



Escrever título (escolher no final)

Universidade Federal da Paraíba - CCEN

Gabriel de Jesus Pereira

2 de novembro de 2024

Índice

1	Resumo	5
2	Introdução	6
2.1	Objetivos	6
2.1.1	Objetivo Geral	6
2.1.2	Objetivos Específicos	6
2.2	Organização do Trabalho	6
3	Recursos Computacionais	7
3.1	Linguagem R	7
3.2	Linguagem Python	7
3.3	Quarto	8
3.4	Web Scraping	8
4	Algoritmos de Aprendizado de Máquina	9
4.1	Árvores de decisão	9
4.2	Métodos Ensemble	13
4.2.1	Bagging	14
4.2.2	Random Forest	15
4.2.3	Boosting Trees	16
4.2.4	Stacked generalization	17
4.2.5	Gradient Boosting	17
4.2.6	Diferentes implementações de Gradient Boosting	18
5	Metodologia	22
5.1	Obtenção dos dados	22
5.2	Análise exploratória de dados	23
5.3	Construção do modelo	24
5.3.1	Etapas de pré-processamento	24
5.3.2	Validação cruzada	25
5.4	Otimização de hiperparâmetros	27
5.4.1	Tree-Structured Parzen Estimator	28
5.4.2	Otimização de hiperparâmetros com optuna	29

5.5	Interpretação dos algoritmos de aprendizagem de máquina	31
5.5.1	Individual Conditional Expectation (ICE)	31
5.5.2	Local interpretable model-agnostic explanations (LIME)	32
5.5.3	SHapley Additive exPlanations (SHAP)	32
6	Resultados	33
6.1	Análise exploratória de dados	33
6.2	Construção dos modelos	37
6.2.1	Random Forest	37
6.2.2	Gradient Boosting	37
7	Conclusão	38
8	Referências	39

Lista de Figuras

4.1	Exemplo de estrutura de árvore de regressão. A árvore tem cinco folhas e quatro nós internos.	10
5.1	Visualização de K-Fold com 20 folds.	26
6.1	Quantidade de valores ausentes por variáveis	34
6.2	Distribuição das variáveis numéricas.	35
6.3	Comparação entre distribuição dos valores dos imóveis antes e depois da transformação logarítmica.	36
6.4	Gráfico de correlação de Spearman das variáveis independentes.	36

1 Resumo

2 Introdução

2.1 Objetivos

2.1.1 Objetivo Geral

2.1.2 Objetivos Específicos

2.2 Organização do Trabalho

3 Recursos Computacionais

3.1 Linguagem R

R (R CORE TEAM, 2024) é uma linguagem de programação voltada para computação científica e visualização de dados. Seu desenvolvimento foi iniciado pelos professores Ross Ihaka e Robert Gentleman, que a criaram com o objetivo de ser uma linguagem para ensinar introdução à estatística na Universidade de Auckland. A primeira versão do R foi lançada em 1993, e em 1997 ele se tornou oficialmente parte do Projeto GNU.

A linguagem R é fortemente inspirada no paradigma de programação funcional, o que a torna poderosa para manipulação e análise de dados. No R, as funções são de primeira classe, o que significa que elas podem ser passadas como argumentos para outras funções, retornadas como resultados e atribuídas a variáveis. Essa possibilidade permite códigos mais modulares, reutilizáveis e facilitam a implementação de pipelines de transformação de dados. O R oferece funções como `apply`, `lapply`, `sapply` e pacotes como `purrr` e `furrr`, especialmente focados em programação funcional. Embora essa grande inspiração do R no paradigma funcional, o R também permite o uso de programação orientada a objetos através de sistemas como S3, R6 e S4.

3.2 Linguagem Python

Python (VAN ROSSUM; DRAKE JR, 1995) é uma linguagem de programação criada por Guido Van Rossum. Guido começou a desenvolver o Python no final dos anos 80 como uma sucessora da linguagem ABC, e a primeira versão foi lançada oficialmente em 1991. Python é uma linguagem de alto nível, de propósito geral, que enfatiza a simplicidade e a legibilidade do código.

Neste trabalho, Python foi utilizado principalmente para modelagem e coleta de dados de sites de imóveis. Para a modelagem, utilizou-se a biblioteca `scikit-learn` (PEDREGOSA *et al.*, 2011), que oferece uma grande quantidade de ferramentas estatísticas e de aprendizado de máquina. A otimização dos hiperparâmetros dos modelos foi realizada com a biblioteca `Optuna`, que dispõe de diversos métodos de otimização, incluindo métodos avançados de otimização bayesiana. Para a coleta de

dados de imóveis, foi empregada a biblioteca Scrapy (KOUZIS-LOUKAS, 2016), um framework open-source em Python voltado para web scraping, que permite extrair dados de páginas da web de forma automatizada. Com o Scrapy, é possível criar “crawlers” ou “spiders” que navegam em sites, coletando e organizando informações específicas de maneira eficiente.

Além disso, Python foi utilizado para a criação de todos os gráficos e para a manipulação das bases de dados. A biblioteca utilizada para visualização de dados foi o Matplotlib (HUNTER, 2007), enquanto a manipulação e organização das bases de dados foram realizadas com a biblioteca pandas (MCKINNEY, 2010; TEAM, 2020), amplamente utilizada em Python para manipulação de dados e limpeza de dados, análise de dados e estatísticas.

3.3 Quarto

Quarto (ALLAIRE; DERVIEUX, 2024) é uma plataforma de publicação científica desenvolvida pela empresa Posit com o objetivo de criar documentos de alta qualidade a partir de arquivos que combinam texto e código. É uma evolução do R Markdown, sendo compatível com várias linguagens de programação, como R, Python, Julia e outros, o que o torna bastante versátil para a análise de dados e geração de relatórios interativos. Com o Quarto, é possível produzir relatórios, artigos, livros, apresentações e sites. Ele é amplamente utilizado na comunidade R e oferece suporte para Markdown e \LaTeX , facilitando a inclusão de fórmulas matemáticas, gráficos, tabelas e outros elementos visuais, que são renderizados em formatos como HTML, PDF e MS Word.

O Quarto foi utilizado para a produção de todo o texto deste trabalho, atendendo aos requisitos das normas ABNT. Com sua flexibilidade e suporte para formatação customizável, Quarto permitiu integrar texto, código e visualizações de forma reprodutível e organizada, facilitando a geração de documentos acadêmicos de alta qualidade.

3.4 Web Scraping

4 Algoritmos de Aprendizado de Máquina

Neste capítulo, serão descritos os algoritmos de aprendizado de máquina utilizados neste trabalho. Alguns dos métodos utilizados podem fazer uso de diversos algoritmos ou modelos estatísticos. No entanto, o foco principal e o mais utilizado foram as árvores de decisão, especialmente em sua forma particular, as árvores de regressão. Assim, os algoritmos descritos são métodos baseados em árvores.

Os métodos baseados em árvore envolvem a estratificação ou segmentação do espaço dos preditores¹ em várias regiões simples. Dessa forma, todos os algoritmos utilizados neste trabalho partem dessa ideia. Portanto, o primeiro a ser explicado será o de árvores de decisão, pois fundamenta todos os outros algoritmos. Depois das árvores de decisão, serão explicados os métodos ensemble e, por fim, diferentes variações do método de gradient boosting.

4.1 Árvores de decisão

Árvores de decisão podem ser utilizadas tanto para regressão quanto para classificação. Elas servem de base para os modelos baseados em árvores empregados neste trabalho, focando particularmente nas árvores de regressão². O processo de construção de uma árvore se baseia no particionamento recursivo do espaço dos preditores, onde cada particionamento é chamado de nó e o resultado final é chamado de folha ou nó terminal. Em cada nó, é definida uma condição e, caso essa condição seja satisfeita, o resultado será uma das folhas desse nó. Caso contrário, o processo segue para o próximo nó e verifica a próxima condição, podendo gerar uma folha ou outro nó. Veja um exemplo na Figura 4.1.

O espaço dos preditores é dividido em J regiões distintas e disjuntas denotadas por R_1, R_2, \dots, R_J . Essas regiões são construídas em formato de caixa de forma a minimizar a soma dos quadrados dos resíduos. Dessa forma, pode-se modelar a variável resposta como uma constante c_j em cada região R_j .

¹O espaço dos preditores é o conjunto de todos os valores possíveis para as variáveis independentes \mathbf{x}

²Uma árvore de regressão é um caso específico da árvore de decisão, mas para regressão.



Figura 4.1: Exemplo de estrutura de árvore de regressão. A árvore tem cinco folhas e quatro nós internos.

$$f(x) = \sum_{j=1}^J c_j I(x \in R_j)$$

O estimador para a constante c_j é encontrado pelo método de mínimos quadrados. Assim, deve-se minimizar $\sum_{x_i \in R_j} [y_i - f(x_i)]^2$. No entanto, percebe-se que $f(x_i)$ está sendo avaliado somente em um ponto específico x_i , o que reduzirá $f(x_i)$ para uma constante c_j . É fácil de se chegar ao resultado se for observada a definição da função indicadora $I(x \in R_j)$

$$I_{R_j}(x_i) = \begin{cases} 1, & \text{se } x_i \in R_j \\ 0, & \text{se } x_i \notin R_j \end{cases}$$

Como as regiões são disjuntas, x_i não pode estar simultaneamente em duas regiões. Assim, para um ponto específico x_i , apenas um dos casos da função indicadora será diferente de 0. Portanto, $f(x_i) = c_j$. Agora, derivando $\sum_{x_i \in R_j} (y_i - c_j)^2$ em relação a c_j

$$\frac{\partial}{\partial c_j} \sum_{x_i \in R_j} (y_i - c_j)^2 = -2 \sum_{x_i \in R_j} (y_i - c_j) \quad (4.1)$$

e igualando Equação 4.1 a 0, tem-se a seguinte igualdade

$$\sum_{x_i \in R_j} (y_i - \hat{c}_j) = 0$$

que se abrimos o somatório e dividirmos pelo número total de pontos N_j na região R_j , teremos que o estimador de c_j será simplesmente a média dos y_i na região R_j :

$$\sum_{x_i \in R_j} y_i - \hat{c}_j N_j = 0 \Rightarrow \hat{c}_j = \frac{1}{N_j} \sum_{x_i \in R_j} y_i \quad (4.2)$$

No entanto, JAMES *et al.* (2013) caracteriza como inviável considerar todas as possíveis partições do espaço das variáveis em J caixas devido ao alto custo computacional. Dessa forma, a abordagem a ser adotada é uma divisão binária recursiva. O processo começa no topo da árvore de regressão, o ponto em que contém todas as observações, e continua sucessivamente dividindo o espaço dos preditores. As divisões são indicadas como dois novos ramos na árvore, como pode ser visto na Figura 4.1.

Para executar a divisão binária recursiva, deve-se primeiramente selecionar a variável independente X_j e o ponto de corte s tal que a divisão do espaço dos preditores conduza a maior redução possível na soma dos quadrados dos resíduos. Dessa forma, definimos dois semi-planos

$$R_1(j, s) = \{X | X_j \leq s\} \text{ e } R_2(j, s) = \{X | X_j > s\}$$

e procuramos a divisão da variável j e o ponto de corte s que resolve a equação

$$\min_{j, s} \left[\min_{c_1} \sum_{x_i \in R_1(j, s)} (y_i - c_1)^2 + \min_{c_2} \sum_{x_i \in R_2(j, s)} (y_i - c_2)^2 \right]$$

em que c_1 e c_2 é a média da variável dependente para as observações de treinamento nas regiões $R_1(j, s)$ e $R_2(j, s)$, respectivamente. Assim, encontrando a melhor divisão, os dados são particionados nas duas regiões resultantes e o processo de divisão é repetido em todas as outras regiões.

O tamanho da árvore pode ser considerado um hiperparâmetro para regular a complexidade do modelo, pois uma árvore muito grande pode causar sobreajuste aos dados de treinamento, capturando não apenas os padrões relevantes, mas também o ruído. Como resultado, o modelo pode apresentar bom desempenho nos dados de treinamento, mas falhar ao lidar com novos dados devido à sua incapacidade de generalização. Por outro lado, uma árvore muito pequena pode não captar padrões,

relações e estruturas importantes presentes nos dados. Dessa forma, a estratégia adotada para selecionar o tamanho da árvore consiste em crescer uma grande árvore T_0 , interrompendo o processo de divisão apenas ao atingir um tamanho mínimo de nós. Posteriormente, a árvore T_0 é podada utilizando o critério de custo complexidade, que será definido a seguir.

Para o processo de poda da árvore, definimos uma árvore qualquer T que pode ser obtida através do processo da poda de T_0 , de modo que $T \subset T_0$. Assim, sendo N_j a quantidade de pontos na região R_j , seja

$$Q_j(T) = \frac{1}{N_j} \sum_{x_i \in R_j} (y_i - \hat{c}_j)^2$$

uma medida de impureza do nó pelo erro quadrático médio. Assim, define-se o critério de custo complexidade

$$C_\alpha(T) = \sum_{m=1}^{|T|} N_j Q_j(T) + \alpha |T|$$

onde $|T|$ denota a quantidade total de folhas, e $\alpha \geq 0$ é um hiperparâmetro que equilibra o tamanho da árvore e a adequação aos dados. A ideia é encontrar, para cada α , a árvore $T_\alpha \subset T_0$ que minimiza $C_\alpha(T)$. Valores grandes de α resultam em árvores menores, enquanto valores menores resultam em árvores maiores, e $\alpha = 0$ resulta na própria árvore T_0 . A busca por T_α envolve colapsar sucessivamente o nó interno que provoca o menor aumento em $\sum_j N_j Q_j(T)$, continuando o processo até produzir uma árvore com um único nó. Esse processo gera uma sequência de subárvores, na qual existe uma única subárvore menor que, para cada α , minimiza $C_\alpha(T)$.

A estimação de α é realizada por validação cruzada com cinco ou dez folds, sendo $\hat{\alpha}$ escolhido para minimizar a soma dos quadrados dos resíduos durante o processo de validação cruzada. Assim, a árvore final será $T_{\hat{\alpha}}$. O Algoritmo 4.1 exemplifica o processo de crescimento de uma árvore de regressão:

No caso de uma árvore de decisão para classificação, a principal diferença está no critério de divisão dos nós e na poda da árvore. Para a classificação, a previsão em um nó j , correspondente a uma região R_j com N_j observações, será simplesmente a classe majoritária. Assim, tem-se

$$\hat{p}_{jk} = \frac{1}{N_j} \sum_{x_i \in R_j} I(y_i = k)$$

como a proporção de observações da classe k no nó j . Dessa forma, as observações no nó j são classificadas na classe $k(j) = \arg \max_k \hat{p}_{jk}$, que é a moda no nó j .

Algoritmo 4.1 Algoritmo para crescer uma árvore de regressão

1. Use a divisão binária recursiva para crescer uma árvore grande T_0 nos dados de treinamento, parando apenas quando cada folha tiver menos do que um número mínimo de observações.
 2. Aplique o critério custo de complexidade à árvore grande T_0 para obter uma sequência de melhores subárvores T_α , em função de α .
 3. Use validação cruzada K -fold para escolher α . Isto é, divida as observações de treinamento em K folds. Para cada $k = 1, \dots, K$:
 - (a) Repita os Passos 1 e 2 em todos os folds, exceto no k -ésimo fold dos dados de treinamento.
 - (b) Avalie o erro quadrático médio de previsão nos dados no k -ésimo fold deixado de fora, em função de α . Faça a média dos resultados para cada valor de α e escolha α que minimize o erro médio.
 4. Retorne a subárvore $T_{\hat{\alpha}}$ do Passo 2 que corresponde ao valor estimado de α .
-

Algoritmo 4.1: Fonte: JAMES *et al.* (2013, p. 337).

Para a divisão dos nós no caso da regressão, foi utilizado o erro quadrático médio como medida de impureza. Para a classificação, algumas medidas comuns para $Q_j(T)$ são o erro de classificação, o índice de Gini ou a entropia cruzada.

4.2 Métodos Ensemble

As árvores de decisão são conhecidas por sua alta interpretabilidade, mas geralmente apresentam um desempenho preditivo inferior em comparação com outros modelos e algoritmos. No entanto, é possível superar essa limitação construindo um modelo preditivo que combina a força de uma coleção de estimadores base, um processo conhecido como aprendizado em conjunto (Ensemble Learning). De acordo com HASTIE *et al.* (2009), o aprendizado em conjunto pode ser dividido em duas etapas principais: a primeira etapa consiste em desenvolver uma população de algoritmos de aprendizado base a partir dos dados de treinamento, e a segunda etapa envolve a combinação desses algoritmos para formar um estimador agregado. Portanto, nesta seção, serão definidos os métodos de aprendizado em conjunto utilizados neste trabalho.

4.2.1 Bagging

O algoritmo de Bootstrap Aggregation, ou Bagging, foi introduzido por BREIMAN (1996). Sua ideia principal é gerar um estimador agregado a partir de múltiplas versões de um preditor, que são criadas por meio de amostras bootstrap do conjunto de treinamento, utilizadas como novos conjuntos de treinamento. O Bagging pode ser empregado para melhorar a estabilidade e a precisão de modelos ou algoritmos de aprendizado de máquina, além de reduzir a variância e evitar o sobreajuste. Por exemplo, o Bagging pode ser utilizado para melhorar o desempenho da árvore de regressão descrita anteriormente.

BREIMAN (1996) define formalmente o algoritmo de Bagging, que utiliza um conjunto de treinamento \mathcal{L} . A partir desse conjunto, são geradas amostras bootstrap $\mathcal{L}^{(B)}$ com B réplicas, formando uma coleção de modelos $\{f(x, \mathcal{L}^{(B)})\}$, onde f representa um modelo estatístico ou algoritmo treinado nas amostras bootstrap para prever ou classificar uma variável dependente y com base em variáveis independentes \mathbf{x} . Se a variável dependente y for numérica, a predição é obtida pela média das previsões dos modelos:

$$f_B(x) = \frac{1}{B} \sum_{b=1}^B f(x, \mathcal{L}^{(b)})$$

onde f_B representa a predição agregada. No caso em que y prediz uma classe, utiliza-se a votação majoritária. Ou seja, se estivermos classificando em classes $j \in 1, \dots, J$, então $N_j = \#\{B; f(x, \mathcal{L}^{(b)}) = j\}$ representa o número de vezes que a classe j foi predita pelos estimadores. Assim,

$$f_B(x) = \arg \max_j N_j$$

isto é, o j para o qual N_j é máximo

Embora a técnica de Bagging possa melhorar o desempenho de uma árvore de regressão ou de classificação, isso geralmente vem ao custo de menor interpretabilidade. Quando o Bagging é aplicado a uma árvore de regressão, construímos B árvores de regressão usando B réplicas de amostras bootstrap e tomamos a média das previsões resultantes (JAMES *et al.*, 2013). Nesse processo, as árvores de regressão crescem até seu máximo, sem passar pelo processo de poda, resultando em cada árvore individual com alta variância e baixo viés. No entanto, ao agregar as previsões das B árvores, a variância é reduzida.

Para mitigar a falta de interpretabilidade do método Bagging aplicado a árvores de regressão, pode-se usar a medida de impureza baseada no erro quadrático médio,

definida anteriormente, como uma métrica de importância das variáveis independentes. Um valor elevado na redução total média do erro quadrático médio, calculado com base nas divisões realizadas por um determinado preditor em todas as B árvores, indica que o preditor é importante.

As árvores construídas pelo algoritmo de árvore de decisão se beneficiam da proposta de agregação do Bagging, mas esse benefício é limitado devido à correlação positiva existente entre as árvores. Se as árvores forem variáveis aleatórias independentes e identicamente distribuídas, cada uma com variância σ^2 , a variância da média das previsões das B árvores será $\frac{1}{B}\sigma^2$. No entanto, se as árvores forem apenas identicamente distribuídas, mas não necessariamente independentes, e apresentarem uma correlação positiva ρ , a esperança da média das B árvores será a mesma que a esperança de uma árvore individual. Portanto, o viés do agregado das árvores é o mesmo das árvores individuais, e a melhoria é alcançada apenas pela redução da variância. A variância da média das previsões será dada por:

$$\rho\sigma^2 + \frac{1-\rho}{B}\sigma^2 \quad (4.3)$$

Isso significa que, à medida que o número de árvores B aumenta, o segundo termo da soma se torna menos significativo. Portanto, os benefícios da agregação proporcionados pelo algoritmo de Bagging são limitados pela correlação entre as árvores (HASTIE *et al.*, 2009). Mesmo com o aumento do número de árvores no Bagging, a correlação entre elas impede que as previsões individuais sejam completamente independentes, resultando em menor diminuição da variância da média das previsões do que seria esperado se as árvores fossem totalmente independentes. Uma maneira de melhorar o algoritmo de Bagging é por meio do Random Forest, que será descrito a seguir.

4.2.2 Random Forest

O algoritmo Random Forest é uma técnica derivada do método de Bagging, mas com modificações específicas na construção das árvores. O objetivo é melhorar a redução da variância ao diminuir a correlação entre as árvores, sem aumentar significativamente a variabilidade. Isso é alcançado durante o processo de crescimento das árvores por meio da seleção aleatória de variáveis independentes.

No algoritmo Random Forest, ao construir uma árvore a partir de amostras bootstrap, antes de cada divisão, selecionam-se aleatoriamente $m \leq p$ das p variáveis independentes como candidatas para a divisão (com $m = p$ no caso do Bagging). Apenas uma dessas m variáveis é usada para realizar a divisão, com base em critérios como a minimização da impureza. Diferentemente do Bagging, que tende a gerar árvores de decisão semelhantes e, portanto, previsões altamente correlacionadas, o Random Forest

visa minimizar esse problema ao proporcionar oportunidades para que outros preditores sejam considerados. Assim, em média, $(p - m) / p$ das divisões nem sequer considerarão o preditor mais forte, permitindo que outros preditores também tenham a chance de serem usados (JAMES *et al.*, 2013). Esse processo de redução da correlação entre as árvores resulta em uma média das árvores menos variável e, conseqüentemente, mais confiável.

A quantidade de variáveis independentes m selecionadas aleatoriamente é um hiperparâmetro que pode ser estimado por meio de validação cruzada. Valores comuns para m são $m = \sqrt{p}$ com tamanho mínimo do nó igual a um para classificação, e $m = p/3$ com tamanho mínimo do nó igual a cinco para regressão (HASTIE *et al.*, 2009). Quando o número de variáveis é grande, mas poucas são realmente relevantes, o algoritmo Random Forest pode ter um desempenho inferior com valores pequenos de m , pois isso reduz as chances de selecionar as variáveis mais importantes. No entanto, usar um valor pequeno de m pode ser vantajoso quando há muitos preditores correlacionados. Além disso, assim como no Bagging, a Random Forest não sofre de sobreajuste com o aumento da quantidade de árvores B . Portanto, é suficiente usar um B grande o bastante para que a taxa de erro se estabilize (JAMES *et al.*, 2013).

4.2.3 Boosting Trees

O Boosting, assim como o Bagging, é um método destinado a melhorar o desempenho de modelos ou algoritmos. No entanto, neste trabalho, o Boosting foi aplicado apenas às árvores de regressão. Portanto, a explicação do Boosting será restrito ao caso de Boosting Trees (Algoritmo 4.3).

No algoritmo de Bagging, cada árvore é construída e ajustada utilizando amostras bootstrap, e ao final, um estimador agregado φ_B é formado a partir das B árvores. O Boosting Trees funciona de maneira semelhante, mas sem o uso de amostras bootstrap. A ideia principal é corrigir os erros das árvores anteriores, ajustando as novas árvores aos resíduos das anteriores, visando melhorar suas previsões. Assim, as árvores são construídas de forma sequencial, incorporando as informações das árvores anteriores.

No caso da regressão, o Boosting combina um grande número de árvores de decisão $\hat{f}^1, \dots, \hat{f}^B$. A primeira árvore é construída utilizando o conjunto de dados original, e seus resíduos são calculados. Com a primeira árvore ajustada, a segunda árvore é ajustada aos da árvore anterior resíduos e, em seguida, é adicionada ao estimador para atualizar os resíduos. Dessa forma, os resíduos servem como informação crucial para construir novas árvores e corrigir os erros das árvores anteriores. Como cada nova árvore depende das árvores já construídas, árvores menores são suficientes (JAMES *et al.*, 2013).

O processo de aprendizado no método de Boosting é lento, o que acaba gerando melhores resultados. Esse processo de aprendizado pode ser controlado por um hiperparâmetro λ chamado de shrinkage, ou taxa de aprendizado, permitindo que mais árvores, com formas diferentes, corrijam os erros das árvores passadas. No entanto, um valor muito pequeno para λ requer uma quantidade muito maior B de árvores e, diferente do Bagging e Random Forest, o Boosting pode sofrer de sobreajuste se a quantidade de árvores é muito grande. Além disso, a quantidade de divisões d em cada árvore, que controla a complexidade do boosting, pode ser considerado também um hiperparâmetro. Para $d = 1$ é ajustado um modelo aditivo, já que cada termo envolve apenas uma variável. JAMES *et al.* (2013) define d como a profundidade de interação que controla a ordem de interação do modelo boosting, já que d divisões podem envolver no máximo d variáveis.

4.2.4 Stacked generalization

A Stacked Generalization, ou Stacking, é um método de ensemble que consiste em treinar um modelo gerado a partir da combinação da predição de vários outros modelos, visando melhorar a precisão das predições. Esse método pode ser aplicado a qualquer modelo estatístico ou algoritmo de aprendizado de máquina. A ideia principal é atribuir pesos às predições, de modo a dar maior importância aos modelos que produzem melhores resultados, ao mesmo tempo em que se evita atribuir altos pesos a modelos com alta complexidade.

Matematicamente, o Stacking define predições $\hat{f}_m^{-i}(x)$ em x , utilizando o modelo m , aplicado ao conjunto de treinamento com a i -ésima observação removida (HASTIE *et al.*, 2009). Assim, os pesos são estimados de forma a minimizar o erro de predição combinado, dado pela seguinte expressão:

$$\hat{w}^{st} = \arg \min_w \sum_{i=1}^N \left[y_i - \sum_{m=1}^M w_m \hat{f}_m^{-i}(x_i) \right]^2$$

A previsão final dos modelos empilhados é $\sum_m \hat{w}_m^{st} \hat{f}_m(x)$. Assim, em vez de escolher um único modelo, o método de Stacking combina os modelos utilizando pesos estimados, o que melhora a performance preditiva, mas pode comprometer a interpretabilidade.

4.2.5 Gradient Boosting

O algoritmo de Gradient Boosting é semelhante ao de Boosting, mas com diferenças mínimas. Ele constrói modelos aditivos ajustando sequencialmente funções bases aos pseudos-resíduos, que correspondem aos gradientes da função perda do modelo atual (FRIEDMAN, 2002). Esses gradientes indicam a direção na qual a função perda

diminui. Neste trabalho, foram utilizadas diferentes implementações de Gradient Boosting. No entanto, todas empregam o Gradient Boosting com árvores de regressão, com algumas modificações para a construção das árvores ou para melhorar a eficiência do algoritmo existente. Assim, o algoritmo a ser explicado será o Gradient Tree Boosting (Algoritmo 4.4).

O Gradient Boosting aplicado para árvores de regressão, tem que cada função base é uma árvore de regressão com J_m folhas. Dessa forma, cada árvore de regressão tem a forma aditiva

$$h_m(x; \{b_j, R_j\}_1^J) = \sum_{j=1}^{J_m} b_{jm} I(x \in R_{jm}) \quad (4.4)$$

em que $\{R_{jm}\}_1^{J_m}$ são as regiões disjuntas que, coletivamente, cobrem o espaço de todos os valores conjuntos das variáveis preditoras \mathbf{x} . Essas regiões são representadas pelas folhas de sua correspondente árvore. Como as regiões são disjuntas, Equação 4.4 se reduz simplesmente a $h_m(x) = b_{jm}$ para $x \in R_{jm}$. Por mínimos quadrados, b_{jm} é simplesmente a média dos pseudo-resíduos r_{im} ,

$$\hat{b}_{jm} = \frac{1}{N_{jm}} \sum_{x_i \in R_{jm}} r_{im}$$

que dão a direção de diminuição da função perda L pela expressão do gradiente da linha 2(a). Assim, cada árvore de regressão é ajustada aos r_{im} de forma a minimizar o erro das árvores anteriores. N_{jm} denota a quantidade de pontos na região R_{jm} . Por fim, o estimador é separadamente atualizado em cada região correspondente e é expresso

$$f_m(x) = f_{m-1}(x) + \lambda \sum_{j=1}^J \gamma_{jm} I(x \in R_{jm})$$

em que γ_{jm} representa a atualização da constante ótima para cada região, baseado na função perda L , dada a aproximação $f_{m-1}(x)$. O $0 < \lambda \leq 1$, assim como no algoritmo de boosting, representa o hiperparâmetro shrinkage para controlar a taxa de aprendizado. Pequenos valores de λ necessitam maiores quantidades de iterações M para diminuir o risco de treinamento.

4.2.6 Diferentes implementações de Gradient Boosting

4.2.6.1 Light Gradient Boosting

4.2.6.2 Extreme Gradient Boosting

Algoritmo 4.2 Algoritmo de uma Random Forest para regressão ou classificação

1. Para $b = 1$ até B :

- (a) Construa amostras bootstrap \mathcal{L}^* de tamanho N dos dados de treinamento.
- (b) Faça crescer uma árvore de floresta aleatória T_b para os dados bootstrap, repetindo recursivamente os seguintes passos para cada folha da árvore, até que o tamanho mínimo do nó n_{min} seja atingido.
 - i. Selecione m variáveis aleatoriamente entre as p variáveis.
 - ii. Escolha a melhor variável entre as m .
 - iii. Divida o nó em dois subnós.

2. Por fim, o conjunto de árvores $\{T_b\}_1^B$ é construído.

No caso da regressão, para fazer uma predição em um novo ponto x , temos a seguinte função:

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

Para a classificação é utilizado o voto majoritário. Assim, seja $\hat{C}_b(x)$ a previsão da classe da árvore de floresta aleatória b . Então,

$$\hat{C}_{rf}^B(x) = \arg \max_c \sum_{b=1}^B I(\hat{C}_b(x) = c)$$

onde c representa as classes possíveis.

Algoritmo 4.2: Fonte: HASTIE *et al.* (2009, p. 588).

Algoritmo 4.3 Método Boosting aplicado a árvores de regressão

1. Defina $\hat{f}(x) = 0$ e $r_i = y_i$ para todos os i no conjunto de treinamento
2. Para $b = 1, 2, \dots, B$, repita:
 - (a) Ajuste uma árvore \hat{f}^b com d divisões para os dados de treinamento (X, r) .
 - (b) Atualize \hat{f} adicionando uma versão com o hiperparâmetro λ de taxa de aprendizado:

$$\hat{f}(x) \leftarrow \hat{f}(x) + \lambda \hat{f}^b(x)$$

- (c) Atualize os resíduos,

$$r_i \leftarrow r_i - \lambda \hat{f}^b(x_i)$$

3. Retorne o modelo de boosting,

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

Algoritmo 4.3: Fonte: JAMES *et al.* (2013, p. 349).

Algoritmo 4.4 Gradient Tree Boosting

1. Inicialize $f_0(x) = \arg \min_{\gamma} \sum_{i=1}^N L(y_i, \gamma)$

2. Para $m = 1$ até M :

(a) Para $i = 1, 2, \dots, N$, calcule

$$r_{im} = - \left[\frac{\partial L(y_i, f(x_i))}{\partial f(x_i)} \right]_{f=f_{m-1}}$$

(b) Ajuste uma árvore de regressão aos pseudo-resíduos r_{im} , obtendo regiões terminais R_{jm} , $j = 1, 2, \dots, J$.

(c) Para $j = 1, 2, \dots, J_m$, calcule

$$\gamma_{jm} = \arg \min_{\gamma} \sum_{x_i \in R_{jm}} L(y_i, f_{m-1}(x_i) + \gamma)$$

(d) Atualize $f_m(x) = f_{m-1}(x) + \lambda \sum_{j=1}^J \gamma_{jm} I(x \in R_{jm})$

3. Retorne $\hat{f}(x) = f_M(x)$

Algoritmo 4.4: Fonte: HASTIE *et al.* (2009, p. 361).

5 Metodologia

5.1 Obtenção dos dados

Os dados foram obtidos por meio de web scraping, uma técnica automatizada de extração de informações de páginas web. Para isso, foram utilizadas as linguagens de programação R e Python. No R, os pacotes `xml2` (WICKHAM; HESTER; OOMS, 2023) e `rvest` (WICKHAM, 2024) foram utilizados para extrair dados de páginas estáticas de forma estruturada. No Python, as bibliotecas `Scrapy` (KOUZIS-LOUKAS, 2016) e `Playwright`, desenvolvida pela Microsoft, foram empregadas, sendo esta última essencial para a interação com páginas dinâmicas, possibilitando a extração de informações que exigem interações como cliques ou rolagem de página. Além dessas ferramentas, foram implementadas técnicas de rotacionamento de IPs e de modificação das informações do usuário que acessa o site, a fim de evitar bloqueios durante o processo de coleta de dados, garantindo assim a continuidade e eficácia da extração. A ferramenta utilizada para a rotação das informações do usuário que acessa o site é a API criada pela empresa ScrapeOps.

Assim, utilizando as ferramentas e técnicas de web scraping, foram coletadas as variáveis que faziam sentido para a modelagem, priorizando aquelas com menor probabilidade de gerar problemas durante o tratamento dos dados. Ao todo, foram extraídas 25 variáveis, das quais 10 são quantitativas e 15 qualitativas nominais, sendo 13 de caráter dicotômico. No entanto, nem todas as variáveis foram obtidas diretamente por web scraping. As coordenadas de latitude e longitude, por exemplo, foram geradas por meio da geocodificação dos endereços, utilizando o pacote `tidygeocoder` (CAMBON *et al.*, 2021) da linguagem R. Dessa forma, tem-se as seguintes variáveis:

- Valor do imóvel: variável dependente que será modelada e constitui o principal foco de análise deste trabalho;
- Valor médio do aluguel no bairro: valor médio do aluguel dos imóveis no bairro, em m^3 ;
- Área: área total do imóvel, medida em m^2 ;
- Área média do aluguel no bairro: área média dos imóveis alugados no bairro, em m^2 ;

- Condomínio: valor mensal pago pelo condomínio do imóvel;
- IPTU: imposto cobrado sobre imóveis urbanos;
- Banheiros: quantidade de banheiros disponíveis na propriedade;
- Vagas de estacionamento: número total de vagas de estacionamento disponíveis;
- Quartos: quantidade de quartos no imóvel;
- Latitude: posição horizontal, medida em frações decimais de graus;
- Longitude: posição vertical, também medida em frações decimais de graus, assim como a latitude;
- Tipo do imóvel: sete categorias foram consideradas: apartamentos, casas, casas comerciais, casas de condomínio, casas de vila, coberturas, e lotes comerciais e de condomínio;
- Endereço: nome do endereço onde o imóvel está localizado;
- Variáveis dicotômicas: indicam a presença (1) ou ausência (0) de determinadas características no imóvel, como área de serviço, academia, elevador, espaço gourmet, piscina, playground, portaria 24 horas, quadra de esportes, salão de festas, sauna, spa e varanda gourmet.

No entanto, com base nas observações realizadas durante o estudo, nem todas as variáveis coletadas foram utilizadas na modelagem do valor dos imóveis. Algumas foram excluídas devido a uma quantidade excessiva de valores ausentes, enquanto outras se mostraram pouco significativas para explicar o valor do imóvel. Após o processo de coleta e limpeza dos dados, o banco de dados final conta com 31.782 observações.

5.2 Análise exploratória de dados

A análise exploratória de dados é uma das primeiras etapas de qualquer estudo que utiliza a estatística como ferramenta principal, pois permite identificar padrões de comportamento nos dados e descobrir relações entre as variáveis estudadas. Assim, após a coleta e organização dos dados, a primeira etapa deste estudo consistiu em uma análise descritiva. Essa análise possibilitou identificar padrões entre os diferentes tipos de imóveis e como essas características podem influenciar o seu valor. Para evidenciar esses comportamentos, foram criados gráficos e tabelas que permitiram caracterizar as relações entre as variáveis independentes e a variável dependente.

5.3 Construção do modelo

No conjunto de dados extraído, foram avaliados diferentes modelos para a previsão do valor do imóvel. Inicialmente, o valor do imóvel foi explicado por variáveis consideradas relevantes para o estudo, como: valor médio do aluguel no bairro, área, área média do aluguel no bairro, número de banheiros, vagas de estacionamento, número de quartos, latitude, longitude, tipo de imóvel e variáveis dicotômicas obtidas durante o processo de extração. As variáveis relacionadas ao valor do condomínio e IPTU foram excluídas do modelo devido à alta quantidade de valores ausentes.

Com as variáveis selecionadas, o conjunto de dados foi dividido em treino e teste para avaliar o desempenho dos modelos. A divisão foi realizada de forma estratificada, utilizando a classe `StratifiedShuffleSplit`, que garante uma amostragem estratificada e aleatória. A estratificação foi baseada na variável “tipo de imóvel”, preservando a proporção de amostras para cada categoria. Definiu-se 20% do conjunto de dados para o teste, enquanto os 80% restantes foram reservados para o treinamento.

Para a aplicação das ferramentas de modelagem, foram utilizadas as bibliotecas `scikit-learn`, `lightgbm` e `xgboost`. As duas últimas foram empregadas especificamente na modelagem, enquanto a primeira também foi utilizada para criar pipelines de pré-processamento de dados, que organizam etapas sequenciais de preparação necessárias para o tratamento adequado dos dados. Assim, os quatro modelos aplicados na previsão do valor do imóvel foram: Random Forest, Gradient Boosting, LightGBM e XGBoost. Por fim, foi implementado o algoritmo de Stacking, combinando os modelos previamente construídos para melhorar a performance preditiva.

5.3.1 Etapas de pré-processamento

Após toda a organização e limpeza dos dados, foram aplicadas algumas transformações com o objetivo de estabelecer uma relação compreensível das variáveis que mais interferem no valor do imóvel. Além disso, foi aplicado também o tratamento de valores ausentes presentes no conjunto de dados.

O método utilizado para a imputação de valores ausentes foi o algoritmo k-nearest neighbors (KNN). Esse algoritmo estima os valores ausentes de acordo com a fórmula:

$$\hat{y} = \frac{1}{k} \sum_{x_i \in N_k(x)} y_i$$

onde $N_k(x)$ representa o conjunto de k vizinhos mais próximos de x , ou seja, os pontos x_i no conjunto de dados que estão mais próximos de x . Essa proximidade é geralmente medida pela distância Euclidiana, que é a métrica padrão utilizada pela

classe `KNNImputer` da biblioteca `scikit-learn` para imputação de valores ausentes. No processo de imputação, foi utilizado um total de 17 vizinhos, definido pelo argumento `n_neighbors` da classe `KNNImputer`.

A transformação utilizada para estabilizar a variância e aproximar a distribuição dos regressores de uma distribuição normal foi a transformação logarítmica. Para lidar com variáveis categóricas, foi utilizada a classe `OneHotEncoder`, que aplica a codificação one hot. Essa técnica transforma as categorias das variáveis em variáveis dicotômicas, criando uma nova coluna para cada categoria. Além disso, o `OrdinalEncoder` foi utilizado para variáveis ordinais, que possuem uma ordem. Dessa forma, o `OneHotEncoder` foi aplicado à variável de tipo de imóvel, transformando cada categoria de imóvel em variáveis dummy. Já o `OrdinalEncoder` foi aplicado à variável de tamanho do imóvel, que foi criada posteriormente para classificar os imóveis em diferentes faixas: pequenos, médios e grandes.

Por fim, as variáveis numéricas foram normalizadas utilizando a classe `StandardScaler`, que padroniza os dados aplicando a seguinte transformação:

$$z = \frac{x - \mu}{\sigma}$$

onde μ é a média da amostra de treinamento e σ é o desvio padrão da amostra de treinamento.

5.3.2 Validação cruzada

A técnica utilizada para validar o modelo, além das métricas, foi a validação cruzada. A validação cruzada serve para estimar um erro de generalização médio da seguinte forma $Err = E \left[L(Y, \hat{f}(X)) \right]$, em que L é uma função perda e \hat{f} é um estimador. Existem diversas técnicas de validação cruzada, a que foi utilizada nesse trabalho é a validação cruzada K-Fold.

A validação cruzada K-Fold é uma técnica que utiliza parte dos dados para ajustar o modelo e outra parte para testá-lo. Nessa abordagem, os dados são divididos em K folds. Em cada iteração, um desses folds é reservado para testar o modelo, enquanto os $K - 1$ folds restantes são usados para treiná-lo. O modelo é ajustado nos $K - 1$ subconjuntos e avaliado no subconjunto de teste, permitindo estimar o erro de predição. Esse processo é repetido K vezes, alternando o subconjunto de teste em cada rodada, e ao final, os K erros de predição são combinados. O erro de predição estimado pela validação cruzada é dado por:

$$CV(\hat{f}) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N L(y_i, \hat{f}^{-k(i)}(x_i))$$

onde N é o número total de observações, L é a função de perda, y_i é o valor observado, x_i é a entrada correspondente, e $\hat{f}^{-k(i)}$ é o modelo ajustado sem o i -ésimo subconjunto.

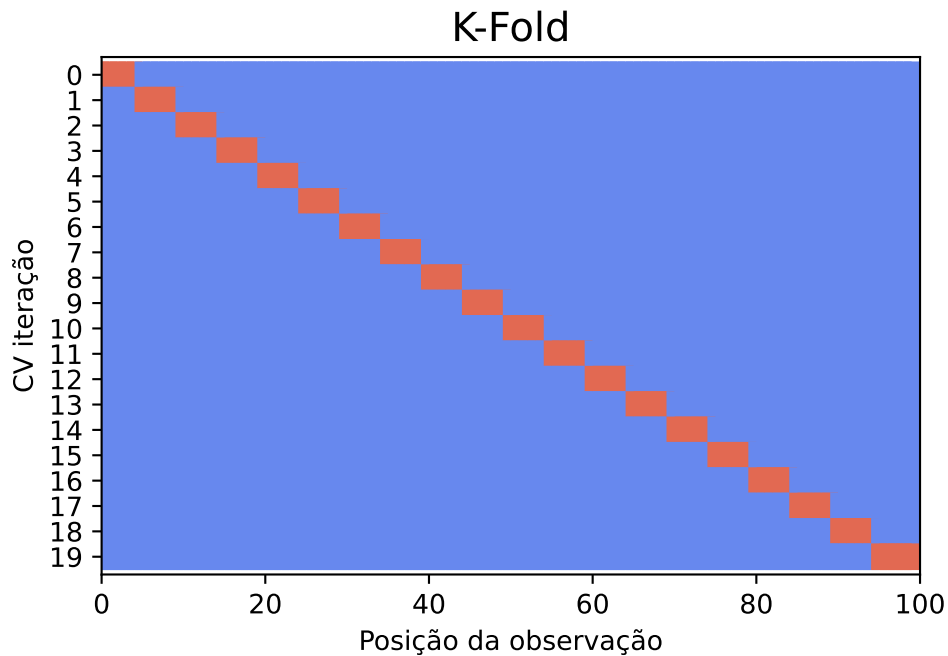


Figura 5.1: Visualização de K-Fold com 20 folds.

A figura acima ilustra exatamente o caso da validação cruzada por K-Fold. As divisões do conjunto de dados para treinamento do modelo são representados pela cor azul, enquanto as laranjas são os conjuntos de validação, onde o modelo ajustado será testado e validado com uma função perda L .

Para aplicar a validação cruzada com K-Fold nos modelos utilizados neste trabalho, foi empregada uma função e uma classe da biblioteca scikit-learn, ambas disponíveis no módulo `model_selection`. A função utilizada para a validação cruzada é a `cross_val_score`, na qual o modelo a ser validado é passado por meio do argumento `estimator`. O critério de avaliação é especificado no argumento `scoring`, e a técnica de validação cruzada é definida pelo argumento `cv`. No caso deste trabalho, foi utilizada a classe `KFold(n_splits=20)`, responsável por realizar a validação cruzada com K-Fold. O argumento `n_splits` define o número de folds utilizados durante a validação, que neste caso foram 20. Por fim, basta calcular a média das métricas retornadas pelo `cross_val_score` para cada um dos folds.

A métrica utilizada para avaliar o desempenho dos modelos durante a validação

cruzada foi a raiz do erro quadrático médio (RMSE). O RMSE mede o quanto os valores estimados pelo modelo se afastam, em média, dos valores observados, sendo que quanto menor o RMSE, melhor é o desempenho do modelo. Além do RMSE, foi também utilizada a métrica MAPE (Erro Percentual Absoluto Médio), que quantifica, em termos percentuais, o desvio médio entre os valores estimados e os observados. Por fim, foi analisado o coeficiente de determinação (R^2), uma medida que indica a proporção da variação da variável dependente explicada pelas variáveis independentes; neste caso, o valor do imóvel. As métricas são definidas da seguinte forma:

$$\text{RMSE} = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=0}^n (y_i - \hat{y}_i)^2} \quad R^2 = 1 - \frac{SS_{\text{resíduos}}}{SS_{\text{total}}} \quad \text{MAPE} = \frac{1}{n} \sum_{i=0}^n \left| 1 - \frac{y_i}{\hat{y}_i} \right|$$

em que $SS_{\text{resíduos}}$ e SS_{total} representam, respectivamente, a soma dos quadrados dos resíduos e a soma dos quadrados totais.

5.4 Otimização de hiperparâmetros

Existem diversas técnicas para otimização de hiperparâmetros em aprendizado de máquina. Uma das mais comuns é o GridSearch. Segundo BISCHL *et al.* (2023), o GridSearch consiste em dividir o intervalo contínuo de valores possíveis de cada hiperparâmetro em um conjunto de valores discretos, avaliando exaustivamente o algoritmo para todas as combinações possíveis. No entanto, como o número de combinações cresce exponencialmente com o aumento das combinações de hiperparâmetros, o GridSearch apresenta um custo computacional elevado. Por isso, existem métodos de otimização mais sofisticados que oferecem melhor desempenho, como a otimização bayesiana, que foi utilizada neste trabalho.

A otimização bayesiana não se refere a um algoritmo específico, mas sim a uma abordagem de otimização fundamentada na inferência bayesiana, que engloba uma ampla família de algoritmos (GARNETT, 2023). Além disso, a otimização bayesiana tem alcançado benchmarks superiores em comparação com outros algoritmos em diversos problemas complexos de otimização de hiperparâmetros (SNOEK; LAROCHELLE; ADAMS, 2012).

Diferentemente de outros algoritmos de otimização de hiperparâmetros, a otimização bayesiana ajusta suas tentativas futuras de avaliação com base nos resultados obtidos anteriormente (YANG; SHAMI, 2020). Para definir os pontos futuros, utiliza-se uma função probabilística $P(\rho|\lambda)$ (BERGSTRA; YAMINS; COX, 2013). Após ajustar essa

função, obtém-se, para cada λ , uma estimativa da performance $\hat{c}(\lambda)$ e da incerteza da predição $\hat{\sigma}(\lambda)$, além da distribuição preditiva associada à função probabilística. Com essa distribuição, uma função de aquisição determina o equilíbrio entre exploitation e exploration¹. Assim, os algoritmos de otimização bayesiana são regidos pela relação $\lambda \rightarrow c(\lambda)$ e buscam um equilíbrio entre exploitation e exploration para identificar as regiões mais promissoras, sem negligenciar possíveis configurações melhores em áreas ainda inexploradas.

5.4.1 Tree-Structured Parzen Estimator

A função probabilística utilizada para a otimização bayesiana neste trabalho foi a Tree-Structured Parzen Estimator (TPE). O TPE define duas funções, $l(x)$ e $g(x)$, que são utilizadas para modelar a distribuição das variáveis do domínio (YANG; SHAMI, 2020). Essas duas densidades são empregadas para estimar a probabilidade de se observar um hiperparâmetro x , dado uma métrica de performance ρ . Assim, tem-se a seguinte definição:

$$p(x|y) = \begin{cases} l(x) & \text{if } y < y^* \\ g(x) & \text{if } y \geq y^* \end{cases} \quad (5.1)$$

em que $l(x)$ representa a densidade quando a função de perda é menor que um limiar y^* , e $g(x)$ é a densidade quando a função de perda tem valores acima de y^* (BERGSTRA *et al.*, 2011). O limite y^* é definido por um hiperparâmetro γ , onde γ corresponde ao percentil dos valores observados de y , de modo que $p(y < y^*) = \gamma$.

Por padrão, o Tree-Structured Parzen Estimator (TPE) utiliza como função de aquisição o Expected Improvement (EI), que pode ser otimizado no TPE da seguinte forma:

$$EI_{y^*}(x) = \int_{-\infty}^{y^*} (y^* - y) p(y|x) dy \quad (5.2)$$

Para encontrar a probabilidade marginal de x , temos a seguinte integral: $p(x) = \int_{\mathbb{R}} p(x|y) p(y) dy$. Particionando o domínio de y , obtemos:

$$p(x) = \gamma l(x) + (1 - \gamma) g(x)$$

Assim, aplicando o Teorema de Bayes e substituindo na integral da equação Equação 5.2:

¹Exploitation refere-se à busca por soluções próximas a boas observações anteriores, enquanto exploration visa explorar áreas ainda não investigadas

$$EI_{y^*}(x) = \int_{-\infty}^{y^*} (y^* - y) \frac{p(x|y)p(y)}{p(x)} dy = \left(\gamma y^* - \int_{-\infty}^{y^*} p(y) dy \right) \left(\gamma + (1 - \gamma) \frac{g(x)}{l(x)} \right)^{-1}$$

A segunda expressão do produto mostra que, para maximizar o Expected Improvement, é necessário encontrar pontos de x com maior probabilidade em $l(x)$ e menor probabilidade em $g(x)$. No entanto, no TPE, maximizar o EI é equivalente a maximizar a razão entre as duas distribuições, definida como $r(x) = \frac{l(x)}{g(x)}$ (COWEN-RIVERS *et al.*, 2022).

5.4.2 Otimização de hiperparâmetros com optuna

Para otimizar os hiperparâmetros dos modelos foi utilizado a biblioteca `optuna` (AKIBA *et al.*, 2019) da linguagem de programação Python. Essa biblioteca implementa diversos métodos para otimização automatizada de hiperparâmetros. Para a sua utilização, é preciso definir inicialmente uma função objetivo. Por exemplo, para otimizar os hiperparâmetros de uma random forest, seria necessário definir uma função objetivo da seguinte forma:

```
import optuna
import numpy as np
import pandas as pd
from sklearn import ensemble
from sklearn.model_selection import cross_val_score, KFold

def objective(trial):
    X = train_df[variaveis_independentes]
    y = train_df.variavel_dependente

    params = dict(
        n_estimators=trial.suggest_int(
            name='n_estimators',
            low=1,
            high=1000),
        max_depth=trial.suggest_int(
            name='max_depth',
            low=20,
            high=1000),
        max_features='sqrt',
```

```

        random_state=42
    )

    model = ensemble.RandomForestRegressor(
        *params
    )
    model.fit(X=X, y=y)

    cv_scores = np.exp(np.sqrt(-cross_val_score(
        estimator=model,
        X=X,
        y=y,
        scoring="neg_mean_squared_error",
        n_jobs=3,
        cv=KFold(n_splits=20))))

    return np.mean(cv_scores)

study = optuna.create_study()
study.optimize(objective, n_trials=100, n_jobs=-1)

```

Primeiro, define-se, em cada tentativa (trial), quais hiperparâmetros serão otimizados, especificados no objeto `params` no início da função. Após definir o espaço de busca para cada hiperparâmetro, o modelo escolhido é ajustado aos dados de treinamento. Com o modelo ajustado, realiza-se a validação cruzada em cada trial, utilizando o método K-Fold com 20 divisões (folds), conforme definido previamente. Após definir a função objetivo, inicializa-se um estudo com `optuna.create_study` e, em seguida, inicia-se a otimização com `study.optimize(objective, n_trials=100, n_jobs=-1)`. Por fim, para selecionar os melhores hiperparâmetros ao fim do último trial, basta executar `study.best_params`.

Por padrão, a biblioteca Optuna utiliza o Tree-Structured Parzen Estimator (TPE) para otimizar hiperparâmetros de um modelo. A técnica de otimização é escolhida por meio do argumento `sampler` no método `create_study`. Para selecionar o TPE, basta passar `optuna.samplers.TPESampler` como argumento para a criação do estudo. O método TPE é o padrão para otimização na biblioteca optuna. No entanto, caso se deseje utilizar outro método de otimização da biblioteca, basta especificá-lo da mesma forma: `optuna.create_study(sampler=metodo_otimizacao)`.

5.5 Interpretação dos algoritmos de aprendizagem de máquina

Na aplicação de aprendizado de máquina, o foco geralmente está em obter um modelo com o menor erro de generalização possível, o que muitas vezes resulta na negligência da interpretação dos resultados. Isso pode comprometer a compreensão do que o algoritmo está efetivamente fazendo. Em resposta a essa limitação, diversas técnicas têm sido desenvolvidas para interpretar os efeitos das variáveis independentes nas estimativas geradas pelos algoritmos. Assim, esta seção será dedicada a descrever a fundamentação teórica e a aplicação das técnicas de interpretação utilizadas neste trabalho.

5.5.1 Individual Conditional Expectation (ICE)

O método de Individual Conditional Expectation (ICE) é uma ferramenta gráfica utilizada para visualizar as estimativas de um modelo. Esse método traça a relação entre os valores preditos pelo modelo e as variáveis, considerando cada observação individual. Com isso, o ICE permite analisar a variação dos valores ajustados ao longo do intervalo de uma covariável, facilitando a visualização de onde e em que medida pode haver heterogeneidade, além de como cada observação responde individualmente às mudanças em uma variável específica (GOLDSTEIN *et al.*, 2015).

Formalmente, o ICE considera as observações $\{x_{S_i}, \mathbf{x}_{C_i}\}_{i=1}^N$ e os valores preditos \hat{f} . Para cada uma das N observações e valores ajustados x_C , uma curva $\hat{f}_S^{(i)}$ é traçada em função dos valores observados de x_S . Dessa forma, a variável x_S é representada no eixo das abscissas, enquanto os valores observados de \mathbf{x}_C permanecem fixos. Quando há um grande número de linhas no gráfico ICE, a interpretação pode se tornar difícil. Para facilitar a análise, considera-se a centralização das curvas em um ponto específico das variáveis, representando apenas a diferença nas predições em relação a esse ponto. Essa centralização é conhecida como c-ICE. As novas curvas são então definidas da seguinte forma:

$$\hat{f}_{cent}^{(i)} = \hat{f}^{(i)} - \mathbf{1}\hat{f}(x^*, \mathbf{x}_{C_i})$$

onde x^* é selecionado como o mínimo ou o máximo de x_S , \hat{f} é o modelo ajustado, e $\mathbf{1}$ é um vetor de uns. Quando x^* é o valor mínimo de x_S , isso garante que todas as curvas comecem em 0, removendo assim as diferenças de nível causadas pelos distintos $x_C^{(i)}$. Se x^* for o valor máximo de x_S , o nível de cada curva centralizada reflete o efeito cumulativo de x_S sobre \hat{f} em relação ao ponto de centralização nas variáveis.

5.5.2 Local interpretable model-agnostic explanations (LIME)

RIBEIRO; SINGH; GUESTRIN (2016) definem o Local Interpretable Model-Agnostic Explanations (LIME) como um algoritmo capaz de explicar as previsões feitas por qualquer modelo de classificação ou regressão, aproximando-o localmente de um modelo mais interpretável. Dessa forma, o objetivo geral do LIME é identificar um modelo interpretável e gerar uma representação interpretável para traduzir modelos complexos.

Formalmente, para a construção da explicação produzida pelo LIME, deve-se definir a explicação como um modelo $g \in G$, onde G é uma classe de potenciais modelos interpretáveis, como uma regressão linear ou árvores de decisão. O domínio de g é $\{0, 1\}^{d'}$, isto é, o modelo explicativo g age sobre a ausência ou presença de componentes interpretáveis. Como nem todos os modelos $g \in G$ podem ser simples o suficiente para ser interpretado, define-se uma medida de complexidade $\Omega(g)$ da explicação gerada por $g \in G$. Para uma árvore de regressão, por exemplo, $\Omega(g)$ pode ser a profundidade da árvore, enquanto que para modelos lineares $\Omega(g)$ pode ser o número de pesos diferentes de zero.

Seja $f : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$ o modelo que está sendo explicado. Assim, define-se uma medida de aproximação $\pi_x(z)$ entre uma instância z para x , de modo a definir a localidade ao redor de x . Por fim, seja $L(f, g, \pi_x)$ uma estatística do quanto g erra ao tentar aproximar f na localidade definida por π_x . Agora, para garantir a interpretabilidade e a fidelidade local, deve-se minimizar $L(f, g, \pi_x)$, mantendo $\Omega(g)$ suficiente baixo. Assim, tem-se a explicação produzida pelo LIME:

$$\xi(x) = \arg \min_{g \in G} L(f, g, \pi_x) + \Omega(g)$$

Podem existir diversas variações para L e Ω com diferentes famílias de modelos explicativos G . Uma escolha para L , por exemplo, é o erro quadrático médio.

5.5.3 SHapley Additive exPlanations (SHAP)

6 Resultados

6.1 Análise exploratória de dados

A análise exploratória dos dados foi realizada após a divisão entre os conjuntos de treinamento e teste. Essa abordagem foi adotada para evitar o sobreajuste do modelo e garantir que o algoritmo não aprenda com informações indisponíveis no conjunto de teste. Assim, a descritiva dos dados foi realizada utilizando o conjunto de treinamento.

A primeira etapa da análise exploratória de dados foi identificar os dados faltantes e determinar a melhor forma de tratá-los. A Figura 6.1 mostra a porcentagem de observações ausentes em cada variável. As variáveis com a maior quantidade de dados ausentes são o valor do condomínio e o IPTU, pois essas informações são as menos preenchidas no site de onde os dados foram coletados. A terceira variável, com quase 20% de observações ausentes, é a quantidade de vagas de estacionamento. As variáveis com mais de 20% de observações ausentes foram removidas da base de dados, pois, com essa quantidade de valores faltantes, nem mesmo métodos de imputação proporcionariam um tratamento adequado. Dessa forma, apenas as variáveis de valor do condomínio e IPTU foram removidas, enquanto as demais com valores ausentes foram tratadas por meio de imputação.

Uma das dificuldades que podem surgir durante a modelagem é o desbalanceamento das classes, ou seja, a diferença na quantidade de cada tipo de imóvel. O tipo de imóvel mais predominante no conjunto de dados são os apartamentos, que representam 81,36% do total. Em seguida, vêm as casas, com 8,91%, e os flats, com 5,72%. Por fim, as casas comerciais são as menos representadas, com apenas 15 ocorrências. Esse desbalanceamento claro entre as classes pode dificultar o desempenho do modelo, especialmente na previsão de categorias menos frequentes, como as casas comerciais, onde o modelo pode ter dificuldade em obter bons resultados.

A distribuição das variáveis foram analisadas em termos do tipo do imóvel a partir de um gráfico de violino. Pela Figura 6.2, é fácil perceber que a maioria das distribuições possuem assimetria negativa. Os apartamentos possuem caudas longas à direita, indicando presença de valores extremamente altos e que indicam que talvez seja necessário a aplicação de alguma transformação para a estabilização da variância.

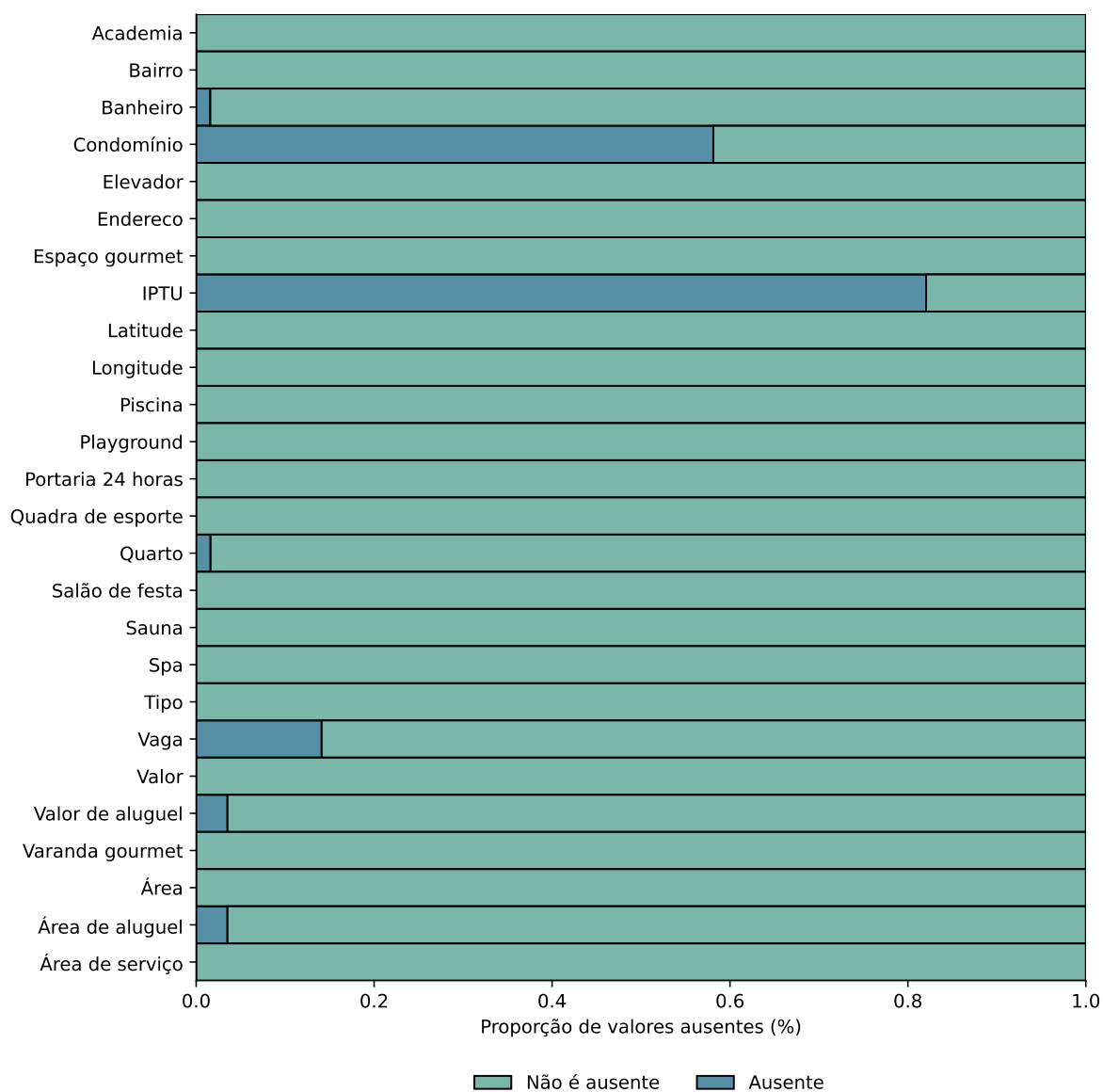


Figura 6.1: Quantidade de valores ausentes por variáveis

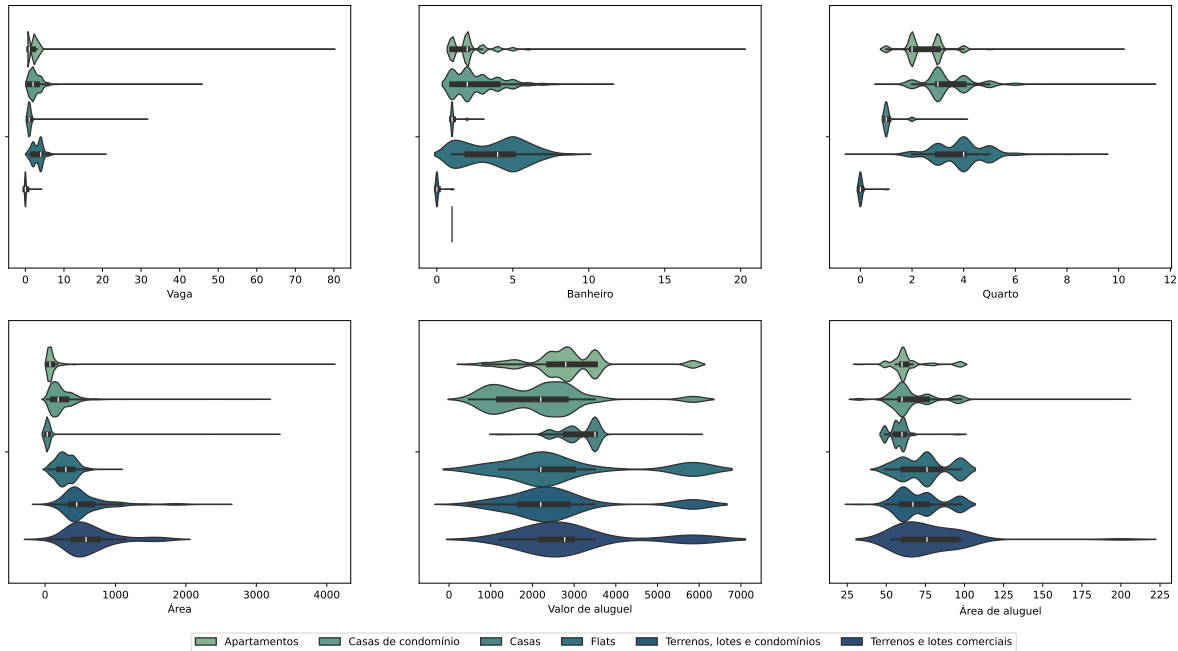


Figura 6.2: Distribuição das variáveis numéricas.

Para reduzir a assimetria da distribuição dos valores dos imóveis, foi aplicada uma transformação logarítmica. O gráfico de densidade à esquerda na Figura 6.3 mostra os dados originais da distribuição do valor dos imóveis. Há uma tendência dos valores ficarem mais concentrados em uma faixa mais baixa, mas alguns imóveis apresentam valores excepcionalmente altos, o que acaba gerando uma distribuição assimétrica positiva. Com a aplicação da transformação logarítmica, a assimetria é suavizada, comprimindo os valores mais altos. Isso tende a aproximar a distribuição de uma forma mais simétrica, facilitando a modelagem e análise estatística.

A Figura 6.4 apresenta a matriz de correlação entre as variáveis numéricas do conjunto de dados. As cores mais escuras indicam uma correlação mais forte entre as variáveis, enquanto as cores mais claras indicam o contrário. O valor do imóvel apresenta maior correlação com as variáveis de área do imóvel e número de vagas de estacionamento. Além disso, o valor do imóvel tem alta correlação com o valor médio do aluguel, número de quartos e banheiros, além de ser fortemente influenciado pela localização das propriedades. Algumas variáveis apresentam multicolinearidade entre si, mas os algoritmos utilizados selecionam aleatoriamente as variáveis para a modelagem, o que reduz o risco de selecionar variáveis redundantes.

ADICIONAR NO FIM UM GRÁFICO DE ESPACIALIZAÇÃO DOS DADOS (INCLUIR VARIAÇÃO DA COR PELO PREÇO DO IMÓVEL)

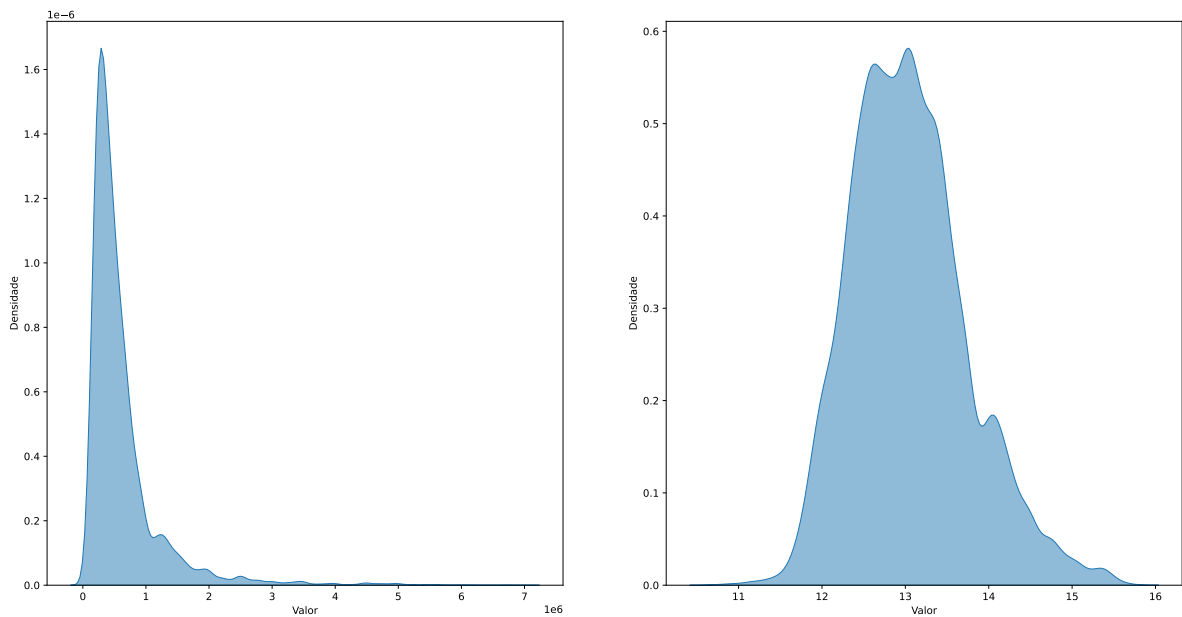


Figura 6.3: Comparação entre distribuição dos valores dos imóveis antes e depois da transformação logarítmica.

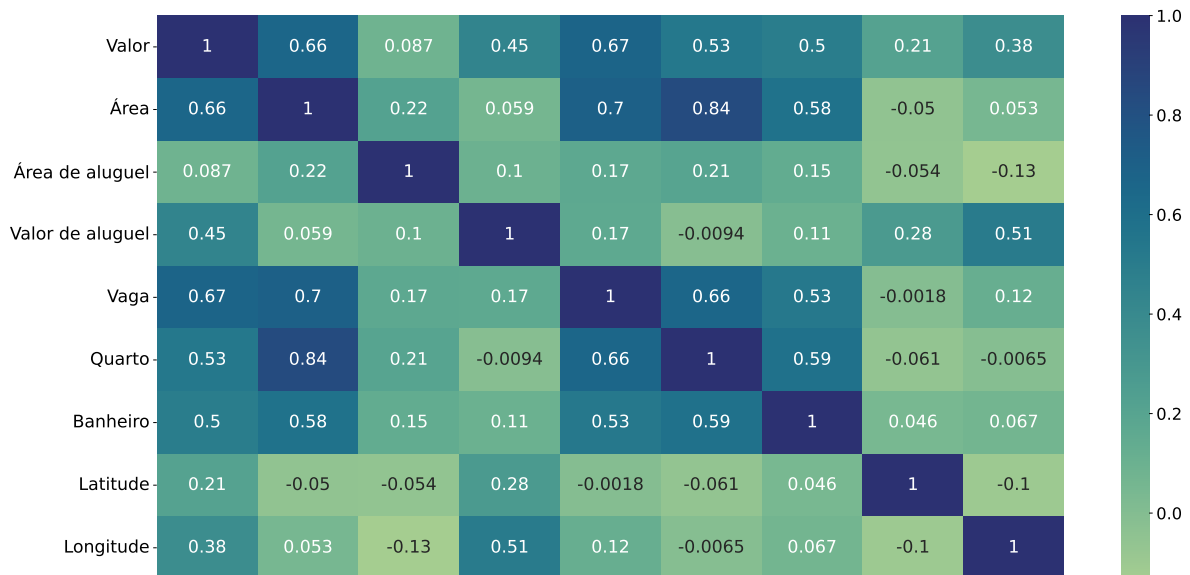


Figura 6.4: Gráfico de correlação de Spearman das variáveis independentes.

6.2 Construção dos modelos

6.2.1 Random Forest

6.2.2 Gradient Boosting

7 Conclusão

8 Referências

AKIBA, T. *et al.* Optuna: A Next-generation Hyperparameter Optimization Framework. [S.l.]: [s.n.], 2019.

ALLAIRE, J.; DERVIEUX, C. **quarto: R Interface to 'Quarto' Markdown Publishing System**. [S.l.]: [s.n.], 2024.

BERGSTRA, J. *et al.* Algorithms for hyper-parameter optimization. **Advances in neural information processing systems**, 2011. v. 24.

_____; YAMINS, D.; COX, D. Making a science of model search: Hyperparameter optimization in hundreds of dimensions for vision architectures. [S.l.]: PMLR, 2013. p. 115–123.

BISCHL, B. *et al.* Hyperparameter optimization: Foundations, algorithms, best practices, and open challenges. **Wiley Interdisciplinary Reviews: Data Mining and Knowledge Discovery**, 2023. v. 13, n. 2, p. e1484.

BREIMAN, L. Bagging predictors. **Machine learning**, 1996. v. 24, p. 123–140.

CAMBON, J. *et al.* tidygeocoder: An R package for geocoding. **Journal of Open Source Software**, 2021. v. 6, n. 65, p. 3544. Disponível em: <<https://doi.org/10.21105/joss.03544>>.

COWEN-RIVERS, A. I. *et al.* Hebo: Pushing the limits of sample-efficient hyperparameter optimisation. **Journal of Artificial Intelligence Research**, 2022. v. 74, p. 1269–1349.

FRIEDMAN, J. H. Stochastic gradient boosting. **Computational statistics & data analysis**, 2002. v. 38, n. 4, p. 367–378.

GARNETT, R. **Bayesian optimization**. [S.l.]: Cambridge University Press, 2023.

GOLDSTEIN, A. *et al.* Peeking inside the black box: Visualizing statistical learning with plots of individual conditional expectation. **journal of Computational and**

Graphical Statistics, 2015. v. 24, n. 1, p. 44–65.

HASTIE, T. *et al.* **The elements of statistical learning: data mining, inference, and prediction**. [S.l.]: Springer, 2009. V. 2.

HUNTER, J. D. **Matplotlib: A 2D graphics environment**. **Computing in Science & Engineering**, 2007. v. 9, n. 3, p. 90–95.

JAMES, G. *et al.* **An introduction to statistical learning**. [S.l.]: Springer, 2013. V. 112.

KOUZIS-LOUKAS, D. **Learning Scrapy**. [S.l.]: Packt Publishing Ltd, 2016.

MCKINNEY, Wes. **Data Structures for Statistical Computing in Python**. (Stéfan van der Walt & Jarrod Millman, Org.). [S.l.]: [s.n.], 2010. p. 56–61.

PEDREGOSA, F. *et al.* Scikit-learn: Machine Learning in Python. **Journal of Machine Learning Research**, 2011. v. 12, p. 2825–2830.

R CORE TEAM. **R: A Language and Environment for Statistical Computing**. Vienna, Austria: R Foundation for Statistical Computing, 2024.

RIBEIRO, M. T.; SINGH, S.; GUESTRIN, C. "Why should i trust you?" Explaining the predictions of any classifier. [S.l.]: [s.n.], 2016. p. 1135–1144.

SNOEK, J.; LAROCHELLE, H.; ADAMS, R. P. Practical bayesian optimization of machine learning algorithms. **Advances in neural information processing systems**, 2012. v. 25.

TEAM, T. Pandas Development. **pandas-dev/pandas: Pandas**. Zenodo. Disponível em: <<https://doi.org/10.5281/zenodo.3509134>>.

VAN ROSSUM, G.; DRAKE JR, F. L. **Python reference manual**. [S.l.]: Centrum voor Wiskunde en Informatica Amsterdam, 1995.

WICKHAM, H. **rvest: Easily Harvest (Scrape) Web Pages**. [S.l.]: [s.n.], 2024.

_____; HESTER, J.; OOMS, J. **xml2: Parse XML**. [S.l.]: [s.n.], 2023.

YANG, L.; SHAMI, A. On hyperparameter optimization of machine learning algorithms: Theory and practice. **Neurocomputing**, 2020. v. 415, p. 295–316.