Introdução a Machine Learning

Profa. Dra. Roberta Wichmann

roberta.wichmann@idp.edu.br



Aula 4 – Regressão no Aprendizado Supervisionado: Métodos e Avaliação

Métodos paramétricos e não paramétricos. Conceitos sobre viés e variância. Conceitos iniciais sobre o método de mínimos quadrados e seleção de modelo. Técnicas de avaliação de modelos. Conceitos iniciais sobre árvores de decisão e KNN.



Recapitulando a Jornada do Machine Learning

Recapitulando: Fundamentos do Aprendizado de Máquina

- Na sessão anterior, percorremos o ciclo completo de um projeto de Machine Learning, desde a formulação do problema até a avaliação do modelo.
- Definimos o Problema: Entendemos qual pergunta queremos responder com os dados.
- Coletamos e Preparamos os Dados: Reunimos e limpamos as informações essenciais.
- Escolhemos e Ajustamos Modelos: Selecionamos um algoritmo e otimizamos seus hiperparâmetros.



Recapitulando a Jornada do Machine Learning

Recapitulando: Fundamentos do Aprendizado de Máquina

- Evitamos Data Leakage: Cuidado para não usar informações do futuro no treinamento!
- Escolhemos as Métricas: Definimos como medir o desempenho do modelo.
- Resultado: Alcançamos um RMSE de 4596 no treino e 4776 no teste, indicando boa generalização, mas com espaço para aprimoramento!

E o que vamos fazer agora?



Recapitulando a Jornada do Machine Learning

Próximos Passos:

- Introduziremos os conceitos que norteiam o funcionamento interno dos modelos de regressão.
- Entenderemos qual a diferença entre a regressão paramétrica e não paramétrica.
- Vamos explorar em detalhes cada métrica de avaliação, bem como os modelos mais utilizados em modelagem.

Mas o que é regressão paramétrica?



Regressão Paramétrica

- A Regressão Paramétrica assume que a relação entre as variáveis pode ser descrita por uma fórmula predefinida com um número limitado de parâmetros.
- Os parâmetros são os coeficientes que determinam a forma do modelo.
- É como tentar encaixar uma peça de um quebra-cabeça em um buraco específico. Se a peça for a certa, o encaixe é perfeito. Se não for, o resultado pode ser ruim.
- Exemplo: Prever o preço de uma casa com base no tamanho (em metros quadrados), assumindo que a relação é linear. Precisamos apenas encontrar os coeficientes da reta.

Como assim coeficientes da reta?



Exemplos:

- A Regressão Linear é o exemplo mais famoso de modelo paramétrico. A abordagem se baseia em determinar uma forma "base" (a equação da reta no exemplo abaixo) fixa que visa explicar a relação entre as variáveis. O trabalho do modelo é só descobrir os parâmetros que melhor ajustam essa forma aos dados.
- Preço = (inclinação) × (tamanho) + (ponto de partida)
 - Inclinação: mostra o quanto o preço aumenta quando o tamanho da casa aumenta.
 - Ponto de partida (intercepto): é o preço quando o tamanho da casa é zero (um valor inicial da linha).
- O desafio do modelo é encontrar quais os melhores valores da inclinação e do intercepto que ajustam melhor aos dados.



Suas vantagens são:

- Simplicidade: Fácil de entender e implementar.
- Interpretabilidade: Permite identificar a importância de cada variável e sua direção (positiva ou negativa).
- Eficiência: Requer menos dados do que modelos não paramétricos.

Como é a interpretação?



Exemplo: em um modelo de salário

- Salário=2000+500×(anos de estudo)
- Note que o "Salário" em reais é nossa variável target e "anos de estudo" é a covariável.
- O que acontece a cada aumento de um ano de estudo?
- Note que a cada um ano no tempo de estudo, há um aumento de em média 500 Reais.
- O que acontece quando a covariável for 0?
- Perceba que se os anos de estudo for igual a 0 o salário base é de 2000 Reais.



Desafios:

- Rigidez: A suposição sobre a forma da relação pode ser muito forte e não capturar a complexidade dos dados.
- Viés: Se a relação real for não linear, o modelo linear terá um alto viés.
- Exemplo: Se a relação entre o tamanho da casa e o preço for exponencial, uma reta não será uma boa aproximação.

Mas o que é viés?



Viés e Variância: A Base para Bons Modelos

- Em Machine Learning, nosso objetivo é construir modelos que façam previsões precisas em dados novos e desconhecidos, o que chamamos de "generalização".
- Para alcançar esse objetivo, é fundamental compreender e controlar dois tipos de erros que podem afetar o desempenho do modelo: o viés e a variância.
- A busca por um bom modelo se resume a encontrar o equilíbrio ideal entre esses dois tipos de erro, evitando tanto a simplificação excessiva quanto a memorização dos dados.

Entendi, mas o que é o viés?



Viés

- Imagine um arqueiro que sempre mira no mesmo lugar, mas erra o centro do alvo. Isso acontece porque ele não tem informações suficientes sobre o vento, a distância e outros fatores.
- O viés é um erro sistemático que ocorre quando o modelo faz suposições muito simplistas sobre os dados, ignorando padrões importantes e nuances presentes na realidade.
- Consequências: Um modelo com alto viés tende a subestimar a complexidade do problema, levando a um ajuste inadequado (underfitting) e a previsões imprecisas.
- Exemplo: Usar uma linha reta para modelar uma relação que, na verdade, é uma curva. O modelo sempre errará, mesmo com muitos dados.



Variância

- Imagine um arqueiro que tenta se ajustar a cada pequena variação do vento, tremendo a mão e errando o alvo. Ele se concentra demais em detalhes irrelevantes, perdendo a visão geral.
- A variância mede a sensibilidade do modelo a pequenas flutuações nos dados. Modelos com alta variância "decoram" os dados, incluindo ruídos e valores anômalos.
- Consequências: O modelo se torna muito específico para os dados de treinamento, perdendo a capacidade de generalizar para dados novos(overfitting).
- Exemplo: Criar uma regra supercomplexa que funciona perfeitamente para um conjunto limitado de dados, mas falha miseravelmente em dados novos.



Então o que seria um bom modelo?

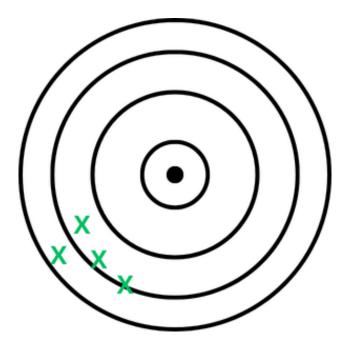
O Segredo é o Equilíbrio

- O Trade-off: Diminuir o viés geralmente aumenta a variância, e vice-versa. O objetivo é encontrar o ponto de equilíbrio ideal, onde ambos os erros são minimizados.
- O Modelo Perfeito: Um bom modelo é capaz de capturar os padrões importantes nos dados sem se ajustar demais ao ruído. Ele generaliza bem para dados novos e desconhecidos.
- Como Alcançar o Equilíbrio: Coletar mais dados e aplicar métodos de validação adequados.

Vamos praticar?



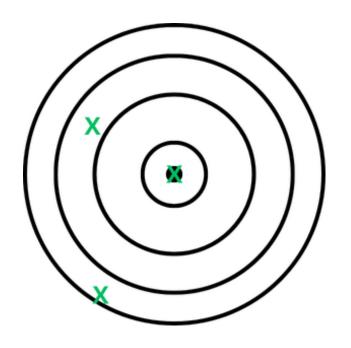
VAMOS PRATICAR



- Como você classifica esse modelo?
- Resposta: Viés alto e variância baixo, os pontos estão muito longe do centro.



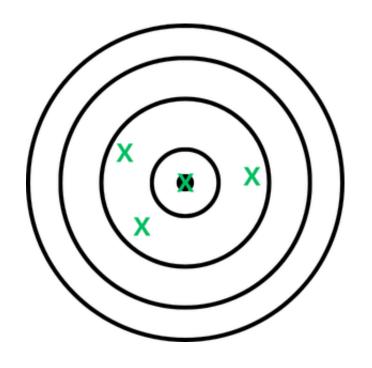
VAMOS PRATICAR



- Como você classifica esse modelo?
- Resposta: Variância alta e viés alto, os pontos estão muito longe do centro e muito longe entre si.



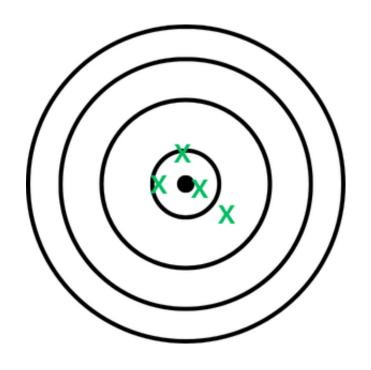
VAMOS PRATICAR



- Como você classifica esse modelo?
- Resposta: Variância moderada e viés baixo, os pontos estão próximos entre si e próximos do centro.



VAMOS PRATICAR



- Como você classifica esse modelo?
- Resposta: Variância baixa e viés baixo, os pontos estão próximos entre si e próximos do centro.



O Aprendizado Paramétrico em Detalhes

Desvendando o Processo de aprendizado

O Que Já Sabemos: Modelos paramétricos assumem uma forma fixa para a relação entre X e Y (ex: Salário=2000+500×(anos de estudo)).

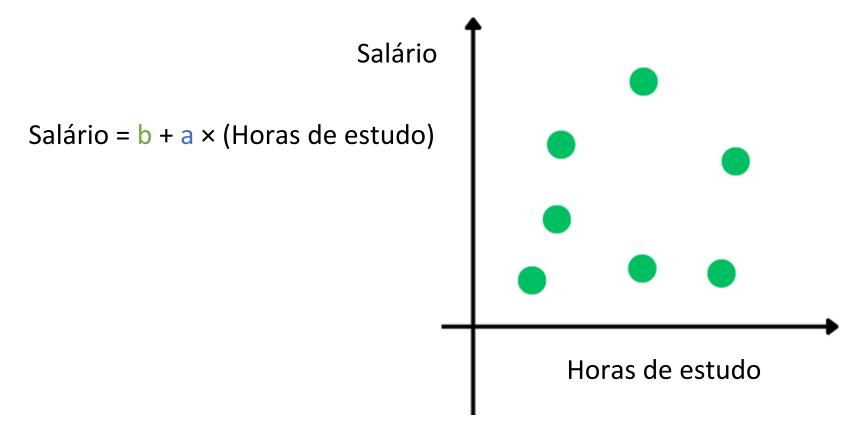
Como Eles Aprendem?

- Definindo a "Perda": Precisamos de uma forma de medir o quão "ruim" é o ajuste do modelo aos dados. Isso é feito com uma função de custo (ou perda).
- Ajustando os Controles: O aprendizado se resume a encontrar os melhores valores para os parâmetros da função, minimizando a função de custo.
- Pense nos parâmetros como "controles" que ajustam a forma da função. Por exemplo, na reta Salário = b + a × (Horas de estudo), a e b são os parâmetros e a serem estimados e Horas de estudo é a nossa variável.



E como se encontra os melhores parâmetros?

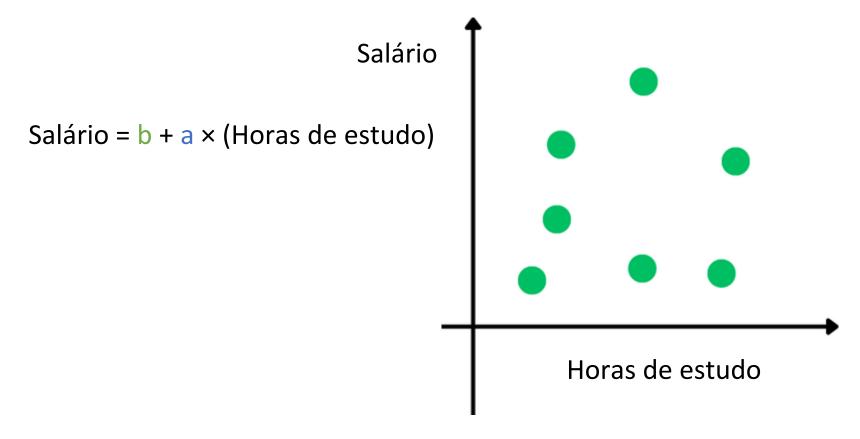
Olhe o gráfico abaixo:





 Temos um monte de pontos espalhados em um gráfico. Cada ponto é basicamente um indivíduo que possui um determinado valor de horas de estudo e de salário.

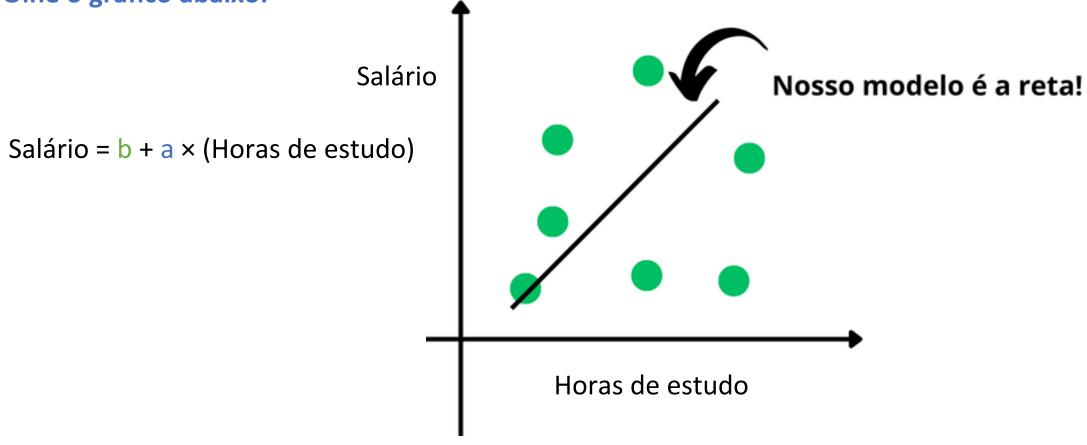
Olhe o gráfico abaixo:





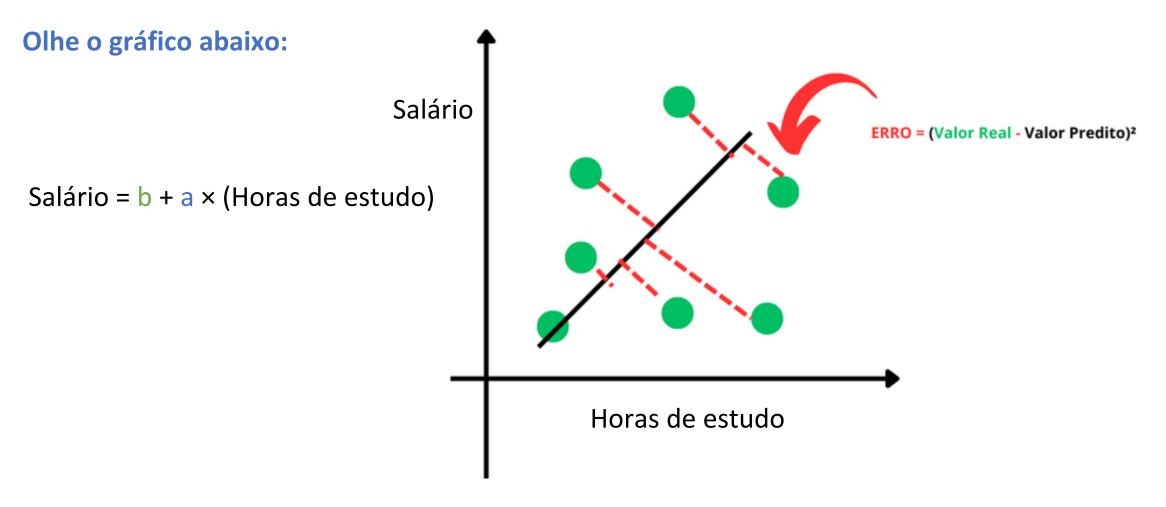






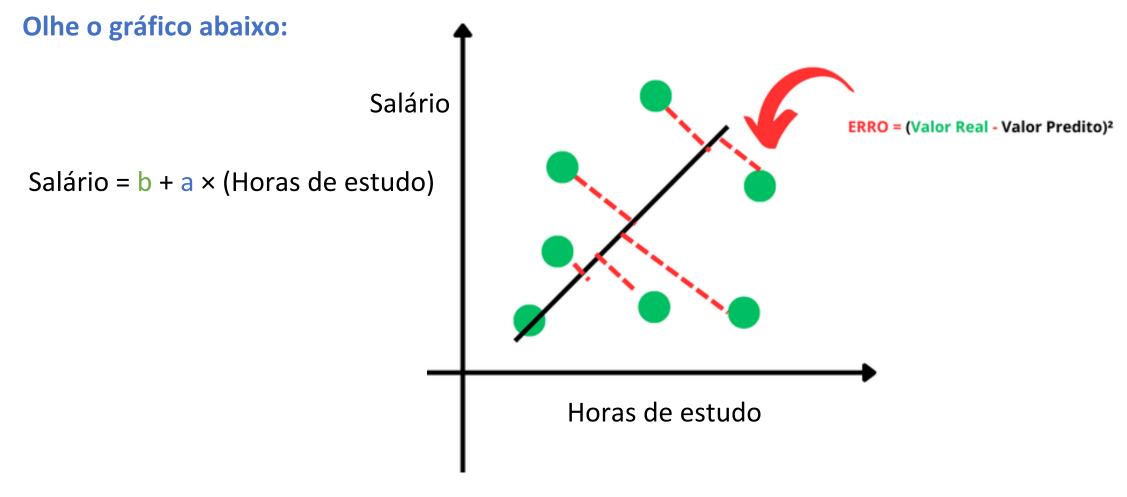
Medindo o Erro: Para cada ponto, medimos a distância até a reta (essa distância é o "erro" de previsão).





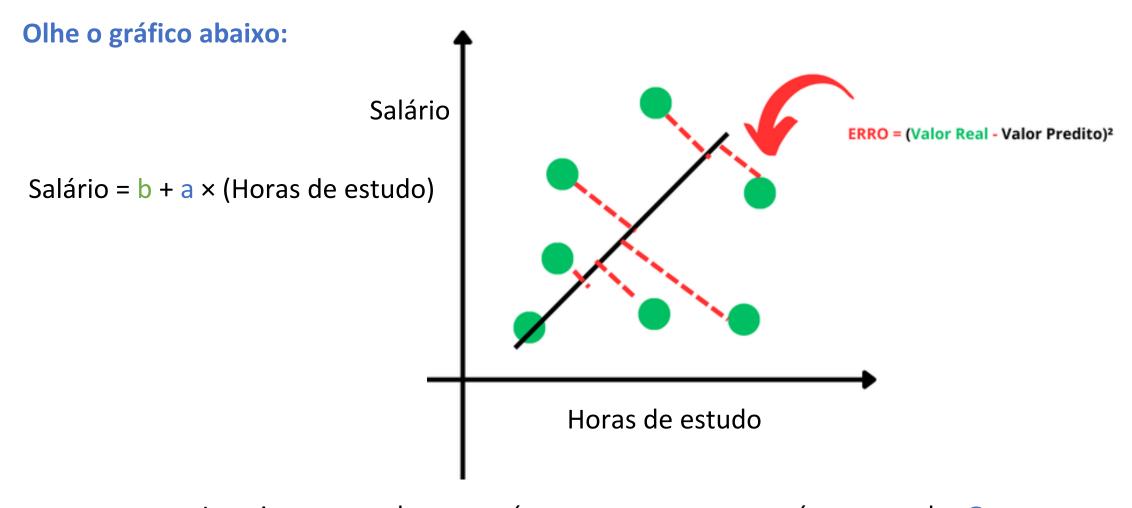


 Eliminando Sinais: Elevamos cada distância ao quadrado (isso transforma todos os erros em positivos e evita que se anulem).



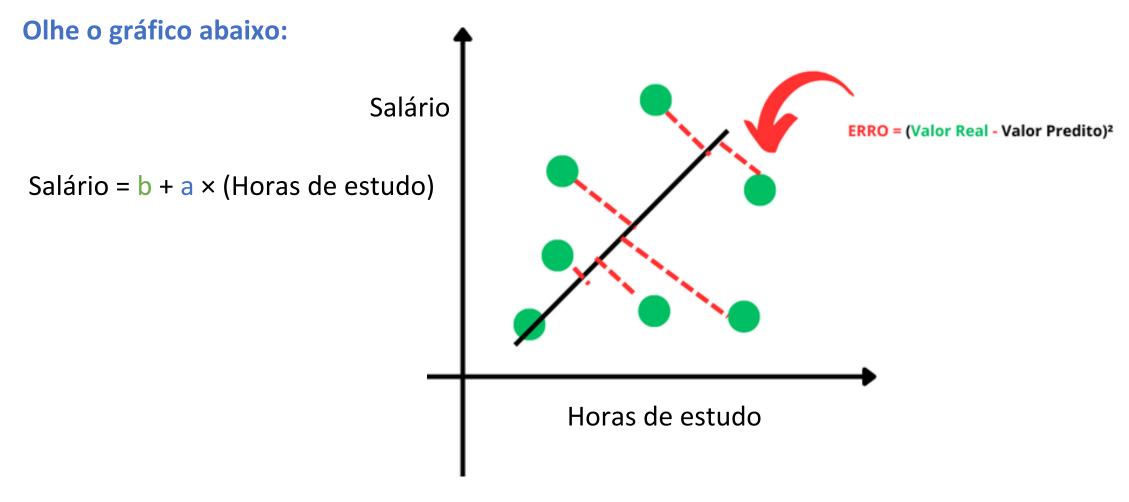


• Encontrando a "Melhor" Reta: Ajustamos a posição (nosso b) e a inclinação da reta (nosso a) até que a soma de todos os erros ao quadrado seja a menor possível.



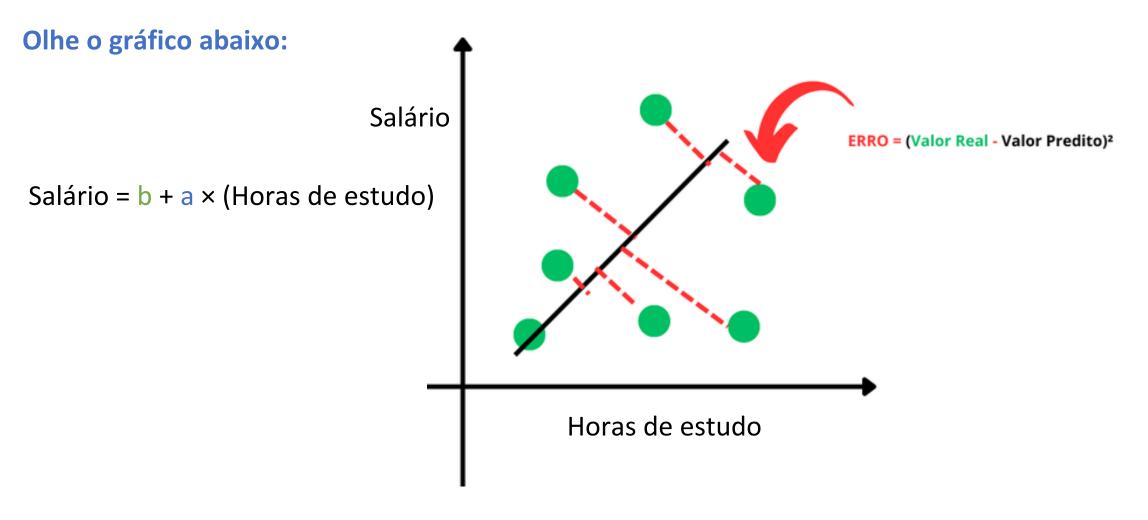


 Imagine que cada ponto é uma pessoa e a reta é uma corda. Queremos posicionar a corda de forma que todas as pessoas fiquem o mais perto possível dela, sem que nenhuma precise se esticar demais.





 Resultado: A reta que encontramos é a que "melhor" representa os dados, no sentido de minimizar a "força" total que as pessoas precisam fazer para se manterem próximas à corda.





E se eu tivesse muitas variáveis, ainda sim poderia usar o método paramétrico?

Seleção de Variáveis: Descobrindo o Que Realmente Importa!

- O Problema: Em muitos problemas, temos muitas variáveis preditoras. Nem todas são importantes!
- A Solução: Selecionar apenas as variáveis que realmente contribuem para a precisão do modelo. Isso torna o modelo mais simples, fácil de entender e com melhor desempenho.
- Técnicas de Seleção: Existem várias formas de fazer isso, e vamos explorar algumas das mais populares: Backward e Forward.

O que é Forward?



Forward Selection

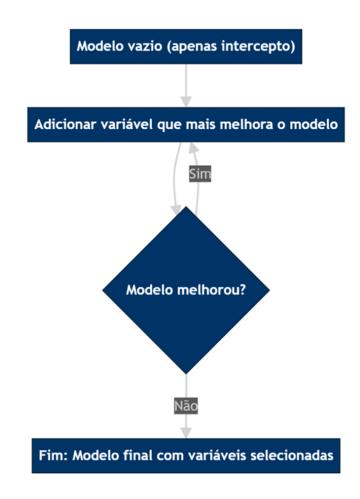
 Imagine construir uma casa. Começamos com a fundação (a variável mais importante) e adicionamos os outros cômodos (variáveis) um por um, sempre escolhendo o que mais contribui para a casa ficar completa.

Como funciona?

- Começamos com um modelo vazio, apenas com o intercepto (nosso b).
- Adicionamos a variável que mais melhora o modelo (ex: a que mais diminui o erro).
- Repetimos o processo, adicionando uma variável por vez, até que a adição de novas variáveis não melhore significativamente o modelo.



Forward Selection





Backward Elimination

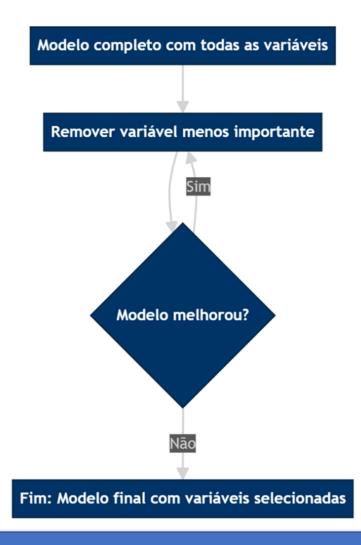
Imagine que você se mudou para uma casa nova, mas ela veio cheia de coisas velhas.
 Começamos com tudo e vamos tirando os objetos um por um até fica apenas com o essencial.

Como funciona?

- Começamos com um modelo que inclui todas as variáveis.
- Removemos a variável que menos afeta o desempenho do modelo.
- Repetimos o processo, removendo uma variável por vez, até que a remoção de qualquer variável piore significativamente o modelo.



Backward Elimination





Mas como medir o quão bom meu modelo é?

Vamos analisar as principais métricas de desempenho para os modelos de regressão.

MSE (Mean Squared Error): A Média dos Erros ao Quadrado

- O MSE mede a média dos quadrados dos erros (diferenças entre os valores previstos e os valores reais).
- Sensibilidade a Outliers: Elevar os erros ao quadrado faz com que o MSE seja muito sensível a outliers (valores muito discrepantes). Um único outlier pode inflar o MSE drasticamente.
- Amplamente usado como medida para calcular o erro do modelo, porém a interpretação se torna mais complexa, já que está em termos quadráticos.

Como podemos sanar essa problemática de interpretação?



RMSE (Root Mean Squared Error)

- O RMSE é simplesmente a raiz quadrada do MSE.
- Está na mesma unidade da variável alvo (o que facilita a interpretação).
- Exemplo: Se a variável resposta for o preço da casa (em Reais) o modelo tem RMSE = 50.000,0, significa que, em média, as previsões do modelo estão a cerca de 50 mil reais de distância do valor real.
- O RMSE mostra, em termos práticos, o tamanho médio do erro do modelo nas mesmas unidades do problema.



MAE (Mean Absolute Error)

- O MAE mede a média dos valores absolutos dos erros (diferenças entre os valores previstos e os valores reais).
- Resistência a Outliers: O MAE é mais robusto a outliers do que o MSE e o RMSE, pois não eleva os erros ao quadrado.
- Exemplo: Se a variável resposta for o preço da casa (em Reais) o modelo tem RMSE = 40.000,0, significa que, o modelo erra 40 mil reais nas previsões do preço das casas.
- O MAE é uma boa opção quando você quer evitar que outliers influenciem muito a avaliação do modelo.



MAPE (Mean Absolute Percentage Error)

- O MAPE mede o erro médio percentual absoluto. É útil quando a escala da variável alvo é importante.
- Interpretação: Um MAPE de 10% significa que, em média, as previsões do modelo estão 10% "distantes" dos valores reais.
- Exemplo: Se a variável resposta for o preço da casa (em Reais) o modelo tem MAPE=8%, significa que, o modelo erra 8% do valor real da casa.
- Cuidado: O MAPE pode ser instável quando a variável alvo tem valores próximos de zero.



Métricas de Desempenho

R² (Coeficiente de Determinação)

 O R² mede a proporção da variância da variável alvo que é explicada pelo modelo. Varia de 0 a 1.

Interpretação

- $R^2 = 1$: O modelo explica 100% da variância (ajuste perfeito).
- $R^2 = 0$: O modelo não explica nada da variância (não é melhor do que chutar um valor aleatório).
- Valores entre 0 e 1: Indicam a proporção da variância explicada pelo modelo.



 Limitações: O R² pode ser enganoso em alguns casos, pois sempre aumenta quando adicionamos mais variáveis ao modelo, mesmo que elas não sejam relevantes.

Métricas de Desempenho

AIC e BIC

• AIC e BIC são formas de comparar modelos, tentando equilibrar dois pontos: quão bem o modelo se ajusta aos dados e quão simples ele é (quantos parâmetros tem).

 Valores mais baixos indicam modelos melhores. A diferença principal é que o AIC tende a favorecer modelos que se ajustam bem, mesmo que sejam um pouco mais complexos, enquanto o BIC penaliza modelos complexos e prefere modelos mais simples e elegantes.

 No final, a escolha depende do seu objetivo: modelos simples são mais fáceis de entender, modelos mais complexos podem prever melhor.



Regressão Não Paramétrica

Regressão Não Paramétrica: Mais flexibilidade

- A Regressão Não Paramétrica não impõe uma forma específica para a relação entre as variáveis. O modelo se adapta aos dados, capturando relações complexas e não lineares.
- É como moldar uma argila para criar uma escultura. A argila se adapta à forma desejada, sem precisar seguir um molde predefinido.
- Exemplo: Prever o preço de uma casa com base em diversas características (tamanho, localização, número de quartos, etc.), sem assumir nenhuma relação específica entre elas.



Regressão Não Paramétrica

Vantagens

- Flexibilidade: Capaz de capturar relações complexas e não lineares.
- Menor Viés: Reduz o risco de "errar" na forma da relação entre as variáveis.
- Exemplo: Métodos como KNN Regressor (previsão baseada nos vizinhos mais próximos) e Árvores de Regressão (divisão dos dados em regiões) são exemplos de modelos não paramétricos.

Desafios

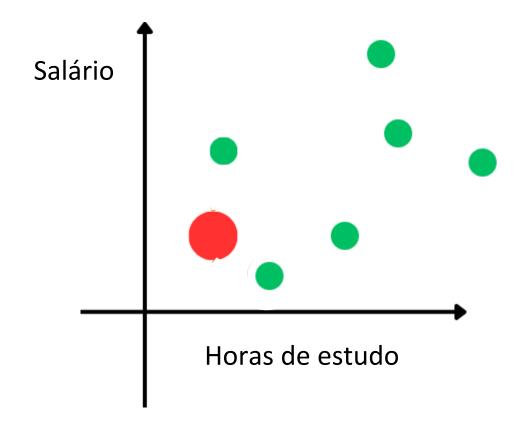
- Complexidade: Mais difícil de implementar.
- Necessidade de Dados: Requer um grande número de observações para evitar o sobreajuste (overfitting).



Quais modelos nós temos para essa abordagem?

K-Nearest Neighbors (KNN)

Observe a imagem abaixo:

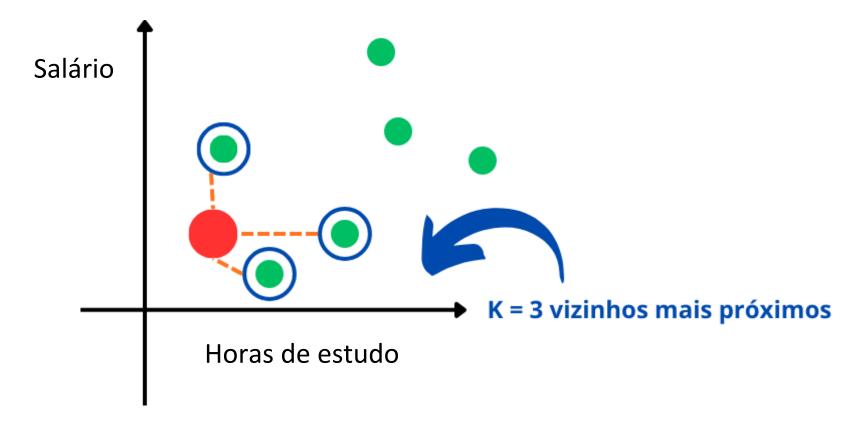




Quais são os 3 vizinhos mais próximos?

K-Nearest Neighbors (KNN)

Observe a imagem abaixo:



• Para prever o valor de um novo ponto, olhamos para os K vizinhos mais próximos e calculamos a média dos valores deles, assim o novo valor terá a média dos vizinhos mais próximos.

K-Nearest Neighbors (KNN)

O que ele faz?

- O KNN precisa encontrar as 3 pessoas (K=3) nos seus dados que são mais parecidas com essa nova pessoa. O critério é definido pela proximidade em relação às horas de estudo. No caso, você buscaria as 3 pessoas mais próximas nos seus dados históricos.
- Como queremos prever o salário, você calcularia a média dos salários médios das regiões dos 3 vizinhos. Essa média seria a sua previsão para o salário da nova pessoa.

Sobre os hiperparâmetros

 Temos vários tipos de hiperparâmetros que podemos utilizar, fique a vontade para entrar na documentação do Scikit-learn e explorá-los clicando aqui.



Regressão Não Paramétrica

Exemplos de Hiperparâmetros:

K: Número de vizinhos a serem considerados

- K pequeno: Modelo mais flexível, mas mais sensível a ruído.
- K grande: Modelo mais estável, mas pode ignorar detalhes importantes.

Métrica de Distância: Como medir a "proximidade" entre os pontos

• Ex: Distância Euclidiana, Distância de Manhattan.

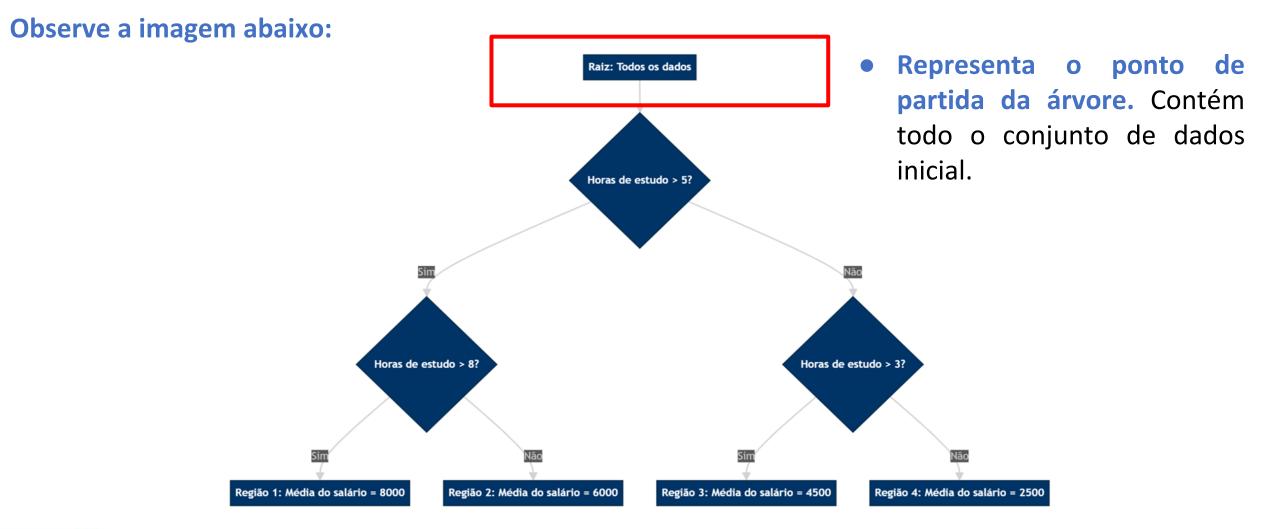
E o modelo que usamos na aula passada?



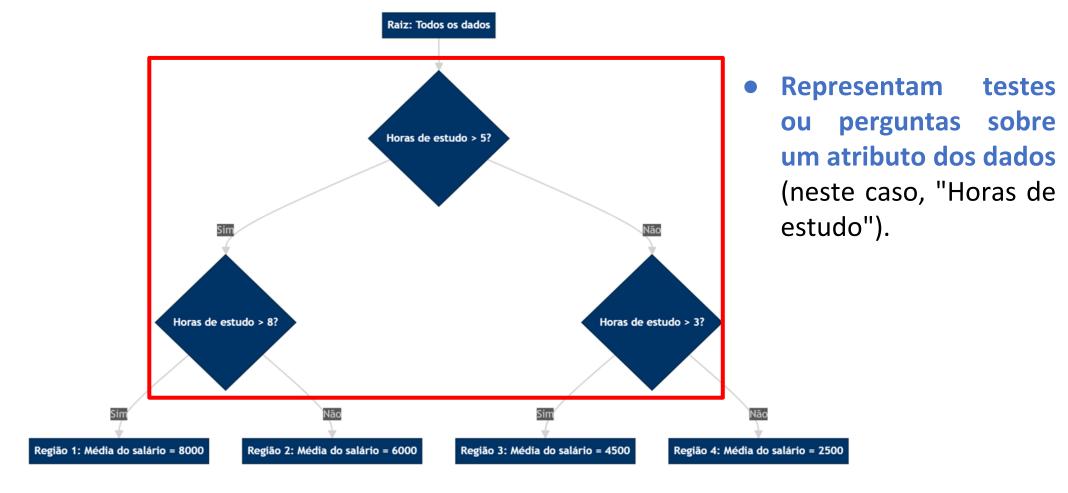
O que ela faz?

- Dividindo para Conquistar: A árvore de decisão começa com todos os dados juntos (como uma grande lista de pessoas).
- Então, ela faz perguntas para dividir essa lista em grupos menores, por exemplo: "Essa pessoa estudou mais de 5 horas por dia?".
- Perguntas Estratégicas: A árvore não faz perguntas aleatórias. Ela escolhe as perguntas que melhor separam as pessoas em grupos com salários mais parecidos.
- Por exemplo, se a pergunta sobre horas de estudo ajudar a separar pessoas com salários altos e baixos, ela será usada.

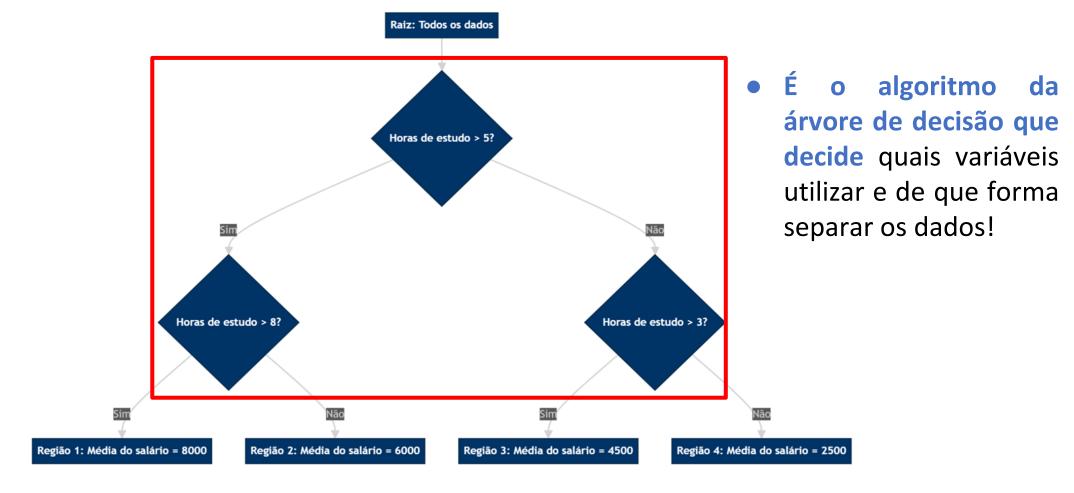




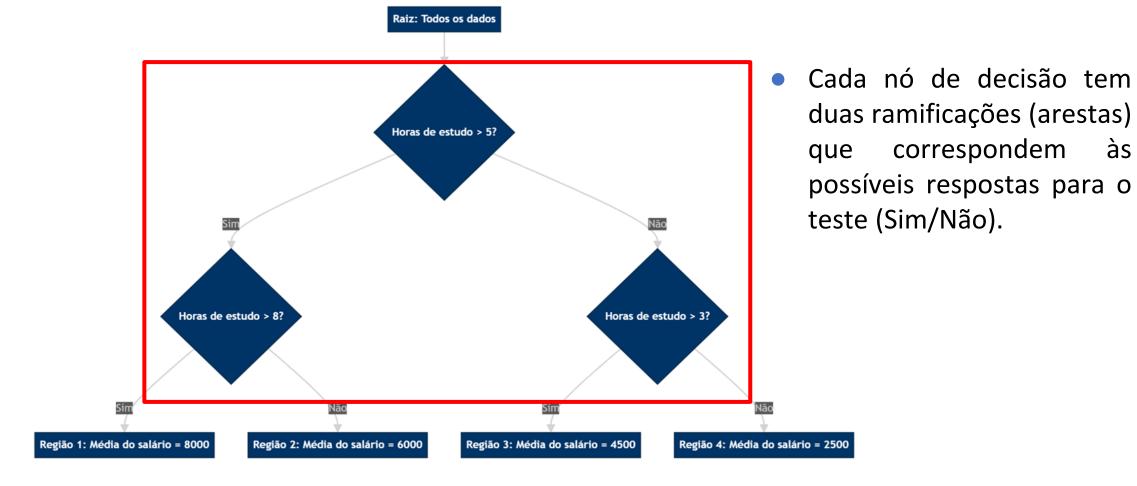




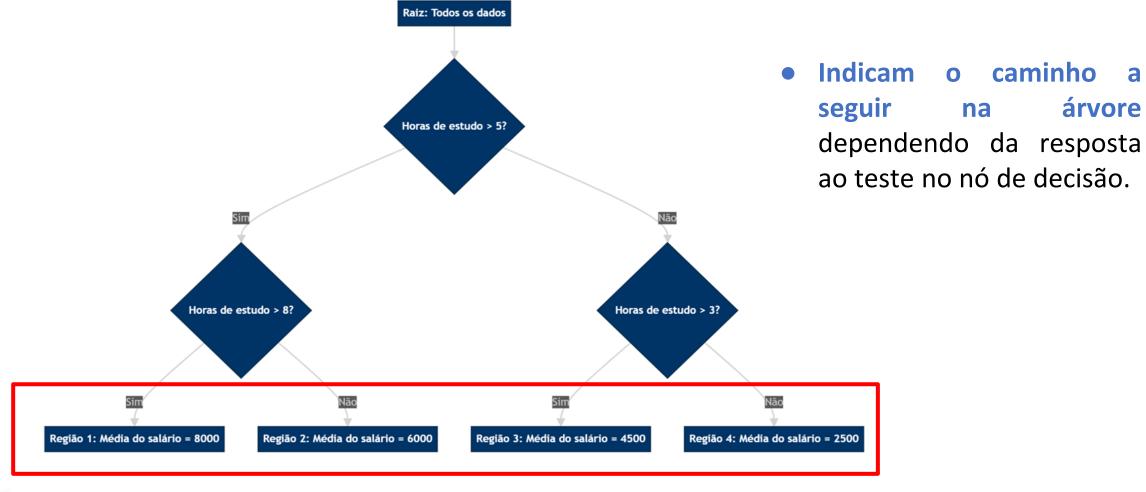




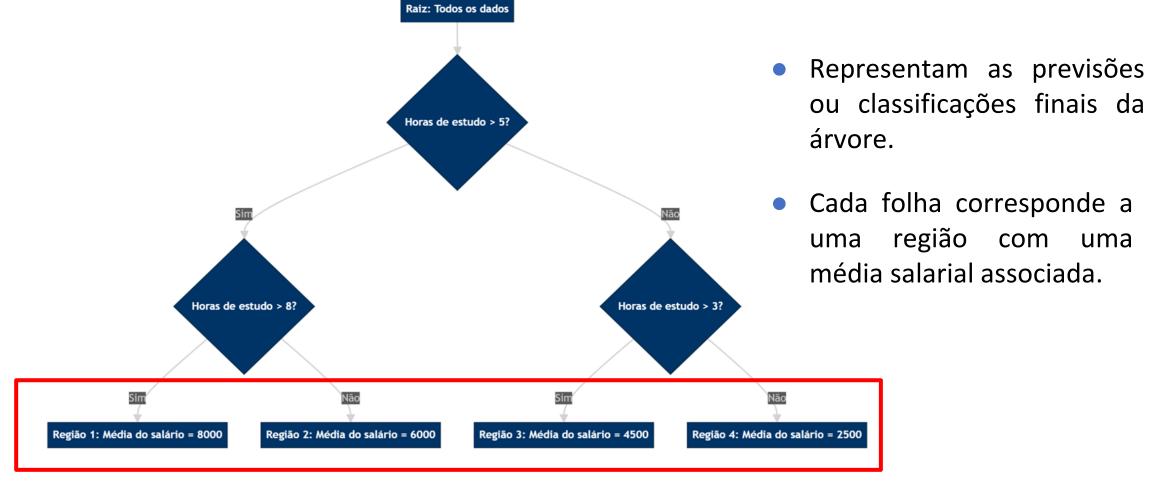














Exemplos de Hiperparâmetros:

Profundidade Máxima da Árvore: Controla a complexidade da árvore.

- Árvores mais profundas: Podem se ajustar melhor aos dados de treinamento, mas correm o risco de overfitting.
- Árvores mais rasas: São mais simples e fáceis de interpretar, mas podem ter baixo desempenho.

Número mínimo de amostras que um nó precisa ter para ser dividido.

- Número pequeno: Corre o risco de overfitting, mas pode se ajustar melhor aos dados.
- Número grande: Árvores mais simples, regiões grandes, risco de underfitting.
 - Para mais detalhes sobre hiperparâmetros, <u>clique aqui</u>.



 Vamos criar um novo script para realizar todo o passo a passo de modelagem, mas primeiro vamos carregar nossos dados.



```
[1]: import pandas as pd # manipulação de tabelas
     from sklearn.model selection import train test split, GridSearchCV # divisão treino/teste + grid search
     from sklearn.preprocessing import OneHotEncoder, StandardScaler # codificação categórica e padronização numérica
     from sklearn.impute import SimpleImputer # imputação dos dados
     from sklearn.compose import ColumnTransformer # aplicar transformações diferentes em colunas
     from sklearn.pipeline import Pipeline # encadeia pré-processamento + modelo
     from sklearn.tree import DecisionTreeRegressor # modelo baseado em várias árvores
     from sklearn.metrics import mean_squared_error, r2_score # métricas de regressão
     import numpy as np # biblioteca numérica
     from sklearn.metrics import mean_squared_error, mean_absolute_error, r2_score # métricas de avaliação do modelo
     from sklearn.neighbors import KNeighborsRegressor # modelo KNN
     # Carregando dataset
     df = pd.read_csv("aula_01_exemplo_01.csv") # lê o arquivo aula_01_exemplo_01.csv em um DataFrame
     df['tem_filhos'] = (df['children'] > 0).astype(int) # Cria uma nova coluna 'tem_filhos' que indica se a pessoa tem filhos (1) ou não (0)
                                                             # (df['children'] > 0) cria uma Series booleana (True/False)
                                                            # .astype(int) converte True para 1 e False para 0
```

 Aqui, adicionaremos os comandos para conseguir manipular o modelo de KNN e as novas métricas de avaliações que aprendemos nessa aula!



 Vamos criar um novo script para realizar todo o passo a passo de modelagem, mas primeiro vamos carregar nossos dados.



```
[1]: import pandas as pd # manipulação de tabelas
     from sklearn.model selection import train test split, GridSearchCV # divisão treino/teste + grid search
     from sklearn.preprocessing import OneHotEncoder, StandardScaler # codificação categórica e padronização numérica
     from sklearn.impute import SimpleImputer # imputação dos dados
     from sklearn.compose import ColumnTransformer # aplicar transformações diferentes em colunas
     from sklearn.pipeline import Pipeline # encadeia pré-processamento + modelo
     from sklearn.tree import DecisionTreeRegressor # modelo baseado em várias árvores
     from sklearn.metrics import mean_squared_error, r2_score # métricas de regressão
     import numpy as np # biblioteca numérica
     from sklearn.metrics import mean_squared_error, mean_absolute_error, r2_score # métricas de avaliação do modelo
     from sklearn.neighbors import KNeighborsRegressor # modelo KNN
     # Carregando dataset
     df = pd.read_csv("aula_01_exemplo_01.csv") # lê o arquivo aula_01_exemplo_01.csv em um DataFrame
     df['tem_filhos'] = (df['children'] > 0).astype(int) # Cria uma nova coluna 'tem_filhos' que indica se a pessoa tem filhos (1) ou não (0)
                                                             # (df['children'] > 0) cria uma Series booleana (True/False)
                                                            # .astype(int) converte True para 1 e False para 0
```



Agora vamos deixar claro quais são as variáveis categóricas e quais são as numéricas.

```
Código
```

```
[5]: # Definição explícita das colunas por tipo
variaveis_categoricas = ["sex", "smoker", "region"] # listas com nomes das colunas categóricas (devem bater exatamente com os nomes do DataFrame)
variaveis_numericas = ["age", "bmi", "children", "tem_filhos"] # lista das colunas numéricas que serão escalonadas
```

 Perceba que não incluímos a variável target, já que fazemos manipulações de padronizar e transformar apenas nas covariáveis.



 Novamente vamos separar nossos dados de forma que fique claro o que é nossa variável target e nossas covariáveis.



```
[2]: # Separando as covariáveis (X) e target (y)

X = df.drop("charges", # drop("charges", axis=1) remove a coluna 'charges' (axis=1 indica coluna; axis=0 seria linhas);

axis=1) # retorna um novo DataFrame sem 'charges'

y = df["charges"] # seleciona a coluna 'charges' como Series − esta é a variável alvo que queremos prever

X.head()
```



2]:		age	sex	bmi	children	smoker	region	tem_filhos
	0	19	female	27.900	0	yes	southwest	0
	1	18	male	33.770	1	no	southeast	1
	2	28	male	33.000	3	no	southeast	1
	3	33	male	22.705	0	no	northwest	0
	4	32	male	28.880	0	no	northwest	0

 Perceba que agora temos a variável X que só possui as nossas covariáveis e a variável y que possui apenas a variável target.



 Vamos dividir nossos dados em dados de treinamento e dados de teste. Usaremos o comando train_test_split().





```
número de linhas e colunas da base de treino: (1070, 7) número de linhas e colunas da base de teste: (268, 7)
```

Sempre definindo quais são nossas covariáveis e variável target.



Vamos recriar cada processo de imputação e transformação de dados.



```
escalonador = StandardScaler() # Escalonador, ele vai padronizar as variáveis numéricas

categorizador = OneHotEncoder(drop="first", # O categorizador vai Remover a primeira dummy para evitar redundância handle_unknown="ignore") # Ignora categorias desconhecidas em dados de teste

imputador_numerico = SimpleImputer(strategy="median") # imputador numérico usando mediana

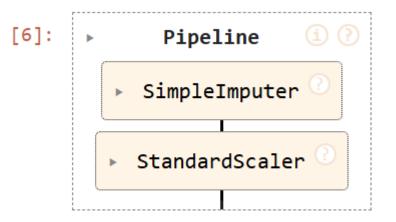
imputador_categorico = SimpleImputer(strategy="most_frequent") # imputador categórico usando a moda
```



Vamos agora recriar a criação das etapas numéricas e categóricas no python.





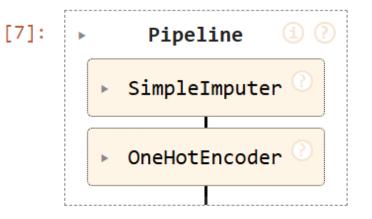


Criando a etapa numérica.

Vamos agora recriar a criação das etapas numéricas e categóricas no python.







Criando a etapa categórica.



Agora vamos juntar tudo novamente.



 O ColumnTransformer() vai servir como um processo de união entre as etapas categóricas e contínuas.



- Agora vamos criar os novos comandos para inserir os modelos que aprendemos nessa aula. Os comandos anteriores são repetições da aula passada e já foram escritos previamente, basta rodá-los préviamente.
- Vamos criar o modelos de árvore de decisão e o KNN. Começaremos pela árvore de decisão.



Criamos nosso modelo e armazenamos ele em uma variável chamada modelo.



Agora vamos criar nossa grade de hiperparâmetros.



```
[10]: # Grade de hiperparâmetros
          "max_depth": [2,3,5,7], # Profundidade máxima da árvore
          "min_samples_split": [2,5,10,15,20,25]# № mínimo de amostras para dividir um nó
```

Note que são os mesmos hiperparâmetros que vimos: "max_depth" é a profundidade máxima da árvore e o "min_samples_split" é Número mínimo de amostras que um nó precisa ter para ser dividido.



Agora vamos usar o Grid Search para encontra os melhores hiperparâmetros.

```
# Configurando Grid Search
grid_search = GridSearchCV(
estimator= modelo,  # modelo a ser otimizado
param_grid=param_grid,  # Grade de hiperparâmetros
cv=5,  # 5-fold cross-validation
scoring="neg_root_mean_squared_error" # Métrica de comparação: RMSE
)
```

 Como o RMSE tem a característica de ser interpretável, vamos seguir utilizando ele como critério para selecionar os melhores hiperparâmetros.



Agora vamos usar o Grid Search nos nossos dados de treino usando o comando .fit().

```
[12]: # Treinando com Grid Search
grid_search.fit(x_treino_transformado, y_treino) # usando as covariáveis já preprocessadas e nossa variável target
melhor_modelo_arvore = grid_search.best_estimator_ # Melhor modelo encontrado
```

Agora temos o melhor modelo para o caso da árvore de decisão.



 Por fim, vamos analisar o desempenho do modelo nos dados de treinamento com as novas métricas.



```
# Predição no treino
y_pred_treino_arvore = melhor_modelo_arvore.predict(x_treino_transformado) # covariáveis de treino

# Métricas de avaliação
mse_treino_arvore = mean_squared_error(y_treino, y_pred_treino_arvore) # Mean Squared Error
rmse_treino_arvore = np.sqrt(mse_treino_arvore) # Root Mean Squared Error
mae_treino_arvore = mean_absolute_error(y_treino, y_pred_treino_arvore) # Mean Absolute Error
r2_treino_arvore = r2_score(y_treino, y_pred_treino_arvore) # R²: proporção da variância explicada pelo modelo
mape_treino_arvore = np.mean(np.abs((y_treino - y_pred_treino_arvore) / y_treino)) * 100 # Mean Absolute Percentage Error (%)
```

O comando mean_squared_error() calcula o MSE. Já o comando np.sqrt() calcula a raiz do MSE o que consequentemente faz com que tenhamos o RMSE. O MAE é calculado pelo mean_absolute_error() e o r² pelo r2_score().



 Por fim, vamos analisar o desempenho do modelo nos dados de treinamento com as novas métricas.



```
y_pred_treino_arvore = melhor_modelo_arvore.predict(x_treino_transformado) # covariáveis de treino

# Métricas de avaliação

mse_treino_arvore = mean_squared_error(y_treino, y_pred_treino_arvore) # Mean Squared Error

rmse_treino_arvore = np.sqrt(mse_treino_arvore) # Root Mean Squared Error

mae_treino_arvore = mean_absolute_error(y_treino, y_pred_treino_arvore) # Mean Absolute Error

r2_treino_arvore = r2_score(y_treino, y_pred_treino_arvore) # R²: proporção da variância explicada pelo modelo

mape_treino_arvore = np.mean(np.abs((y_treino - y_pred_treino_arvore) / y_treino)) * 100 # Mean Absolute Percentage Error (%)
```

 como o MAPE não possui uma função própria, temos que criar do zero! primeiro começando de dentro, calculamos o valor absoluto dos valores reais com os preditos divididos pelos valores reais com o comando np.abs().



 Por fim, vamos analisar o desempenho do modelo nos dados de treinamento com as novas métricas.



```
# Predição no treino
y_pred_treino_arvore = melhor_modelo_arvore.predict(x_treino_transformado) # covariáveis de treino

# Métricas de avaliação
mse_treino_arvore = mean_squared_error(y_treino, y_pred_treino_arvore) # Mean Squared Error
rmse_treino_arvore = np.sqrt(mse_treino_arvore) # Root Mean Squared Error
mae_treino_arvore = mean_absolute_error(y_treino, y_pred_treino_arvore) # Mean Absolute Error
r2_treino_arvore = r2_score(y_treino, y_pred_treino_arvore) # R²: proporção da variância explicada pelo modelo
mape_treino_arvore = np.mean(np.abs((y_treino - y_pred_treino_arvore) / y_treino)) * 100 # Mean Absolute Percentage Error (%)
```

Agora pegamos tudo isso e utilizamos o comando np.mean() para calcular a média e
por fim multiplicamos tudo por 100.



Agora vamos mostrar as métricas calculadas.



```
# Resultados

print("Melhores parâmetros encontrados:", grid_search.best_params_)

print("R² no treino:", np.round(r2_treino_arvore, 3))

print("MSE no treino:", np.round(mse_treino_arvore, 3))

print("RMSE no treino:", np.round(rmse_treino_arvore, 3))

print("MAE no treino:", np.round(mae_treino_arvore, 3))

print("MAPE no treino (%):", np.round(mape_treino_arvore, 2))
```

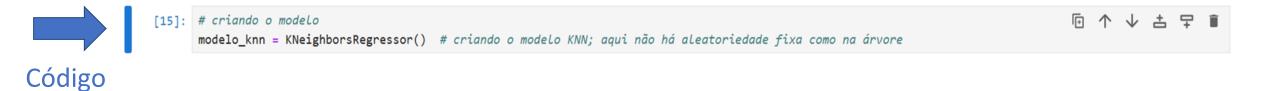


```
Melhores parâmetros encontrados: {'max_depth': 3, 'min_samples_split': 2}
R² no treino: 0.854
MSE no treino: 21120357.016
RMSE no treino: 4595.689
MAE no treino: 2785.253
MAPE no treino (%): 34.69
```



• O modelo de árvore de decisão explica cerca de 85% da variabilidade dos custos médicos nos EUA (R² = 0,854). Em média, a previsão difere do valor real em 2.785 dólares (MAE), com RMSE = 4.595 dólares e MAPE = 34,7%, indicando que o modelo captura bem as tendências gerais.

Agora vamos implementar o modelo KNN.



Note que o KNN não tem o random_state.



Agora vamos criar nossa grade de hiperparâmetros.

```
# Grade de hiperparâmetros
param_grid_knn = {
    "n_neighbors": [3, 5, 7, 9, 11], # Número de vizinhos a considerar na média para prever
    "p": [1, 2] # Tipo de distância: 1 = Manhattan, 2 = Euclidiana
}

Código
```

Perceba que são os mesmos hiperparâmetros que discutimos antes!



Agora vamos usar o Grid Search para encontra os melhores hiperparâmetros.



```
# Configurando Grid Search
grid_search_knn = GridSearchCV(
    estimator=modelo_knn,  # modelo KNN a ser otimizado
    param_grid=param_grid_knn,  # Grade de hiperparâmetros
    cv=5,  # 5-fold cross-validation: o dataset será dividido em 5 partes
    scoring="neg_root_mean_squared_error" # Métrica de comparação: RMSE (quanto menor, melhor)
)

# Treinando com Grid Search
grid_search_knn.fit(x_treino_transformado, y_treino) # usando as covariáveis já preprocessadas e nossa variável target

melhor_modelo_knn = grid_search_knn.best_estimator_ # Melhor modelo KNN encontrado
```

Vamos continuar utilizando o RMSE.



Da mesma forma que a árvore de decisão, vamos calcular as métricas.



```
# Predição no treino
y_pred_treino_knn = melhor_modelo_knn.predict(x_treino_transformado) # covariáveis de treino

# Avaliação do modelo no treino
mse_treino_knn = mean_squared_error(y_treino,y_pred_treino_knn) # Valores reais, Valores preditos

# Métricas de avaliação
mse_treino_knn = mean_squared_error(y_treino, y_pred_treino_knn) # Mean Squared Error
rmse_treino_knn = np.sqrt(mse_treino_knn) # Root Mean Squared Error
mae_treino_knn = mean_absolute_error(y_treino, y_pred_treino_knn) # Mean Absolute Error
r2_treino_knn = r2_score(y_treino, y_pred_treino_knn) # R2: proporção da variância explicada pelo modelo
mape_treino_knn = np.mean(np.abs((y_treino - y_pred_treino_knn) / y_treino)) * 100 # Mean Absolute Percentage Error (%)
```

Note que todos os passos se repetem, apenas mudando o modelo!

O código acima não retorna nada pra gente!



Agora vamos mostrar as métricas calculadas.



```
print("Melhores parâmetros encontrados:", grid_search.best_params_)
print("R² no treino:", np.round(r2_treino_knn, 3))
print("MSE no treino:", np.round(mse_treino_knn, 3))
print("RMSE no treino:", np.round(rmse_treino_knn, 3))
print("MAE no treino:", np.round(mae_treino_knn, 3))
print("MAPE no treino (%):", np.round(mape_treino_knn, 2))
```



```
Melhores parâmetros encontrados: {'n_neighbors': 3, 'p': 1}
R² no treino: 0.861
MSE no treino: 20116578.002
RMSE no treino: 4485.151
MAE no treino: 2464.023
MAPE no treino (%): 25.87
```



• O modelo KNN explica cerca de 86% da variabilidade dos custos médicos nos EUA (R² = 0,861). Em média, a previsão difere do valor real em 2.464 dólares (MAE), com RMSE = 4.485 dólares e MAPE = 25,9%, indicando que o modelo captura bem as tendências gerais, embora possa divergir em casos extremos.

 Agora vamos ver como cada modelo se comporta no teste. Começaremos com a árvore de decisão.

```
| Predição no teste | y_pred_teste_arvore = melhor_modelo_arvore.predict(x_teste_transformado) # covariáveis de teste | # Métricas de avaliação | # Mean Squared Error | # Root Mean Squared Error | # Mean Absolute Error | # Rectate_arvore | # Rectate_arvor
```

Da mesma forma que os anteriores, o que muda é a base de dados!

O código acima não retorna nada pra gente!



Vamos observar o desempenho.



```
print("Avaliação do modelo de Árvore de Decisão no teste:")
print("R²:", np.round(r2_teste_arvore, 3))
print("MSE:", np.round(mse_teste_arvore, 3))
print("RMSE:", np.round(rmse_teste_arvore, 3))
print("MAE:", np.round(mae_teste_arvore, 3))
print("MAPE (%):", np.round(mape_teste_arvore, 2))
```



Avaliação do modelo de Árvore de Decisão no teste:

R2: 0.853

MSE: 22812669.852

RMSE: 4776.261 MAE: 2865.638

MAPE (%): 37.68



o modelo de árvore de decisão apresentou R² = 0,853, indicando que cerca de 85% da variabilidade dos custos médicos nos EUA foi explicada pelo modelo. As previsões apresentam MAE de 2.866 dólares, RMSE de 4.776 dólares e MAPE de 37,7%.

Agora vamos analisar pro KNN.



Agora conseguiremos comparar o desempenho dos dois modelos.

O código acima não retorna nada pra gente!



Vamos observar o desempenho.



```
[23]: # Resultados

print("Avaliação do modelo KNN no teste:")

print("R²:", np.round(r²_teste_knn, 3))

print("MSE:", np.round(mse_teste_knn, 3))

print("RMSE:", np.round(rmse_teste_knn, 3))

print("MAE:", np.round(mae_teste_knn, 3))

print("MAPE (%):", np.round(mape_teste_knn, 2))
```



Avaliação do modelo KNN no teste:

R²: 0.708

MSE: 45388801.136

RMSE: 6737.121

MAE: 3996.595

MAPE (%): 42.63



• O modelo KNN apresentou R² = 0,708, indicando que explica cerca de 71% da variabilidade dos custos médicos nos EUA. As previsões têm MAE de 3.997 dólares, RMSE de 6.737 dólares e MAPE de 42,6%,

Vamos observar o desempenho.



```
# Resultados

print("Avaliação do modelo KNN no teste:")

print("R²:", np.round(r²_teste_knn, 3))

print("MSE:", np.round(mse_teste_knn, 3))

print("RMSE:", np.round(mse_teste_knn, 3))

print("MAE:", np.round(mae_teste_knn, 3))

print("MAPE (%):", np.round(mape_teste_knn, 2))
```



Avaliação do modelo KNN no teste:

R²: 0.708

MSE: 45388801.136

RMSE: 6737.121

MAE: 3996.595

MAPE (%): 42.63



Vamos organizar as medidas?

Considerações Finais

Modelo	Dados	R ²	MSE	RMSE	MAE	MAPE (%)
Árvore de	Treino	0,854	21.120.357	4.595	2.785	34,69
Decisão	Teste	0,853	22.812.670	4.776	2.866	37,68
KNN	Treino	0,861	20.116.578	4.485	2.464	25,87
	Teste	0,708	45.388.801	6.737	3.997	42,63

• Note que Para o KNN por mais que o RMSE, MSE, MAE, R² e MAPE sejam os menores no treino, quando testamos na base de teste, os valores das medidas aumentam invés de permanecer ou diminuir.



Considerações Finais

Modelo	Dados	R ²	MSE	RMSE	MAE	MAPE (%)
Árvore de Decisão	Treino	0,854	21.120.357	4.595	2.785	34,69
	Teste	0,853	22.812.670	4.776	2.866	37,68
KNN	Treino	0,861	20.116.578	4.485	2.464	25,87
	Teste	0,708	45.388.801	6.737	3.997	42,63

- Agora para a árvore de decisão, demos que as medidas permanecem muito próximas, o que caracteriza como um bom modelo de generalização.
- Portanto, a árvore de decisão pode ser dita como um bom modelo para nossos dados.



Próximos Passos

- Até aqui, trabalhamos com modelos supervisionados de regressão, cujo objetivo foi prever valores numéricos contínuos.
- Exploramos algoritmos como a Árvore de Decisão e o KNN, analisando seu desempenho tanto no conjunto de treino quanto no de teste. Essa etapa permitiu compreender como diferentes métodos se ajustam aos dados e como avaliamos suas previsões.
- Agora, passaremos para o aprendizado supervisionado de classificação, que se concentra em prever categorias em vez de valores numéricos. Enquanto a regressão busca estimar um número, a classificação procura atribuir um rótulo a cada observação. Esse tipo de problema é muito comum em diversas aplicações práticas



Disclaimer: propriedade intelectual

Este material foi criado pela professora Roberta Moreira Wichmann e é de sua propriedade intelectual.

É destinado exclusivamente ao uso dos alunos para fins educacionais no contexto das aulas.

Qualquer reprodução, distribuição ou utilização deste material, no todo ou em parte, sem a expressa autorização prévia da autora, é estritamente proibida.

O não cumprimento destas condições poderá resultar em medidas legais.



Referências Bibliográficas

- ➤ ABU-MOSTAFA, Yaser S.; MAGDON-ISMAIL, Malik; LIN, Hsuan-Tien. Learning from Data: A Short Course. Pasadena: California Institute of Technology (AMLBook), 2012.
- DEMÉTRIO, Clarice Garcia Borges; ZOCCHI, Sílvio Sandoval. Modelos de regressão. Piracicaba: Departamento de Ciências Exatas, ESALQ/USP, 2011. Disponível em:https://www.researchgate.net/publication/266233241_Modelos_de_Regressao. Acesso em: 23 set. 202
- Figure 1. Description of the Control of the Control
- HARRIS, C. R. et al. Array programming with NumPy. Nature, v. 585, p. 357–362, 2020. DOI: 10.1038/s41586-020-2649-2.
- HASTIE, Trevor; TIBSHIRANI, Robert; FRIEDMAN, Jerome. The elements of statistical learning: data mining, inference, and prediction. 2. ed. New York: Springer, 2009.
- KAPOOR, Sayash; NARAYANAN, Arvind. Leakage and the reproducibility crisis in machine-learning-based science. Patterns, v. 4, n. 9, 2023.

Referências Bibliográficas

- > IZBICKI, Rafael; DOS SANTOS, Tiago Mendonça. Aprendizado de máquina: uma abordagem estatística. Rafael Izbicki, 2020.
- MORETTIN, Pedro Alberto; SINGER, Júlio da Motta. Estatística e ciência de dados. 2. ed. Rio de Janeiro: LTC,
 2022.
- PEDREGOSA, F. et al. Scikit-learn: Machine Learning in Python. Journal of Machine Learning Research, v. 12, p. 2825–2830, 2011.
- > PYTHON SOFTWARE FOUNDATION. Python Language Reference. Disponível em: https://docs.python.org/3/reference/index.html. Acesso em: 10 set. 2025.
- THE PANDAS DEVELOPMENT TEAM. pandas-dev/pandas: Pandas. Zenodo, 2024. Disponível em: https://doi.org/10.5281/zenodo.10537285. Acesso em: 10 set. 2025.



Referências Bibliográficas

➤ VON LUXBURG, Ulrike; SCHÖLKOPF, Bernhard. Statistical Learning Theory: Models, Concepts, and Results. In: GABBAY, D. M.; HARTMANN, S.; WOODS, J. H. (eds.). Handbook of the History of Logic, vol. 10: Inductive Logic. Amsterdam: Elsevier North Holland, 2011. p. 651–706. DOI: 10.1016/B978-0-444-52936-7.50016-1.



Regressão no Aprendizado Supervisionado: Métodos e Avaliação

Obrigada!

Profa. Dra. Roberta Wichmann

<u>roberta.wichmann@idp.edu.br</u>



