierárquico e a economia de tempo e processamento em realizar o contrário (GROSS; SOHL, 1990).

Além disso, ambas são abordagens de nível único, isto é, são realizadas as previsões para um único nível e então os demais níveis são obtidos agregando ou desagregando. O problema com esses tipos de abordagem é que elas utilizam informação incompleta (HYNDMAN; ATHANASOPOULOS, 2021). Por exemplo, suponha-se que se escolha estimar modelos para cada uma das n filiais de uma empresa e agregá-las (bottom-up). Nesse caso, ignora-se a influência que os níveis mais agregados podem ter na estimação de cada filial. Por outro lado,

Revisões sistemáticas das literaturas iniciais relacionadas ao tema podem ser encontradas em Athanasopoulos, Ahmed e Hyndman (2009) e Athanasopoulos, Hyndman, Kourentzes e Panagiotelis (2023).

caso se escolha estimar modelos para o nível mais agregado (*top-down*), ignora-se a informação individual de cada filial.

Uma terceira possibilidade é a *reconciliação ótima*. Ela é uma abordagem que busca resolver esse problema e consiste em realizar previsões para todos os níveis hierárquicos e, então, estimar um modelo para reescrever as previsões do nível mais desagregado como uma combinação linear de todos os elementos da hierarquia. Obtidas as novas previsões no menor nível, elas são então agregadas, gerando previsões coerentes nos níveis superiores. Dessa forma, a informação de todos os níveis é utilizada na estimação dos modelos e na geração das previsões ao mesmo tempo em que a variância do erro de previsão é minimizada (WICKRAMASURIYA; ATHANASOPOULOS; HYNDMAN, 2019).

Atualmente, os métodos analíticos baseados na minimização do traço (MinT) da matriz da variância-covariância dos erros das previsões reconciliadas, desenvolvidos em Wickramasuriya, Athanasopoulos e Hyndman (2019), estão entre os mais populares na literatura da reconciliação ótima. Esses métodos divergem apenas na forma da qual se dá o relacionamento entre os diferentes elementos da hierarquia, resultando numa estimação por mínimos quadrados ordinários (MQO), mínimos quadrados ponderados (MQP) ou mínimos quadrados generalizados (MQG)².

Entretanto, tais métodos são sujeitos a uma série de restrições, como as do modelo clássico de regressão linear (MCRL), e têm sua capacidade preditiva reduzida quando suas hipóteses são violadas. Além disso, esses métodos requerem que *toda* a informação seja utilizada, mesmo aquelas que eventualmente não sejam relevantes para aquela previsão. Nesse sentido, métodos de *machine learning* são mais gerais, de modo a permitir parâmetros não lineares e poderem aproximar virtualmente qualquer função, além de incluírem parâmetros de regularização, de forma que não necessariamente utilizam toda a informação disponível. Espera-se, portanto, que esses métodos alcancem melhor performance no problema da reconciliação ótima, justificando a pesquisa e atenção ao tema. Nessa direção, Spiliotis et al. (2021) propuseram uma metodologia para reconciliação ótima de séries temporais hierárquicas utilizando métodos de *machine learning*, especificamente o *gradient boosting* e *random forest*, obtendo resultados superiores aos métodos analíticos em algumas situações.

Tomando como ponto de partida a metodologia proposta por Spiliotis et al. (2021), este trabalho explora métodos adicionais de ML na tarefa de reconciliação ótima, especificamente os métodos de regressão regularizada Lasso, *ridge* e *elastic net*, e *support vector machines* (SVM), além de outra implementação de *gradient boosting*, o *LightGBM* (LGBM). Paralelamente, propõe e avalia estratégias alternativas na obtenção do conjunto de treinamento para os modelos de ML, verificando se sua performance preditiva supera a dos métodos analíticos nas

Se os erros de previsão são descorrelacionados e homoscedásticos ao longo de toda estrutura (MQO), o que é impossível em séries temporais hierárquicas; se os erros são descorrelacionados e homoscedásticos apenas dentro do mesmo nível hierárquico (MQP estrutural); se os erros são descorrelacionados mas ponderados pela variância da série (MQP); ou se são correlacionados e variantes ao longo de toda a estrutura (MQG).

situações em que a metodologia original não foi capaz.

Para tanto, foram realizados três estudos de caso, sendo o primeiro em um contexto de economia bancária brasileira, enquanto os demais envolvem bases de dados amplamente utilizadas na literatura de séries temporais hierárquicas, relacionadas ao setor de turismo doméstico australiano. O primeiro estudo de caso trata da previsão de saldos de empréstimos e financiamentos do Banco do Estado do Espírito Santo (Banestes); o segundo, da previsão da quantidade trimestral de viagens domésticas na Austrália; e o terceiro, da previsão da quantidade mensal de noites que os visitantes passam em viagens domésticas na Austrália.

1.2 Outline

Esta dissertação está organizada da seguinte forma: no Capítulo 2, é introduzida a formalização algébrica e metodológica necessária para a compreensão dos métodos de previsões de séries temporais hierárquicas e reconciliação ótima, assim como uma breve revisão de literatura englobando os artigos seminais para o tema. No Capítulo 3, são apresentadas as variações de metodologias propostas para reconciliação ótima por ML. No Capítulo 4, é realizado o estudo de caso para a previsão de saldos de crédito e financiamento para o Banestes. No Capítulo 5, são realizados os estudos de casos para as bases de turismo doméstico australiano.

Uma síntese das contribuições desse trabalho é expressa pelos seguintes pontos:

- 1. Como trabalhos anteriores já haviam evidenciado, a reconciliação ótima por ML é capaz de melhorar a acurácia das previsões de séries temporais hierárquicas e agrupadas em relação aos métodos analíticos;
- 2. Além do *XGBoost* (XGB) e do *random forest* (RF), já testados em Spiliotis et al. (2021), foram avaliados na tarefa de reconciliação ótima os métodos de ML LGBM, *Lasso*, *ridge*, *elastic net*, e SVM.
- 3. Principalmente devido à quantidade de hiperparâmetros a serem calibrados, os métodos de ML baseados em árvore de decisão (XGB, RF e LGBM) apresentaram custo elevado em tempo de processamento, ao mesmo tempo em que não foram capazes de superar métodos mais simples, como os de regressão regularizada e SVM, de forma que o *trade-off* entre acurácia e tempo de processamento não foi justificado.
- 4. Foram investigadas três estratégias para obtenção do conjunto de treinamento dos modelos de reconciliação ótima por ML: o *rolling forecasting* (proposta em Spiliotis et al. (2021)), e outras duas adicionais propostas neste trabalho, a primeira utilizando os valores ajustados dos modelos de previsão base e a segunda utilizando os valores ajustados de modelos reestimados;
- 5. Não houve método ou estratégia que alcançasse consistentemente a melhor performance em todos os três estudos de caso, ou mesmo ao longo de todos os níveis hierárquicos de cada estudo de caso. Em geral, os métodos de ML obtiveram melhor resultados, ou

- nos níveis mais desagregados, ou nos mais agregados, a depender do conjunto de dados analisado;
- 6. A combinação correta do método de ML e da estratégia para obtenção do conjunto treinamento pode resultar em até 91% de ganho de performance em relação aos métodos analíticos de reconciliação ótima.

2 RECONCILIAÇÃO DE SÉRIES TEMPORAIS HIERÁR-QUICAS E AGRUPADAS

2.1 Notação algébrica

Séries temporais hierárquicas são aquelas que podem ser agregadas ou desagregadas naturalmente em uma estrutura aninhada (HYNDMAN; ATHANASOPOULOS, 2021). Para ilustrar, tome a série do PIB de um país fictício com três estados, cada um com dois municípios. Essa série pode ser desagregada por estado que, por sua vez, pode ser desagregada por município (Figura 1).

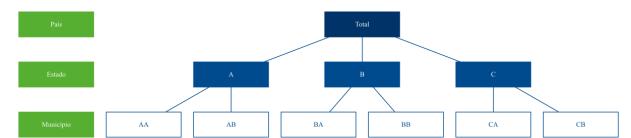


Figura 1 – Séries Hierárquicas

Essa estrutura pode ser representada através de equações para qualquer nível de agregação. Dessa forma, o agregado nacional pode ser descrito pelos agregados dos estados, Equação (1), ou como o agregado dos municípios, Equação (2). Já o agregado para o estado A é representado pela Equação (3).

$$y_t = y_{A,t} + y_{B,t} + y_{C,t} \tag{1}$$

$$y_t = y_{AA,t} + y_{AB,t} + y_{BA,t} + y_{BB,t} + y_{CA,t} + y_{CB,t}$$
 (2)

$$y_{A,t} = y_{AA,t} + y_{AB,t} (3)$$

Alternativamente, podemos descrever a estrutura completa de forma matricial:

$$\begin{vmatrix} y_{t} \\ y_{A,t} \\ y_{B,t} \\ y_{C,t} \\ y_{AA,t} \\ y_{BA,t} \\ y_{BB,t} \\ y_{CB,t} \\ y_{CB,t} \end{vmatrix}_{10 \times 1} = \begin{vmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{vmatrix} \begin{bmatrix} y_{AA,t} \\ y_{AB,t} \\ y_{BA,t} \\ y_{BB,t} \\ y_{CA,t} \\ y_{CB,t} \end{bmatrix}_{6 \times 1}$$

$$(4)$$

Uma outra forma de desagregarmos o PIB é por atividade econômica — agricultura, indústrias extrativas, indústria de transformação, eletricidade e gás, construção etc (Figura 2). Essa estrutura não pode ser desagregada naturalmente de uma única maneira, como é a hierarquia de estados e municípios. Não pode ser aninhada por um atributo como a própria geografía. A esse tipo de estrutura dá-se o nome de *séries temporais agrupadas*.



Figura 2 – Séries Agrupadas

Combinando as duas, temos a estrutura de séries hierárquicas agrupadas. Ao contrário da estrutura hierárquica, que só pode ser agregada de uma forma, como com os municípios abaixo dos estados³, a adição da estrutura agrupada pode ocorrer tanto acima (Figura 3) quanto abaixo (Figura 4) da hierárquica.

Na notação matricial, a estrutura da Figura 4 é representada como abaixo. Formalmente, o primeiro membro da igualdade é composto pelo vetor \boldsymbol{y}_t n-dimensional com todas as observações no tempo t para todos os níveis da hierarquia. O segundo membro é composto pela matriz de soma \boldsymbol{S} de dimensão $n \times m$ que define as equações para todo nível de agregação, e pelo vetor \boldsymbol{b}_t composta pelas séries no nível mais desagregado.

$$y_t = Sb_t \tag{5}$$

Essa estrutura é única no sentido que o somatório dos municípios totaliza o estado, mas não se pode somar estados para totalizar um município. Outro exemplo de estrutura hierárquica é a série de vendas de uma empresa: pode-se agregar as vendas de cada filial para obter o total, mas não o contrário.

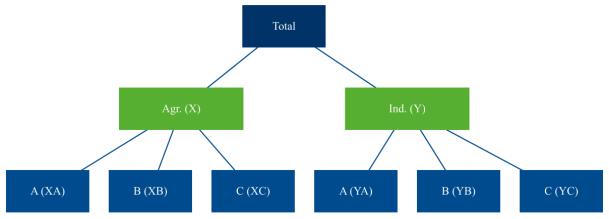


Figura 3 – Séries Hierárquicas Agrupadas (a)

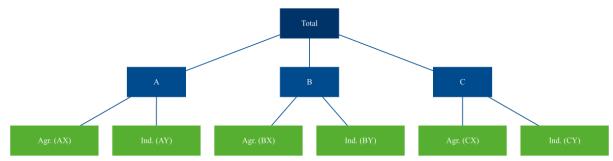


Figura 4 – Séries Hierárquicas Agrupadas (b)

$$\begin{bmatrix} y_t \\ y_{A,t} \\ y_{B,t} \\ y_{C,t} \\ y_{X,t} \\ y_{Y,t} \\ y_{AX,t} \\ y_{BX,t} \\ y_{BX,t} \\ y_{BX,t} \\ y_{BY,t} \\ y_{CY,t} \end{bmatrix}_{12\times 1} = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}_{12\times 6} \begin{bmatrix} y_{AX,t} \\ y_{AY,t} \\ y_{AY,t} \\ y_{BX,t} \\ y_{CX,t} \\ y_{CY,t} \end{bmatrix}_{6\times 1}$$

$$(6)$$

2.2 Abordagens de nível único

As abordagens de nível único são aquelas em que as previsões são realizadas para um único nível hierárquico. A partir dessas previsões, os demais níveis são obtidos, ou desagregando (no caso dos níveis inferiores), ou agregando (no caso dos níveis superiores) essas previsões (HYNDMAN; ATHANASOPOULOS, 2021). Os métodos *top-down*, *bottom-up* e *middle-out* são abordagens de nível único.

Enquanto há apenas uma única forma de se agregar níveis na hierarquia (*bottom-up*), a desagregação (*top-down*) pode ser realizada de, ao menos, duas dezenas de maneiras (GROSS; SOHL, 1990). Dois dos métodos mais intuitivos são a média das proporções históricas e a proporção das médias históricas.

Na média das proporções históricas, cada proporção p_j , com j=1,...,m, consiste em tomar a média das proporções da série desagregada $y_{j,t}$ em relação ao agregado $y_{1,t}$:

$$p_j = \frac{1}{T} \sum_{t=1}^{T} \frac{y_{j,t}}{y_{1,t}} \tag{7}$$

Já a proporção das médias históricas consiste em tomar a proporção das médias das séries desagregadas em relação à média do agregado⁴.

$$p_{j} = \frac{\sum_{t=1}^{T} \frac{y_{j,t}}{T}}{\sum_{t=1}^{T} \frac{y_{1,t}}{T}}$$
 (8)

Athanasopoulos, Ahmed e Hyndman (2009) desenvolvem o método proporções de previsão, que consiste em um método *top-down* em que os pesos são calculados a partir das proporções das previsões fora da amostra ao invés do passado. A vantagem do método é que os pesos estarão os mais próximos das características mais recentes da série, ao invés de serem baseados em dados históricos. A desvantagem é que se deve realizar previsões para toda a hierarquia, perdendo o ganho de agilidade dos demais métodos *top-down*.

$$p_j = \prod_{i=0}^{K-1} \frac{\hat{Y}_{j,t+h}^i}{\sum \hat{Y}_{j,t+h}^{(i+1)}}$$

Uma vez definida a forma e os pesos com os quais as previsões do agregado serão distribuídas nos níveis inferiores, podemos definir uma matriz com todos esses pesos, que, seguindo a formulação de Hyndman e Athanasopoulos (2021), chamamos de G:

$$G = \begin{bmatrix} p_1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ p_2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ p_3 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ p_4 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ p_5 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ p_6 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}_{6 \times 10}$$

$$(9)$$

Isso é equivalente a tomar a proporção direta entre os somatórios das séries. Note que, pelas propriedades do operador de somatório, $\sum_{t=1}^{T}\frac{y_t}{T}=\frac{y_1}{T}+\ldots+\frac{y_T}{T}=\frac{y_1+\ldots+y_T}{T}=\frac{\sum_{t=1}^{T}y_t}{T}$. Então, a equação Equação 8 pode ser simplificada para $p_j=\frac{\sum_{t=1}^{T}y_{j,t}}{\sum_{t=1}^{T}y_{1,t}}$.

 ${m G}$ é uma matriz $m \times n$ que multiplica o vetor $\hat{{m y}}_{T+h|T}$ que chamamos de *previsões base*, isto é, as previsões individuais para todos os níveis de agregação. A equação para a abordagem *top-down* será, então:

$$\tilde{\boldsymbol{y}}_{T+h|T} = \boldsymbol{S}\boldsymbol{G}\hat{\boldsymbol{y}}_{T+h|T} \tag{10}$$

Na notação matricial para a estrutura da Figura 1, temos:

Multiplicando as matrizes G e \hat{y} obtemos o vetor b_t^5 , que contém as previsões para os níveis mais desagregados, agora definidas como proporção do total.

$$\begin{bmatrix} \tilde{y}_{t} \\ \tilde{y}_{A,t} \\ \tilde{y}_{B,t} \\ \tilde{y}_{C,t} \\ \tilde{y}_{AA,t} \\ \tilde{y}_{AB,t} \\ \tilde{y}_{BA,t} \\ \tilde{y}_{BB,t} \\ \tilde{y}_{CA,t} \\ \tilde{y}_{CB,t} \end{bmatrix}_{10 \times 1} = \boldsymbol{S}_{10 \times 6} \begin{bmatrix} p_{1}\hat{y}_{T+h|T} \\ p_{2}\hat{y}_{T+h|T} \\ p_{3}\hat{y}_{T+h|T} \\ p_{4}\hat{y}_{T+h|T} \\ p_{5}\hat{y}_{T+h|T} \\ p_{6}\hat{y}_{T+h|T} \end{bmatrix}_{6 \times 1}$$

$$(12)$$

Note que, por se tratar de um método top-down, é necessário apenas o primeiro elemento do vetor de previsões base, ou seja, a previsão do nível mais agregado (Equação 12). Sendo essa exatamente uma das vantagens do método top-down, na prática, podemos anular os demais elementos de \hat{y} .

⁵ Ver Equação 5.

Substituindo a matriz S, temos as equações que definem as previsões reconciliadas.

Já a abordagem bottom-up parte do raciocínio inverso e define as previsões de cada elemento da estrutura a partir das previsões dos elementos mais desagregados. Para tanto, basta modificar a matriz G.

$$G = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}_{6 \times 10}$$

$$(15)$$

Portanto, G define a abordagem — se top-down, bottom-up ou outro qualquer —, e S define a maneira da qual as previsões são somadas para formar as equações de previsão para cada elemento da estrutura. Portanto, chamamos G de matriz de reconciliação.

$$\begin{bmatrix} \tilde{y}_{t} \\ \tilde{y}_{A,t} \\ \tilde{y}_{B,t} \\ \tilde{y}_{C,t} \\ \tilde{y}_{AA,t} \\ \tilde{y}_{BA,t} \\ \tilde{y}_{BB,t} \\ \tilde{y}_{CB,t} \end{bmatrix}_{10 \times 1} = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}_{10 \times 6} \begin{bmatrix} \hat{y}_{AA,T+h|T} \\ \hat{y}_{AB,T+h|T} \\ \hat{y}_{BA,T+h|T} \\ \hat{y}_{CB,T+h|T} \\ \hat{y}_{CB,T+h|T} \end{bmatrix}_{6 \times 1}$$

$$(16)$$

Quando m — a quantidade de elementos do nível mais desagregado — é muito grande, tornando muito custoso obter \hat{y}_t , e não se deseja uma abordagem estritamente top-down, pode-se combinar as duas formas:

Esse método é chamado de middle-out. Nele, o vetor \boldsymbol{b}_t é reescrito como proporções de algum nível intermédiário arbitrariamente escolhido, ao invés de proporções do total. Isso permite uma abordagem mais econômica, em termos de custo computacional e de tempo, ao mesmo tempo em que mantém em algum grau as características individuais das hierarquias.

$$\begin{bmatrix} \tilde{y}_{t} \\ \tilde{y}_{A,t} \\ \tilde{y}_{B,t} \\ \tilde{y}_{C,t} \\ \tilde{y}_{AB,t} \\ \tilde{y}_{BA,t} \\ \tilde{y}_{BB,t} \\ \tilde{y}_{CB,t} \\ \tilde{y}_{CB,t} \end{bmatrix}_{n\times 1} = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}_{n\times m} \begin{bmatrix} p_{1}\hat{y}_{A,T+h|T} \\ p_{2}\hat{y}_{A,T+h|T} \\ p_{3}\hat{y}_{A,T+h|T} \\ p_{5}\hat{y}_{B,T+h|T} \\ p_{6}\hat{y}_{B,T+h|T} \end{bmatrix}_{m\times 1}$$

$$(18)$$

2.3 Coerência e reconciliação

Seja somando as previsões do nível mais desagregado para formar os níveis superiores da hierarquia (bottom-up) ou distribuindo proporcionalmente as previsões do nível mais agregado (top-down), o vetor \tilde{y}_t representa as previsões coerentes. Isso significa que as previsões são totalizadas corretamente — as previsões de cada elemento agregado corresponde ao somatório das previsões dos níveis inferiores da hierarquia. Isso é garantido pela multiplicação das matrizes SG.

Não fosse essa pré-multiplicação, nada garantiria a coerência das previsões. Tomando a estrutura da Figura 1 como exemplo, seria um acaso improvável que as previsões do agregado para o estado do Espírito Santo fossem exatamente a soma das previsões individuais de seus municípios. Isso porque não há qualquer razão para que cada série siga o mesmo processo estocástico.

Os métodos para gerar previsões coerentes (\tilde{y}_t) a partir de previsões base (\hat{y}_t) são chamados de métodos de reconciliação. Os métodos de reconciliação tradicionais apresentados, topdown e bottom-up, utilizam informação limitada. No método top-down, utiliza-se apenas informações do nível mais agregado — por isso, apenas a primeira coluna em (Equação 9) é diferente de zero. Já na abordagem bottom-up, utiliza-se apenas as informações dos níveis mais desagregados, o que resulta na submatriz identidade $m \times m$ (Equação 15), enquanto as colunas que representam os níveis mais agregados são nulas.

Alternativamente, podemos pensar numa matriz G qualquer que utilize toda a informação disponível e tenha algumas propriedades que garantam que as previsões coerentes tenham o menor erro o possível. Esse é o problema de pesquisa trabalhado na *reconciliação ótima*.

Os métodos analíticos de reconciliação ótima são aqueles que estimam a matriz de reconciliação G através de regressão linear. Isso resulta na redefinição das previsões do nível mais desagregado como uma combinação linear 6 das previsões de todos os elementos de todos os níveis da hierarquia, utilizando, assim, toda a informação disponível.

A primeira abordagem prática para reconciliação ótima, via MQO, é formalizada apenas em Hyndman, Ahmed et al. (2011). Hyndman, Lee e Wang (2016) tentam aperfeiçoar o método usando as variâncias das previsões individuais estimadas (dentro da amostra) como estimativa para a matriz de variância-covariância dos erros de reconciliação, de forma a utilizá-las como pesos e realizar a reconciliação ótima por mínimos quadrados ponderados (MQP).

Wickramasuriya, Athanasopoulos e Hyndman (2019) argumentam que o que de fato interessa é que as previsões reconciliadas tenham o menor erro. Então, corrigem a abordagem de reconciliação ótima para o objetivo de minimização dos erros das previsões reconciliadas \tilde{y}_{t+h} , ao invés dos erros das previsões individuais \hat{y}_{t+h} . Dado que isso implica na minimização da variância de \tilde{e}_{t+h} , ou seja, na minimização do somatório da diagonal, o traço, da matriz de

⁶ Por essa razão, esses métodos são também chamados de métodos de combinação.

variância-covariância de \tilde{e}_{t+h} , eles chamaram esse método de Traço Mínimo (MinT, na sigla em inglês).

Este método é considerado o estado-da-arte para a reconciliação ótima analítica. Nele, o objetivo é minimizar o erro das previsões reconciliadas:

$$\tilde{\boldsymbol{e}}_{t+h|t} = \boldsymbol{y}_{t+h} - \tilde{\boldsymbol{y}}_{t+h|t} \tag{19}$$

Essa equação pode ser reescrita como $ilde{e}_t = m{S}m{G}\hat{e}_t$, que tem variância dada por 7

$$Var[\tilde{e}] = SG\hat{W}_{t+h|t}G'S'$$
(20)

em que $\hat{m{W}}_{t+h|t}$ é a matriz de variância-covariância dos erros de previsão base.

A abordagem consiste então em se obter um valor de G que minimize o traço de $Var[y_{t+h} - \tilde{y}_{t+h|t}]$. Isso resultaria no melhor (variância mínima) estimador linear não viesado⁸ (WICKRAMASURIYA; ATHANASOPOULOS; HYNDMAN, 2019). Sua solução é dada por

$$G = (S'\hat{W}_{t+h|t}^{\dagger}S)^{-1}S'\hat{W}_{t+h|t}^{\dagger}$$
(21)

em que $\hat{W}_{t+h|t}^{\dagger}$ é a inversa generalizada de Moore-Penrose para $\hat{W}_{t+h|t}^{9}$. Essa formulação corresponde a um problema de regressão por mínimos quadradados generalizados, considerando S como a matriz de preditores e G os coeficientes a serem estimados. Consequentemente, as previsões ótimas reconciliadas são dadas por

$$\tilde{\mathbf{y}}_{t+h|t} = \mathbf{S}(\mathbf{S}'\hat{\mathbf{W}}_{t+h|t}^{\dagger}\mathbf{S})^{-1}\mathbf{S}'\hat{\mathbf{W}}_{t+h|t}^{\dagger}\hat{\mathbf{y}}_{t+h|t}$$
(22)

que são ao menos tão boas quanto as previsões individuais, de acordo com o demonstrado pelos autores.

Spiliotis et al. (2021) propõem a utilização de *machine learning* para a reconciliação ótima de séries temporais, especificamente os métodos de RF e *gradient boosting*. A ideia subjacente é treinar modelos individuais de ML para cada série do nível mais desagregado a partir de previsões para dentro da amostra obtidas via *rolling forecasting*, com o objetivo de encontrar a combinação contemporânea que minimiza os erros, para então usar esses modelos para combinar as previsões base. Os autores descrevem como vantagens desse método em relação aos anteriores a descrição de relacionamentos não lineares, performance preditiva e a desnecessidade da utilização de todos os elementos da hierarquia na combinação ótima. Para o conjunto de

Ver demonstração A.3.

A ausência de viés é garantida pela condição de ausência de viés em \tilde{y} .

A necessidade da inversa generalizada aqui é trivial, uma vez que a inversa regular, do tipo A^{-1} , requer matriz quadrada, o que não acontece no caso de séries temporais hierárquicas, uma vez que, necessariamente, tem-se n > m (n = m + número de nós de agregação). Além disso, \hat{W} é posto incompleto (ver demonstração A.4).

dados utilizados, os autores afirmam que o uso de ML, especialmente o XGB, permite alcançar maior performance em relação às abordagens de nível único e o MinT.

Panagiotelis et al. (2021) reinterpretam a literatura de coerência e reconciliação de previsões pontuais a partir de uma abordagem geométrica, trazendo provas alternativas para conclusões anteriores ao mesmo tempo em que fornece novos teoremas. Além disso, os autores estendem essa interpretação geométrica para o contexto probabilístico, fornecendo métodos paramétricos e não paramétricos (via *bootstrapping*) para reconciliação de previsões probabilísticas.

Shiratori, Kobayashi e Takano (2020) propõem a utilização de um termo de regularização para penalizar o erro dos níveis superiores na previsão das séries do nível mais desagregado, de forma a obter as previsões base já com a informação dos níveis superiores, substituindo a abordagem de combinação ótima. Assim como nas demais abordagens, a coerência é obtida através de agregação BU.

Uma revisão sistemática descrevendo os avanços e diferentes abordagens para reconciliação de previsões hierárquicas pode ser encontrada em Athanasopoulos, Hyndman, Kourentzes e Panagiotelis (2023). Isto posto, a presente dissertação foca em estender a abordagem de combinação ótima por ML, realizada em trabalhos como de Spiliotis et al. (2021), para a reconciliação de séries temporais hierárquicas e agrupadas, avaliando a efetividade de 7 implementações de métodos de ML (RF, XGB, *Lasso*, *ridge*, *elastic net*, SVM e LGBM), propondo variações metodológicas para a obtenção do conjunto de treinamento dos modelos de ML e obtendo ganhos significativos de performance em três estudos de caso.

3 ESTENDENDO O FRAMEWORK DE COMBINAÇÃO ÓTIMA VIA MACHINE LEARNING

3.1 Introdução

A ideia da reconciliação de previsões por combinação consiste em encontrar combinações, lineares ou não, que minimizem o erro de combinação contemporânea dentro da amostra e tenham o menor erro de generalização para o conjunto de previsões base, incoerentes, para fora da amostra. O objetivo é que, dada a performance das previsões base individuais \hat{y}_t , as previsões reconciliadas \tilde{y}_t , obtidas por combinação e agregadas de maneira BU, se tornem mais precisas por conta da incorporação de informações dos diferentes níveis hierárquicos e demais nós da estrutura.

Embora os métodos de ML também sejam utilizados no contexto de previsão de séries temporais, é importante ressaltar que este não é caso deste trabalho. As previsões de séries temporais são realizadas anteriormente, na obtenção das previsões base \hat{y}_t . Nada impede que essas previsões sejam obtidas por métodos de ML, inclusive utilizando técnicas de

previsão hierárquica na predição de séries individuais (ATHANASOPOULOS; HYNDMAN; KOURENTZES; PETROPOULOS, 2017), entretanto, a aplicação dos métodos de ML aqui ocorrem na reconciliação, ou seja, na combinação contemporânea, *cross section*, das previsões base que, por sua vez, podem ter sido obtidas através de qualquer método.

Nesse sentido, este trabalho busca estender o *framework* de combinação ótima utilizando métodos de ML para a reconciliação de séries temporais hierárquicas e agrupadas. Além de avaliar 7 implementações de métodos de ML (RF, XGB, *Lasso*, *ridge*, *elastic net*, SVM e LGBM)¹⁰, propõe variações metodológicas para a obtenção do conjunto de treinamento dos modelos de ML.

3.2 Metodologia de combinação ótima via machine learning

Spiliotis et al. (2021) propõem estimar essa combinação em uma abordagem que constitui-se nas seguintes etapas:

1. Previsões base: Para cada série y_t , incluindo os nós de agregação, utiliza-se todo o conjunto de treinamento, de tamanho T, para produzir previsões h passos à frente, $\hat{y}_{t+h|T}$, utilizando qualquer método de previsão. Essas são as previsões base a serem reconciliadas.



Figura 5 – Previsões base a serem reconciliadas. Em azul, o conjunto de treino e, em verde, as previsões h passos à frente para fora da amostra.

- 2. Rolling forecast: A amostra treino é separada em p subamostras para todas as séries em todos os níveis de agregação, com a primeira separação abrangindo y_1 até y_Q , a segunda y_1 até y_{Q+1} e assim sucessivamente até a última separação abrangendo y_1 até y_{Q+p-1} . Para cada subamostra é treinado um modelo que, mais uma vez, pode ser estimado utilizando qualquer método. Então, é realizada previsão um passo a frente. Essas previsões são então concatenadas para formar o conjunto de treinamento para os modelos de ML.
- 3. Treino dos modelos de ML: Para cada série do nível mais desagregado, y_m , é treinado um modelo de ML com n+1 variáveis, compostas pelas n séries previstas que incluem todos os níveis de agregação —, mais a própria y_m como variável explicada (Tabela 1). Cada uma das n séries contam com p previsões obtidas na 2^a etapa, representadas na Figura 6 pela cor verde. Isso resulta em um modelo de reconciliação ótima para cada

¹⁰ Uma breve introdução sobre cada um desses métodos pode ser encontrado no Apêndice B.

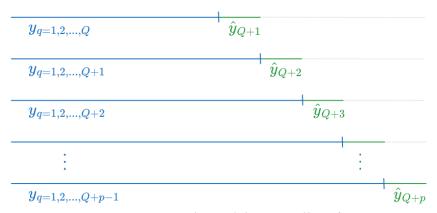


Figura 6 – Esquema de modelagem rolling forecast

elemento do menor nível da hierarquia, combinando informações disponíveis de todos os níveis hierárquicos.

| | | , , | | |
|----------------|-------------------|-------------------|-----|-------------------|
| Var. Explicada | Variável 1 | Variável 2 | | Variável n |
| $y_{1,Q+1}$ | $\hat{y}_{1,Q+1}$ | $\hat{y}_{2,Q+1}$ | | $\hat{y}_{n,Q+1}$ |
| $y_{1,Q+2}$ | $\hat{y}_{1,Q+2}$ | $\hat{y}_{2,Q+2}$ | | $\hat{y}_{n,Q+2}$ |
| ••• | ••• | ••• | ••• | ••• |
| $y_{m,Q+p}$ | $\hat{y}_{1,Q+p}$ | $\hat{y}_{2,Q+p}$ | | $\hat{y}_{n,Q+p}$ |

Tabela 1 – Conjunto de treinamento para predição dos modelos de ML

- 4. Reconciliação ótima: Com os modelos treinados na 3^a etapa, passa-se as previsões base obtidas na 1^a etapa como regressores para se obter as previsões reconciliadas h passos à frente das séries do nível mais desagregado \tilde{y}_m .
- 5. Agregação: Assim como nos métodos analíticos de combinação ótima, a obtenção das previsões reconciliadas para os demais níveis de hierárquicos \tilde{y}_n se dá através da agregação BU, mas ao invés de se somar as previsões base \hat{y}_m , somam-se as previsões reconciliadas \tilde{y}_m .

Dessa forma, essa metodologia é semelhante à aplicada na reconciliação ótima analítica, se afastando principalmente em três pontos: (i) a utilização de algoritmos de ML ao invés de MQG, (ii) a não atribuição de peso de forma obrigatória para todos os nós da hierarquia e (iii) no ajuste de um modelo individual para cada série do nível mais desagregado, permitindo maior especialização e sendo capaz de se adaptar melhor aos diferentes padrões de cada série (SPILI-OTIS et al., 2021). A Figura 7 ilustra a metodologia de combinação ótima via ML.

Um ponto negativo na estratégia de *rolling forecasting* (2^a etapa) é o custo em tempo de processamento. Em um cenário de hierarquias largas e agrupadas, o ganho de performance com a estimação de um modelo individual para cada p subamostras pode não compensar o trade-off em relação ao custo.

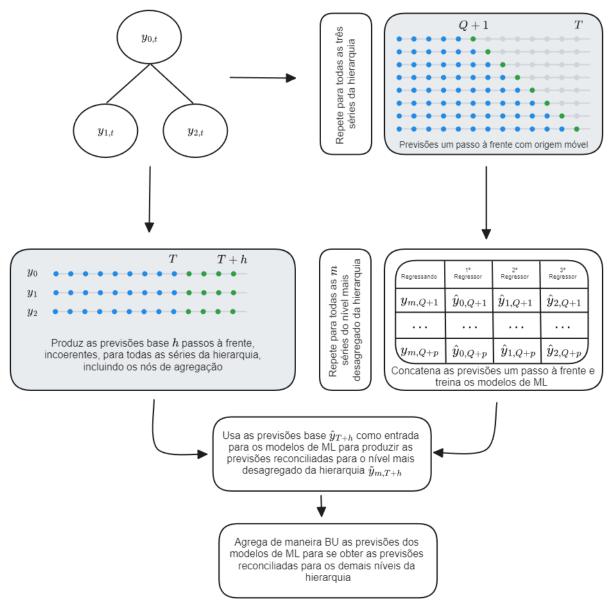


Figura 7 – Metodologia de combinação ótima via ML. Estratégia *rolling forecast* (adaptado de Spiliotis et al. (2021))

Nesse sentido, uma alternativa é o processo de reestimação, que consiste na reestimação de um modelo para um novo conjunto de dados. Nessa estratégia, que chamarei de reduced fitted values, os n modelos são treinados com o conjunto de dados $\Omega_1 = \{y_1, y_2, ..., y_Q\}$ e então reajustados para o restante do conjunto de dados $\Omega_2 = \{y_{Q+1}, y_{Q+2}, ..., y_{Q+p}\}$, se esquivando do processo de rolling origin. De posse dos modelos reajustados, utiliza-se então os valores ajustados (fitted values) como conjunto de treinamento para os modelos de ML. Uma restrição dessa abordagem é que, fixados os hiperparâmetros de $\hat{y}_{t|\Omega_1}$, não necessariamente todos os coeficientes de $\hat{y}_{t|\Omega_2}$ alcançarão convergência no reajuste de seus coeficientes para o novo conjunto de dados.

A metodologia de combinação ótima na estratégia *reduced fitted values* está ilustrada na Figura 8. Nela, o tamanho da amostra disponível para o treino dos modelos de ML é o mesmo

que o da estratégia por rolling forecasting, mas o custo computacional é reduzido, uma vez que é treinado apenas um modelo para cada série y_t . Além disso, como alterações são comuns em processos estocásticos de séries longas de natureza econômica ou social, a estratégia reduced fitted values pode resultar em previsões mais precisas, uma vez que os modelos são reestimados apenas com os dados de Ω_2 , resultando em coeficientes adaptados às características mais recentes das séries.

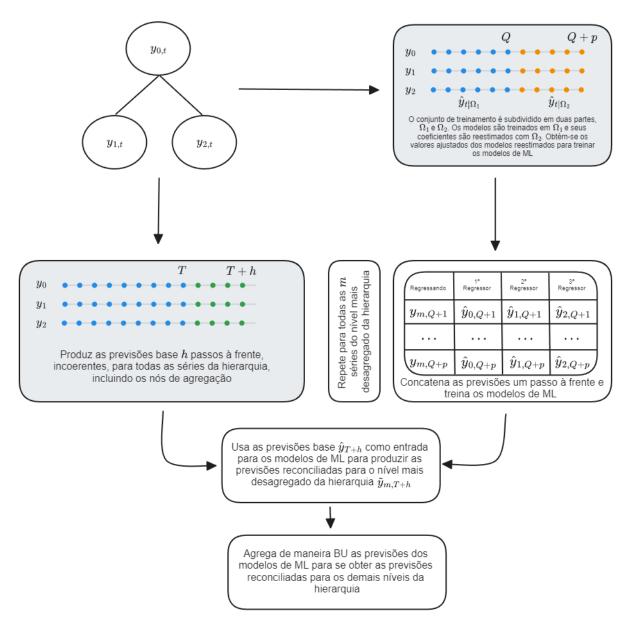


Figura 8 – Metodologia de combinação ótima via ML. Estratégia reduced fitted values

As duas estratégias possuem uma dificuldade em comum: a necessidade de realização de previsões para dentro do conjunto de treinamento. Isso pode ser um problema para séries temporais com poucas observações ou incompletas. Por exemplo, suponha o problema de previsão hierárquica para uma franquia de varejo. O fechamento e abertura de novas filiais é bastante frequente, o que eventualmente irá resultar em filiais abertas após o período escolhido para Q. Como a combinação ótima trata da combinação contemporânea, isso significaria lidar com da-

dos faltantes no conjunto de treinamento dos modelos de ML. As alternativas metodológicas para contornar esse problema passam por restringir a escolha dos métodos de ML para apenas aqueles capazes de trabalhar com dados faltantes nativamente ou utilizar uma estratégia de imputação na etapa de pré-processamento.

Para as séries de processo estocástico bem definido, mesmo em longos períodos, uma 3° estratégia para aquisição do conjunto de treinamento para os modelos de ML é usar os valores ajustados dos modelos das previsões base \hat{y} (passo 1) como input para os modelos de ML. Chamarei essa estratégia de *fitted values* (Figura 9).

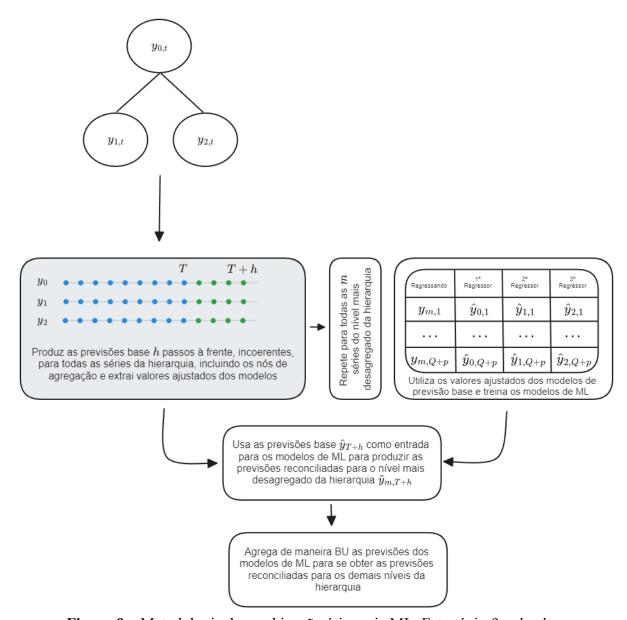


Figura 9 – Metodologia de combinação ótima via ML. Estratégia fitted values

Essa estratégia equivale a usar previsões um passo à frente obtidas a partir do conjunto de dados completo $\Omega=\Omega_1+\Omega_2$. Em relação às duas estratégias anteriores, essa abordagem aumenta o tamanho da amostra treino em Q observações para cada série, o que pode melhorar a

qualidade modelos de ML. Além disso, ela é ainda mais simples de implementar, uma vez que não é necessário gerar novos modelos, utilizando aqueles já estimados na 1ª etapa.

3.3 Notas sobre otimização de hiperparâmetros na reconciliação ótima

Considere uma função de ajuste f, um conjunto de pontos $\Omega=\omega_1,...,\omega_n$ com $\omega_i=(\mathbf{x}_i\ \mathbf{y}_i)'$, variáveis de decisão ou parâmetros $\mathbf{x}_i\in\mathbb{R}^m$ e imagem $\mathbf{y}_i=f(\mathbf{x}_i)\in\mathbb{R}$. Diferentemente da abordagem do modelo clássico de regressão linear em que, cumpridas certas hipóteses, há um modelo teórico de coeficientes estimados por mínimos quadrados ordinários (MQO) que é garantido pelo teorema de Gauss-Markov ser o melhor estimador linear não viesado (BLUE), em ML o objetivo é encontrar, de forma iterativa, um modelo que melhor aproxima a função f usando a informação contida em Ω , ou seja, queremos ajustar uma função de regressão \hat{f}_{Ω} aos nossos dados Ω de forma que $\hat{\mathbf{y}}=\hat{f}_{\Omega}(\mathbf{x},\varepsilon)$ tenha o menor erro de aproximação ε (BISCHL; MERSMANN et al., 2012).

Para verificar o quão bem o modelo \hat{f}_D se aproxima da função real f, é necessário uma função de perda $L(\mathbf{y},\hat{f}(\mathbf{x}))$ que, no caso de regressão, será a perda quadrática $(\mathbf{y}-\hat{f}(\mathbf{x}))^2$ ou a perda absoluta $|\mathbf{x}-\hat{f}(\mathbf{x})|$. Esses valores são agregados pela média para formar as funções de custo erro médio quadrático (MSE) e erro médio absoluto (MAE).

A fim de evitar o problema de sobreajuste, diferentes métodos para mensuração do erro de generalização (i.e. performance fora da amostra) foram desenvolvidos, sendo a validação cruzada (STONE, 1974) um dos mais populares. Este método consiste em gerar repetidamente i subconjuntos de treino Ω^a_i e teste Ω^b_i , com $\Omega=\Omega^a_i+\Omega^b_i$; ajustar um meta-modelo com cada conjunto de treino; e avaliar sua qualidade no conjunto de teste correspondente. Dessa forma, a estimativa do erro de generalização se dá por

$$\widehat{GE}_{me} = \frac{1}{k} \sum_{i=1}^{k} \widehat{GE}(\widehat{f}_{\Omega_i^a}, \Omega_i^b)$$
(23)

sendo \widehat{GE}_{me} o erro de generalização médio. Dividindo a amostra em k subconjuntos, utilizando k-1 para ajustar um meta-modelo e validando a performance no subconjunto restante — e repetindo esse procedimento para todas as possibilidades de subconjuntos —, temos a validação cruzada k-fold. Esta é uma técnica de reamostragem que permite estimar o erro de generalização de um modelo de forma mais robusta e confiável que o hold-out simples (quando k=1). Isso porque, ao contrário do hold-out, a validação cruzada permite que todos os dados sejam usados tanto para treino quanto para teste, o que reduz a variância da estimativa do erro de generalização.

Para dados *cross-section*, essa definição de validação cruzada *k-fold* é geralmente suficiente. Entretanto, no caso de séries temporais, o analista deve tomar alguns cuidados na escolha da abordagem de validação cruzada. Isso porque, ao contrário de dados *cross-section*, os dados de séries temporais são dependentes no tempo. Isso traz dois problemas aparentes:

primeiramente, ao dividir a amostra em k subconjuntos aleatórios, o meta-modelo será treinado em períodos descontínuos e com dados futuros aos dados de teste em, ao menos, k-1 subconjuntos. Em segundo lugar, realizando o subdivisão treino-teste em y_t , com y_{t-1} na amostra treino, significa que os subconjuntos de treino e teste são dependentes (Figura 10).

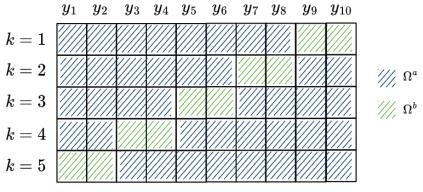


Figura 10 – Validação k-fold aleatória

Para contornar esse problema, outros métodos de validação cruzada foram desenvolvidos pensando em séries temporais. Tomando o conjunto de validação com dados exclusivamente posteriores aos dados de treino, temos o método conhecido como validação cruzada com origem móvel (Figura 11).

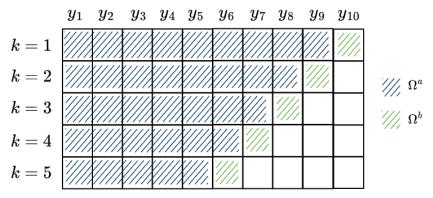


Figura 11 – Validação k-fold com origem móvel

Já quando excluímos as defasagens dependentes do subconjunto de treino (em relação ao conjunto de validação), temos a validação cruzada não dependente (Figura 12). Para ilustrar esse caso, tome um processo AR(3). Excluir as defasagens dependentes significa que, se o conjunto de validação começa em y_t , então o conjunto de treino pode conter observações apenas até y_{t-4} . O problema evidente dessa abordagem é que, dependendo do tamanho da estrutura de autocorrelação da série, muitas defasagens são excluídas de cada k-fold, podendo inviabilizar o processo de validação.

Cumpridas algumas restrições, esses problemas são apenas aparentes. Bergmeir e Benítez (2012) comparam uma série de métodos de validação em séries temporais e concluem que, considerando séries estacionárias, os problemas teóricos relacionados à dependência não

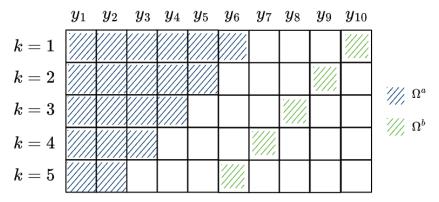


Figura 12 – Validação *k*-fold não-dependente

produzem impactos empíricos. Bergmeir, Hyndman e Koo (2018) vão além e abordam esse problema teórica e empiricamente, concluindo que não apenas é possível o uso de validação cruzada k-fold quando a série não apresenta autocorrelação serial nos resíduos, mas também é uma melhor escolha do que a validação fora da amostra¹¹.

Entretanto, no mundo real, trabalhando com uma longa coleção de séries temporais hierárquicas agrupadas, raramente será o caso em que a totalidade das séries são estacionárias. Nesse sentido, é razoável supor que, mesmo que o método de reconciliação via combinação ótima trate da combinação contemporânea das previsões, se as médias das séries estão se alterando ao longo do tempo, a combinação ótima entre elas também possa se alterar. Por isso, um processo de validação cruzada que não suponha estacionariedade pode ser mais adequado.

Por essa razão, proponho que o processo de reamostragem para otimização de hiperparâmetros conte com, além da validação cruzada k-fold, a validação cruzada com origem móvel em seu benchmark. Para tanto, é necessário definir uma janela mínima para Ω^a e um horizonte para o conjunto de teste Ω^b , que devem ser escolhidos de acordo com as características do conjunto de dados trabalhado.

3.4 Conclusão

Nesta seção, foram apresentadas a abordagem para a reconciliação de previsões de séries temporais hierárquicas e agrupadas por conbinação ótima utilizando métodos de ML. Foram propostas três estratégias para a obtenção do conjunto de treinamento dos modelos de ML: *rolling forecast*, *reduced fitted values* e *fitted values*. Cada uma dessas estratégias tem suas vantagens e desvantagens, e a escolha entre elas depende das características específicas das séries temporais que estão sendo previstas.

Além disso, discutiu-se a importância da validação cruzada na otimização de hiperparâmetros para modelos de ML no cenário de combinação ótima. Em particular, destacou-se a necessidade de considerar a dependência temporal nos dados ao escolher o método de vali-

Out-of-sample evaluation é o método padrão na literatura de séries temporais e consiste na separação da porção final da série — geralmente entre 20% e 30% — para validação.

dação cruzada. Nesse sentido, propus o uso da validação cruzada com origem móvel como uma alternativa para calibração dos modelos de combinação ótima.

4 PREVISÃO DE SALDOS DE EMPRÉSTIMOS E FINAN-CIAMENTOS DO BANCO DO ESTADO DO ESPÍRITO SANTO

4.1 Introdução

Embora no séc. XX ainda houvesse espaço para uma gestão guiada apenas por instinto (WALLANDER, 1999), atualmente é impensável um banco não realizar previsões de seus resultados e comunicar suas expectativas ao mercado. Nesse documento, ou *guidance*, a projeção da carteira de crédito — o total de empréstimos e financiamentos, dentre outros itens — é frequentemente a primeira informação fornecida. Juntamente com as projeções de depósitos, provisões para créditos de liquidação duvidosa, eficiência operacional, entre outros indicadores-chave, essas projeções determinam a temperatura das expectativas da instituição, e isso é essencial para os acionistas e investidores. Essas projeções precisam ser tão precisas quanto possível para que se possa calcular o risco de transacionar com a instituição financeira.

Ainda que não existam penalidades específicas para instituições financeiras que erram (por uma boa margem) em suas projeções, elas podem sofrer consequências negativas em outros aspectos, como na avaliação de seus desempenhos por parte dos investidores e clientes. Estes podem considerar as projeções equivocadas como um sinal de falta de competência ou confiança na instituição financeira, o que pode afetar negativamente a reputação e a imagem da instituição.

Além disso, nos casos em que algum grupo se sentir lesado, os bancos podem enfrentar ações judiciais se suas projeções forem consideradas enganosas ou fraudulentas. Por exemplo, se uma instituição financeira fizer projeções excessivamente otimistas para incentivar os investidores a comprar seus títulos e, posteriormente, as projeções se mostrarem incorretas, ela pode ser acusada de fraude¹² ou, ao menos, gestão temerária¹³ — ambos caracterizados como crime contra o Sistema Financeiro Nacional (SFN).

Por isso, é importante que as instituições financeiras sejam transparentes e precisas em suas projeções, fornecendo informações confiáveis e atualizadas para seus clientes e investidores. No entanto, há também motivações estratégicas para essa atividade. Beccalli et al. (2015) mostraram que, em uma amostra de 55 bancos europeus, a utilização de *guidance* está associada a um aumento de 15% na probabilidade do banco atingir ou superar as expectativas de mercado.

Art. 3°: Divulgar informação falsa ou prejudicialmente incompleta sobre instituição financeira. Pena: Reclusão, de 2 (dois) a 6 (seis) anos, e multa. Art. 4°: Gerir fraudulentamente instituição financeira. Pena: Reclusão, de 3 (três) a 12 (doze) anos, e multa (BRASIL, 1986).

Art. 4º, parágrafo único: Se a gestão é temerária: Pena: Reclusão, de 2 (dois) a 8 (oito) anos, e multa (BRASIL, 1986).

Isso, por sua vez, está associado a um incremento de até 5% no retorno por ação em relação aos bancos que não alcançaram ou superaram as expectativas.

A prática usual em *budgeting*¹⁴, principalmente para empresas com muitas filiais, é a *top-down*. No caso dos bancos de varejo, com muitas agências espalhadas pelo território, esse método pode ser muito útil. Na prática, em um país continental como o Brasil, a quantidade de filiais para as quais se deve realizar previsões pode tornar a tarefa desafiadora mesmo para instituições regionais.

Esse é o caso do Banestes. Com 134 agências distribuídas pelos 78 municípios capixabas, realizar o *budgeting* para R\$ 5,5 bi de faturamento 15 não é uma tarefa trivial. Além de uma estrutura hierárquica de alta dimensionalidade por conta da quantidade de agências, se tratando de um banco múltiplo 16 que opera com diversas carteiras, as n modalidades de crédito 17 expandem a estrutura para um total de $n \times 134$ séries temporais a serem estimadas.

Dada tal complexidade, a abordagem *top-down* se coloca como uma opção viável em termos de tempo de processamento e análise. No entanto, conforme descemos na hierarquia, menos precisa ela se torna e, além disso, as características individuais das séries temporais do menor nível hierárquicos são ignoradas. No sentido inverso, caso se escolha estimar modelos para cada uma das 134 agências e agregá-las (*bottom-up*), ignora-se a influência que os níveis mais agregados — aqui a carteira de crédito da região ou de todo o estado — podem ter na estimação do saldo de crédito de cada agência. De qualquer forma, utiliza-se informação incompleta. Nesse sentido, a reconciliação ótima pode incrementar em grande medida a acurácia das previsões de saldos de crédito de instituições financeiras, permitindo a elaboração do *guidance* e do orçamento de forma mais precisa.

Neste estudo de caso, buscou-se aprimorar as previsões de saldos de empréstimos e financiamentos do Banco do Estado do Espírito Santo através da aplicação da metodologia de combinação ótima via ML. Para o *benchmarking*, foram testadas 7 implementações de métodos de ML (XGB, RF, LGBM, *Elastic Net*, *Lasso*, *ridge* e SVM), 2 métodos analíticos (*bottom-up* e MinT), 3 estratégias de aquisição do conjunto de treinamento para os modelos de ML (*rolling forecast*, *fitted values* e *reduced fitted values*) e 2 estratégias de validação cruzada (aleatória e *rolling origin*).

O orçamento é um documento no qual é definido o planejamento financeiro de um empresa, geralmente para o ano seguinte, estabelecendo metas e objetivos. Nele, são projetadas as expectativas da empresa e é base de comparação para saber como os resultados estão se desviando da performance esperada.

Conforme demonstrativos publicados referentes ao exercício de 2022 (BANCO DO ESTADO DO ESPÍRITO SANTO, 2022).

Para ser classificado como banco múltiplo, a instituição financeira deve operar com, no mínimo, duas carteiras dentre: comercial; investimento ou desenvolvimento; crédito imobiliário; de crédito, financiamento e investimento, e; arrendamento mercantil (CONSELHO MONETÁRIO NACIONAL, 1994).

¹⁷ Crédito consignado, rural, imobiliário, pessoal, capital de giro, desconto de títulos etc.

4.2 Revisão de literatura

A nível macroeconômico, a previsão do agregado de crédito das instituições financeiras é uma preocupação de bancos centrais ao redor do mundo. No Brasil, Bader, Koyama, Sérgio Mikio e Tsuchida, Marcos Hiroyuki (2014) aprimoram o método FAVAR (*Factor Augmented Vector Autoregression*) com uma etapa de análise de correlação canônica para identificar as melhores, em termos de correlação com as variáveis de crédito do SFN, combinações lineares de componentes principais. Çolak et al. (2019) produzem, a partir de séries filtradas do agregado de crédito, indicadores para monitoramento de períodos de expansão e desaceleração de crédito no setor bancário turco.

Já para níveis abaixo do agregado de crédito, poucos trabalhos foram encontrados. Tangenciando o tema da previsão de saldos de crédito, outros tópicos da economia bancária foram objeto de estudo para previsão de séries temporais. Sezer, Gudelek e Ozbayoglu (2019) produziram revisão de literatura de trabalhos que realizaram previsão de séries temporais financeiras utilizando *deep learning*. Gorodetskaya, Gobareva e Koroteev (2021) propõem o que chamaram de "uma metodologia universal" para aplicação automática de *machine learning* na previsão de séries temporais do setor bancário. Entretanto, nenhum dos trabalhos combinaram estruturas hierárquicas com *machine learning*.

No que diz respeito à previsão de séries temporais em largas hierarquias, Prayoga, Suhartono e Rahayu (2017) trabalharam na previsão do fluxo de caixa do Banco da Indonésia, utilizando uma hierarquia de 3 níveis. Porém, utilizaram apenas a abordagem *top-down* para reconciliação. Inversamente, Li et al. (2016) compararam dois métodos de *machine learning* para previsão da produção de energia solar no estado da Flórida/EUA, redes neurais artificiais e SVM, em uma abordagem *bottom-up*, caracterizando ambos trabalhos como de nível único.

Aplicações de reconciliação ótima foram realizadas a nível macroeconômico para previsão do PIB australiano, índices de inflação no Reino Unido e México, e previsão de desemprego no Brasil (ATHANASOPOULOS; HYNDMAN; KOURENTZES; PANAGIOTELIS, 2023). Entretanto, não foram encontradas referências à aplicação de reconciliação ótima para previsão hierárquica de saldos de empréstimos e financiamentos de bancos, tanto a nível individual quanto para o agregado de crédito de uma economia, de forma que este trabalho possa ser o primeiro a aplicar a abordagem de combinação ótima via ML para esse contexto.

4.3 Metodologia

Os dados usados nesse trabalho são dados terciários obtidos do *datalake* público Base dos Dados (DAHIS et al., 2022). A fonte primária são os bancos comerciais e múltiplos com carteira comercial que disponibilizam mensalmente os saldos dos principais verbetes do balan-

cete via documento 4500¹⁸ ao Banco Central do Brasil, que os compila e publica, agrupados por agência bancária e por município, no relatório ESTBAN — Estatística Bancária Mensal e por Município¹⁹.

O que compõe os verbetes de crédito, ou seja, os valores das séries temporais a serem trabalhadas, são os saldos de crédito ativo (empréstimos e financiamentos), que correspondem ao principal mais os juros calculados até 59 dias de atraso²⁰. Além das estatísticas bancárias, foram obtidas informações de regiões, mesorregiões e microrregiões dos estados, também a partir *datalake* Base dos Dados, com o objetivo de enriquecer a estrutura hierárquica dos dados do ESTBAN, limitada aos municípios.

Em relação à cobertura temporal, utilizou-se dados entre 2003 e 2022. Por brevidade, optou-se por não trabalhar com dados faltantes²¹. Portanto, apesar do Banestes contar com 134 agências, foram mantidas apenas as agências com série completa, ou seja, que já estavam em atividade em 2003.

Por fim, o conjunto de dados conta com séries mensais de saldos de empréstimos e financiamentos de 79 agências bancárias, distribuídas por 62 municípios, entre janeiro de 2003 e dezembro de 2022, totalizando 37.920 observações. Esses dados então são organizados de forma hierárquica por estado, mesorregião, microrregião, município e agência bancária; e, de forma agrupada, por verbete. Com a estrutura hierárquica e agrupada, o conjunto de dados alcança 114 480 observações.

O estado do Espírito Santo está localizado no sudeste brasileiro e é dividido em 78 municípios, que estão agrupados em 4 mesorregiões e 13 microrregiões.

| Mesorregião | Microrregiões |
|---------------------------------|--|
| Central Espirito Santense | Afonso Claudio, Guarapari, Santa Teresa, Vitoria |
| Litoral Norte Espirito Santense | Linhares, Montanha, Sao Mateus |
| Noroeste Espirito Santense | Barra de Sao Francisco, Colatina, Nova Venecia |
| Sul Espirito Santense | Alegre, Cachoeiro de Itapemirim, Itapemirim |

Tabela 2 – Microrregiões por mesorregião

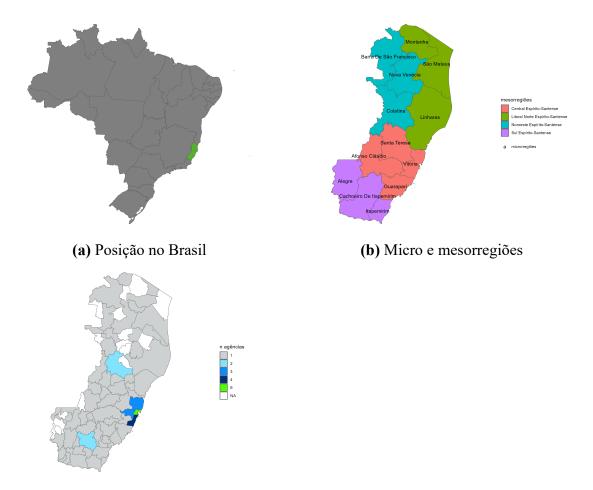
Na amostra selecionada para este trabalho, com exceção dos municípios de Colatina e Cachoeiro de Itapemirim, que contam com 2 agências cada, todos os demais municípios no interior contam com uma única agência. Já na microrregião da capital Vitória, se encontram municípios com múltiplas unidades. Considerando que essa microrregião é a mais representativa (Figura 16), é importante a manutenção do nível hierárquico municipal.

¹⁸ Esses documentos são relatórios eletrônicos obrigatórios demandados pelo Bacen às instituições financeiras que permitem ao regulador o conhecimento minucioso dos bancos e de seus clientes.

https://www4.bcb.gov.br/fis/cosif/estban.asp?frame=1

Não são consideradas crédito ativo as operações de crédito liquidadas ou que tenham sido transferidas para prejuízo. São transferidas para prejuízo as operações de crédito em atraso há mais 6 meses após sua classificação de risco em H, que é a mínima (CONSELHO MONETÁRIO NACIONAL, 1999).

²¹ Ver Section 3.2.



(c) Quantidade de agências por município

Figura 13 – O Estado do Espírito Santo e suas meso e microrregiões.

Tabela 3 – Municípios por microrregião

| Microrregiões | Municípios |
|-------------------------|--|
| Afonso Claudio | Afonso Claudio, Conceicao do Castelo, domingos Martins, Laranja da Terra, Marechal Floriano, Venda Nova do Imigrante |
| Alegre | Alegre, Guacui, Ibatiba, Iuna, Muniz Freire |
| Barra de Sao Francisco | Barra de Sao Francisco, Ecoporanga, Mantenopolis |
| Cachoeiro de Itapemirim | Apiaca, Atilio Vivacqua, Bom Jesus do Norte, Cachoeiro de Itapemirim, Castelo, Jeronimo Monteiro, Mimoso do Sul, Muqui, Sao Jose do Calcado, Vargem Alta |
| Colatina | Baixo Guandu, Colatina, Pancas |
| Guarapari | Alfredo Chaves, Anchieta, Guarapari, Iconha, Piuma, Rio Novo do Sul |
| Itapemirim | Itapemirim, Marataizes, Presidente Kennedy |
| Linhares | Aracruz, Fundao, Ibiracu, Joao Neiva, Linhares, Rio Bananal |
| Montanha | Mucurici, Pinheiros |
| Nova Venecia | Aguia Branca, Boa Esperanca, Nova Venecia, Vila Valerio |
| Santa Teresa | Itaguacu, Itarana, Santa Leopoldina, Santa Maria de Jetiba, Santa Teresa, Sao Roque do Canaa |
| Sao Mateus | Jaguare, Pedro Canario, Sao Mateus |
| Vitoria | Cariacica, Serra, Viana, Vila Velha, Vitoria |

A série temporal do agregado de crédito no Banestes no Espírito Santo é apresentada na Figura 14. Em relação à distribuição, a mesorregião Central Espírito-santense concentra mais crédito do que o somatório das demais regiões (Figura 15), sendo a microrregião de Vitória a responsável por essa concentração (Figura 16). Na ótica dos verbetes, o crédito para financiamentos é uma pequena fração do saldo de empréstimos, independentemente da mesorregião (Figura 17 e Figura 18).

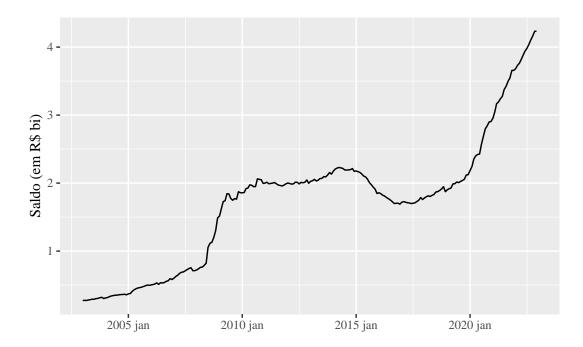


Figura 14 - Série temporal do agregado de crédito do Banestes no ES

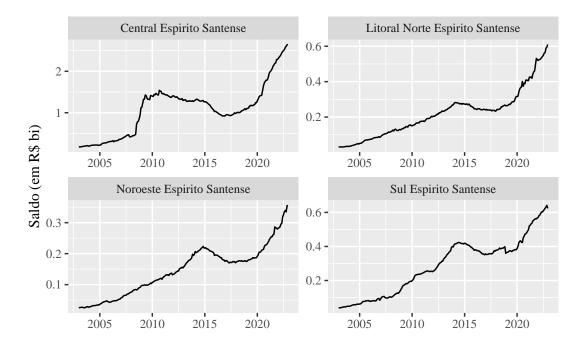


Figura 15 – Séries temporais do agregado de crédito do Banestes por mesorregião do ES

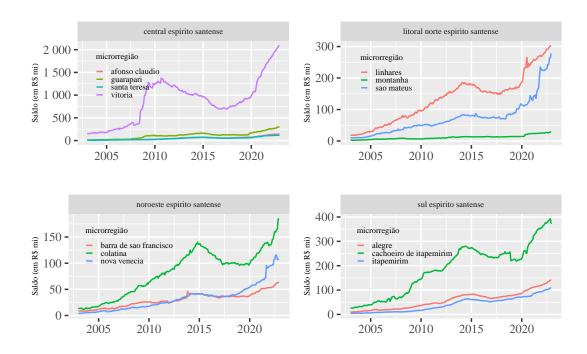


Figura 16 - Séries temporais do agregado de crédito do Banestes por microrregião do ES

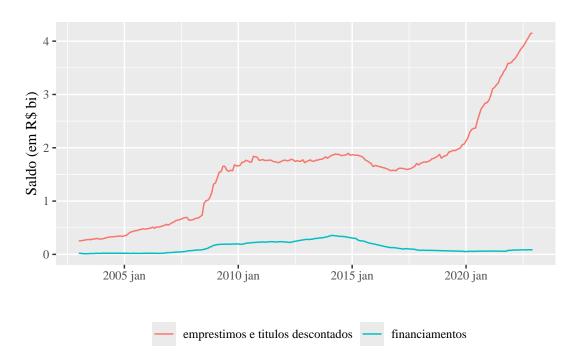


Figura 17 – Séries temporais dos verbetes no agregado do ES

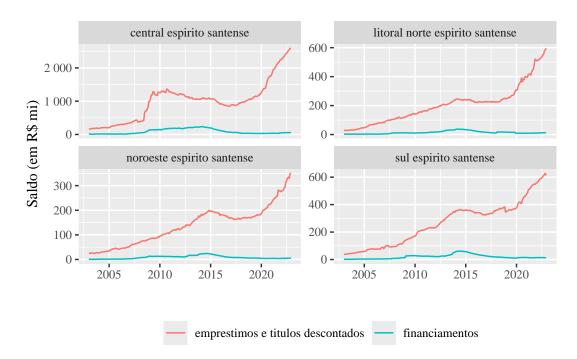


Figura 18 – Séries temporais dos verbetes por mesorregião do ES

Em relação às previsões base, uma vez que o foco deste trabalho está no incremento de performance proporcionado pela reconciliação ótima sobre um conjunto de previsões individuais para fora da amostra e não na qualidade destas, elas foram obtidas por meio de métodos simples para previsão de séries temporais, especificamente o algoritmo de Hyndman-Koehler-Snyder-Grose para suavização exponencial (ETS) (HYNDMAN; KOEHLER et al., 2002). Esses métodos são amplamente utilizados na literatura de séries temporais e, portanto, servem como benchmark para a avaliação dos métodos de reconciliação ótima.

Os modelos de previsão base foram treinados com dados de 2003 a 2021 e as previsões h passos à frente foram realizadas para o ano de 2022, com h=1,2,3,...,12 (Figura 5). Para verificar a qualidade básica do ajuste, foram realizados testes de Ljung-Box para os resíduos das previsões. Considerando nível de significância de $\alpha=0.05$ e 12 defasagens, cerca de 80% dos modelos não rejeitam a hipótese nula de que os resíduos são descorrelatados. Isso sugere que os modelos de previsão base são, em sua maior parte, adequados para o propósito deste trabalho.

Tabela 4 – Resultados do teste de Ljung-box para as previsões base ($\alpha = 0.05$)

| Resultado | Proporção |
|-------------|-----------|
| não rejeita | 0.7945493 |
| rejeita | 0.2054507 |

O *software* usado foi o R (R CORE TEAM, 2023). As previsões base, as previsões hierárquicas de nível único e a reconciliação ótima através da MinT foram realizados com os pacotes {fable} (O'HARA-WILD; HYNDMAN; WANG, 2024a) e {fabletools} (O'HARA-WILD; HYNDMAN; WANG, 2024b). Já metodologia de *machine learning* (reamostragem,

otimização de hiperparâmetros, treino e predição) foi executada com o pacote {mlr3} (LANG et al., 2024) e suas extensões. As implementações do XGB e LGBM utilizadas foram as de seus pacotes homônimos {xgboost} (CHEN; HE et al., 2024) e {ligthgbm} (SHI et al., 2024). Para as configurações de *Elastic Net* foi utilizado o pacote {glmnet} (FRIEDMAN et al., 2023). Já para os métodos de RF e SVM foram usados os pacotes {ranger} (WRIGHT; WAGER; PROBST, 2023) e {e1071} (MEYER et al., 2023), respectivamente.

Boa parte dos métodos de ML são altamente parametrizáveis, sendo sua performance de generalização sensível à escolha de seus hiperparâmetros. Para os métodos avaliados neste trabalho, os conjuntos de hiperparâmetros a serem otimizados e seus respectivos espaços de busca são apresentados no Apêndice C, de acordo com a recomendação em Bischl, Binder et al. (2021).

Para a otimização, foram utilizadas dois calibradores: (i) busca em grade, com resolução de 10 combinações, mais custoso em tempo de processamento, para os métodos de menor quantidade de hiperparâmetros a serem otimizados; e (ii) otimização bayesiana, na configuração padrão do pacote {mlr3MBO} (SCHNEIDER et al., 2024), mais eficiente para os métodos com maior quantidade de hiperparâmetros. As estratégias de reamostragem utilizadas foram a validação cruzada k-fold aleatória e a k-fold com origem móvel, ambas com k=10. Para a segunda, utilizou-se janela mínima de 5 anos e $|\Omega^b|=12$, compatível com o horizonte de previsão para o experimento.

A otimização bayesiana foi usada em todos os métodos, exceto no *elastic net*, uma vez que apenas um (no caso do *Lasso* e *ridge*) ou dois hiperparâmetros foram otimizados. A medida de performance utilizada para a otimização foi a raiz do erro quadrático médio (*root mean squared error* — RMSE).

Por fim, cada modelo foi calibrado individualmente, ou seja, cada série y_m possui um conjunto de hiperparâmetros otimizados para cada um dos 7 métodos de ML empregados para combinação ótima.

4.4 Resultados

As tabelas a seguir apresentam os resultados obtidos para o experimento. As métricas utilizadas foram a Raiz do Erro Médio Escalado Quadrático (*Root Mean Squared Scaled Error* — RMSSE) e o erro médio escalado absoluto (*Mean Absolute Scaled Error* — MASE), que permitem a comparação independentemente da escala — essencial no contexto de previsão hierárquica, onde a agregação torna natural a diferença de escala.

A Tabela 5 contém as medidas de acurácia RMSSE e MASE para os métodos analíticos de reconciliação ótima BU (*bottom-up*) e MinT, e para as previsões base, ou seja, sem aplicar qualquer método de reconciliação. A primeira coluna especifica o método utilizado, enquanto as demais colunas apresentam a média da performance em cada nível de agregação.

As Tabela 6, Tabela 8 e Tabela 10 reportam as medidas de acurácia para os métodos de reconciliação ótima baseados em ML utilizando validação cruzada aleatória, enquanto as Tabela 7, Tabela 9 e Tabela 11. Já as Tabela 12 e Tabela 13 reportam o tempo de processamento para as etapas de calibragem, treino e predição desses métodos²².

Em geral, os métodos baseados em árvore, além de requererem maior tempo de processamento devido a sua complexidade no espaço de hiperparâmetros, também tenderam a perder qualidade de performance conforme suas previsões são agregadas para formação dos níveis superiores da hierarquia. Contrariamente, os métodos de regressão regularizada e o SVM se mostraram mais robustos à agregação.

Nas tabelas a seguir, **negrito** indica a melhor performance entre os métodos para aquele determinado nível de agregação, e <u>sublinhado</u> indica que aquele método de ML superou o método analítico de melhor performance naquele nível de agregação.

Nos resultados para a base de dados Estban, estão incluídas as médias de performance para cada nível hierárquico e agrupado. As colunas "agregado", "mesorregiao", "microrregiao", "municipio" e "agencia", fazem referência à estrutura hierárquica, ou seja, tratam o verbete de forma agregada. Já as colunas "verbete", "bottom" e "hierarquia", incluem também a estrutura agrupada, tratando o verbete de forma desagregada. Detalhadamente:

- Agregado: performance do método para a série que representa o total, com os verbetes agregados, (Figura 14).
- Mesorregião: a média das performances do método para as séries do agregado de cada mesorregião, com os verbetes agregados (Figura 15).
- Microrregião: a média das performances do método para as séries do agregado de cada microrregião, com os verbetes agregados (Figura 16).
- Município: a média das performances do método para as séries do agregado de cada município, com os verbetes agregados.
- Agência: a média das performances do método para as séries de cada agência, com os verbetes agregados.
- Verbete: a média das performances do método para as séries de cada verbete, para o total da hierarquia (Figura 17).
- Bottom: a média das performances do método para as séries do nível mais desagregado, ou seja, verbete por agência.
- Hierarquia: a média das performances do método para todas as séries, agregadas e desagregadas.

Os métodos analíticos não tiveram seu tempo de processamento medidos porque executam quase que instantaneamente, já sinalizando uma vantagem para esses métodos.

Tabela 5 – Resultados Estban: Acurácia dos métodos analíticos de reconciliação

| .model | agregado | mesorregiao | microrregiao | municipio | agencia | verbete | bottom | hierarquia |
|--------|----------|-------------|--------------|-----------|---------|---------|--------|------------|
| RMSSE | , | | | | | | | |
| base | 0.197 | 0.690 | 0.846 | 0.671 | 0.717 | 0.183 | 0.656 | 0.657 |
| bu | 0.196 | 0.561 | 0.706 | 0.710 | 0.739 | 0.185 | 0.656 | 0.663 |
| mint | 0.172 | 0.619 | 0.722 | 0.689 | 0.712 | 0.140 | 0.634 | 0.641 |
| MASE | | | | | | | | |
| base | 0.278 | 0.818 | 0.998 | 0.790 | 0.886 | 0.250 | 0.883 | 0.847 |
| bu | 0.240 | 0.572 | 0.771 | 0.820 | 0.895 | 0.221 | 0.883 | 0.844 |
| mint | 0.224 | 0.692 | 0.865 | 0.830 | 0.891 | 0.164 | 0.864 | 0.837 |

Tabela 6 – Resultados Estban: Acurácia dos métodos de ML de reconciliação, estratégia *rolling forecast* + validação cruzada aleatória

| modelo | agregado | mesorregiao | microrregiao | municipio | agencia | verbete | bottom | hierarquia |
|---------------|--------------|-------------|--------------|-----------|---------|---------|--------|------------|
| RMSSE | | | | | | | | |
| elastic net | 0.280 | 0.763 | 1.178 | 1.211 | 1.251 | 0.770 | 1.062 | 1.094 |
| lasso | 0.196 | 0.726 | 1.054 | 0.995 | 1.043 | 0.501 | 0.839 | 0.882 |
| lightgbm | 1.407 | 1.628 | 1.530 | 1.294 | 1.322 | 0.883 | 0.972 | 1.095 |
| random forest | 1.227 | 1.397 | 1.303 | 1.118 | 1.171 | 0.725 | 0.858 | 0.949 |
| ridge | 0.416 | 0.776 | 1.131 | 1.511 | 1.535 | 0.919 | 1.357 | 1.368 |
| svm | 0.262 | 0.745 | 0.858 | 0.853 | 0.911 | 0.234 | 0.847 | 0.838 |
| xgb | 1.186 | 1.405 | 1.296 | 1.096 | 1.139 | 0.700 | 0.830 | 0.924 |
| MASE | | | | | | | | |
| elastic net | 0.234 | 0.726 | 1.406 | 1.491 | 1.582 | 0.949 | 1.439 | 1.428 |
| lasso | <u>0.166</u> | 0.714 | 1.250 | 1.193 | 1.298 | 0.641 | 1.142 | 1.147 |
| lightgbm | 1.890 | 1.896 | 1.874 | 1.600 | 1.654 | 1.234 | 1.390 | 1.478 |
| random forest | 1.615 | 1.560 | 1.501 | 1.332 | 1.423 | 0.996 | 1.097 | 1.177 |
| ridge | 0.402 | 0.757 | 1.315 | 1.800 | 1.881 | 1.090 | 1.790 | 1.738 |
| svm | 0.306 | 0.684 | 0.862 | 0.991 | 1.108 | 0.290 | 1.251 | 1.143 |
| xgb | 1.542 | 1.564 | 1.479 | 1.297 | 1.373 | 0.948 | 1.022 | 1.115 |

Tabela 7 – Resultados Estban: Acurácia dos métodos de ML de reconciliação, estratégia *rolling* forecast + validação cruzada com origem móvel

| modelo | agregado | mesorregiao | microrregiao | municipio | agencia | verbete | bottom | hierarquia |
|---------------|----------|-------------|--------------|-----------|---------|---------|--------|------------|
| RMSSE | | | | | | | | |
| elastic net | 0.272 | 0.636 | 1.107 | 1.282 | 1.346 | 0.711 | 1.105 | 1.137 |
| lasso | 0.278 | 0.724 | 1.001 | 0.979 | 1.035 | 0.644 | 0.837 | 0.875 |
| lightgbm | 1.339 | 1.460 | 1.375 | 1.158 | 1.208 | 0.916 | 0.939 | 1.025 |
| random forest | 1.362 | 1.522 | 1.377 | 1.144 | 1.197 | 0.798 | 0.875 | 0.974 |
| ridge | 0.458 | 0.756 | 1.159 | 1.551 | 1.569 | 0.913 | 1.406 | 1.410 |
| svm | 1.727 | 1.766 | 1.663 | 1.714 | 1.755 | 0.981 | 1.353 | 1.463 |
| xgb | 1.246 | 1.489 | 1.336 | 1.114 | 1.156 | 0.847 | 0.849 | 0.951 |
| MASE | | | | | | | | |
| elastic net | 0.224 | 0.615 | 1.334 | 1.557 | 1.682 | 0.856 | 1.469 | 1.464 |
| lasso | 0.209 | 0.704 | 1.165 | 1.171 | 1.286 | 0.769 | 1.139 | 1.135 |
| lightgbm | 1.784 | 1.642 | 1.609 | 1.401 | 1.489 | 1.269 | 1.286 | 1.335 |
| random forest | 1.831 | 1.757 | 1.636 | 1.379 | 1.471 | 1.117 | 1.130 | 1.222 |
| ridge | 0.456 | 0.738 | 1.372 | 1.858 | 1.931 | 1.084 | 1.855 | 1.795 |
| svm | 2.507 | 2.202 | 2.081 | 2.214 | 2.344 | 1.476 | 1.996 | 2.052 |
| xgb | 1.631 | 1.671 | 1.529 | 1.323 | 1.394 | 1.156 | 1.043 | 1.149 |

Tabela 8 – Resultados Estban: Acurácia dos métodos de ML de reconciliação, estratégia *fitted* values + validação cruzada aleatória

| modelo | agregado | mesorregiao | microrregiao | municipio | agencia | verbete | bottom | hierarquia |
|---------------|----------|-------------|--------------|-----------|---------|---------|--------|------------|
| RMSSE | | | | | | | | |
| elastic net | 0.777 | 0.986 | 1.086 | 1.038 | 1.149 | 0.579 | 0.924 | 0.961 |
| lasso | 0.661 | 0.955 | 1.074 | 0.909 | 1.008 | 0.530 | 0.826 | 0.862 |
| lightgbm | 1.495 | 1.649 | 1.557 | 1.300 | 1.342 | 0.923 | 0.999 | 1.116 |
| random forest | 1.204 | 1.397 | 1.294 | 1.098 | 1.150 | 0.694 | 0.839 | 0.930 |
| ridge | 1.001 | 1.146 | 1.247 | 1.208 | 1.327 | 0.689 | 1.125 | 1.147 |
| svm | 0.395 | 0.929 | 0.928 | 0.934 | 0.961 | 0.319 | 0.905 | 0.898 |
| xgb | 1.196 | 1.373 | 1.282 | 1.084 | 1.133 | 0.699 | 0.824 | 0.916 |
| MASE | | | | | | | | |
| elastic net | 1.049 | 1.143 | 1.317 | 1.268 | 1.451 | 0.795 | 1.290 | 1.284 |
| lasso | 0.894 | 1.087 | 1.319 | 1.114 | 1.276 | 0.728 | 1.167 | 1.162 |
| lightgbm | 2.027 | 1.931 | 1.906 | 1.610 | 1.683 | 1.302 | 1.433 | 1.512 |
| random forest | 1.576 | 1.557 | 1.488 | 1.311 | 1.397 | 0.947 | 1.043 | 1.132 |
| ridge | 1.338 | 1.350 | 1.549 | 1.501 | 1.696 | 0.935 | 1.584 | 1.551 |
| svm | 0.445 | 0.947 | 1.080 | 1.163 | 1.226 | 0.341 | 1.282 | 1.217 |
| xgb | 1.545 | 1.509 | 1.476 | 1.293 | 1.375 | 0.942 | 1.017 | 1.109 |

Tabela 9 – Resultados Estban: Acurácia dos métodos de ML de reconciliação, estratégia *fitted* values + validação cruzada com origem móvel

| modelo | agregado | mesorregiao | microrregiao | municipio | agencia | verbete | bottom | hierarquia |
|---------------|----------|-------------|--------------|-----------|---------|---------|--------|------------|
| RMSSE | | | | | | | | |
| elastic net | 0.873 | 1.108 | 1.146 | 0.984 | 1.082 | 0.582 | 0.909 | 0.942 |
| lasso | 0.788 | 1.006 | 1.169 | 0.948 | 1.053 | 0.575 | 0.842 | 0.890 |
| lightgbm | 1.515 | 1.632 | 1.543 | 1.307 | 1.347 | 0.956 | 1.010 | 1.126 |
| random forest | 1.217 | 1.462 | 1.343 | 1.139 | 1.179 | 0.723 | 0.863 | 0.961 |
| ridge | 0.990 | 1.127 | 1.223 | 1.196 | 1.317 | 0.687 | 1.123 | 1.143 |
| svm | 1.189 | 1.867 | 1.882 | 1.738 | 1.764 | 0.889 | 1.335 | 1.475 |
| xgb | 1.274 | 1.428 | 1.341 | 1.137 | 1.183 | 0.856 | 0.874 | 0.972 |
| MASE | | | | | | | | |
| elastic net | 1.170 | 1.272 | 1.423 | 1.224 | 1.389 | 0.799 | 1.282 | 1.273 |
| lasso | 1.051 | 1.149 | 1.448 | 1.165 | 1.339 | 0.788 | 1.189 | 1.198 |
| lightgbm | 2.064 | 1.918 | 1.892 | 1.619 | 1.692 | 1.352 | 1.393 | 1.489 |
| random forest | 1.598 | 1.657 | 1.578 | 1.368 | 1.438 | 0.988 | 1.112 | 1.202 |
| ridge | 1.320 | 1.326 | 1.508 | 1.489 | 1.686 | 0.930 | 1.580 | 1.545 |
| svm | 1.737 | 2.287 | 2.479 | 2.292 | 2.412 | 1.309 | 1.991 | 2.100 |
| xgb | 1.661 | 1.596 | 1.539 | 1.351 | 1.426 | 1.165 | 1.075 | 1.177 |

Tabela 10 – Resultados Estban: Acurácia dos métodos de ML de reconciliação, estratégia *reduced fitted values* + validação cruzada aleatória

| modelo | agregado | mesorregiao | microrregiao | municipio | agencia | verbete | bottom | hierarquia |
|---------------|--------------|-------------|--------------|-----------|---------|---------|--------|------------|
| RMSSE | | | | | | | | |
| elastic net | 0.090 | 0.582 | 0.730 | 0.819 | 0.838 | 0.164 | 0.730 | 0.736 |
| lasso | 0.132 | 0.523 | 0.766 | 0.757 | 0.774 | 0.187 | 0.681 | 0.693 |
| lightgbm | 1.406 | 1.588 | 1.520 | 1.281 | 1.323 | 0.889 | 0.971 | 1.091 |
| random forest | 1.248 | 1.409 | 1.319 | 1.119 | 1.167 | 0.692 | 0.857 | 0.949 |
| ridge | <u>0.141</u> | 0.635 | 0.784 | 0.902 | 0.922 | 0.207 | 0.841 | 0.829 |
| svm | 0.187 | 0.743 | 0.767 | 0.792 | 0.834 | 0.295 | 0.807 | 0.792 |
| xgb | 1.218 | 1.347 | 1.253 | 1.084 | 1.140 | 0.708 | 0.844 | 0.927 |
| MASE | | | | | | | | |
| elastic net | 0.086 | 0.584 | 0.834 | 0.973 | 1.008 | 0.208 | 0.944 | 0.922 |
| lasso | 0.138 | 0.520 | 0.883 | 0.907 | 0.933 | 0.216 | 0.891 | 0.878 |
| lightgbm | 1.879 | 1.831 | 1.832 | 1.580 | 1.652 | 1.236 | 1.388 | 1.470 |
| random forest | 1.636 | 1.576 | 1.526 | 1.333 | 1.418 | 0.947 | 1.065 | 1.155 |
| ridge | <u>0.159</u> | 0.630 | 0.894 | 1.047 | 1.087 | 0.231 | 1.073 | 1.021 |
| svm | 0.225 | 0.764 | 0.850 | 0.949 | 1.022 | 0.395 | 1.176 | 1.083 |
| xgb | 1.593 | 1.491 | 1.427 | 1.293 | 1.380 | 0.965 | 1.064 | 1.137 |

Tabela 11 – Resultados Estban: Acurácia dos métodos de ML de reconciliação, estratégia *reduced fitted values* + validação cruzada com origem móvel

| modelo | agregado | mesorregiao | microrregiao | municipio | agencia | verbete | bottom | hierarquia |
|---------------|--------------|-------------|--------------|-----------|---------|---------|--------|------------|
| RMSSE | | | | | | | | |
| elastic net | <u>0.154</u> | 0.609 | 0.682 | 0.770 | 0.796 | 0.189 | 0.710 | 0.709 |
| lasso | 0.197 | 0.509 | 0.665 | 0.747 | 0.786 | 0.217 | 0.675 | 0.682 |
| lightgbm | 1.577 | 1.666 | 1.554 | 1.265 | 1.339 | 0.955 | 1.018 | 1.122 |
| random forest | 1.273 | 1.477 | 1.360 | 1.157 | 1.204 | 0.717 | 0.879 | 0.978 |
| ridge | 0.142 | 0.668 | 0.794 | 0.916 | 0.941 | 0.222 | 0.861 | 0.848 |
| svm | 1.604 | 1.755 | 1.626 | 1.667 | 1.655 | 0.927 | 1.237 | 1.378 |
| xgb | 1.415 | 1.660 | 1.488 | 1.181 | 1.228 | 0.950 | 0.902 | 1.015 |
| MASE | | | | | | | | |
| elastic net | <u>0.175</u> | 0.619 | 0.760 | 0.915 | 0.953 | 0.222 | 0.920 | 0.889 |
| lasso | 0.248 | 0.519 | 0.753 | 0.888 | 0.940 | 0.265 | 0.879 | 0.859 |
| lightgbm | 2.160 | 1.944 | 1.862 | 1.554 | 1.705 | 1.360 | 1.406 | 1.481 |
| random forest | 1.685 | 1.683 | 1.610 | 1.397 | 1.478 | 0.991 | 1.132 | 1.224 |
| ridge | 0.162 | 0.664 | 0.895 | 1.066 | 1.112 | 0.259 | 1.111 | 1.054 |
| svm | 2.316 | 2.202 | 2.132 | 2.162 | 2.203 | 1.388 | 1.821 | 1.936 |
| xgb | 1.884 | 1.908 | 1.762 | 1.424 | 1.528 | 1.316 | 1.135 | 1.254 |

Tabela 12 – Resultados Estban: Tempo de processamento dos métodos de ML (em horas). Validação cruzada aleatória

| | xgb | random forest | elastic net | lasso | ridge | svm | lightgbm |
|-----------------------|--------|---------------|-------------|-------|-------|-------|----------|
| reduced fitted values | 19.235 | 5.483 | 1.428 | 0.879 | 0.993 | 1.279 | 3.290 |
| fitted values | 21.758 | 5.521 | 1.363 | 0.829 | 0.924 | 1.273 | 3.341 |
| rolling forecast | 20.908 | 5.429 | 1.345 | 0.838 | 0.929 | 1.285 | 3.377 |

| | | 1 | 1 C 4 | 1 (*) | 1 | • 1 | | 1: 1 . 1 |
|-----|-------------------------------|--------|-----------------|--------------|--------|----------|--------|------------|
| | idação cruzad | da com | origem móvel | | | | | |
| Tal | deia 13 – Resultados E | stban: | rempo de proces | ssamento dos | metodo | s de MIL | (em no | ras). vai- |

| | xgb | random forest | elastic net | lasso | ridge | svm | lightgbm |
|-----------------------|--------|---------------|-------------|-------|-------|-------|----------|
| reduced fitted values | 15.795 | 3.986 | 1.226 | 0.745 | 0.823 | 0.631 | 3.177 |
| fitted values | 15.170 | 4.029 | 1.206 | 0.698 | 0.780 | 0.629 | 4.365 |
| rolling forecast | 13.134 | 3.593 | 1.060 | 0.665 | 0.737 | 0.529 | 2.356 |

Para a base de dados Estban, não houve uma combinação de método e estratégia que fosse consistentemente melhor ao longo de todos os níveis de agregação. Portanto, a escolha do método e da estratégia a serem utilizados dependerá do objetivo do pesquisador²³.

Para os níveis ao topo da hierarquia, os métodos de ML se mostraram a melhor opção para estimação. No nível agregado, o *elastic net* na estratégia *reduced fitted values* + validação cruzada aleatória (Tabela 10) se mostrou a melhor opção para a estimação do agregado, com 91% de ganho de performance sobre o MinT (Tabela 5), em termos de RMSSE, ou seja, o MinT obteve quase o dobro do erro do *elastic net*. Para os níveis de meso e microrregião, o *elastic net* na configuração *Lasso* e na estratégia *reduced fitted values* + validação cruzada com origem móvel obteve as melhores performances, sendo 10% melhor que BU para mesorregião e 6% melhor que o BU para microrregião (Tabela 11). Por outro lado, tanto nos níveis hierárquicos abaixo, quanto no nível agrupado, os métodos de ML não foram capazes de superar os métodos analíticos.

Os resultados se mostraram bastante sensíveis à estratégia utilizada. Na métrica RMSS, nenhum método utilizando as estratégias *rolling forecast* e *fitted values* foi capaz de superar o MinT em qualquer nível de agregação, enquanto na estratégia *reduced fitted values* os métodos de ML mostraram ganhos de performance nas três configurações do *elastic net* em ao menos um nível de agregação.

Em geral, as medidas RMSSE e MASE se mostraram bastante correlacionadas, com os métodos que obtiveram melhor performance em uma métrica também obtendo melhor performance na outra. A exceção foi para o método *lasso* na estratégia *rolling forecast*, que obteve performance melhor que o MinT, em termos de MASE, para o nível agregado, sendo o único resultado positivo para a estratégia *rolling forecast*.

4.5 Conclusão

Neste estudo de caso, foram apresentados experimentos de reconciliação ótima para séries temporais hierárquicas e agrupadas, utilizando métodos analíticos e de ML com o objetivo de obter coerência e ganhos de acurácia nas previsões de saldos de empréstimos e financiamentos

Se o objetivo é a elaboração de *guidance*, por exemplo, o pesquisador deve preferir o método e estratégia que geram as previsões mais precisas para o nível agregado. Já para elaboração de metas individuais, os níveis individuais ou regionais podem ser preferíveis.

do Banco do Estado do Espírito Santo. Pesquisas anteriores já haviam mostrado que a reconciliação ótima pode trazer ganhos de acurácia, e que métodos de ML podem ser competitivos em relação aos métodos analíticos.

Este trabalho trouxe, além dos métodos de RF e XGB já trabalhados em Spiliotis et al. (2021), o método de regressão regularizada *elastic net* e o SVM, além de avaliar outra implementação de *gradient boosting*, o LGBM. Paralelamente, este trabalho propôs duas estratégias alternativas para aquisição do conjunto de treinamento dos modelos de ML e também avaliou a estratégia de validação cruzada com origem móvel para a tarefa de combinação ótima.

Os resultados obtidos para a base de dados Estban mostraram, primeiramente, que não houve uma combinação de método e estratégia que obtivesse melhor performance de maneira consistente ao longo de todos os níveis hierárquicos. Dessa forma, a escolha do método e da estratégia a serem utilizados dependerá do objetivo do pesquisador. Para os níveis ao topo da hierarquia, a combinação correta de método e estratégia de estimação (*elastic net + reduced fitted values*) gerou 91% de ganho de performance no nível mais agregado, o que imputaria a instituição financeira maior precisão para tomada de decisão e planejamento estratégico, além de sinalizar maior confiança nas estimativas comunicadas ao mercado e aos investidores.

Por outro lado, para os níveis inferiores na estrutura hierárquica (municípios e agências), os métodos analíticos se mostraram a melhor escolha. Isto sugere que, com o objetivo de elaboração de metas individuais — seja para as agências ou superintendências regionais —, os métodos analíticos ainda são preferíveis, enquanto para microrregiões, mesorregiões e total, os métodos de ML demonstram maior acurácia.

Os restultados também mostram que o resultado da reconciliação ótima é sensível à estratégia utilizada. Apenas na estratégia *reduced fitted values* que os ganhos de performance foram observados, enquanto nas estratégias *rolling forecast* e *fitted values* os métodos de ML não foram capazes de superar os métodos analíticos.

Contrariamente aos resultados de Spiliotis et al. (2021), as implementações de ML baseados em árvore de decisão (XGB, RF e LGBM) não foram capazes de superar os métodos analíticos em nenhum nível de agregação.

5 PREVISÃO PARA O TURISMO DOMÉSTICO AUS-TRALIANO

5.1 Introdução

A base de dados "overnight trips" consiste na quantidade trimestral de viagens domésticas que duram uma noite na Austrália entre 1998 e 2017. A estrutura é hierárquica e agrupada, composta por 3 níveis hierárquicos — *State* (Estados), *Region* (Regiões) e total —, e agrupado

por *Purpose* (Propósito). Essa base de dados foi utilizada em Athanasopoulos, Ahmed e Hyndman (2009) para comparar a performance da combinação ótima contra BU e algumas variações de TD e é também utilizada em Hyndman e Athanasopoulos (2021) como recurso didático no capítulo de previsão hierárquica.

A base de dados "domestic visitor nights" registra o número total de noites que os visitantes domésticos passam em viagens dentro da Austrália. A estrutura desse dataset é estritamente hierárquica, composta por 4 níveis hierárquicos: *State* (Estados), *Zones* (Zonas), *Region* (Regiões) e total. Essa base de dados foi utilizada em trabalhos como Wickramasuriya, Athanasopoulos e Hyndman (2019), Kourentzes e Athanasopoulos (2019) e Spiliotis et al. (2021).

5.2 Resultados

Assim como na base de dados Estban, aqui também não houve uma combinação de método e estratégia que fosse consistentemente melhor ao longo de todos os níveis de agregação. Entretanto, uma tendência pode ser observada em ambas bases de dados, com os métodos de ML se mostrando a melhor opção para estimação nos níveis ao topo da hierarquia, enquanto os métodos analíticos se mostram melhor opção para os níveis ao fundo da hierarquia.

Nessa base de dados, o método SVM na estratégia *rolling forecast* se mostrou a melhor combinação para os níveis mais agregados, alcançando 93% de incremento de performance em relação ao MinT, em termos de RMSSE, ou seja, o MinT teve quase o dobro do erro que o SVM. Já a estratégia *reduced fitted values* teve performance muito baixa, com probelmas de estimação e necessidade de imputação de dados. Além da perda de performance nas medidas de acurácia, a estratégia *reduced fitted values* também teve tempo de processamento muito longos em relação às outras estratégias. Nessa estratégia também foi observada presença de valores negativos para os métodos *elastic net* e SVM, de forma que foram excluídos do *benchmark*.

Tabela 14 – Resultados para "overnight trips": Acurácia dos métodos analíticos de reconciliação

| .model | agregado | state | region | purpose | bottom | hierarquia |
|--------|----------|-------|--------|---------|--------|------------|
| RMSSE | 1 | | | | | |
| base | 1.446 | 1.260 | 1.068 | 1.265 | 0.925 | 0.976 |
| bu | 2.580 | 1.634 | 1.113 | 2.004 | 0.925 | 1.011 |
| mint | 1.813 | 1.296 | 0.978 | 1.420 | 0.876 | 0.923 |
| MASE | | | | | | |
| base | 1.533 | 1.399 | 1.132 | 1.330 | 0.979 | 1.036 |
| bu | 3.164 | 1.877 | 1.176 | 2.323 | 0.979 | 1.078 |
| mint | 2.086 | 1.449 | 1.021 | 1.512 | 0.937 | 0.984 |

Tabela 15 – Resultados para "overnight trips": Acurácia dos métodos de ML de reconciliação, estratégia rolling forecast

| modelo | agregado | State | Region | Purpose | bottom | hierarquia |
|---------------|--------------|--------------|--------|--------------|--------|------------|
| RMSSE | | | | | | |
| elastic net | 1.990 | 1.386 | 1.086 | 1.541 | 0.988 | 1.041 |
| lasso | 1.929 | 1.373 | 1.100 | 1.523 | 1.026 | 1.069 |
| lightgbm | 4.330 | 2.762 | 1.651 | 3.456 | 1.141 | 1.354 |
| random forest | 2.135 | 1.365 | 1.033 | 1.709 | 0.908 | 0.966 |
| ridge | <u>1.256</u> | <u>1.185</u> | 1.013 | <u>1.202</u> | 0.919 | 0.959 |
| svm | 0.940 | 1.010 | 1.076 | 1.011 | 1.100 | 1.097 |
| xgb | 2.340 | 1.451 | 1.114 | 1.892 | 0.964 | 1.031 |
| MASE | | | | | | |
| elastic net | 2.360 | 1.572 | 1.145 | 1.653 | 1.058 | 1.115 |
| lasso | 2.264 | 1.557 | 1.168 | 1.593 | 1.110 | 1.155 |
| lightgbm | 5.505 | 3.214 | 1.763 | 4.060 | 1.200 | 1.448 |
| random forest | 2.579 | 1.528 | 1.073 | 1.816 | 0.961 | 1.020 |
| ridge | 1.343 | <u>1.309</u> | 1.058 | <u>1.192</u> | 0.981 | 1.020 |
| svm | 1.070 | 1.096 | 1.140 | 1.033 | 1.178 | 1.174 |
| xgb | 2.888 | 1.650 | 1.162 | 2.118 | 1.013 | 1.087 |

Tabela 16 – Resultados para "overnight trips": Acurácia dos métodos de ML de reconciliação, estratégia fitted values

| modelo | agregado | State | Region | Purpose | bottom | hierarquia |
|---------------|----------|--------------|--------|---------|--------|------------|
| RMSSE | | | | | | |
| elastic net | 2.166 | 1.400 | 1.100 | 1.771 | 0.972 | 1.034 |
| lasso | 1.904 | 1.446 | 1.093 | 1.611 | 0.973 | 1.034 |
| lightgbm | 4.330 | 2.762 | 1.651 | 3.456 | 1.141 | 1.354 |
| random forest | 2.115 | 1.361 | 1.032 | 1.715 | 0.907 | 0.964 |
| ridge | 1.568 | <u>1.156</u> | 0.971 | 1.292 | 0.897 | 0.933 |
| svm | 1.495 | <u>1.189</u> | 1.046 | 1.383 | 1.036 | 1.054 |
| xgb | 2.269 | 1.418 | 1.100 | 1.829 | 0.962 | 1.023 |
| MASE | | | | | | |
| elastic net | 2.587 | 1.570 | 1.160 | 1.955 | 1.035 | 1.102 |
| lasso | 2.212 | 1.672 | 1.156 | 1.729 | 1.040 | 1.108 |
| lightgbm | 5.505 | 3.214 | 1.763 | 4.060 | 1.200 | 1.448 |
| random forest | 2.543 | 1.538 | 1.073 | 1.837 | 0.966 | 1.024 |
| ridge | 1.773 | 1.290 | 1.012 | 1.308 | 0.960 | 0.993 |
| svm | 1.747 | <u>1.304</u> | 1.091 | 1.364 | 1.097 | 1.113 |
| xgb | 2.790 | 1.619 | 1.153 | 2.041 | 1.013 | 1.080 |

Tabela 17 – Resultados para "overnight trips": Acurácia dos métodos de ML de reconciliação, estratégia reduced fitted values

| modelo | agregado | State | Region | Purpose | bottom | hierarquia |
|---------------|-----------|-----------|----------|-----------|-----------|------------|
| RMSSE | | | | | | |
| elastic net | 496.4 | 449 | 405.5 | 510.4 | 281.6 | 317.9 |
| lasso | 593.1 | 381 | 411.8 | 502.4 | 309.8 | 338.5 |
| lightgbm | 4.33 | 2.762 | 1.651 | 3.456 | 1.141 | 1.354 |
| random forest | 2.582 | 1.55 | 1.108 | 2.015 | 0.9236 | 1.005 |
| ridge | 328.9 | 282.3 | 220.1 | 331 | 129.9 | 159.5 |
| svm | 5.328e+09 | 1.378e+10 | 1.15e+10 | 1.179e+10 | 5.643e+09 | 7.244e+09 |
| xgb | 3.14 | 1.934 | 1.284 | 2.441 | 1.019 | 1.136 |
| MASE | | | | | | |
| elastic net | 563.8 | 521.7 | 459.7 | 586.9 | 324.1 | 363.4 |
| lasso | 656 | 423.9 | 460.8 | 599.1 | 359.5 | 388.5 |
| lightgbm | 5.505 | 3.214 | 1.763 | 4.06 | 1.2 | 1.448 |
| random forest | 3.176 | 1.762 | 1.167 | 2.236 | 0.9756 | 1.066 |
| ridge | 361.5 | 324.7 | 248 | 377.6 | 147.8 | 180.7 |
| svm | 6.081e+09 | 1.413e+10 | 1.08e+10 | 1.095e+10 | 5.255e+09 | 6.82e+09 |
| xgb | 3.932 | 2.265 | 1.378 | 2.857 | 1.072 | 1.213 |

Tabela 18 – Resultados para "overnight trips": Tempo de processamento dos métodos de ML (em horas)

| | xgb | random forest | elastic net | lasso | ridge | svm | lightgbm |
|-----------------------|--------|---------------|-------------|-------|-------|--------|----------|
| fitted values | 15.767 | 3.687 | 1.540 | 1.282 | 1.371 | 1.977 | 3.535 |
| rolling forecast | 12.087 | 2.987 | 0.957 | 0.796 | 1.073 | 2.035 | 3.596 |
| reduced fitted values | 24.627 | 15.386 | 6.006 | 4.968 | 5.323 | 10.474 | 19.362 |

Tabela 19 – Resultados para "visitor nights": Acurácia dos métodos analíticos de reconciliação

| .model | agregado | state | zone | region | hierarquia |
|--------|----------|-------|-------|--------|------------|
| RMSSE | 2 | | | | |
| base | 0.782 | 0.900 | 0.932 | 0.876 | 0.890 |
| bu | 1.749 | 1.172 | 0.963 | 0.876 | 0.924 |
| mint | 1.146 | 0.911 | 0.835 | 0.822 | 0.834 |
| td | 0.782 | 0.858 | 0.843 | 0.836 | 0.839 |
| MASE | | | | | |
| base | 0.788 | 0.955 | 1.014 | 0.949 | 0.964 |
| bu | 1.850 | 1.278 | 1.029 | 0.949 | 0.997 |
| mint | 1.176 | 0.950 | 0.902 | 0.893 | 0.901 |
| td | 0.788 | 0.881 | 0.919 | 0.916 | 0.913 |

Tabela 20 – Resultados para "visitor nights": Acurácia dos métodos de ML de reconciliação, estratégia rolling forecast

| modelo | agregado | State | Zone | Region | hierarquia |
|---------------|----------|-------|-------|--------------|------------|
| RMSSE | | | | | |
| elastic net | 1.298 | 1.037 | 0.905 | 0.857 | 0.884 |
| lasso | 1.248 | 1.015 | 0.883 | 0.839 | 0.865 |
| lightgbm | 1.563 | 1.124 | 0.933 | 0.866 | 0.905 |
| random forest | 1.251 | 0.951 | 0.828 | 0.805 | 0.824 |
| ridge | 1.231 | 0.950 | 0.838 | <u>0.811</u> | 0.830 |
| svm | 1.478 | 1.087 | 0.921 | 0.856 | 0.892 |
| xgb | 1.427 | 1.062 | 0.895 | 0.846 | 0.877 |
| MASE | | | | | |
| elastic net | 1.396 | 1.080 | 0.969 | 0.924 | 0.949 |
| lasso | 1.322 | 1.046 | 0.933 | 0.903 | 0.923 |
| lightgbm | 1.466 | 1.124 | 0.978 | 0.933 | 0.961 |
| random forest | 1.301 | 0.986 | 0.882 | 0.868 | 0.883 |
| ridge | 1.311 | 0.994 | 0.902 | 0.885 | 0.899 |
| svm | 1.560 | 1.117 | 0.979 | 0.919 | 0.952 |
| xgb | 1.447 | 1.102 | 0.950 | 0.907 | 0.935 |

Tabela 21 – Resultados para "visitor nights": Acurácia dos métodos de ML de reconciliação, estratégia fitted values

| modelo | agregado | State | Zone | Region | hierarquia |
|---------------|----------|-------|--------------|--------------|------------|
| RMSSE | | | | | |
| elastic net | 1.285 | 0.979 | 0.864 | 0.830 | 0.852 |
| lasso | 1.097 | 0.974 | 0.848 | 0.819 | 0.838 |
| lightgbm | 1.342 | 1.037 | 0.886 | 0.842 | 0.869 |
| random forest | 1.202 | 0.931 | <u>0.820</u> | 0.813 | 0.826 |
| ridge | 1.068 | 0.906 | 0.813 | 0.804 | 0.815 |
| svm | 1.232 | 0.971 | 0.859 | 0.835 | 0.853 |
| xgb | 1.376 | 0.994 | 0.857 | 0.838 | 0.858 |
| MASE | | | | | |
| elastic net | 1.343 | 1.019 | 0.923 | 0.895 | 0.914 |
| lasso | 1.136 | 0.989 | 0.888 | 0.883 | 0.893 |
| lightgbm | 1.249 | 1.040 | 0.941 | 0.916 | 0.933 |
| random forest | 1.207 | 0.964 | <u>0.883</u> | <u>0.879</u> | 0.888 |
| ridge | 1.120 | 0.950 | 0.869 | 0.875 | 0.880 |
| svm | 1.292 | 0.999 | 0.915 | 0.895 | 0.910 |
| xgb | 1.396 | 1.025 | 0.925 | 0.907 | 0.924 |

| Tabela 22 – Resultados para "visitor nights": | Acurácia dos métodos de ML de reconciliação, |
|--|--|
| estratégia reduced fitted values | |

| modelo | agregado | State | Zone | Region | hierarquia |
|---------------|-----------|-----------|-----------|-----------|------------|
| RMSSE | | | | | |
| elastic net | 7.424e+12 | 2.628e+12 | 1.601e+12 | 7.51e+11 | 1.136e+12 |
| lasso | 1.354 | 1.086 | 0.9167 | 0.8473 | 0.8838 |
| lightgbm | 1.705 | 1.15 | 0.9707 | 0.877 | 0.9245 |
| random forest | 1.232 | 0.9545 | 0.8502 | 0.8424 | 0.8548 |
| ridge | 1.99e+12 | 2.238e+12 | 1.728e+12 | 1.455e+12 | 1.576e+12 |
| svm | 1.717 | 1.332 | 1.116 | 0.9758 | 1.039 |
| xgb | 1.724 | 1.16 | 0.9431 | 0.8713 | 0.9147 |
| MASE | | | | | |
| elastic net | 8.493e+12 | 2.931e+12 | 1.81e+12 | 8.536e+11 | 1.286e+12 |
| lasso | 1.468 | 1.126 | 0.9676 | 0.913 | 0.9447 |
| lightgbm | 1.761 | 1.219 | 1.025 | 0.9422 | 0.9871 |
| random forest | 1.254 | 1.016 | 0.9184 | 0.9151 | 0.9253 |
| ridge | 2.356e+12 | 2.614e+12 | 2.046e+12 | 1.813e+12 | 1.925e+12 |
| svm | 1.96 | 1.516 | 1.227 | 1.092 | 1.159 |
| xgb | 1.821 | 1.248 | 1.002 | 0.9243 | 0.9716 |

Tabela 23 – Resultados para "visitor nights": Tempo de processamento dos métodos de ML (em horas)

| | xgb | random forest | elastic net | lasso | ridge | svm | lightgbm |
|-----------------------|-------|---------------|-------------|-------|-------|-------|----------|
| fitted values | 5.089 | 1.493 | 0.315 | 0.236 | 0.235 | 2.439 | 1.353 |
| rolling forecast | 5.585 | 1.645 | 0.260 | 0.253 | 0.294 | 1.746 | 1.374 |
| reduced fitted values | 4.910 | 1.453 | 0.283 | 0.222 | 0.221 | 6.395 | 1.343 |

6 CONCLUSÃO

Para pesquisas futuras, pode-se investigar se a performance dos diferentes métodos e estratégias estão relacionadas às características das séries temporais, por exemplo:

- Existem características específicas das séries temporais que favorecem o uso de métodos de ML em níveis agregados ou desagregados?
- Séries estritamente hierárquicas irão favorecer métodos analíticos nos níveis mais agregados, enquanto séries hierárquicas agrupadas favorecerão métodos de ML?
- Existe motivo teórico para que os métodos de ML baseados em árvore de decisão tenham baixa performance nos níveis inferiores de séries hierárquicas agrupadas?
- Os efeitos do ruído de previsão: se os diferentes métodos e estratégias exibem aumento ou deterioração de performance quando as previsões individuais são mais ou menos ruidosas (i.e. se a variância do erro das previsões individuais é maior ou menor).
- Os efeitos de correlação entre as séries: se os métodos e estratégias exibem aumento ou deterioração de performance quando as séries temporais no menor nível hierárquico são

mais ou menos correlacionadas.

- Os efeitos de componentes sazonais: se os métodos e estratégias exibem aumento ou deterioração de performance quando as séries temporais do menor nível hierárquico possuem ou não componentes sazonais.
- Os efeitos do tamanho da hierarquia: verificar se os métodos e estratégias exibem aumento ou deterioração de performance quando a hierarquia é mais ou menos profunda (i.e. possui mais ou menos níveis hierárquicos).

REFERÊNCIAS

ATHANASOPOULOS, G.; AHMED, R. A.; HYNDMAN, R. J. Hierarchical forecasts for Australian domestic tourism. **International Journal of Forecasting**, v. 25, n. 1, p. 146–166, 1 jan. 2009. ISSN 0169-2070. DOI: 10.1016/j.ijforecast.2008.07.004. Disponível em: https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0169207008000691. Acesso em: 11 jan. 2023. Citado nas pp. 13, 19, 49.

ATHANASOPOULOS, G.; HYNDMAN, R. J.; KOURENTZES, N.; PANAGIOTELIS, A. Forecast reconciliation: A review, 2023. Citado nas pp. 13, 25, 36.

ATHANASOPOULOS, G.; HYNDMAN, R. J.; KOURENTZES, N.; PETROPOULOS, F. Forecasting with temporal hierarchies. **European Journal of Operational Research**, v. 262, n. 1, p. 60–74, 1 out. 2017. ISSN 0377-2217. DOI: 10.1016/j.ejor.2017.02.046. Disponível em: https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0377221717301911. Acesso em: 11 jan. 2023. Citado na p. 26.

BADER, F. L. C.; KOYAMA, SÉRGIO MIKIO; TSUCHIDA, MARCOS HIROYUKI. Modelo favar canônico para previsão do mercado de crédito. **Banco Central do Brasil**, v. 369, p. 38, nov. 2014. ISSN 1519-1028. Citado na p. 36.

BANCO DO ESTADO DO ESPÍRITO SANTO. **Demonstrações Financeiras**. Vitória, 2022. Disponível em: https://www.banestes.com.br/ri/arquivos/informacoes/demoFinanceiras/2022 demonFinanceiras.pdf>. Acesso em: 4 jun. 2023. Citado na p. 35.

BECCALLI, E. et al. Earnings management, forecast guidance and the banking crisis. **The European Journal of Finance**, v. 21, n. 3, p. 242–268, 19 fev. 2015. ISSN 1351-847X. DOI: 10.1080/1351847X.2013.809548. Disponível em: https://doi.org/10.1080/1351847X.2013. 809548>. Acesso em: 7 mai. 2023. Citado na p. 34.

BERGMEIR, C.; BENÍTEZ, J. M. On the use of cross-validation for time series predictor evaluation. **Information Sciences**, v. 191, p. 192–213, 15 mai. 2012. ISSN 0020-0255. DOI: 10. 1016/j.ins.2011.12.028. Disponível em: https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0020025511006773. Acesso em: 30 mai. 2023. Citado na p. 32.

BERGMEIR, C.; HYNDMAN, R. J.; KOO, B. A note on the validity of cross-validation for evaluating autoregressive time series prediction. **Computational Statistics & Data Analysis**, v. 120, p. 70–83, abr. 2018. ISSN 01679473. DOI: 10.1016/j.csda.2017.11.003. Disponível em: https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0167947317302384. Acesso em: 28 mai. 2023. Citado na p. 33.

BISCHL, B.; MERSMANN, O. et al. Resampling Methods for Meta-Model Validation with Recommendations for Evolutionary Computation. **Evolutionary Computation**, v. 20, n. 2, p. 249–275, jun. 2012. Conference Name: Evolutionary Computation. ISSN 1063-6560. DOI: 10.1162/EVCO_a_00069. Citado na p. 31.

BISCHL, B.; BINDER, M. et al. **Hyperparameter Optimization: Foundations, Algorithms, Best Practices and Open Challenges**. [S.l.]: arXiv, 24 nov. 2021. DOI: 10.48550/arXiv.2107. 05847. arXiv: 2107.05847[cs,stat]. Disponível em: http://arxiv.org/abs/2107.05847. Acesso em: 4 set. 2023. Citado na p. 42.

BRASIL. **Lei nº 7.492, de 16 de junho de 1986**. Brasília, DF: Presidência da República, 18 jun. 1986. Disponível em: https://www.planalto.gov.br/ccivil-03/leis/17492.htm. Citado na p. 34.

CHEN, T.; GUESTRIN, C. XGBoost: A Scalable Tree Boosting System. In: PROCEEDINGS of the 22nd ACM SIGKDD International Conference on Knowledge Discovery and Data Mining. New York, NY, USA: Association for Computing Machinery, 13 ago. 2016. (KDD '16), p. 785–794. ISBN 978-1-4503-4232-2. DOI: 10.1145/2939672.2939785. Disponível em: https://dl.acm.org/doi/10.1145/2939672.2939785. Acesso em: 23 jan. 2024. Citado na p. 65.

CHEN, T.; HE, T. et al. **xgboost: Extreme Gradient Boosting**. [S.l.], 2024. R package version 1.7.7.1. Disponível em: https://github.com/dmlc/xgboost. Citado na p. 42.

ÇOLAK, M. S. et al. **TCMB - Monitoring and Forecasting Cyclical Dynamics in Bank Credits: Evidence from Turkish Banking Sector**. Ankara, Turquia, 2019. Disponível em: https://www.tcmb.gov.tr/wps/wcm/connect/EN/TCMB+EN/Main+Menu/Publications/Research/Working+Paperss/2019/19-29. Acesso em: 6 mar. 2023. Citado na p. 36.

CONSELHO MONETÁRIO NACIONAL. **Resolução nº 2.099, de 17 de agosto de 1994**. Brasília, DF: Banco Central do Brasil, 17 ago. 1994. Disponível em: https://www.bcb.gov.br/pre/normativos/res/1994/pdf/res_2099_v1_O.pdf. Citado na p. 35.

_____. Resolução nº 2.682, de 21 de dezembro de 1999. Brasília, DF: Banco Central do Brasil, 21 dez. 1999. Disponível em: https://www.bcb.gov.br/pre/normativos/res/1999/pdf/res_2682_v2_L.pdf. Citado na p. 37.

DAHIS, R. et al. Data Basis (Base Dos Dados): Universalizing Access to High-Quality Data. **SSRN Electronic Journal**, 2022. ISSN 1556-5068. DOI: 10.2139/ssrn.4157813. Disponível em: https://www.ssrn.com/abstract=4157813>. Acesso em: 18 jun. 2023. Citado na p. 36.

FRIEDMAN, J. et al. **glmnet: Lasso and Elastic-Net Regularized Generalized Linear Models**. [S.1.], 2023. R package version 4.1-8. Disponível em: https://glmnet.stanford.edu. Citado na p. 42.

GORODETSKAYA, O.; GOBAREVA, Y.; KOROTEEV, M. A Machine Learning Pipeline for Forecasting Time Series in the Banking Sector. **Economies**, v. 9, n. 4, p. 205, dez. 2021. Number: 4 Publisher: Multidisciplinary Digital Publishing Institute. ISSN 2227-7099. DOI: 10.3390/economies9040205. Disponível em: https://www.mdpi.com/2227-7099/9/4/205. Acesso em: 27 fev. 2023. Citado na p. 36.

GROSS, C. W.; SOHL, J. E. Disaggregation methods to expedite product line forecasting. **Journal of Forecasting**, v. 9, n. 3, p. 233–254, 1990. ISSN 1099-131X. DOI: 10.1002/for.39800 90304. Disponível em: https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/for.3980090304>. Acesso em: 18 jun. 2023. Citado nas pp. 13, 19.

HASTIE, T.; TIBSHIRANI, R.; FRIEDMAN, J. The Elements of Statistical Learning: Data Mining, Inference, and Prediction, Second Edition. 2nd 2009, Corr. 9th Printing 2017 ed. edição. New York, NY: Springer, 1 fev. 2009. ISBN 978-0-387-84857-0. Citado nas pp. 65, 67, 68.

HYNDMAN, R.; ATHANASOPOULOS, G. Forecasting: principles and practice. 3. ed. Melbourne, Austrália: OTexts, 2021. Disponível em: https://otexts.com/fpp3/. Citado nas pp. 13, 16, 18, 19, 49.

HYNDMAN, R. J.; KOEHLER, A. B. et al. A state space framework for automatic forecasting using exponential smoothing methods. **International Journal of Forecasting**, v. 18, n. 3, p. 439–454, 1 jul. 2002. ISSN 0169-2070. DOI: 10.1016/S0169-2070(01)00110-8. Disponível em: https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0169207001001108. Acesso em: 26 nov. 2023. Citado na p. 41.

HYNDMAN, R. J.; AHMED, R. A. et al. Optimal combination forecasts for hierarchical time series. **Computational Statistics & Data Analysis**, v. 55, n. 9, p. 2579–2589, 1 set. 2011. ISSN 0167-9473. DOI: 10.1016/j.csda.2011.03.006. Disponível em: https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0167947311000971. Acesso em: 11 jan. 2023. Citado na p. 23.

HYNDMAN, R. J.; LEE, A. J.; WANG, E. Fast computation of reconciled forecasts for hierarchical and grouped time series. **Computational Statistics & Data Analysis**, v. 97, p. 16–32, 1 mai. 2016. ISSN 0167-9473. DOI: 10.1016/j.csda.2015.11.007. Disponível em: https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S016794731500290X. Acesso em: 11 jan. 2023. Citado na p. 23.

KE, G. et al. LightGBM: A Highly Efficient Gradient Boosting Decision Tree. In: AD-VANCES in Neural Information Processing Systems. [S.l.]: Curran Associates, Inc., 2017. v. 30. Disponível em: https://proceedings.neurips.cc/paper/2017/hash/6449f44a102fde848669bdd9eb6b76fa-Abstract.html. Acesso em: 23 jan. 2024. Citado na p. 65.

KOURENTZES, N.; ATHANASOPOULOS, G. Cross-temporal coherent forecasts for Australian tourism. **Annals of Tourism Research**, v. 75, p. 393–409, 1 mar. 2019. ISSN 0160-7383. DOI: 10.1016/j.annals.2019.02.001. Disponível em: https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0160738319300167>. Acesso em: 11 jan. 2023. Citado na p. 49.

LANG, M. et al. mlr3: Machine Learning in R - Next Generation. [S.1.], 2024. R package version 0.18.0. Disponível em: https://mlr3.mlr-org.com. Citado na p. 42.

LI, Z. et al. A Hierarchical Approach Using Machine Learning Methods in Solar Photovoltaic Energy Production Forecasting. **Energies**, v. 9, n. 1, p. 55, jan. 2016. Number: 1 Publisher: Multidisciplinary Digital Publishing Institute. ISSN 1996-1073. DOI: 10.3390/en9010055. Disponível em: https://www.mdpi.com/1996-1073/9/1/55>. Acesso em: 8 abr. 2023. Citado na p. 36.

MAKRIDAKIS, S.; SPILIOTIS, E.; ASSIMAKOPOULOS, V. M5 accuracy competition: Results, findings, and conclusions. **International Journal of Forecasting**, v. 38, n. 4, p. 1346–1364, 1 out. 2022. ISSN 0169-2070. DOI: 10.1016/j.ijforecast.2021.11.013. Disponível em: https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0169207021001874. Acesso em: 15 mar. 2024. Citado nas pp. 4, 5.

MEYER, D. et al. e1071: Misc Functions of the Department of Statistics, Probability Theory Group (Formerly: E1071), TU Wien. [S.l.: s.n.], 2023. R package version 1.7-14. Disponível em: https://CRAN.R-project.org/package=e1071. Citado na p. 42.

O'HARA-WILD, M.; HYNDMAN, R.; WANG, E. **fable: Forecasting Models for Tidy Time Series**. [S.l.], 2024. R package version 0.3.4. Disponível em: https://fable.tidyverts.org. Citado na p. 41.

_____. fabletools: Core Tools for Packages in the fable Framework. [S.l.], 2024. R package version 0.4.1. Disponível em: https://fabletools.tidyverts.org/. Citado na p. 41.

PANAGIOTELIS, A. et al. Forecast reconciliation: A geometric view with new insights on bias correction. **International Journal of Forecasting**, v. 37, n. 1, p. 343–359, 1 jan. 2021. ISSN 0169-2070. DOI: 10.1016/j.ijforecast.2020.06.004. Disponível em: https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0169207020300911>. Acesso em: 15 jan. 2023. Citado na p. 25.

PRAYOGA, I.; SUHARTONO, S.; RAHAYU, S. Top-down forecasting for high dimensional currency circulation data of Bank Indonesia. **International Journal of Advances in Soft Computing and its Applications**, v. 9, p. 62–74, 1 jan. 2017. Citado na p. 36.

R CORE TEAM. **R: A Language and Environment for Statistical Computing**. Vienna, Austria, 2023. Disponível em: https://www.R-project.org/>. Citado na p. 41.

SCHNEIDER, L. et al. mlr3mbo: Flexible Bayesian Optimization. [S.l.], 2024. R package version 0.2.2. Disponível em: https://mlr3mbo.mlr-org.com. Citado na p. 42.

SEZER, O. B.; GUDELEK, M. U.; OZBAYOGLU, A. M. Financial Time Series Forecasting with Deep Learning: A Systematic Literature Review: 2005-2019. Turquia: arXiv, 29 nov. 2019. arXiv: 1911.13288[cs,q-fin,stat]. Disponível em: http://arxiv.org/abs/1911.13288. Acesso em: 7 mar. 2023. Citado na p. 36.

SHI, Y. et al. **lightgbm: Light Gradient Boosting Machine**. [S.l.], 2024. R package version 4.3.0. Disponível em: https://github.com/Microsoft/LightGBM>. Citado na p. 42.

SHIRATORI, T.; KOBAYASHI, K.; TAKANO, Y. Prediction of hierarchical time series using structured regularization and its application to artificial neural networks. **PLOS ONE**, v. 15, n. 11, e0242099, 12 nov. 2020. Publisher: Public Library of Science. ISSN 1932-6203. DOI: 10.1371/journal.pone.0242099. Disponível em: https://journals.plos.org/plosone/article?id=10.1371/journal.pone.0242099. Acesso em: 18 mar. 2024. Citado na p. 25.

SPILIOTIS, E. et al. Hierarchical forecast reconciliation with machine learning. **Applied Soft Computing**, v. 112, p. 107756, 1 nov. 2021. ISSN 1568-4946. DOI: 10.1016/j.asoc.2021.1077 56. Disponível em: https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1568494621006773. Acesso em: 11 jan. 2023. Citado nas pp. 4, 5, 14, 15, 24–28, 48, 49.

STONE, M. Cross-validation and multinomial prediction. **Biometrika**, v. 61, n. 3, p. 509–515, 1 dez. 1974. ISSN 0006-3444. DOI: 10.1093/biomet/61.3.509. Disponível em: https://doi.org/10.1093/biomet/61.3.509>. Acesso em: 28 mai. 2023. Citado na p. 31.

WALLANDER, J. Budgeting — an unnecessary evil. **Scandinavian Journal of Management**, v. 15, n. 4, p. 405–421, 1 dez. 1999. ISSN 0956-5221. DOI: 10.1016/S0956-5221(98)00032-3. Disponível em: https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0956522198000323. Acesso em: 8 mai. 2023. Citado na p. 34.

WICKRAMASURIYA, S. L.; ATHANASOPOULOS, G.; HYNDMAN, R. J. Optimal Forecast Reconciliation for Hierarchical and Grouped Time Series Through Trace Minimization. **Journal of the American Statistical Association**, v. 114, n. 526, p. 804–819, 3 abr. 2019. ISSN 0162-1459, 1537-274X. DOI: 10.1080/01621459.2018.1448825. Disponível em: https://www.tandfonline.com/doi/full/10.1080/01621459.2018.1448825. Acesso em: 18 jun. 2023. Citado nas pp. 14, 23, 24, 49.

WRIGHT, M. N.; WAGER, S.; PROBST, P. ranger: A Fast Implementation of Random Forests. [S.l.], 2023. R package version 0.16.0. Disponível em: http://imbs-hl.github.io/ranger/. Citado na p. 42.

ZOU, H.; HASTIE, T. Regularization and variable selection via the elastic net. **Journal of the Royal Statistical Society: Series B (Statistical Methodology)**, v. 67, n. 2, p. 301–320, 2005. _eprint: https://onlinelibrary.wiley.com/doi/pdf/10.1111/j.1467-9868.2005.00503.x. ISSN 1467-9868. DOI: 10.1111/j.1467-9868.2005.00503.x. Disponível em: https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1111/j.1467-9868.2005.00503.x. Acesso em: 5 jun. 2023. Citado na p. 64.



APÊNDICE A – DEMONSTRAÇÕES

Proposição A.1 (condição de ausência de viés em \tilde{y}). Se as previsões reconciliadas são não viesadas, então SGS = S, ou seja, G é inversa generalizada de S.

Demonstração.

$$\tilde{\mathbf{y}}_{t+h|t} = \mathbf{S}\mathbf{G}\hat{\mathbf{y}}_{t+h|t} \tag{A.1}$$

Se $\hat{m{y}}_{t+h|t}$ é não viesado, então

$$\mathbb{E}[\hat{y}_{t+h|t}] = \mathbb{E}[y_{t+h|t}] = Sb_t \tag{A.2}$$

Da mesma forma, se espera-se que as previsões reconciliadas não sejam viesadas,

$$\mathbb{E}[\tilde{\mathbf{y}}_{t+h|t}] = \mathbb{E}[\mathbf{y}_{t+h|t}] = \mathbf{S}\mathbf{b}_t \tag{A.3}$$

Substituindo (A.2) em (A.1), temos

$$\tilde{\boldsymbol{y}}_{t+h|t} = \boldsymbol{SGSb}_t \tag{A.4}$$

Logo, para manter a igualdade entre (A.1) e (A.4), SGS = S

Proposição A.2. $ilde{e}_t = SG\hat{e}_t$.

Demonstração.

$$\tilde{e}_{t+h|t} = y_{t+h} - \tilde{y}_{t+h|t} \tag{A.5}$$

Substituindo (A.1) em (A.5),

$$\tilde{\boldsymbol{e}}_{t+h|t} = \boldsymbol{y}_{t+h} - \boldsymbol{S}\boldsymbol{G}\hat{\boldsymbol{y}}_{t+h|t} \tag{A.6}$$

Lembrando que, por definição, $oldsymbol{y}_{t+h} = \hat{oldsymbol{y}}_{t+h|t} + \hat{oldsymbol{e}}_{t+h|t},$ então

$$\tilde{e}_{t+h|t} = \hat{y}_{t+h|t} + \hat{e}_{t+h|t} - SG\hat{y}_{t+h|t}$$
 (A.7)

$$= \hat{\boldsymbol{e}}_{t+h|t} + \hat{\boldsymbol{y}}_{t+h|t}(\boldsymbol{I} - \boldsymbol{S}\boldsymbol{G}) \tag{A.8}$$

Usando a definição novamente, temos que

$$\tilde{e}_{t+h|t} = \hat{e}_{t+h|t} + (y_{t+h} - \hat{e}_{t+h|t})(I - SG)$$
 (A.9)

$$= y_{t+h} - SGy_{t+h|t} + SG\hat{e}_{t+h|t}$$
 (A.10)

$$= y_{t+h}(I - SG) + SG\hat{e}_{t+h|t}$$
(A.11)

Substituindo (5) em (A.11), temos

$$\tilde{e}_{t+h|t} = Sb_{t+h}(I - SG) + SG\hat{e}_{t+h|t}$$
(A.12)

$$= Sb_{t+h} - Sb_{t+h}SG + SG\hat{e}_{t+h|t}$$
(A.13)

$$= Sb_{t+h} - (G'S')(b'_{t+h}S') + SG\hat{e}_{t+h|t}$$
 (A.14)

$$= Sb_{t+h} - SGSb_{t+h} + SG\hat{e}_{t+h|t}$$
(A.15)

Finalmente, pela condição de ausência de viés em \tilde{y} , temos que

$$\tilde{e}_{t+h|t} = Sb_{t+h} - Sb_{t+h} + SG\hat{e}_{t+h|t}$$
 (A.16)

$$= \mathbf{S}\mathbf{G}\hat{\mathbf{e}}_{t+h|t} \tag{A.17}$$

Proposição A.3. $Var[\tilde{e}_t] = SG\hat{W}G'S'$.

Demonstração. Por A.2, temos que

$$Var[\tilde{e}] = \mathbb{E}[(SG\hat{e})(SG\hat{e})']$$
(A.18)

$$= \mathbb{E}[\mathbf{S}\mathbf{G}\hat{\mathbf{e}}\hat{\mathbf{e}}'\mathbf{G}'\mathbf{S}'] \tag{A.19}$$

$$= \mathbf{S}\mathbf{G}\hat{\mathbf{W}}\mathbf{G}'\mathbf{S}' \tag{A.20}$$

Em que $\hat{m{W}}$ é a matriz de variância-covariância dos erros de previsão base. \Box

Proposição A.4. \hat{W} é posto incompleto.

Demonstração. Pela propriedade do vínculo do posto do produto de matrizes, ou seja, $pos(\mathbf{AB}) \leq min(pos(\mathbf{A}), pos(\mathbf{B}))$, temos que

$$pos(\mathbf{SG}\hat{\mathbf{e}}_{t+h|t}) \le min(pos(\mathbf{S}), pos(\mathbf{G}), pos(\hat{\mathbf{e}}_{t+h|t})) \tag{A.21}$$

Como S é a representação matricial de uma estrutura hierárquica, em que os nós pais totalizam os nós filhos, S apresenta, por hipótese, dependência linear e, consequentemente, posto incompleto.

Pela equação (A.21), segue que \tilde{e} é posto incompleto. Da mesma forma, $pos(\tilde{e}\tilde{e}') \leq min(pos(\tilde{e}), pos(\tilde{e}'))$. Portanto, \hat{W} é posto incompleto.

APÊNDICE B – MÉTODOS DE MACHINE LEARNING

1 ELASTIC NET

O elastic net (ZOU; HASTIE, 2005) é um método de regressão regularizada que combina as normas L_1 e L_2 , as penalidades do lasso e do ridge, respectivamente. A função objetivo a ser minimizada é dada por

$$L(\lambda_1, \lambda_2, \boldsymbol{\beta}) = |\mathbf{y} - \mathbf{X}\boldsymbol{\beta}|^2 + \lambda_2 |\boldsymbol{\beta}|^2 + \lambda_1 |\boldsymbol{\beta}|_1$$
 (B.1)

em que λ_1 e λ_2 são os parâmetros de regularização e $\boldsymbol{\beta}$ é o vetor de coeficientes a serem estimados. A solução para essa função objetivo é dada por l

$$\hat{\boldsymbol{\beta}} = \arg\min_{\boldsymbol{\beta}} |\mathbf{y} - \mathbf{X}\boldsymbol{\beta}|^2, \text{ sujeito a } (1 - \alpha)|\boldsymbol{\beta}|_1 + \alpha|\boldsymbol{\beta}|^2 \le t \tag{B.2}$$

 $\operatorname{com} \alpha = \frac{\lambda_2}{\lambda_1 + \lambda_2} \ \operatorname{e} \ t \in \mathbb{R}^+.$

A função $(1-\alpha)|\pmb\beta|_1+\alpha|\pmb\beta|^2$ é a penalidade *elastic net*, uma combinação das penalidades *lasso* e *ridge*. O parâmetro α controla a mistura das duas penalidades, incluindo os casos extremos. Note que $\alpha=0 \implies \lambda_2=0$, resultando em uma penalidade exclusivamente *lasso*, enquanto $\alpha=1 \implies \lambda_1=0$, e a penalidade é apenas do tipo *ridge*.

Portanto o *elastic net* é um método de *shrinkage*, uma vez que a penalidade *ridge* reduz o tamanho dos coeficientes, e de *seleção de variáveis*, uma vez que a penalidade *lasso* tende a anular os coeficientes de variáveis irrelevantes. Essas propriedades são desejáveis para a reconciliação de séries temporais, uma vez que a estrutura hierárquica pode conter séries insignificantes para a previsão de outras séries.

Diferentemente dos métodos analíticos estudados, o *elastic net* não possui uma solução fechada. Portanto, é necessário utilizar métodos iterativos para encontrar o valor ótimo de $\hat{\beta}$ e Zou e Hastie (2005) utilizam validação cruzada k-fold para encontrar quais os valores de λ_1 e λ_2 que minimizam o resíduo. Nesse sentido, dado a metodologia de processo iterativo envolvendo calibragem de hiperparâmetros e reamostragem, podemos classificar o *elastic net* como um método de *machine learning*.

Sob o valor otimizado ainda é aplicada correção de escala na forma $(1 + \lambda_2)\hat{\beta}$. Ver Zou e Hastie (2005).

2 GRADIENT BOOSTING

Como cada uma das diversas implementações de *gradient boosting* possui sua teoria adjacente, e não é de objetivo deste trabalho detalhar o funcionamento de cada uma delas, trabalharemos apenas sua intuição.

Assim como os métodos de floresta aleatória, os métodos de *gradient boosting* também são métodos de conjuntos de árvores. A diferença se dá na forma como os modelos são treinados. *Gradient boosting* são métodos que combinam as predições de vários modelos fracos parar formar um conjunto — *ensemble*, na definição mais usual, ou comitê (*committee*), na definição de Hastie, Tibshirani e Friedman (2009) quando usado para classificação — mais complexo e preciso (forte).

Um estimador fraco é aquele que tem desempenho apenas ligeiramente melhor que o acaso. O propósito do *boosting* é produzir uma sequencia de estimadores fracos, cada um deles focado nos erros dos estimadores anteriores. A cada iteração, as observações classificadas incorretamente (no caso de uma tarefa de classificação) ou de maior variância (no caso de uma tarefa de regressão) na iteração anterior têm seu peso aumentado, e vice-versa. Dessa forma, o modelo subsequente formado na próxima iteração é obrigado a se concentrar nas observações onde as iterações anteriores falharam. Isso que significa transformar um conjunto de estimadores fracos em um conjunto forte.

O *gradient boosting* é uma extensão do *boosting* que utiliza o gradiente da função de perda como critério de otimização, de forma que esta se dá na direção em que a função de perda decresce mais rapidamente a cada iteração. Os métodos utilizados neste trabalho são o *XGBoost* (CHEN; GUESTRIN, 2016) e o *LightGBM* (KE et al., 2017).

Um das principais diferenças entre os dois métodos é a forma como as árvores são construídas. O *XGBoost* cresce suas árvores de forma *level-wise*, ou seja, cresce todas as folhas do último nível de uma árvore de uma vez, adicionando mais um nível de profundidade completo a cada iteração (Figura 19a). Já o *LightGBM* cresce suas árvores de forma *leaf-wise*, ou seja, cresce uma folha por vez, aprofundando a árvore apenas no nó que resulta na maior variação negativa na função de perda (Figura 19b).

3 RANDOM FOREST

Floresta aleatória é um método de aprendizado de máquina que utiliza conjuntos de árvores de decisão descorrelatadas² para classificação ou regressão. O método consiste em treinar várias árvores de decisão em subconjuntos aleatórios dos dados de treinamento e, então, combinar suas predições (HASTIE; TIBSHIRANI; FRIEDMAN, 2009). A aleatoriedade é introduzida

As árvores de decisão são descorrelatadas no sentido que, ao contrário os métodos de *boosting trees*, a próxima árvore não é construída com base na iteração anterior (processo de fortalecimento).

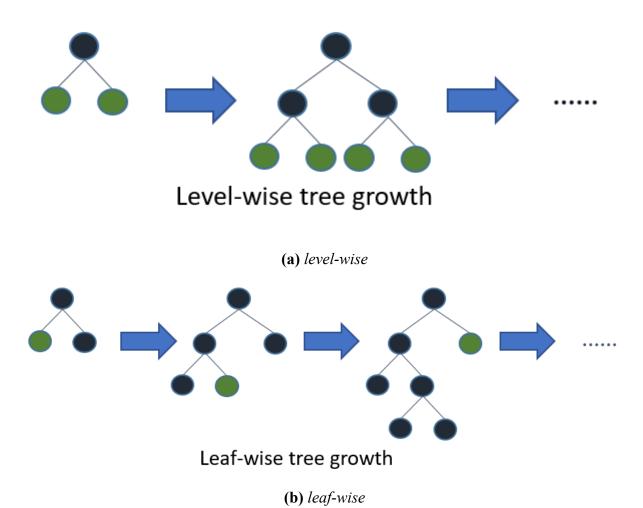


Figura 19 - Crescimento de árvores em algoritmos de boosting.

de duas formas: na seleção das observações e na seleção das variáveis preditoras.

A intuição para seu algoritmo para regressão é simples e a ideia geral é, para cada árvore de decisão, particionar recursivamente nós de tamanho N em dois nós filhos de forma a aumentar a complexidade do modelo e minimizar a função de custo. Se a próxima partição de um nó resultar em um ou ambos nós filhos de tamanho menor que um mínimo estabelecido via hiperparâmetro, a partição é interrompida (Algoritmo 1).

4 SUPPORT VECTOR MACHINES

A intuição do métodos de SVMs é mais facilmente compreendida a partir de uma tarefa de classificação de duas classes. Nesse caso, o objetivo é encontrar um hiperplano (i.e. um subespaço de dimensão n-1) que separe as classes de forma que a margem entre o hiperplano e os pontos de cada classe seja a maior possível. Então, dado um conjunto de N pares de observações e suas respectivas classes, $\{(x_i,y_i)\}_{i=1}^N$, em que $x_i\in\mathbb{R}^p$ e $y_i\in\{-1,1\}$, queremos encontrar o hiperplano definido por

Algoritmo 1: Floresta aleatória para regressão

 $\overline{T_1,T_2,...,T_b}$ e uma floresta aleatória de B árvores de decisão.

 $i \in \mathbb{N}$ é a quantidade de observações em um nó.

 $n_{min} \in \mathbb{N}$ é o número mínimo de observações em um nó.

for $b=1\to B$ do

1. Toma uma amostra de tamanho N dos dados de treino.

while $i < n_{min}$ do

- a. Seleciona j variáveis aleatoriamente.
- b. Escolhe a melhor variável para *split* dentre *j*.
- c. Divide o nó em dois nós filhos.
- $\begin{array}{ll} \mbox{if Nenhum dos n\'os filhos tem } i < n_{min} \mbox{ then} \\ | \mbox{ d. Repete os passos a-c para cada n\'o filho.} \\ \end{array}$

end

end

- 2. Produz um conjunto de árvores $\{T_b\}_1^B$.
- 3. Realiza a predição para cada árvore T_b em um ponto x e calcula a média das predições:

$$\hat{f}(x) = \frac{1}{B} \sum_{b=1}^{B} T_b(x)$$

$$\{x: f(x) = x^T\beta + \beta_0 = 0\}$$

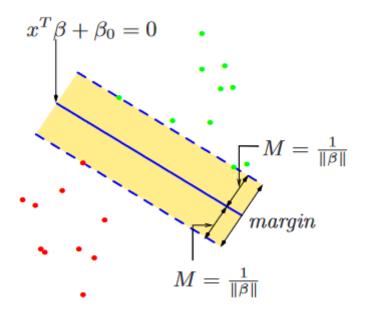
sendo f(x) a distância ortogonal entre x e o hiperplano $f(x) = x^T \beta + \beta_0 = 0$, e M a margem entre as classes, definida como a distância ortogonal entre os pontos mais próximos de cada classe e o hiperplano (HASTIE; TIBSHIRANI; FRIEDMAN, 2009). Portanto, o problema de otimização é dado por

$$\begin{array}{ll} \max & M \\ \beta,\beta_0 & \\ \text{sujeito a} & y_i(x_i^T\beta+\beta_0) \geq M, \quad i=1,...,N \end{array} \tag{B.3}$$

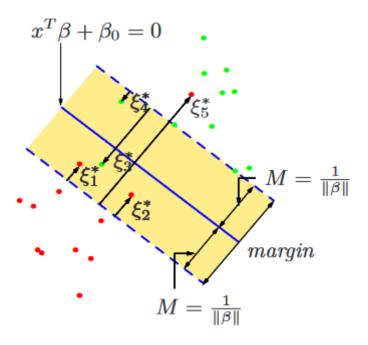
Quando pode-se encontrar um hiperplano com $y_i f(x_i) > 0 \quad \forall i$, tem-se o caso da construção de uma solução única para um hiperplano entre duas classes perfeitamente separadas pela maior margem possível (Figura 20a).

Entretanto, no mundo real, dificilmente um problema de classificação será linearmente separável. Pa
ara contornar esse obstáculo, é possível introduzir variáveis de folg
a $\xi_i \geq 0$ para cada observação (Figura 20b), de forma que a restrição se torne

$$y_i(x_i^T \beta + \beta_0) \ge M(1 - \xi_i), \quad i = 1, ..., N$$
 (B.4)



(a) Hiperplano entre duas classes perfeitamente separáveis.



(b) Hiperplano entre duas classes não separáveis.

Figura 20 – Support vector classifiers. Fonte: Hastie, Tibshirani e Friedman (2009).

e a função objetivo se torne

$$\min ||\beta|| \quad \text{sujeito a} \left\{ \begin{array}{cc} y_i(x_i^T\beta + \beta_0) \geq M(1-\xi_i) & \forall i, \\ \xi_i \geq 0, \sum \xi_i \leq \text{constante} \end{array} \right\} \tag{B.5}$$

Para estender essa ideia para problemas de regressão, é necessário introduzir uma função de perda ϵ -insensível, que penaliza apenas os erros maiores que ϵ , de forma que os erros menores são ignorados durante a otimização, assim como as observações localizadas no lado correto do hiperplano são ignoradas no problema de classificação. A função objetivo se torna

$$\min ||\beta|| \quad \text{sujeito a} \left\{ \begin{array}{cc} |y_i - x_i^T \beta - \beta_0| \leq \epsilon & \forall i, \\ \sum |\beta_j| \leq \text{constante} \end{array} \right\} \tag{B.6}$$

APÊNDICE C – CONJUNTOS DE HIPERPARÂMETROS

Tabela 24 – Intervalos de hiperparâmetros para {xgboost}

| Hiperparâmetro | Descrição | Intervalo | Trafo |
|-------------------|---|-----------|----------|
| nrounds | Número de iterações | [1,5000] | NULL |
| eta | Taxa de aprendizado | [-4, 0] | 10^{x} |
| max_depth | Profundidade máxima | [1, 20] | NULL |
| subsample | Subamostra | [0.1, 1] | NULL |
| colsample_bytree | Subamostra de colunas para uma árvore | [0.1, 1] | NULL |
| colsample_bylevel | Subamostra de colunas por nível de profundidade | [0.1, 1] | NULL |
| lambda | Regularização L2 | [-10, 10] | 2^x |
| alpha | Regularização L1 | [-10, 10] | 2^x |

Tabela 25 – Intervalos de hiperparâmetros para {lightgbm}

| Hiperparâmetro | Descrição | Intervalo | Trafo |
|------------------|--------------------------|--------------------|----------|
| num_iterations | Número de iterações | [1, 1000] | NULL |
| boosting | Algoritmo de boosting | {gbdt, dart, goss} | NULL |
| learning_rate | Taxa de aprendizado | [-4, 0] | 10^{x} |
| num_leaves | Número de folhas | [2, 20] | NULL |
| lambda_11 | Regularização L1 | [-12, 12] | 2^x |
| lambda_12 | Regularização L2 | [-12, 12] | 2^x |
| feature_fraction | Subamostra de colunas | [0.1, 1] | NULL |
| bagging_fraction | Subamostra de linhas | [0.1, 1] | NULL |
| bagging_freq | Frequência de amostragem | [1, 10] | NULL |

Tabela 26 – Intervalos de hiperparâmetros para {ranger}

| Hiperparâmetro | Descrição | Intervalo | Trafo |
|-----------------|--|---------------|-------|
| min.node.size | Número mínimo de observações em um nó terminal | [1, 7] | 2^x |
| mtry | Número de variáveis candidatas para split | [1,) | NULL |
| replace | Amostragem com reposição | {TRUE, FALSE} | NULL |
| sample.fraction | Fração de observações a serem amostradas | [0.1, 1] | NULL |
| num.trees | Número de árvores | [1, 2000] | NULL |

Tabela 27 – Intervalos de hiperparâmetros para {e1071} (svm)

| Hiperparâmetro | Descrição | Intervalo | Trafo |
|----------------|---------------------|---------------------------------------|-------|
| cost | Custo de ξ | [0, 1] | 2^x |
| kernel | Kernel | {linear, polynomial, radial, sigmoid} | NULL |
| degree | Grau do polinômio | [1,5] | NULL |
| gamma | Influência amostral | [-12, 12] | 2^x |
| type | Tipo de SVM | {eps-regression} | NULL |

Tabela 28 – Intervalos de hiperparâmetros para {glmnet}

| Hiperparâmetro | Descrição | Intervalo | Trafo |
|----------------|-------------------------|-----------|-------|
| alpha | Mix entre lasso e ridge | [0, 1] | NULL |
| lambda | Regularização | [-12, 12] | 2^x |