



Alexandre Werneck Andreza

**Aprendizado em dois estágios para métodos de
comité de árvores de decisão**

Dissertação de Mestrado

Dissertação apresentada como requisito parcial para a obtenção do grau de Mestre pelo Programa de Pós-graduação em Informática da PUC-Rio.

Orientador: Prof. Marcus Vinicius Soledade Poggi de Aragão

Rio de Janeiro
Maio de 2020



Alexandre Werneck Andreza

**Aprendizado em dois estágios para métodos de
comité de árvores de decisão**

Dissertação apresentada como requisito parcial para a obtenção do grau de Mestre pelo Programa de Pós-graduação em Informática da PUC-Rio. Aprovada pela Comissão Examinadora abaixo.

Prof. Marcus Vinicius Soledade Poggi de Aragão

Orientador

Departamento de Informática – PUC-Rio

Prof. Eduardo Sany Laber

Departamento de Informática – PUC-Rio

Prof. Thibaut Victor Gaston Vidal

Departamento de Informática – PUC-Rio

Rio de Janeiro, 18 de Maio de 2020

Todos os direitos reservados. É proibida a reprodução total ou parcial do trabalho sem autorização da universidade, do autor e do orientador.

Alexandre Werneck Andreza

Graduado em Informática pela Pontifícia Universidade Católica, PUC-Rio (2016). Atualmente trabalhando no SGU, Sistema de Gerência Universitária da PUC-Rio.

Ficha Catalográfica

Andreza, Alexandre Werneck

Aprendizado em dois estágios para métodos de comitê de árvores de decisão / Alexandre Werneck Andreza; orientador: Marcus Vinicius Soledade Poggi de Aragão. – Rio de Janeiro: PUC-Rio, Departamento de Informática , 2020.

v., 115 f: il. color. ; 30 cm

Dissertação (mestrado) - Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro, Departamento de Informática .

Inclui bibliografia

1. Departamento de Informática – Teses. 2. Ciência de Dados – Teses. 3. Aprendizado de máquina;. 4. Métodos de floresta;. 5. Construção de características;. 6. Previsão otimizada. I. Poggi de Aragão, Marcus Vinicius Soledade. II. Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro. Departamento de Informática . III. Título.

Agradecimentos

Agradecimentos especiais ao meu orientador Marcus Poggi por todo o conhecimento compartilhado, pelo incentivo e paciência ao longo dessa caminhada. Igualmente, a todos do Galgos pelas experiências acadêmicas divididas.

Obrigado à equipe do SGU pelo incentivo e compreensão nos momentos em que os estudos exigiam maior dedicação. Agradeço meus gestores, Gustavo Miranda e Floriano Mazini por acreditarem nesse objetivo e aceitarem as adaptações de horários necessárias nesse período.

Aos meus familiares e a minha noiva, que sempre e irrestritamente me apoiaram.

O presente trabalho foi realizado com apoio da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior - Brasil (CAPES) - Código de Financiamento 001

Resumo

Andreza, Alexandre Werneck; Poggi de Aragão, Marcus Vinicius Soledade. **Aprendizado em dois estágios para métodos de comitê de árvores de decisão**. Rio de Janeiro, 2020. 115p. Dissertação de Mestrado – Departamento de Informática, Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro.

Tree ensemble methods são reconhecidamente métodos de sucesso em problemas de aprendizado supervisionado, bem como são comumente descritos como métodos resistentes ao *overfitting*. A proposta deste trabalho é investigar essa característica a partir de modelos que extrapolem essa resistência. Ao prever uma instância de exemplo, os métodos de conjuntos são capazes de identificar a folha onde essa instância ocorre em cada uma das árvores. Nosso método então procura identificar uma nova função sobre todas as folhas deste conjunto, minimizando uma função de perda no conjunto de treino. Uma das maneiras de definir conceitualmente essa proposta é interpretar nosso modelo como um gerador automático de *features* ou um otimizador de predição.

Palavras-chave

Aprendizado de máquina; Métodos de floresta; Construção de características; Previsão otimizada

Abstract

Andreza, Alexandre Werneck; Poggi de Aragão, Marcus Vinicius Soledade (Advisor). **Two-stage learning for tree ensemble methods**. Rio de Janeiro, 2020. 115p. Dissertação de mestrado – Departamento de Informática , Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro.

In supervised learning, tree ensemble methods have been recognized for their high level performance in a wide range of applications. Moreover, several references report such methods to present a resistance of to overfitting. This work investigates this observed resistance by proposing a method that explores it. When predicting an instance, tree ensemble methods determines the leaf of each tree where the instance falls. The prediction is then obtained by a function of these leaves, minimizing a loss function or an error estimator for the training set, overfitting in the learning phase in some sense. This method can be interpreted either as an Automated Feature Engineering or a Predictor Optimization.

Keywords

Machine Learning; Ensemble methods; Feature construction; Optimizer prediction

Sumário

1	Introdução	12
1.1	Motivação	14
1.2	Contribuições desta dissertação	16
1.3	Estrutura da dissertação	16
2	Aprendizado supervisionado	18
2.1	Classificação	19
2.1.1	Medidas para algoritmos de classificação	19
2.2	Regressão	21
2.2.1	Medidas para algoritmos de regressão	21
2.3	Árvore de Decisão (<i>Decision trees</i>)	21
2.3.1	<i>Impurity</i> em algoritmos de classificação	23
2.3.2	<i>Impurity</i> em algoritmos de regressão	23
3	<i>Ensemble methods</i> - Métodos de conjunto	24
3.1	<i>Random Forest</i>	25
3.2	<i>Gradient tree boosting</i>	27
3.2.1	XGBoost - Extreme gradient boosting	28
3.3	<i>Feature construction</i> nos métodos de conjunto	28
4	Metodologia	30
4.1	Nós folhas dos <i>tree ensemble methods</i> como <i>features</i>	30
4.2	Otimização e sobreajuste do preditor	32
5	Algoritmos	33
5.1	Valores das folha em algoritmos de classificação	33
5.2	Valores das folha em algoritmos de regressão	34
5.3	Métodos de conjunto de árvores	34
5.4	Métodos de previsão	34
6	Resultados	38
6.1	Experimentos em <i>datasets</i> artificiais	38
6.1.1	Conjunto de dados para classificação	38
6.1.2	Conjunto de dados para regressão	40
6.2	Resultados em problemas reais	41
6.2.1	<i>Datasets</i>	41
6.2.2	Experimentos nos <i>datasets</i> clássicos	44
7	Conclusões e Trabalhos Futuros	53
	Referências bibliográficas	55
A	Material complementar com configurações de 50, 100 e 500 árvores de decisão	58

B	Aspectos estruturais das árvores de decisão	71
C	Visualizações gráficas de y e $f(x)$ nos modelos	83

Lista de figuras

Figura 1.1	Representação em superfície da árvore de decisão.	15
Figura 2.1	Curva <i>ROC</i> para valores de <i>AUC</i> : 0.5, 0.75 e 1.0	20
Figura 4.1	<i>Feature induction</i> por um conjunto de árvores de decisão. Os valores 0 e 1 são aplicados às folhas das árvores de decisão.	31
Figura 6.1	Experimentos a partir de dados artificiais por funções lineares e não lineares	39
Figura 6.2	Experimentos a partir de dados artificiais em regressão	40

Lista de tabelas

Tabela 5.1	Algoritmos de classificação	36
Tabela 5.2	Algoritmos de regressão	37
Tabela 6.1	<i>Datasets</i> de classificação	42
Tabela 6.2	<i>Datasets</i> de regressão	43
Tabela 6.3	À esquerda o resultado considerando todos os algoritmos propostos. À direita o melhor algoritmo comparado com os <i>benchmarks</i> , nos <i>datasets</i> de classificação - in sample	45
Tabela 6.4	À esquerda o resultado considerando todos os algoritmos propostos. À direita o melhor algoritmo comparado com os <i>benchmarks</i> , nos <i>datasets</i> de classificação - out of sample	45
Tabela 6.5	À esquerda o resultado considerando todos os algoritmos propostos. À direita o melhor algoritmo comparado com os <i>benchmarks</i> , nos <i>datasets</i> de regressão - in sample	46
Tabela 6.6	À esquerda o resultado considerando todos os algoritmos propostos. À direita o melhor algoritmo comparado com os <i>benchmarks</i> , nos <i>datasets</i> de regressão - out of sample	46
Tabela 6.7	Resultados em <i>datasets</i> de classificação - in sample	47
Tabela 6.8	Resultados em <i>datasets</i> de classificação - out of sample	48
Tabela 6.9	Resultados em <i>datasets</i> de regressão - in sample	50
Tabela 6.10	Resultados em <i>datasets</i> de regressão - out of sample	52

Lista de Abreviaturas

2PL – Two Phase Learning
RF – Random forest
XG – XGBoost – Extreme gradient boosting
SVM – Singular vector machine
RBF – Radius basis function
SVM-R – Singular vector machine – rbf
SVM-L – Singular vector machine – linear
NN – Neural network
MSE – Mean squared error
MAE – Mean absolute error
ACC – Accuracy
ROC – Receiver operating characteristic
AUC – Area under the curve ROC
BL – Binary Leaves
EL – Estimation leaves
LV – Leaf value
PV – Path value

1

Introdução

A capacidade de inferir resultados, a partir do conhecimento existente, é uma das grandes motivações das pesquisas em aprendizado de máquina, tarefa que também pode ser entendida como *pattern recognition*, ou reconhecimento de padrões. De forma geral, os algoritmos, que resolvem essa classe de problemas, devem estimar uma função que represente este conhecimento a partir das características dos dados, ou comumente definidas como *features*.

Estes algoritmos são compostos por dois estágios fundamentais [15], a inferência do modelo, quando a partir do treinamento sobre um conjunto de dados uma função f fica definida e a fase subsequente de decisão, quando valores de estimativas são obtidos para dados desconhecidos inicialmente. Uma das abordagens utilizadas é a construção de árvores de decisão, modelo que permite reduzir a complexidade de uma decisão, em torno das *features* do problema, em um conjunto de estruturas condicionais sequenciais. O presente trabalho utiliza como referência o modelo de árvores conhecido como *CART*, definidas por Brieman [5], e portanto, todas essas condições são binárias, ou seja, a cada passo o algoritmo permite seguir apenas dois caminhos.

A combinação de métodos é uma outra abordagem, com resultados usualmente superiores às estimativas de modelos simples [2]. Esta metodologia é referenciada na literatura como *ensemble methods*. A motivação principal dessa abordagem se deve ao fato que a combinação dos modelos permite a correção de erros individuais [2].

Sendo assim, por óbvio, os *ensemble methods* podem considerar a combinação de modelos a partir de árvores de decisão, tornando-se *tree ensemble methods*, ou métodos de conjuntos de árvores. Diferentes formas de tratar essa união de modelos são definidas na literatura[15], algumas através da manipulação do conjunto de treinamento, seja pela remontagem de *features* ou pela randomização aleatória dos dados, e outras ainda adaptando os valores esperados de saída, promovendo treinamentos mais ajustados.

As florestas aleatórias, algoritmo conhecido como *Random Forest*, e as árvores impulsionadas pelo gradiente, denominada na literatura como *gradient tree boosting*, são abordagens tradicionais para a construção de modelos de conjuntos com árvores de decisão. Estes modelos, a partir de diferentes

heurísticas, promovem a combinação de múltiplas decisões a fim de melhor estimarem os dados, especialmente no conjunto de teste. Denomina-se conjunto de teste, o subconjunto formado a partir das informações originais, não utilizadas durante a construção dos modelos, destinado à avaliação de desempenho dos algoritmos.

Uma das grandes vantagens dos métodos de conjunto de árvores, citados acima, é a resistência que apresentam à alta variância, em outros termos, eles são capazes de preservar uma margem de ajuste, ou tolerância ao erro de estimativa, mesmo que novas árvores sejam construídas. Essa capacidade, definida na literatura como resistência ao *overfitting* [3] [12], é uma característica fundamental ao bom desempenho dos métodos, prevenindo que os modelos piorem a precisão, na média, quando treinados em conjuntos maiores.

Nas *random forests*, conforme definido em Brieman, 2001 [3], esse suporte é garantido por um erro de generalização que converge a uma estimativa limitada quando o número de árvores cresce, "*it follows from the Strong Law of Large Numbers*". A partir disso, entende-se que aumentar a quantidade de árvores indefinidamente em uma *random forest* não necessariamente resulta em melhoria do modelo.

Por outro lado, as *boosted trees* são limitadas por um parâmetro de regularização, aplicado igualmente a cada estimador. Esse controle pode ser interpretado como um valor de tolerância dos passos de iteração, garantindo um número mínimo de árvores e diminuindo o peso de cada correção sugerida pelas árvores de decisão.

Random Forest e *Gradient Tree Boosting* e algumas extensões estão entre as metodologias mais competitivas em desafios de aprendizado de máquina [7][16].

De forma geral, qualquer destes *tree ensemble methods*, é conceitualmente caracterizado como uma construção obtida a partir de um conjunto de *weak learners*, ou estimadores fracos, e uma estimativa final considerando uma função sobre estes resultados do conjunto. Portanto, as diferenças entre os algoritmos analisados neste trabalho, *random forest* e *gradient tree boosting*, podem ser reduzidas às fases de treinamento, ou a construção das árvores de decisão, e a função estimadora do valor esperado.

As árvores das *random forests* dispõem da possibilidade de serem construídas em paralelo, ou seja, os seus aspectos individuais não possuem correlação entre si. A premissa fundamental desse conjunto é que seja gerado, tendo como base subconjuntos randomizados e independentes. Estes subconjuntos são formados a partir dos dados de entrada do algoritmo. Ao final, espera-se uma decisão coletiva, onde cada árvore irá contribuir igualmente para a

estimativa do modelo.

A base de construção do conjunto de estimadores fracos no *gradient tree boosting* é a execução de passos incrementais, quando uma estimativa influencia diretamente na geração das próximas árvores. Uma *loss function*, a cada passo de iteração, irá redefinir os novos parâmetros em $i + 1$, penalizando os exemplos classificados incorretamente pela árvore de decisão i . Esse controle é fundamental para o desempenho apurado desse modelo, que ao destacar um erro de estimativa, permite que os passos subsequentes façam as correções necessárias.

O método proposto neste trabalho procura redefinir essas duas etapas dos *ensemble methods*, propondo uma alternativa de *feature construction* utilizando as folhas das árvores de decisão e uma nova função estimadora, aplicada ao conjunto dos *weak learners*. O método resultante pode ser interpretado como gerador automático de *features*, *Automated Feature Engineering*, ou preditor otimizado, *Predictor Optimization*.

1.1

Motivação

As folhas das árvores de decisão representam o conhecimento obtido durante a fase de treinamento. Cada folha, aqui denominada por l , contém o peso das distribuições entre as classes, dado pelos exemplos que ocorrem em l , ou a estimativa média de valores reais, definido pelas instâncias em l , nos problemas de regressão. Entretanto, algumas dessas informações podem ser ignoradas pelos estimadores no conjunto de teste, levando em consideração que instâncias podem não ocorrer em determinados nós finais e que um único exemplo ocorre apenas em um nó folha de cada árvore de decisão. Nossa intuição é que a generalização final de um *ensemble method* possa ser potencializada, considerando todas as folhas de todas as árvores de decisão ao prever uma instância.

Colaborando com essa perspectiva, em exemplos de classificação, observamos empiricamente que algumas folhas possuem distribuições não homogêneas, enquanto outras representam apenas uma classe do problema. O contorno dessa inconsistência é obtido de forma gulosa, deixando as árvores completas, contendo apenas nós finais com classes exclusivas. Contudo, essa liberdade provoca um excesso de ajuste no modelo, causando o problema de *overfitting* local.

Com isso, uma das motivações desse trabalho é investigar pesos ótimos nas folhas das árvores de decisão. Considerando uma eventual sobrecarga de dados, o modelo proposto deseja avaliar os benefícios dessa abordagem, a

classificação final. Busca-se uma função ótima que acrescentando algum grau de correção melhore as estimativas. Cabe ressaltar que, apesar dos modelos de *boost* já promoverem correções individuais, o interesse nessa abordagem fica restrito à função final de predição.

1.2

Contribuições desta dissertação

A estrutura obtida como resultado dos algoritmos de árvores de decisão, apresenta um elevado grau de simplicidade em compreensão, por isso são comumente utilizadas na representação do conhecimento em diversas áreas. Essa característica do modelo de árvores, somado a disponibilidade de serem combinados nos *ensemble methods*, tornaram essa metodologia bastante utilizada em pesquisas de aprendizado de máquina. Apesar deste amplo conhecimento e difusão, novos trabalhos, utilizando árvores de decisão, permanecem sendo elaborados, sugerindo novas oportunidades de pesquisa.

Das árvores de decisão, em especial das informações das folhas, este trabalho propõe um modelo gerador de características, na literatura de *machine learning* este gerador pode ser entendido como *feature construction*. Essas características, ou *features*, representam estes nós finais, as folhas, bem como seus respectivos pesos.

Experimentos demonstram que a utilização dessas *features* para um conjunto com poucas árvores, elevam a acurácia do modelo, tornando-o comparável com os mesmos algoritmos utilizando um número maior de árvores. Os resultados deste trabalho atestam também que a inclusão de uma função ótima como preditora, combinado às novas *features*, melhora os resultados gerais, na média dos *datasets* analisados.

1.3

Estrutura da dissertação

Este trabalho foi organizado da seguinte forma. No próximo capítulo, apresentamos uma revisão de aprendizado supervisionado, reduzida aos assuntos de interesse deste trabalho. As métricas usadas por experimentos e resultados finais são apresentadas neste capítulo. No capítulo 3, ainda apresentamos algumas revisões, desta vez sobre métodos de conjunto, ou *ensemble methods*, *random forest* e *gradient tree boosting*, além da apresentação do algoritmo *XGBoost*. Finalmente, as próximas duas seções explicarão nosso método. No capítulo 4, a metodologia é apresentada e, a seguir, no capítulo 5, um conjunto de algoritmos é definido. O capítulo 6 concentra-se em experimentos e

resultados obtidos pela metodologia proposta. O último capítulo é dedicado a conclusão a partir de discussões, ideias e trabalhos futuros.

2

Aprendizado supervisionado

O aprendizado supervisionado considera, como premissa básica, a existência de um conjunto de entradas previamente classificadas. Algoritmos especialistas devem, a partir dos pares de exemplos *input-output*, 'aprender' uma função que mapeia qualquer entrada em uma saída. Estamos interessados em uma função $f(x, y)$ que estime um valor de y , dado x .

Sendo assim, define-se o aprendizado supervisionado da seguinte forma:

Dado (X, Y) , um conjunto de exemplos de treinamento de tamanho N , formado pelos pares $\{(x_i, y_i), \dots, (x_N, y_N)\}$, em que x_i é o i_{th} exemplo e y_i é uma resposta conhecida para x_i . Um algoritmo supervisionado procura uma função $f : X \rightarrow Y$, de modo que f tenha y esperado como o valor de saída. X é o conjunto de valores de entrada dos exemplos e Y é o conjunto de valores de saída dos exemplos.

A função f é denominada, no aprendizado supervisionado, como a hipótese, ou o preditor do problema. Esta função, ao final, será um estimador que mapeia novos dados de entrada x' , desconhecidos inicialmente, em valores y' .

Soluções clássicas de *machine learning*, como as máquinas de vetores de suporte, ou svm, as regressões lineares e as árvores de decisão estão contidas neste escopo. Apesar de alguns métodos apresentarem desempenho melhor em uma grande gama de conjunto de dados, não existe uma solução única que funcione em todas as tarefas. Cada *dataset*, bem como a solução esperada, impõem abordagens diferentes, usando algum destes algoritmos ou ainda uma combinação deles.

Um dos fatores de sucesso, a ser observado, na construção de algoritmos para o aprendizado supervisionado é o controle frequente entre o baixo viés e baixa variância do modelo. Essa relação é classicamente descrita na literatura como o *trade-off: low bias x low variance*. De outra forma, a mitigação de alto viés e alta variância preservam esse controle.

O problema de alto viés, ou *high bias*, é conhecido como *underfitting*, quando um modelo estimador não representa com qualidade a correlação entre as *features* do problema e os valores de saída esperados. Modelos como

esses tendem a gerar funções pouco representativas dos dados. Por outro lado, um excesso de correlação tende a gerar modelos muito ajustados ao conjunto de treinamento, consequentemente, pouco flexíveis a novos exemplos. Esse problema é definido como alta variância, ou *high variance*, e é conhecido como *overfitting*. Dessa forma, tradicionalmente, os modelos clássicos de aprendizado supervisionado definem mecanismos de controle, especialmente para o problema de *overfitting*.

As tarefas de aprendizado supervisionado e os conjuntos de dados para experimentos são geralmente agrupados em duas classes de problema, classificação e regressão. A seguir, as especificidades de cada uma delas são apresentadas.

2.1 Classificação

Em problemas de classificação, Y é definido como um conjunto finito, restrito a um grupo de classes discretas, de tamanho K . Dessa forma, $Y = \{y_1, \dots, y_k\}$. A função, ou hipótese, que estima valores de y é chamada de classificador. Cada classificador deve ser capaz de prever um, e apenas um, resultado, dentro do conjunto de valores em Y .

As seções seguintes apresentam medidas comumente utilizadas por algoritmos de classificação. São métricas que analisam o desempenho nos conjuntos de treinamento e teste.

2.1.1 Medidas para algoritmos de classificação

Accuracy é uma medida de precisão do modelo, representa o quão próximos estão os resultados obtidos e os valores esperados. É a métrica mais utilizada na validação de desempenho dos algoritmos de classificação. A acurácia é obtida pela divisão entre a soma das classificações corretas e o número de exemplos estimados.

Considerando \hat{y} os valores estimados em f , n_{samples} o número de exemplos e y os valores esperados, temos o cálculo da *accuracy* dado por:

$$\text{accuracy}(y, \hat{y}) = \frac{1}{n_{\text{samples}}} \sum_{i=0}^{n_{\text{samples}}-1} 1(\hat{y}_i = y_i)$$

ROC Curve – Receiver Operating Characteristic Curve, ou curva ROC, é uma representação gráfica dos valores obtidos por uma hipótese, utilizada em *datasets* de classificação binária. Essa curva é a projeção da razão dos positivos verdadeiros (*True positive rate - TPR*), dada por *true positives / (true positives + false negatives)* e a razão dos falsos positivos (*False positive rate - FPR*),

dada por $\text{false positives} / (\text{false positives} + \text{true negatives})$). A curva ROC permite medir o custo/benefício de uma função estimada, já que ela fornece a visualização de erros e acertos para todas as classes do problema.

AUC - *Area under the curve ROC*, ou a área abaixo da curva ROC, é derivada da curva ROC e tenta reduzir a projeção gráfica a uma estimativa de valor entre 0 e 1. Com isso, diferentes valores de *AUC*, obtidos a partir de diferentes hipóteses, podem ser comparados. Quanto mais próximos a 1, melhores são os modelos e a sua capacidade em separar corretamente as duas classes. Por outro lado, valores próximos ou abaixo de 0.5 representam a dificuldade da hipótese em classificar os exemplos nas classes corretas.

Considerando três estimadores quaisquer com valores de *AUC* em 0.5, 0.75 e 1.0 respectivamente, as curvas *ROC* desses modelos são dadas na imagem abaixo. Um estimador capaz de separar corretamente as classes do problema tem *AUC* igual a 1 e os pontos de estimativas que ocorrem no espaço *ROC* estão na coordenada (0,1). Um modelo com essa característica classifica os dados com 100% de especificidade, sem falsos positivos, e 100% de sensibilidade, sem falsos negativos.

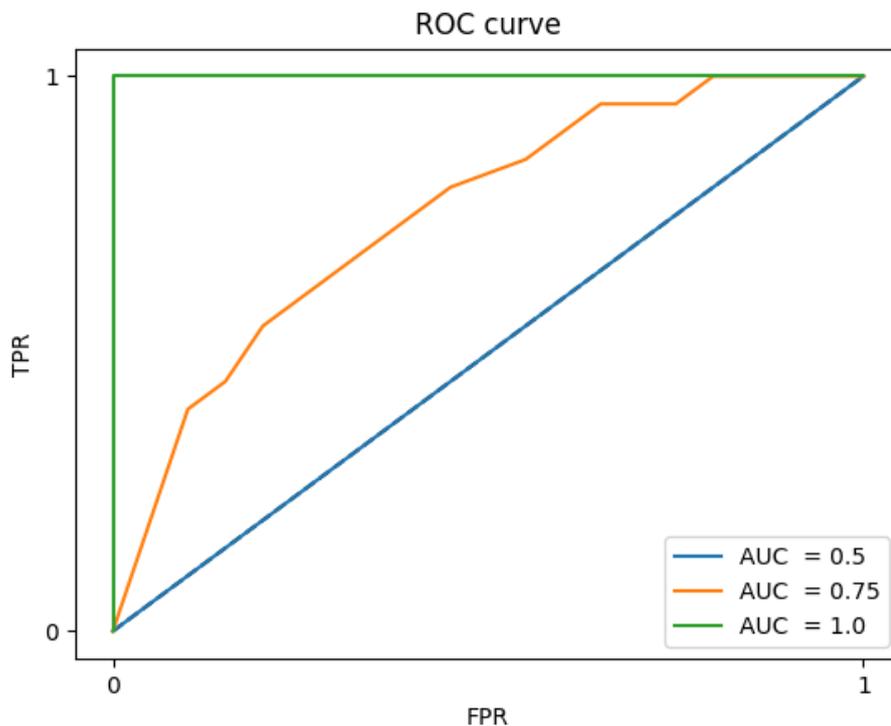


Figura 2.1: Curva *ROC* para valores de *AUC*: 0.5, 0.75 e 1.0

2.2

Regressão

O *output* de qualquer algoritmo de regressão é dado por um valor real, dessa forma, Y é um conjunto de valores não discretos. Novas métricas são apresentadas para estimarem o desempenho desses algoritmos, calculando as diferenças reais entre os valores obtidos e os valores esperados.

2.2.1

Medidas para algoritmos de regressão

As medidas comumente utilizadas para avaliar o desempenho desses algoritmos, e que fazem parte do escopo deste trabalho, são:

MAE - *Mean absolute error*, ou erro absoluto médio, é dado pela divisão da soma das diferenças absolutas entre o valor esperado e o valor obtido e o número de exemplos.

$$\text{MAE}(y, \hat{y}) = \frac{1}{n_{\text{samples}}} \sum_{i=0}^{n_{\text{samples}}-1} |y_i - \hat{y}_i|.$$

MSE - *Mean squared error*, ou erro médio quadrático, é dado pela divisão da soma das diferenças quadráticas entre o valor esperado e o valor obtido e o número de exemplos. MSE potencializa as falhas superiores à média dos erros.

$$\text{MSE}(y, \hat{y}) = \frac{1}{n_{\text{samples}}} \sum_{i=0}^{n_{\text{samples}}-1} (y_i - \hat{y}_i)^2.$$

2.3

Árvore de Decisão (*Decision trees*)

Conforme já mencionado, as árvores de decisão são uma maneira de inferir funções para os problemas de aprendizado supervisionado. De forma geral, essa abordagem consiste na divisão de uma tarefa complexa, com grande número de *features*, em pequenas soluções simples, a partir de características individuais dos dados. Qualquer algoritmo irá produzir, recursivamente, subconjuntos que apresentam as predições semelhantes, por isso, quanto maior o número de nós, maior será a especificidade desses espaços.

Toda árvore de decisão é composta por nós internos, ou nós de decisão, e nós finais, ou nós folhas, conectados por regras condicionais. Por isso, uma outra maneira de entender os algoritmos geradores de *decision trees* é considerá-los como um conjunto formado a partir de sequências de estruturas condicionais *if – then – else*. Nós finais contém as estimativas de classes para os problemas de classificação e valores reais na regressão.

Uma *decision tree* pode ainda ser representada como um grafo direcionado, dado por $G = (V, E)$. V é o conjunto de nós do grafo, ou seja, os nós de

decisão e os nós folhas e E é o conjunto de pares (v_i, v_j) que representam um caminho na árvore de decisão.

Muitos algoritmos foram propostos para o problema de construção das árvores de decisão, tendo como foco principal a procura pelos melhores *split points*, ou pontos de ruptura, que representam os nós de decisão. Cada ponto de divisão é alcançado considerando a combinação, entre uma *feature* do conjunto de dados e um valor de *threshold*, que divide os dados de forma mais homogênea. Essa abordagem pode não alcançar o ótimo global, ou seja, é possível existir uma outra árvore de decisão que melhor separe os dados. Ótimos locais não garantem a divisão ótima de todo conjunto de dados[8].

O algoritmo utilizado neste trabalho, também suportado pelas bibliotecas de apoio, é conhecido como CART, Classification and Regression Trees, e foi demonstrado em artigo de mesmo nome[5], por Brieman, 1984. A documentação da biblioteca *scikit-learn*[6] define o processo de construção das árvores no algoritmo de *CART* como:

"CART constructs binary trees using the feature and threshold that yield the largest information gain at each node."

Sendo assim, o ganho de informação, ou *information gain*, é calculado nos problemas de classificação e regressão a cada passo de iteração do algoritmo. A premissa dessa operação é que este valor precisa ser o maior entre os possíveis, *largest information gain*, ou seja, os subconjuntos gerados devem ser homogêneos ao máximo. Para exemplificar essa definição, considerando um típico problema de classificação binária, os subconjuntos serão homogêneos ao máximo quando, em cada um destes, todos os exemplos representam apenas uma classe do problema.

Cada nó, não folha, de uma árvore gerada pelo algoritmo de *CART* é composto por uma *feature*, contida nos exemplos do problema e um valor de *threshold* que permite a sua subdivisão binária. Cada um destes nós carrega uma função, *information gain*, estimada durante a fase de treinamento.

A função de ganho esperado pode ser definida como $Gain(n_x)$, onde n_x é qualquer nó, de uma árvore de decisão, candidato ao particionamento. Define-se então, n_l e n_r como subconjuntos de n_x , ou nós filhos. Um cálculo de impureza pode ser realizado em qualquer desses conjuntos e esse valor é dado por $Imp(n_i)$. A fórmula geral para obtenção do ganho de informação em n_x é dada por:

$$Gain(n) = Imp(n_x) - p_l * Imp(n_l) - p_r * Imp(n_r) \quad (2-1)$$

Da fórmula 2-1, p_l é a distribuição de exemplos no nó n_l em relação ao total de exemplos de n_x , igualmente, p_r é a distribuição de exemplos no nó n_r .

Ganhos ótimos, ou a maximização de *Gain*, devem tender à impureza do nó original, enquanto valores próximos de zero são compatíveis com subconjuntos de distribuições não homogêneas e a divisão implica em baixo ganho de informação.

O problema de encontrar o ganho máximo segue então de estimar as impurezas, dado por $Imp(n_i)$, em cada possível subconjunto a partir de n_x . As tarefas de classificação e regressão definem métodos diferentes para este cálculo, a seguir essas abordagens são definidas.

2.3.1

Impurity em algoritmos de classificação

Gini index, ou coeficiente de gini, é uma medida que representa a dispersão dos dados em função das classes do problema, por esse motivo é considerada capaz de inferir a impureza de subconjuntos. Voltando ao exemplo, considerando que Y é um conjunto de classes distintas de tamanho K , a impureza de qualquer nó $Imp(n_i)$ é igual a 1 menos a soma das probabilidades de cada classe na instância do nó n_i . Dessa formulação temos que os valores de impureza dos nós são sempre menores que 1. Valor de impureza igual a zero significa que todos os elementos de um subconjunto pertencem a apenas uma classe. Quanto mais esse valor tende a 1, menos homogêneo o subconjunto se torna.

$$Imp(n_x) = 1 - \sum_{k=1}^K p_k^2$$

Entropy é uma medida bastante semelhante à proposta do *gini index*, pois também mede a impureza de subconjuntos. A diferença básica entre os cálculos é na utilização, pela entropia, do valor do log das distribuições das classes nos subconjuntos.

$$Imp(n_x) = - \sum_{k=1}^K p_k * \log p_k$$

O algoritmo de *CART* da biblioteca scikit-learn[6], por padrão, utiliza o *gini index* no cálculo de impureza dos nós.

2.3.2

Impurity em algoritmos de regressão

A função de ganho, definida em 2-1, é igualmente compatível com a procura pelos pontos de ruptura ótimos nos algoritmos de regressão. A diferença fica restrita ao cálculo de impureza dos subconjuntos.

As medidas de erro quadrático médio, **MSE**, 2.2.1, ou o erro absoluto médio, **MAE**, 2.2.1, são as soluções utilizadas, para esse cálculo, nas tarefas em que o conjunto Y é formado por valores contínuos.

3

Ensemble methods - Métodos de conjunto

Ao definir o aprendizado supervisionado, f , a função estimadora, fica caracterizada como a melhor hipótese. Os métodos de conjunto, que utilizam uma coleção de árvores de decisão, definem f a partir de um comitê formado por n hipóteses diferentes, ótimas localmente.

Sendo assim, dado H , um conjunto das n hipóteses, caracterizadas como *weak learners*, ou estimativas fracas, na forma de $h_i(X) = Y$, a função estimadora nos *ensemble methods* fica redefinida como $f(H(X), Y)$. Cada algoritmo possui uma operação própria aplicada ao comitê para obter o valor predito.

Ensemble algorithms, como *Random Forest* e *Gradient Tree Boosting*, são formados por esses dois processos, a construção das hipóteses utilizando árvores de decisão e a função de decisão, ou comitê, aplicada ao conjunto de estimadores. Este comitê, nos algoritmos citados, tem como diferença básica a atribuição de pesos a cada estimador. Apesar desse conceito não aparecer explicitamente na definição dos métodos, ele serve a este trabalho por encapsular $f(H(X), Y)$ em um termo comum aos algoritmos. Com isso, f é dado em função do somatório de todas hipóteses multiplicadas pelo seu peso w_i .

$$f(X, Y) = w_i * h_i(x_i) + \dots + w_n * h_n(x_n)$$

Considere um típico problema de classificação binária, em que a decisão do comitê é dada pelo voto da maioria. Dessa forma, $Y = \{-1, 1\}$ e cada peso w_i é igual a $1/m$, onde m é o número de hipóteses ou o tamanho de H . A função f é então igual ao somatório das hipóteses dividido por m .

$$f(X, Y) = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m h_i(x_i)$$

Quando $f \geq 0$ para qualquer exemplo i , o valor predito é igual a 1, a maioria das hipóteses é igual a 1. Ao contrário, o valor predito é igual a -1 quando $f < 0$.

Decisões coletivas permitem uma correção estatística no modelo. Voltando ao problema da classificação binária e supondo uma hipótese ótima, construída com apenas uma árvore de decisão, que será utilizada como classificador do problema, existe um conjunto de outras árvores ótimas que foram

desconsideradas. Assume-se um risco, inerente ao problema de *machine learning*, que esta árvore apresente erros no conjunto de testes. Se adicionarmos outras árvores este erro pode ser compensado pela decisão coletiva, por isso, os *tree ensemble methods* combinando as diferentes hipóteses tendem a minimizar os erros com um número maior de árvores. Estatisticamente, métodos de conjunto reduzem a variância [9], *low variance*, através da diminuição da média dos erros, encontrados nos *m weak learners*, em relação à média dos valores esperados.

Os *ensemble methods* são capazes também de reduzir o problema de *high bias*, ou alto viés. Modelos com elevado grau de liberdade encontram o problema do *underfitting*, ou seja, diminuem a correlação entre os dados e os valores esperados Y , as estimativas dessas árvores perdem precisão. O aumento na quantidade de *decision trees*, em alguns casos, implica na criação de um espaço maior de funções capazes de representar o problema. Essa sobrecarga de hipóteses gera um ajuste no modelo de conjunto, as distâncias médias dos valores estimados aproximam-se dos valores reais.

Computacionalmente, encontrar o ponto de ruptura ótimo global em uma árvore de decisão é considerado um problema difícil, apesar dos nós internos definirem mínimos locais ótimos para apenas uma característica dos dados. Sendo assim, a melhor hipótese, como definido no problema das *decision trees*, pode não ser alcançada. Esses *local mistakes*, ou erros locais, tendem a serem corrigidos na média através do aumento na quantidade de árvores de decisão.

Este trabalho é fortemente apoiado pelos métodos de conjunto *Random Forest* e *Gradiente Tree Boosting*. A seguir, alguns conceitos destes métodos são definidos, em especial os algoritmos utilizados para construção das árvores de decisão, os parâmetros de ajustes e como a predição final é obtida.

3.1

Random Forest

Conforme modelo proposto em Brieman, 2001 [3], as florestas aleatórias são capazes de gerar boas funções de estimativa, randomizando as características para a formação de subconjuntos de treinamento com baixa correlação e formando um comitê de diferentes árvores de decisão.

O artigo de mesmo nome [3], apresenta uma revisão bibliográfica de métodos para a construção de conjuntos de treinamento das árvores de decisão. Algumas abordagens constroem conjuntos aleatórios de treino a partir de X , como o método *bagging* de Brieman, 1996, outras utilizam um número K de nós candidatos aos melhores pontos de divisão, onde K é igual ao número de estimadores desejado, Dietterich, 1998, dentre outras. Por

fim, a abordagem proposta por Amit e Geman, 1997, utilizando o conjunto de dados *written character recognition*, os autores propõem a formação de conjuntos randomizados utilizando os melhores valores de divisão em *geometric features*, ou características geométricas. Esta última, é citada como grande influenciadora no trabalho do autor.

As florestas aleatórias, de forma geral, são construídas a partir da formação de vetores independentes a cada passo k , em uma floresta de K árvores de decisão, Brieman, 2001:

"The common element in all of these procedures is that for the k^{th} tree, a random vector θ_k is generated, independent of the past random vectors $\theta_1.. \theta_{k-1}$ but with the same distribution;..."

Uma hipótese para o problema de floresta aleatória fica então definida em função de θ_i , portanto, $h_i(x_i) = h_i(\theta_{k_i}(X))$. Nas *random forests* cada árvore contribui igualmente para a estimativa final. Nos problemas de classificação, o voto da maioria é a predição do algoritmo:

"After a large number of trees is generated, they vote for the most popular class. We call these procedures random forests." Brieman, 2001

Em regressão, a predição é dada pela média das hipóteses h_i nas K árvores de decisão:

"The random forest predictor is formed by taking the average over k of the trees $h(x, \theta_k)$." Brieman, 2001

A garantia da baixa correlação, entre os subconjuntos de treinamento, é fundamental para a geração de árvores independentes e, conseqüentemente, decisivo no bom desempenho do estimador. Eventuais erros individuais são compensados por outras árvores de decisão, diminuindo o impacto de votos incorretos no comitê.

Random forest utiliza a abordagem de *CART*, apresentada por Brieman[5], na formação das árvores de decisão, bem como, é o método padrão presente na biblioteca de apoio, scikit-learn[6], empregue neste trabalho.

3.2

Gradient tree boosting

O *gradient tree boosting* pode ser visto de forma geral como passos de *boosting*, ou impulsionamento, aplicado às *weak trees*, ou árvores de decisão de hipóteses fracas, para potencializar a capacidade de predição do algoritmo. O *gradient*, ou gradiente, serve para indicar a direção desse impulso a cada passo de iteração. Em outros termos, o passo gradiente permite as correções de erros de estimativa em cada árvore de decisão. Uma pré-definição ao *gradient tree boosting* é apresentada por Freund, 1999[10].

"Kearns and Valiant [30, 31] were the first to pose the question of whether a 'weak' learning algorithm which performs just slightly better than random guessing in the PAC model can be 'boosted' into an arbitrarily accurate 'strong' learning algorithm."

Sendo assim, estamos de posse de duas premissas para qualquer modelo de *boosting*, os *weak learners* e o aprendizado por reforço. Em geral, uma hipótese fraca é considerada como uma função capaz de inferir resultados um pouco melhores que a escolha aleatória. E depois, o impulsionamento que consiste na marcação de erros do modelo, ou seja, exemplos mal treinados ficam sobreajustados no passo $i + 1$.

O problema do aprendizado por reforço é uma tarefa de otimização. Friedman, 1999[12] o define a partir de F' , uma função de X que minimiza os erros de estimativa de f , o valor do comitê dos métodos de conjunto, a partir de uma função de perda, *loss function*.

$$F'(X) = \operatorname{argmin}_{f(X)} L(Y, f(X))$$

A função de perda, $L(Y, f(X))$, utilizada por cada algoritmo depende da tarefa em investigação, em geral, problemas de regressão utilizam o erro quadrático, dado por $(Y - f(x))^2$ ou o erro absoluto, dado por $|Y - f(x)|$ e os problemas de classificação, quando classes binárias, utilizam *negative binomial log-likelihood*, dado pelo $\log(1 + e^{-2y*f(x)})$.

Em seguida, f é redefinida em função de P , onde P é um conjunto de parâmetros, $f(x; P)$. Esse ajuste, proposto por Friedman, permite encapsular as hipóteses fracas em torno de parâmetros que reduzem as perdas locais.

$$f(x; P) = \sum_{m=0}^M \beta_m f'(x; a_m)$$

Considerando M , o número de árvores do modelo, um valor de regularização β controla o excesso de ajuste a cada passo do algoritmo. Os valores de a_m são dados nas árvores de decisão pelos pontos de ruptura e pela média dos nós finais de cada árvore.

Dado p_m como o conjunto de valores dos parâmetros no passo m , o problema do algoritmo de *boosting* segue por encontrar os valores locais que minimizam L na função f' . Os pontos de mínimo são dados pelo cálculo do gradiente. Por fim, p_m é obtido pela diferença entre os valores estimados nos $m - 1$ passos e o *gradient descent* em m .

$$p_m = p_{m-1} - g_m$$

No *gradient tree boosting*, os passos incrementais permitem a correção do modelo, ao destacar os erros locais dos *weak learners*.

3.2.1

XGBoost - Extreme gradient boosting

XGBoost é uma extensão às árvores impulsionadas de Friedman[12].

O algoritmo *extreme gradient* apresenta alguns ajustes na função de regularização, "*We make minor improvements in the regularized objective, which were found helpful in practice.*", que promovem um melhor controle do ajuste excessivo. Além disso, "*we provide insights on cache access patterns, data compression and sharding to build a scalable tree boosting system.*" que garantem mais robustez do modelo em *datasets* maiores. Em geral, o *XGBoost* funciona muito bem para conjunto de dados com grande número de *features* e exemplos.

XGBoost é um algoritmo de elevada performance em muitas competições de *machine learning* [7], por isso é a escolha deste trabalho como investigação dos métodos de conjunto com árvores de decisão.

3.3

Feature construction nos métodos de conjunto

Composição de características a partir dos dados originais aparece na literatura de duas formas, a partir de métodos para redução de dimensionalidade ou utilizando heurísticas para geração de novas *features* por inferências [24].

A primeira abordagem, tradicionalmente utilizando a análise de componentes principais, ou PCA *Principal Component Analysis*, tem por motivação a eliminação de características não representativas do conjunto de dados. Além disso, a observação dos primeiros componentes permite a projeção de dados com alta dimensão em um plano representativo. A escolha por essa técnica permite ainda ganho no tempo de processamento de muitos algoritmos de aprendizado supervisionado.

A metodologia aqui proposta, por outro lado, está interessada na inferência de características por resultado do aprendizado obtido em árvores de

decisão dos métodos de conjunto. A técnica de expansão das features, pode induzir a geração de um novo espaço linearmente separável [24], facilitando encontrar uma função que melhor classifique os dados.

Os capítulos a seguir apresentam as diferentes abordagens utilizadas na construção de novas características a partir das folhas das árvores de decisão. A perspectiva é sempre por *feature induction*, aumentando o número de dimensões em relação aos dados originais.

4 Metodologia

Este trabalho promove a construção de um método de conjunto, a partir da redefinição de dois passos dos algoritmos de *tree ensemble methods*. O primeiro deles, a estrutura das árvores de decisão, especialmente através da aplicação de pesos aos nós folhas. E então, a projeção desses novos dados no problema de predição coletiva. Nossa proposta é encontrar uma nova função f , alternativa às operações finais de decisão, o voto da maioria nas *random forest* ou a soma dos estimadores individuais no *gradient tree boosting*, que melhorem a decisão global.

Considerando D , como a tupla (X, Y) , que representa o conjunto de dados em um problema de aprendizado supervisionado, ficam definidos os subconjuntos de D , S e T , as fontes de dados para as fases de treinamento e teste dos algoritmos.

Dado a tupla $D = (X, Y)$ com n exemplos, onde x_i é um vetor de dimensão d com as suas coordenadas assumindo valores categóricos, reais ou binários. Assume-se $S \subset D$, onde $S = \{x_i, y_i\}$, $i = 1, \dots, n_s$, uma amostra de D , o *dataset* de treino. Deseja-se obter uma função preditora, $h : x \rightarrow y$, do conhecimento de S , que minimize o valor esperado de uma função de perda $L(h(x), y)$, nos *out-of-sample*, ou seja, nos exemplos de teste $T \subset D$, onde $T = \{x_i, y_i\}$, $i = n_s + 1, \dots, n = n_s + n_o$.

O método proposto é constituído de duas fases de aprendizado, por isso *two phase learning*, abreviado para **2PL**. Os tópicos a seguir cobrem essas duas etapas.

4.1 Nós folhas dos *tree ensemble methods* como *features*

Ao apresentar os conceitos iniciais dos algoritmos, que utilizam um conjunto de árvores de decisão, duas condições foram introduzidas em torno dos nós folhas. Alguns nós podem não ser atingidos por nenhum exemplo do conjunto de testes e para cada exemplo de estimativa apenas uma folha é alcançada em cada árvore. O processo de construção das novas *features*, neste

trabalho, utiliza a hipótese de que a função que mapeia os valores dos nós folhas na previsão estimada, pode não se caracterizar como um preditor ótimo.

Dado \mathcal{A} , um *tree ensemble method* qualquer, que mapeia o conjunto de treinamento S para um conjunto de folhas $\ell(S)$, temos m igual ao número de árvores que \mathcal{A} gera a partir de S e l_t o número de folhas na árvore de decisão t . Dado ainda v_i , como um vetor de componentes, onde cada elemento na forma v_i^{tj} representa o valor da folha j na árvore t , temos v_i com dimensão igual ao número de folhas, $|\ell(S)| = \sum_{t=1}^m l_t$. Sendo assim, \mathcal{A} pode ser compreendido como um modelo que faz o mapeamento de qualquer instância x_i em um vetor correspondente v_i .

$$\mathcal{A} = x_i \rightarrow v_i$$

Os elementos do vetor v_i , v_i^{tj} , são mapeados como uma função de *features* x_i . Este recurso é definido como g , uma função dada por $g(i, j, t, S)$, ou ainda, $v_i^{tj} = g(i, j, t, S)$.

$$v_i^{tj} = g(i, j, t, S)$$

Portanto, dado \mathcal{X} , \mathcal{A} e S , o conjunto de dados \mathcal{V} , contendo tuplas $\{v_i, y_i\}$, $i = 1, \dots, n = n_s + n_o$ é determinado diretamente e considerado neste modelo como a primeira fase do treinamento.

\mathcal{V} corresponde aos dados em \mathcal{X} como um novo conjunto de *features*. Procura-se então, um preditor $f : v \rightarrow y$ que minimize o valor esperado de uma função de perda $L(f(v), y)$. A função f , treinada em \mathcal{V} , representa a segunda etapa do aprendizado.

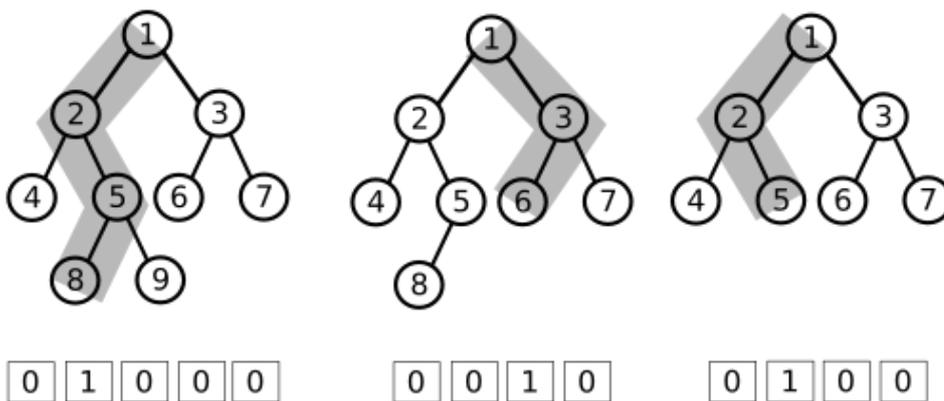


Figura 4.1: *Feature induction* por um conjunto de árvores de decisão. Os valores 0 e 1 são aplicados às folhas das árvores de decisão.

Portanto, pode-se compreender o método de conjunto de árvores, conforme definido no modelo \mathcal{A} , como um procedimento automatizado de geração

de *features*. As *features* do conjunto de dados original D , classificam uma instância i conforme uma configuração, dentre as configurações possíveis, $P_{t=1}^m l_t$, induzidas pelas m árvores de decisão fornecidas pelo método. Mesmo em conjuntos com m baixo, é garantido que para cada configuração exista pelo menos uma instância, sendo assim, um ajuste perfeito do conjunto de treinamento é possível, ou seja, o modelo pode alcançar o *overfitting*.

Esse processo de conversão dos dados, em \mathcal{A} , segue por reduzir a sensibilidade de um *ensemble method* às *features* cujo domínio de valores é muito largo, ou o intervalo entre os valores é muito grande, achatando condições a serem avaliadas a um número finito, relativamente pequeno, para determinar a configuração em que ocorre uma instância.

Essas principais características do conjunto de dados traduzido \mathcal{V} são exploradas pelo preditor.

4.2

Otimização e sobreajuste do preditor

A partir da formação de um conjunto de árvores de decisão, uma função \mathcal{F} que mapeia as instâncias v_i , para valores $\bar{y}_i = \mathcal{F}(v_i)$ de predição, pode ser estimada ou aproximada. Encontrar \mathcal{F} incorre em um problema típico de aprendizado supervisionado, por isso, qualquer algoritmo de machine learning, para tarefas supervisionadas, pode ser considerado.

Uma importante característica a ser observada é que todas as abordagens neste trabalho avaliam a resistência à alta variância induzida nos preditores, ao minimizar a função de perda nas amostras S , dadas por \mathcal{V} . Essa resistência é compreendida na literatura como a capacidade dos algoritmos em manterem boas estimativas, evitando um excesso de correlação entre os dados de entrada e os valores de saída. Por outro lado, as funções de \mathcal{F} , na metodologia proposta, precisam promover este ajuste extremo em \mathcal{V} para melhor estimarem o conjunto de teste. A avaliação utilizada para definir o excesso de ajuste é dado pela acurácia igual a 1 nos problemas de classificação e pelos erros médio e absoluto tendendo a 0 nas tarefas de regressão. De forma geral, \mathcal{F} , como um problema de otimização, deve ser o preditor ótimo no *dataset* de treino com as novas *features*.

O método *2PL* fica assim definido. Resumidamente, consiste em aplicar um conjunto de dados S , obtidos em D original, a qualquer método de conjunto de árvores \mathcal{A} , a fim de obter um novo conjunto de dados transformados \mathcal{V} . Em seguida, qualquer outro método de aprendizado supervisionado \mathcal{F} é aplicado em \mathcal{V} . O *2PL* requer as escolhas de \mathcal{A} , $g(i, j, t, S)$ e \mathcal{F} . Diferentes propostas de combinações são realizadas.

5 Algoritmos

Esta seção apresenta os algoritmos utilizados no experimento, instâncias do modelo proposto $2PL$. Primeiro, descrevemos as funções $g(i, j, t, S)$, em tarefas de classificação e regressão, usadas para calcular os valores v_i^{tj} atribuídos às folhas, ou seja, as novas *features* do conjunto de dados transformado. O experimento, considerando um amplo espectro de *datasets*, permite a coleta de uma grande quantidade de informações. A seguir, listamos os *tree ensemble methods* utilizados para construir os conjuntos de árvores, bem como os métodos de *machine learning* para obter preditores em \mathcal{V} , o conjunto de dados transformado.

5.1 Valores das folha em algoritmos de classificação

Dois funções de valor, aplicado às folhas, foram experimentadas: *Binary leaves* (**BL**), ou folhas binárias e *Estimation leaves* (**EL**), ou estimativas nas folhas. Essas funções são aplicáveis às duas possíveis características de Y , conjunto de classes binárias ou multiclasse, se diferenciando apenas em EL na maneira como a previsão na segunda fase do método proposto é executada. O valor em EL requer que a predição seja feita em cada classe, considerando o modelo um-contra-todos. A classe de maior valor, *highest estimation score*, será a estimativa considerada. A maior pontuação é considerada aqui como a maior distância entre a instância e as funções de estimativas individuais no um-contra-todos. As duas funções são assim definidas:

Binary leaves - BL Dada uma folha j de uma árvore de decisão t , uma instância i terá *feature* v_i^{tj} igual a um quando x_i satisfaz a condição do caminho que alcança j na árvore t , e zero no caso contrário.

Estimation leaves - EL Seja p^{tj} o percentual de instâncias de S que ocorrem na folha j da árvore de decisão t que pertencem à classe 1, dado $Y = \{0, 1\}$. Então, a *feature* v_i^{tj} é igual a $-1 + 2.p^{tj}$ quando x_i satisfaz a condição do caminho que alcança j na árvore t , e zero no caso contrário. Essa abordagem

funciona para problemas de classificação binária, por isso, a abordagem um-contratodos citada anteriormente.

5.2

Valores das folha em algoritmos de regressão

Nas tarefas de regressão foram testadas três funções. A primeira, igual definido em 5.1, **BL**. As outras duas são *Leaf values* (**LV**), ou valores das folhas, e *Path value* (bf **PV**), ou valor do caminho.

Leaf value - LV Essa função atribui à *feature* v_i^{tj} , quando x_i satisfaz a condição do caminho que alcança j na árvore t , o valor da média de valores y_i que ocorrem na folha j , e zero no caso contrário. Esse valor de média corresponde à predição da árvore de regressão.

Path value - PV Essa função atribui à *feature* v_i^{tj} , um valor ρ^{tj} , quando x_i satisfaz a condição do caminho que alcança j na árvore t , e zero no caso contrário. O valor de ρ^{tj} é dado pela média das médias dos valores y_i , das instâncias em S , de todos os nós da árvore de decisão que ocorrem no caminho que leva à folha j .

5.3

Métodos de conjunto de árvores

Como forma de avaliar o método *2PL* e a sua capacidade de aprimorar métodos de alto desempenho, optamos por realizar experimentos usando os algoritmos de *Random Forest*, do pacote *scikit-learn* [6], e *Gradient Tree Boosting*, do pacote *XGBoost* [7]. Ao aplicar esses dois algoritmos ao conjunto de treinamento S , o método *2PL* realiza a extração das árvores geradas e, transformando S , constrói o *dataset* \mathcal{V} a partir de uma função sobre os valores. As funções acima definidas foram experimentadas em **RF** e **XG**, exceto a função **PV** que é testada apenas para **RF** em conjuntos de dados de regressão.

5.4

Métodos de previsão

Foram definidos três métodos de previsão para avaliar se o *overfitting* nos dados transformados \mathcal{V} pode melhorar o desempenho dos métodos de conjunto de árvores, ao prever um conjunto de teste T , dado pelos exemplos fora do espaço de treinamento. Dois *kernels* do algoritmo de *support vector machine* foram testados, o modelo de função linear, aqui denominado (**SVM-L**) e o modelo não-linear RBF, aqui abreviado para (**SVM-R**), ambos do pacote

scikit-learn[6]. O outro teste utiliza o algoritmo de rede neural *perceptron*, denominado (NN), também do pacote scikit-learn.

Quando aplicados a conjuntos de dados de classificação, os preditores são usados de duas maneiras, mantendo os valores de y_i exatamente como no conjunto de dados original D e depois, adaptando y_i , no modelo um-para-todos, para 1 se a classe associada for aquela em que a pontuação precisa ser estimada e -1 no caso contrário.

A utilização de diferentes preditores funciona também para estabelecer a correlação entre modelos mais ajustados, com maior precisão no conjunto de treino, e uma redução dos erros de estimativa nos *out - of - samples*, dado por T . Todos os algoritmos deste trabalho estão resumidos nas tabelas 5.1 e 5.2, para classificação e regressão, respectivamente. A coluna ID identifica o algoritmo, \mathcal{A} especifica o método de conjunto de árvores usado, enquanto $g(i, j, t, S)$ indica as funções de valor aplicadas às folhas no conjunto de dados transformado. A quarta coluna existe apenas para os conjuntos de dados de classificação e indica se o preditor é usado diretamente (**D**) ou no modo multiclasse um-para-todos (**M**). Observe que os dois primeiros algoritmos para classificação e regressão são *Random Forest* (RF) e *XGBoost* (XG), eles servem como referência para comparação de desempenho das composições no $2PL$.

ID	\mathcal{A}	$g(i, j, t, S)$	\mathcal{F}	D/M
1	RF	-	-	-
2	XG	-	-	-
3	RF	BL	SVM-L	M
4	RF	BL	SVM-L	D
5	RF	EL	SVM-L	M
6	XG	BL	SVM-L	M
7	XG	BL	SVM-L	D
8	XG	BL	NN	D
9	XG	EL	SVM-R	M
10	RF	BL	SVM-R	M
11	RF	EL	SVM-R	M
12	XG	BL	NN	M
13	XG	BL	SVM-R	M
14	RF	BL	SVM-R	D
15	XG	BL	SVM-R	D
16	RF	EL	NN	M
17	RF	BL	NN	M
18	XG	EL	SVM-L	M
19	RF	BL	NN	D
20	XG	EL	NN	M

Tabela 5.1: Algoritmos de classificação

ID	\mathcal{A}	$g(i, j, t, S)$	\mathcal{F}
1	RF	-	-
2	XG	-	-
3	RF	PV	SVM-L
4	RF	LV	SVM-L
5	XG	BL	NN
6	RF	BL	NN
7	XG	BL	SVM-L
8	RF	PV	NN
9	RF	LV	NN
10	XG	LV	NN
11	XG	LV	SVM-L
12	RF	BL	SVM-L
13	XG	BL	SVM-R
14	XG	LV	SVM-R
15	RF	LV	SVM-R
16	RF	PV	SVM-R
17	RF	BL	SVM-R

Tabela 5.2: Algoritmos de regressão

6

Resultados

A performance de qualquer função estimadora depende de particularidades do problema para o qual ela é construída[12]. O tamanho do conjunto de dados \mathcal{N} , a real função dos dados \mathcal{F} e o espaço dos valores esperados, dado pelo número de classes, nos problemas de classificação, com a sua distribuição no conjunto de dados e pelo intervalo dos valores reais nos problemas de regressão, impossibilitam a existência de um modelo único que funcione melhor em todos os problemas. Busca-se provar, a capacidade do modelo $2PL$ em generalização na média dos experimentos com dados artificiais por funções e também em *datasets* de problemas reais. Considerando que o tamanho \mathcal{N} das amostras é previamente conhecido e o espaço de valores é possível inferir pelo conjunto Y , o problema de generalização investigado fica em torno de \mathcal{F} .

As seções a seguir apresentam os resultados e análises dos algoritmos propostos, utilizando a metodologia $2PL$, em dados artificiais, obtidos por funções geradoras de distribuições, disponíveis no pacote scikit-learn[6], e também em *datasets* clássicos para as tarefas de aprendizado supervisionado. Todos os conjuntos artificiais gerados possuem 1000 exemplos, ou seja, $\mathcal{N} = 1000$ nas tarefas de classificação e regressão.

6.1

Experimentos em *datasets* artificiais

6.1.1

Conjunto de dados para classificação

As proposições a seguir concentram-se em torno de funções \mathcal{F} capazes de gerar dados aleatórios, por funções conhecidas, lineares ou não. Todos os exemplos gerados para o problema de classificação possuem duas *features*, permitindo a sua representação no espaço de duas dimensões e são formados por classes binárias. A imagem a seguir apresenta uma matriz de nove projeções, as linhas representam cada experimento e as colunas são dadas pela distribuição dos dados, a acurácia no conjunto de treino e a acurácia no conjunto de teste. Em todos esses experimentos os conjuntos são divididos em proporções de 70% e 30%, *in-sample* e *out-of-sample* respectivamente. O primeiro conjunto

de dados representa uma distribuição linearmente separável, com outliers, seguido por duas abordagens não lineares que desafiam o modelo em amostragens cujos dados são gerados por agrupamento de *clusters*. Essas funções geradoras de amostras aleatórios seguem a abordagem da biblioteca scikit-learn[6].

Foram consideradas as configurações com 50, 100, 500 e 1000 árvores, seguindo os moldes dos resultados em *datasets* reais, que serão apresentados na próxima seção. Os algoritmos foram comparados aos modelos de *Random Forest* e *XGBoost* e apenas aquele com melhor desempenho é apresentado nos gráficos.

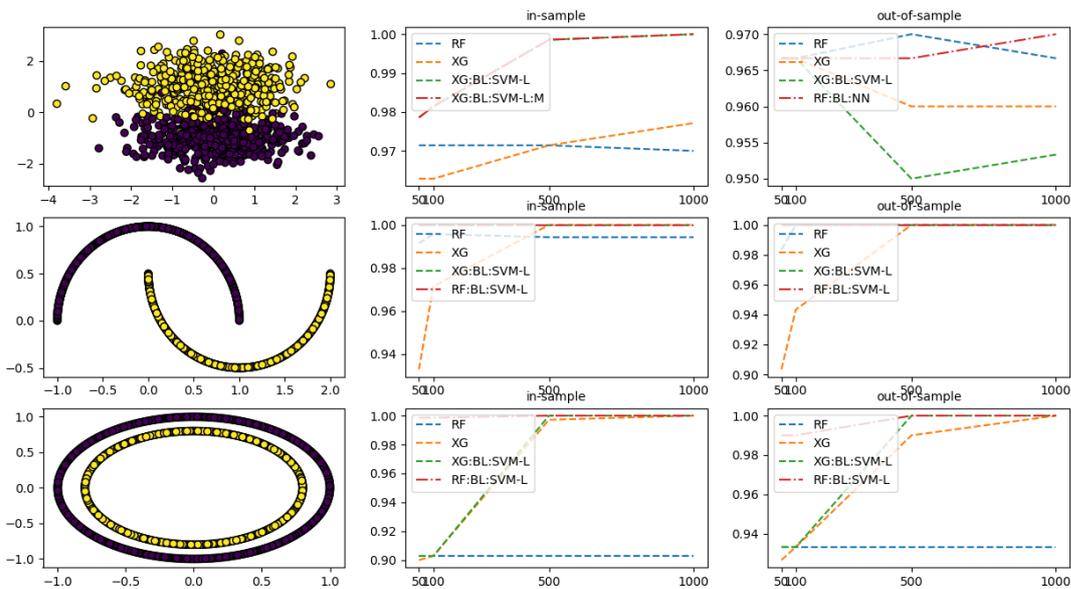


Figura 6.1: Experimentos a partir de dados artificiais por funções lineares e não lineares

O algoritmo $XG : BL : SVM - L$ é aquele que apresentou os melhores resultados para conjuntos de mil árvores nos *datasets* utilizados como referência, por isso, o mesmo algoritmo segue como um dos modelos avaliados nessa seção. Detalhes desse desempenho são demonstrados na seção de resultados.

Os gráficos demonstram aspectos importantes do desempenho do algoritmo $XG : BL : SVM - L$, destacando-se a elevada acurácia do modelo no conjunto de treino, a consolidação dessa performance no teste e ainda o número inferior de árvores necessárias, em relação aos métodos de referência, para o modelo obter as melhores estimativas. Excluindo-se os algoritmos *RF*, *XG* e $XG : BL : SVM - L$, a título de informação, o melhor desempenho dentre os outros é adicionado nos gráficos, representado pelas linhas na cor vermelha, colaborando na análise do *2PL* e suas variações.

6.1.2 Conjunto de dados para regressão

A mesma lógica seguiu para as análises em funções geradoras de *datasets* de regressão. Dessa vez, a coluna que representa a distribuição dos dados foi omitida, dado que o conjunto Y está contido em uma faixa de valores reais. Sendo assim, uma matriz de 3 linhas e 2 colunas é construída, cada linha representa um experimento a partir de uma função geradora e as colunas representam os erros quadráticos médios em treino e teste, respectivamente. A primeira função propõe a criação de um *dataset* como uma combinação linear entre as *features*, duas nos experimentos, e o conjunto Y , essa estrutura é compatível com algoritmos de regressão linear. Em seguida, uma nova função linear é definida para os valores de Y e os dados de entrada X pertencem a uma distribuição normal $X \sim N(0, 1)$. Demais features no conjunto de dados não devem ter influência nos valores de Y .

$$\mathcal{F} = x_1 + 2 * x_2 - 2 * x_3 - 1.5 * x_4$$

E por fim, uma função não linear, com ruídos, é definida em um conjunto de *features* uniformemente distribuídas no intervalo $[0, 1]$. Essa função é definida por Friedman,1991 [11] e aparece em Brieman, 1996 [4].

$$\mathcal{F} = 10 * \sin(\pi * x_1 * x_2) + 20 * (x_3 - 0.5)^2 + 10 * x_4 + 5 * x_5 + noise * N(0, 1)$$

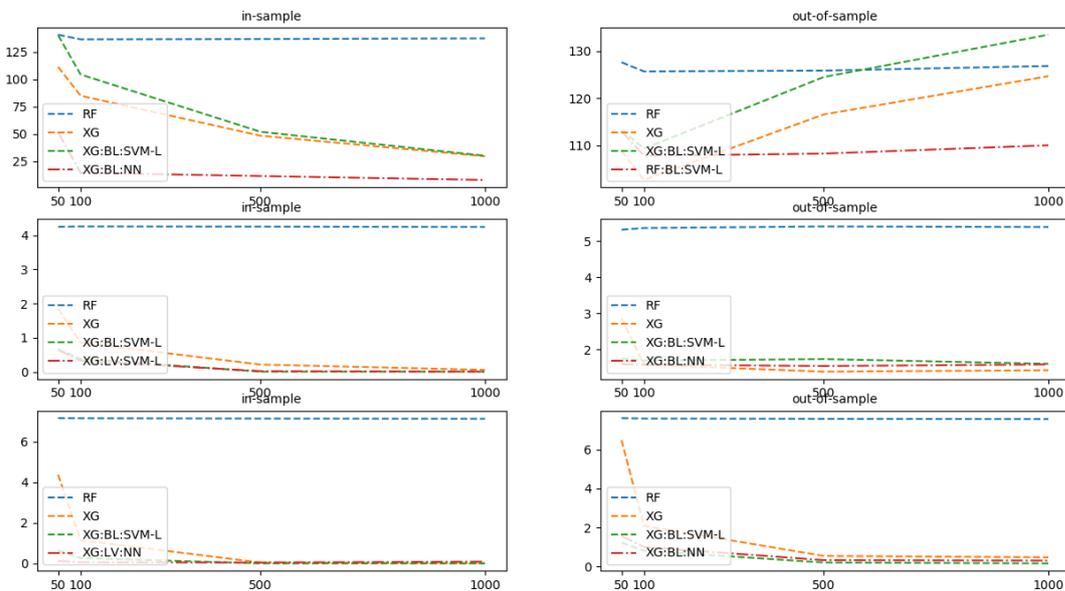


Figura 6.2: Experimentos a partir de dados artificiais em regressão

Similar aos experimentos de classificação, os resultados demonstram uma consistência na diminuição do erro quadrático médio nos *in - sample* e *out - of - sample datasets*. Da mesma forma, fica destacado a capacidade

das melhores estimativas serem alcançadas com número de árvores inferior às necessárias nos algoritmos de referência deste trabalho. O algoritmo de comparação foi o $XG : BL : SVM - L$, que demonstrou os melhores resultados nos *datasets* reais.

Mais uma vez, assim como na tarefa de classificação, um quarto algoritmo é adicionado aos gráficos, representado pela linhas na cor vermelha, indicando aquele com melhor desempenho, excluindo-se os algoritmos RF , XG e $XG : BL : SVM - L$. Essa abordagem colabora na análise do $2PL$ e suas variações.

6.2

Resultados em problemas reais

Esta seção apresenta alguns dos resultados obtidos a partir de experimentos com o modelo proposto $2PL$, em *datasets* de problemas reais. Destaca-se o bom resultado, obtido pela média, de algumas configurações, ressaltando que ajustes de parâmetros nestes modelos podem influenciar alguns resultados individuais.

6.2.1

Datasets

Todos os experimentos a seguir, incluindo os resultados do material complementar, foram baseados em 53 *datasets* de tarefas de classificação e 96 bases para tarefas de regressão. A tabela 6.1 apresenta detalhes dos conjuntos de dados de classificação. A primeira coluna é um identificador, seguida pelo nome do conjunto de dados, o número de *features* (NF) e o número de classes (NC). A próxima coluna, n_s , é o número de instâncias do conjunto de treino (*in - sample*) e a última coluna, com o rótulo n_o , é o número de instâncias de teste (*out - of - sample*). A tabela 6.2 apresenta os *datasets* de regressão e possui colunas análogas, exceto pelo número de classes, NC que não é aplicável.

Estes *datasets* foram obtidos a partir dos trabalhos de Bertsimas, 2017 [1] para classificação e um estudo de *benchmark* por Orzechowski, 2018 [18] dos algoritmos de regressão.

#	Dataset	NF	NC	n_s	n_o
1	Acute-inflammations-1	6	2	90	30
2	Acute-inflammations-2	6	2	90	30
3	Balance-scale	4	3	468	157
4	Blood-transfusion-service-center	4	2	561	187
5	Banknote-authentication	4	2	1029	343
6	Breast-cancer-wisconsin-diagnostic	30	2	426	143
7	Breast-cancer-wisconsin-prognostic	32	2	148	50
8	Breast-cancer	9	2	214	72
9	Car-evaluation	6	4	1296	432
10	Chess-king-rook-vs-king-pawn	36	2	2397	799
11	Climate-model-simulation-crashes	18	2	405	135
12	Congressional-voting-records	16	2	326	109
13	Connectionist-bench-sonar	60	2	156	52
14	Credit-approval	15	2	517	173
15	Cylinder-bands	39	2	405	135
16	Dermatology	34	6	274	92
17	Connectionist-bench	10	11	742	248
18	Contraceptive-method-choice	9	3	1104	369
19	Echocardiogram	7	3	99	33
20	Fertility	9	2	75	25
21	Haberman-survival	3	2	229	77
22	Hayes-roth	4	3	99	33
23	Heart-disease-Cleveland	13	5	227	76
24	Image-segmentation	19	7	157	53
25	Indian-liver-patient	10	2	437	146
26	Hepatitis	19	2	116	39
27	Ionosphere	34	2	263	88
28	Iris	4	3	112	38
29	Mammographic-mass	5	2	720	241
30	Monks-problems-1	6	2	93	31
31	Monks-problems-2	6	2	126	43
32	Monks-problems-3	6	2	91	31
33	Optical-recognition-handwritten-digits	64	10	2867	956
34	Ozone-level-detection-eight	72	2	1900	634
35	Ozone-level-detection-one	72	2	1902	634
36	Parkinsons	21	2	146	49
37	Planning-relax	12	2	136	46
38	Qsar-biodegradation	41	2	791	264
39	Seeds	7	3	157	53
40	Seismic-bumps	18	2	1938	646
41	Soybean-small	35	4	35	12
42	Spect-heart	22	2	60	20
43	Spectf-heart	44	2	60	20
44	Statlog-project-German-credit	20	2	750	250
45	Statlog-project-landsat-satellite	36	6	3326	1109
46	Teaching-assistant-evaluation	5	3	113	38
47	Thoracic-surgery	16	2	352	118
48	Thyroid-disease-ann-thyroid	21	3	2829	943
49	Thyroid-disease-new-thyroid	5	3	161	54
50	Spambase	57	2	3450	1151
51	Tic-tac-toe-endgame	9	2	718	240
52	Wall-following-robot-navigation-2	2	4	4092	1364
53	Wine	13	3	133	45

Tabela 6.1: *Datasets* de classificação

#	Dataset	NF	n_s	n_o
1	1027-ESL	4	366	122
2	1028-SWD	10	750	250
3	1029-LEV	4	750	250
4	1030-ERA	4	750	250
5	1089-USCrime	13	35	12
6	1096-FacultySalaries	4	37	13
7	192-vineyard	2	39	13
8	195-auto-price	15	119	40
9	207-autoPrice	15	119	40
10	210-cloud	5	81	27
11	228-elusage	2	41	14
12	229-pwLinear	10	150	50
13	230-machine-cpu	6	156	53
14	485-analcatdata-vehicle	4	36	12
15	505-tecator	124	180	60
16	519-vinnie	2	285	95
17	522-pm10	7	375	125
18	523-analcatdata-neavote	2	75	25
19	527-analcatdata-election2000	14	50	17
20	542-pollution	15	45	15
21	547-no2	7	375	125
22	556-analcatdata-apnea2	3	356	119
23	557-analcatdata-apnea1	3	356	119
24	560-bodyfat	14	189	63
25	561-cpu	7	156	53
26	579-fri-c0-250-5	5	187	63
27	581-fri-c3-500-25	25	375	125
28	582-fri-c1-500-25	25	375	125
29	583-fri-c1-1000-50	50	750	250
30	584-fri-c4-500-25	25	375	125
31	586-fri-c3-1000-25	25	750	250
32	589-fri-c2-1000-25	25	750	250
33	590-fri-c0-1000-50	50	750	250
34	591-fri-c1-100-10	10	75	25
35	592-fri-c4-1000-25	25	750	250
36	593-fri-c1-1000-10	10	750	250
37	594-fri-c2-100-5	5	75	25
38	595-fri-c0-1000-10	10	750	250
39	596-fri-c2-250-5	5	187	63
40	597-fri-c2-500-5	5	375	125
41	598-fri-c0-1000-25	25	750	250
42	599-fri-c2-1000-5	5	750	250
43	601-fri-c1-250-5	5	187	63
44	602-fri-c3-250-10	10	187	63
45	603-fri-c0-250-50	50	187	63
46	604-fri-c4-500-10	10	375	125
47	605-fri-c2-250-25	25	187	63
48	606-fri-c2-1000-10	10	750	250
49	607-fri-c4-1000-50	50	750	250

#	Dataset	NF	n_s	n_o
50	608-fri-c3-1000-10	10	750	250
51	609-fri-c0-1000-5	5	750	250
52	611-fri-c3-100-5	5	75	25
53	612-fri-c1-1000-5	5	750	250
54	613-fri-c3-250-5	5	187	63
55	615-fri-c4-250-10	10	187	63
56	616-fri-c4-500-50	50	375	125
57	617-fri-c3-500-5	5	375	125
58	618-fri-c3-1000-50	50	750	250
59	620-fri-c1-1000-25	25	750	250
60	621-fri-c0-100-10	10	75	25
61	622-fri-c2-1000-50	50	750	250
62	623-fri-c4-1000-10	10	750	250
63	624-fri-c0-100-5	5	75	25
64	626-fri-c2-500-50	50	375	125
65	627-fri-c2-500-10	10	375	125
66	628-fri-c3-1000-5	5	750	250
67	631-fri-c1-500-5	5	375	125
68	633-fri-c0-500-25	25	375	125
69	634-fri-c2-100-10	10	75	25
70	635-fri-c0-250-10	10	187	63
71	637-fri-c1-500-50	50	375	125
72	641-fri-c1-500-10	10	375	125
73	643-fri-c2-500-25	25	375	125
74	644-fri-c4-250-25	25	187	63
75	645-fri-c3-500-50	50	375	125
76	646-fri-c3-500-10	10	375	125
77	647-fri-c1-250-10	10	187	63
78	648-fri-c1-250-50	50	187	63
79	649-fri-c0-500-5	5	375	125
80	650-fri-c0-500-50	50	375	125
81	651-fri-c0-100-25	25	75	25
82	653-fri-c0-250-25	25	187	63
83	654-fri-c0-500-10	10	375	125
84	656-fri-c1-100-5	5	75	25
85	657-fri-c2-250-10	10	187	63
86	658-fri-c3-250-25	25	187	63
87	659-sleuth-ex1714	7	35	12
88	663-rabe-266	2	90	30
89	665-sleuth-case2002	6	110	37
90	666-rmftsa-ladata	10	381	127
91	678-visualizing-environmental	3	83	28
92	687-sleuth-ex1605	5	46	16
93	690-visualizing-galaxy	4	242	81
94	695-chatfield-4	12	176	59
95	706-sleuth-case1202	6	69	24
96	712-chscase-geyser1	2	166	56

Tabela 6.2: *Datasets* de regressão

6.2.2

Experimentos nos *datasets* clássicos

Os resultados obtidos seguiram uma linha de análise, assim como nos experimentos por funções de randomização dos dados, os números de estimadores, leia-se árvores, construídas na primeira fase de treinamento foram 50, 100, 500 e 1000. Os valores demonstrados nessa seção referem-se ao desempenho do *2PL* em conjuntos de 1000 árvores, os demais estão contemplados no apêndice. A utilização desse número de árvores segue pela constatação dos melhores resultados, na média, com essa configuração em Orzechowski, 2018 [18].

A tabela 6.3 apresenta o número de vezes em que os algoritmos obtém o melhor desempenho no treino para os dados de classificação. Em sequência, a tabela 6.4 representa o número de vitórias dos algoritmos no conjunto de teste para classificação. Os casos de regressão seguem pelo mesmo caminho, em 6.5 os melhores algoritmos no treinamento e 6.6 os campeões nos dados de teste.

Em seguida às tabelas de desempenho dos algoritmos quatro novas tabelas são apresentadas. As duas primeiras demonstram o desempenho dos algoritmos nos conjuntos de dados de classificação, em treino e teste, e na sequência os mesmos resultados para os *datasets* de regressão.

#	No. of winners
XG:BL:SVM-L	53
XG:BL:SVM-L:M	52
RF:BL:SVM-L	28
RF:BL:SVM-L:M	28
RF:EL:SVM-L:M	27
XG:EL:SVM-L:M	27
XG:BL:NN	18
XG:EL:NN:M	16
XG:BL:NN:M	15
XG	14
RF:BL:NN	11
XG:EL:SVM:M	10
RF:BL:NN:M	10
RF:EL:NN:M	8
RF	7
SVM-L	6
XG:BL:SVM:M	5
RF:BL:SVM	5
RF:EL:SVM:M	4
XG:BL:SVM	4
RF:BL:SVM:M	4

#	No. of winners
XG:BL:SVM-L	53
XG	14
RF	7
SVM-L	6

Tabela 6.3: À esquerda o resultado considerando todos os algoritmos propostos. À direita o melhor algoritmo comparado com os *benchmarks*, nos *datasets* de classificação - in sample

#	No. of winners
XG:BL:SVM-L	19
XG:BL:SVM-L:M	16
XG:BL:SVM	13
XG	13
RF:EL:NN:M	12
RF:BL:NN	12
RF	12
XG:BL:SVM:M	11
XG:EL:NN:M	11
RF:BL:SVM-L	11
RF:BL:SVM-L:M	11
XG:BL:NN	10
XG:BL:NN:M	10
RF:EL:SVM-L:M	9
SVM-L	9
RF:BL:NN:M	9
XG:EL:SVM:M	8
RF:BL:SVM	8
XG:EL:SVM-L:M	8
RF:BL:SVM:M	7
RF:EL:SVM:M	6

#	No. of winners
XG:BL:SVM-L	29
XG	21
RF	15
SVM-L	12

Tabela 6.4: À esquerda o resultado considerando todos os algoritmos propostos. À direita o melhor algoritmo comparado com os *benchmarks*, nos *datasets* de classificação - out of sample

#	No. of winners	#	No. of winners
XG:BL:SVM-L	47	XG:BL:SVM-L	76
XG:LV:SVM-L	31	XG	18
RF:LV:SVM-L	4	RF	2
XG:BL:NN	4	SVM-L	0
XG	3		
XG:LV:NN	3		
RF:BL:NN	2		
RF:PV:NN	1		
RF:BL:SVM-L	1		
RF:PV:SVM-L	0		
XG:BL:SVM	0		
RF:LV:NN	0		
RF:LV:SVM	0		
RF:BL:SVM	0		
RF	0		
RF:PV:SVM	0		
SVM-L	0		
XG:LV:SVM	0		

Tabela 6.5: À esquerda o resultado considerando todos os algoritmos propostos. À direita o melhor algoritmo comparado com os *benchmarks*, nos *datasets* de regressão - in sample

#	No. of winners	#	No. of winners
XG:BL:SVM-L	45	XG:BL:SVM-L	62
XG:BL:NN	16	XG	18
XG	8	RF	10
RF	7	SVM-L	6
SVM-L	6		
RF:PV:SVM-L	4		
RF:BL:NN	3		
XG:LV:NN	2		
RF:BL:SVM-L	2		
XG:LV:SVM-L	1		
RF:PV:NN	1		
RF:LV:SVM-L	1		
XG:BL:SVM	0		
RF:LV:NN	0		
RF:LV:SVM	0		
RF:BL:SVM	0		
RF:PV:SVM	0		
XG:LV:SVM	0		

Tabela 6.6: À esquerda o resultado considerando todos os algoritmos propostos. À direita o melhor algoritmo comparado com os *benchmarks*, nos *datasets* de regressão - out of sample

#	PUC-Rio - Certificação Digital N° 1621782/CA																				
	SVM-L	RF	RF:BL:SVM-L	RF:BL:SVM	RF:BL:NN	XG	XG:BL:SVM-L	XG:BL:SVM	M	RF:EL:SVM:M	RF:EL:NN:M	XG:BL:SVM-L:M	XG:BL:SVM:M	XG:BL:NN:M	XG:EL:SVM-L:M	XG:EL:SVM:M	XG:EL:NN:M				
1	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000				
2	0.989	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000				
3	0.876	0.838	0.989	0.831	0.902	0.940	1.000	0.908	1.000	0.976	0.835	0.885	0.968	0.831	0.865	1.000	0.908	0.998	1.000	0.912	0.996
4	0.781	0.786	0.911	0.781	0.800	0.836	0.938	0.781	0.809	0.911	0.781	0.802	0.895	0.781	0.802	0.938	0.781	0.811	0.895	0.832	0.843
5	0.828	0.913	0.998	0.952	0.942	0.997	1.000	0.998	0.996	0.998	0.952	0.955	0.997	0.949	0.953	1.000	0.995	0.994	0.999	0.998	0.998
6	1.000	0.972	1.000	0.962	0.953	0.995	1.000	0.984	0.991	1.000	0.962	0.948	1.000	0.962	0.948	1.000	0.984	0.993	1.000	0.995	0.995
7	0.845	0.865	1.000	0.770	0.980	0.993	1.000	0.770	1.000	1.000	0.770	0.980	1.000	0.770	0.986	1.000	0.770	1.000	1.000	1.000	1.000
8	0.780	0.841	0.949	0.762	0.869	0.897	0.986	0.762	0.879	0.949	0.762	0.860	0.939	0.879	0.813	0.986	0.762	0.883	0.949	0.766	0.883
9	0.705	0.829	0.922	0.840	0.835	0.969	1.000	0.931	0.981	0.909	0.840	0.840	0.897	0.840	0.840	1.000	0.926	0.959	0.996	0.965	0.964
10	0.938	0.941	0.940	0.941	0.940	0.976	0.998	0.970	0.966	0.940	0.941	0.941	0.941	0.941	0.941	0.998	0.970	0.972	0.987	0.980	0.977
11	0.975	0.963	1.000	0.911	0.978	0.998	1.000	0.911	0.998	1.000	0.911	0.983	1.000	0.911	0.983	1.000	0.911	0.998	1.000	0.998	0.998
12	0.945	0.975	0.997	0.975	0.975	0.979	0.997	0.975	0.975	0.997	0.975	0.975	0.997	0.975	0.975	0.997	0.975	0.975	0.988	0.979	0.979
13	1.000	0.962	1.000	0.904	1.000	1.000	1.000	0.782	1.000	1.000	0.904	1.000	1.000	0.904	1.000	1.000	0.782	1.000	1.000	1.000	1.000
14	0.859	0.913	0.975	0.880	0.901	0.956	1.000	0.892	0.928	0.975	0.880	0.897	0.971	0.928	0.878	1.000	0.892	0.957	0.985	0.956	0.954
15	0.785	0.835	1.000	0.874	0.914	0.985	1.000	0.694	0.993	1.000	0.874	0.884	0.998	0.852	0.919	1.000	0.694	0.988	0.995	0.990	0.990
16	0.985	0.964	0.993	0.974	0.974	1.000	1.000	0.923	1.000	0.993	0.974	0.974	0.993	0.971	0.974	1.000	0.989	0.993	1.000	0.996	1.000
17	0.811	0.547	0.903	0.586	0.658	1.000	1.000	0.472	0.980	0.682	0.547	0.885	0.980	0.660	0.592	1.000	0.993	0.892	1.000	0.993	0.961
18	0.554	0.574	0.667	0.578	0.579	0.650	0.958	0.584	0.606	0.667	0.598	0.574	0.637	0.598	0.588	0.949	0.604	0.597	0.890	0.636	0.605
19	0.545	0.758	1.000	0.424	0.990	0.990	1.000	0.424	1.000	1.000	0.869	0.980	1.000	0.869	0.939	1.000	0.970	1.000	1.000	0.939	1.000
20	0.867	0.907	0.987	0.867	0.987	0.907	0.987	0.867	0.987	0.987	0.867	0.987	0.987	0.867	0.973	0.987	0.867	0.907	0.973	0.867	0.907
21	0.782	0.812	0.961	0.782	0.873	0.869	0.978	0.782	0.891	0.961	0.782	0.869	0.956	0.782	0.913	0.978	0.782	0.873	0.930	0.782	0.869
22	0.626	0.818	0.909	0.808	0.899	0.909	0.909	0.384	0.909	0.909	0.818	0.909	0.909	0.818	0.899	0.909	0.879	0.909	0.909	0.909	0.909
23	0.670	0.696	1.000	0.546	0.960	0.982	1.000	0.546	1.000	1.000	0.700	0.731	1.000	0.824	0.824	1.000	0.581	0.952	1.000	0.947	0.947
24	0.987	0.860	1.000	0.834	0.975	1.000	1.000	0.554	1.000	1.000	0.898	0.917	1.000	0.898	0.898	1.000	0.987	1.000	1.000	0.975	1.000
25	0.723	0.785	0.995	0.723	0.769	0.908	1.000	0.723	0.952	0.995	0.723	0.762	0.993	0.723	0.778	1.000	0.723	0.934	0.979	0.934	0.929
26	0.871	0.940	1.000	0.810	0.940	0.974	1.000	0.810	0.966	1.000	0.810	0.940	1.000	0.810	0.940	1.000	0.810	0.966	1.000	0.810	0.974
27	0.894	0.939	0.996	0.913	0.939	0.996	1.000	0.935	1.000	0.996	0.913	0.924	0.996	0.916	0.924	1.000	0.935	1.000	1.000	0.996	0.996
28	0.991	1.000	1.000	0.982	1.000	0.991	1.000	0.964	0.991	1.000	0.982	0.982	1.000	0.973	0.982	1.000	0.964	0.991	1.000	0.991	0.991
29	0.828	0.850	0.894	0.846	0.846	0.871	0.942	0.894	0.846	0.894	0.846	0.846	0.890	0.832	0.828	0.942	0.853	0.847	0.892	0.872	0.872
30	0.742	0.935	1.000	0.839	1.000	0.978	1.000	0.688	1.000	1.000	0.839	1.000	1.000	0.882	1.000	1.000	0.688	1.000	0.989	0.957	0.978
31	0.651	0.722	1.000	0.651	0.960	0.897	1.000	0.651	0.944	1.000	0.651	0.952	1.000	0.651	0.889	1.000	0.651	0.968	0.968	0.825	0.913
32	0.835	0.934	1.000	0.934	0.967	0.945	1.000	0.868	0.934	1.000	0.934	0.956	1.000	0.934	0.967	1.000	0.934	0.978	0.945	0.945	0.945
33	0.940	0.584	0.911	0.719	0.810	0.993	1.000	0.955	0.966	0.903	0.783	0.692	0.900	0.774	0.663	1.000	0.967	0.949	1.000	0.970	0.971
34	0.947	0.942	0.995	0.934	0.960	0.986	1.000	0.934	0.971	0.995	0.934	0.951	0.993	0.934	0.934	1.000	0.934	0.967	0.999	0.991	0.987
35	0.976	0.974	0.997	0.972	0.972	0.994	1.000	0.972	0.989	0.997	0.972	0.972	0.997	0.972	0.972	1.000	0.972	0.972	1.000	0.997	0.992
36	0.959	0.966	1.000	0.884	1.000	1.000	1.000	0.747	1.000	1.000	0.884	1.000	1.000	0.911	1.000	1.000	0.747	1.000	1.000	1.000	1.000
37	0.757	0.824	1.000	0.757	0.993	0.978	1.000	0.757	0.993	1.000	0.757	0.993	1.000	0.757	0.993	1.000	0.757	0.993	1.000	0.978	1.000
38	0.877	0.861	0.986	0.876	0.872	0.956	1.000	0.895	0.905	0.986	0.876	0.869	0.976	0.875	0.858	1.000	0.895	0.906	0.989	0.952	0.956
39	0.981	0.981	1.000	0.981	0.981	1.000	1.000	0.968	0.987	1.000	0.981	0.981	1.000	0.981	0.981	1.000	0.962	1.000	1.000	0.975	1.000
40	0.929	0.929	0.972	0.929	0.929	0.941	1.000	0.929	0.929	0.972	0.929	0.929	0.970	0.929	0.929	1.000	0.929	0.929	0.998	0.953	0.955
41	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	0.600	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000
42	0.800	0.883	0.967	0.817	0.950	0.867	0.967	0.717	0.950	0.967	0.817	0.950	0.967	0.817	0.883	0.967	0.717	0.900	0.900	0.850	0.867
43	1.000	1.000	1.000	0.917	1.000	1.000	1.000	0.533	1.000	1.000	0.917	1.000	1.000	0.950	1.000	1.000	0.533	1.000	1.000	1.000	1.000
44	0.769	0.791	0.965	0.776	0.783	0.892	1.000	0.699	0.916	0.965	0.776	0.804	0.940	0.763	0.791	1.000	0.699	0.947	0.975	0.909	0.907
45	0.824	0.789	0.883	0.811	0.833	0.961	1.000	0.893	0.939	0.881	0.820	0.796	0.880	0.820	0.793	1.000	0.904	0.894	1.000	0.903	0.916
46	0.522	0.708	0.973	0.372	0.965	0.920	0.973	0.372	0.912	0.973	0.788	0.841	0.973	0.805	0.823	0.973	0.885	0.947	0.973	0.841	0.947
47	0.861	0.866	0.991	0.861	0.875	0.898	1.000	0.861	0.909	0.991	0.861	0.878	0.983	0.861	0.861	1.000	0.912	0.997	0.989	0.932	0.932
48	0.946	0.996	0.999	0.998	0.994	0.999	1.000	0.998	0.994	0.999	0.998	0.994	0.999	0.998	0.995	1.000	0.998	0.991	1.000	1.000	0.998
49	0.925	0.950	1.000	0.826	0.950	1.000	1.000	0.795	1.000	1.000	0.932	0.963	1.000	0.932	0.944	1.000	0.801	0.994	1.000	0.857	1.000
50	0.946	0.912	0.944	0.912	0.894	0.962	0.997	0.958	0.948	0.912	0.908	0.941	0.941	0.914	0.898	0.997	0.958	0.952	0.988	0.962	0.962
51	0.657	0.825	0.907	0.834	0.834	0.960	1.000	0.816	0.947	0.907	0.834	0.834	0.907	0.834	0.852	1.000	0.816	0.957	0.997	0.979	0.978
52	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000
53	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	0.992	0.992	1.000	0.992	0.992	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000

Tabela 6.7: Resultados em *datasets* de classificação - in sample

#	PUC-Rio - Certificação Digital Nº 1621782/CA																			
	SVM-L	RF	RF:BL:SVM-L	RF:BL:SVM	RF:BL:NN	XG	XG:BL:SVM-L	XG:BL:SVM	M	RF:EL:SVM:M	RF:EL:NN:M	XG:BL:SVM-L:M	XG:BL:SVM:M	XG:BL:NN:M	XG:EL:SVM-L:M	XG:EL:SVM:M	XG:EL:NN:M			
1	1.000	1.000	1.000	0.967	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	0.967	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000			
2	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000			
3	0.885	0.834	0.898	0.841	0.879	0.930	0.924	0.930	0.955	0.898	0.841	0.898	0.879	0.841	0.885	0.911	0.924			
4	0.706	0.706	0.701	0.706	0.743	0.738	0.695	0.706	0.743	0.701	0.706	0.733	0.690	0.706	0.738	0.695	0.706			
5	0.825	0.904	0.988	0.953	0.962	0.985	0.994	0.985	0.988	0.953	0.959	0.988	0.988	0.950	0.936	0.994	0.985			
6	0.958	0.958	0.958	0.958	0.958	0.965	0.979	0.965	0.944	0.958	0.958	0.944	0.958	0.951	0.944	0.979	0.965			
7	0.700	0.760	0.640	0.740	0.620	0.680	0.680	0.740	0.720	0.660	0.740	0.640	0.680	0.740	0.660	0.680	0.740			
8	0.792	0.722	0.708	0.764	0.736	0.708	0.694	0.764	0.722	0.708	0.764	0.722	0.750	0.764	0.736	0.694	0.708			
9	0.685	0.794	0.903	0.808	0.815	0.944	0.991	0.926	0.968	0.887	0.808	0.808	0.870	0.808	0.808	0.986	0.898			
10	0.939	0.940	0.944	0.940	0.949	0.972	0.991	0.970	0.962	0.944	0.940	0.940	0.940	0.940	0.940	0.991	0.970			
11	0.970	0.941	0.956	0.926	0.941	0.948	0.948	0.926	0.956	0.926	0.941	0.956	0.926	0.933	0.948	0.926	0.956			
12	0.945	0.963	0.963	0.963	0.963	0.972	0.917	0.963	0.963	0.963	0.963	0.963	0.963	0.963	0.917	0.963	0.972			
13	0.865	0.788	0.885	0.788	0.846	0.923	0.942	0.835	0.904	0.885	0.788	0.846	0.885	0.788	0.865	0.942	0.635			
14	0.867	0.850	0.827	0.867	0.844	0.832	0.809	0.867	0.873	0.827	0.867	0.844	0.832	0.855	0.867	0.873	0.815			
15	0.778	0.763	0.785	0.763	0.785	0.815	0.822	0.689	0.844	0.785	0.763	0.756	0.785	0.770	0.756	0.822	0.689			
16	0.978	0.913	0.935	0.913	0.913	0.978	0.957	0.891	0.946	0.924	0.924	0.924	0.924	0.913	0.978	0.935	0.946			
17	0.706	0.536	0.694	0.560	0.593	0.875	0.964	0.359	0.883	0.669	0.581	0.528	0.665	0.548	0.907	0.907	0.923			
18	0.526	0.509	0.539	0.526	0.547	0.556	0.458	0.512	0.566	0.537	0.537	0.534	0.542	0.539	0.550	0.477	0.520			
19	0.333	0.333	0.394	0.485	0.364	0.303	0.333	0.485	0.455	0.455	0.394	0.303	0.455	0.394	0.364	0.364	0.394			
20	0.920	0.960	0.960	0.920	0.920	0.960	0.880	0.920	0.960	0.960	0.920	0.920	0.960	0.920	0.920	0.880	0.920			
21	0.597	0.636	0.597	0.597	0.623	0.649	0.649	0.597	0.623	0.597	0.597	0.623	0.623	0.597	0.623	0.649	0.597			
22	0.576	0.727	0.818	0.667	0.818	0.758	0.788	0.394	0.818	0.818	0.727	0.788	0.818	0.818	0.758	0.758	0.758			
23	0.526	0.618	0.553	0.526	0.526	0.539	0.526	0.526	0.526	0.526	0.579	0.605	0.526	0.526	0.526	0.539	0.500			
24	0.830	0.736	0.943	0.660	0.849	0.868	0.906	0.453	0.830	0.887	0.736	0.792	0.906	0.736	0.774	0.887	0.849			
25	0.685	0.685	0.671	0.685	0.692	0.692	0.692	0.685	0.678	0.671	0.685	0.678	0.664	0.685	0.692	0.685	0.658			
26	0.846	0.769	0.718	0.744	0.795	0.872	0.821	0.744	0.846	0.718	0.744	0.795	0.744	0.821	0.821	0.744	0.769			
27	0.784	0.920	0.932	0.920	0.943	0.977	0.977	0.920	0.977	0.932	0.920	0.920	0.932	0.920	0.920	0.977	0.920			
28	0.974	0.974	0.974	0.974	0.974	0.974	0.921	0.974	0.974	0.974	0.974	0.974	0.974	0.974	0.974	0.974	0.974			
29	0.793	0.830	0.784	0.813	0.826	0.826	0.759	0.830	0.813	0.784	0.826	0.788	0.813	0.788	0.830	0.809	0.830			
30	0.677	0.903	1.000	0.806	1.000	0.774	1.000	0.645	0.871	1.000	0.806	1.000	1.000	0.806	1.000	1.000	0.645			
31	0.535	0.605	0.814	0.535	0.721	0.628	0.791	0.535	0.721	0.814	0.535	0.674	0.791	0.535	0.744	0.791	0.535			
32	0.903	0.935	0.935	0.935	0.968	0.935	0.935	0.935	0.935	0.935	0.935	0.935	0.935	0.935	0.968	0.935	0.903			
33	0.806	0.564	0.861	0.681	0.788	0.957	0.974	0.945	0.954	0.867	0.752	0.664	0.859	0.735	0.618	0.972	0.951			
34	0.943	0.943	0.926	0.945	0.945	0.940	0.935	0.945	0.938	0.926	0.945	0.943	0.927	0.945	0.945	0.935	0.945			
35	0.970	0.970	0.957	0.970	0.970	0.967	0.964	0.970	0.959	0.957	0.970	0.970	0.970	0.956	0.964	0.970	0.956			
36	0.857	0.918	0.939	0.939	0.939	0.939	0.959	0.776	0.918	0.939	0.939	0.939	0.939	0.939	0.939	0.959	0.776			
37	0.587	0.565	0.630	0.587	0.696	0.630	0.565	0.587	0.587	0.630	0.630	0.630	0.630	0.587	0.630	0.565	0.587			
38	0.845	0.841	0.867	0.864	0.852	0.890	0.875	0.898	0.845	0.867	0.864	0.830	0.871	0.856	0.822	0.875	0.898			
39	0.943	0.943	0.962	0.943	0.962	0.962	0.962	0.962	0.962	0.962	0.925	0.962	0.962	0.925	0.962	0.962	0.962			
40	0.950	0.950	0.924	0.950	0.950	0.952	0.920	0.950	0.950	0.924	0.950	0.950	0.927	0.950	0.950	0.920	0.950			
41	1.000	0.917	0.917	0.917	0.917	0.917	0.917	0.500	0.917	0.917	0.917	0.917	0.917	0.917	0.917	0.917	0.917			
42	0.850	0.600	0.450	0.500	0.450	0.750	0.600	0.500	0.650	0.450	0.500	0.500	0.450	0.500	0.750	0.600	0.500			
43	0.850	0.950	0.900	0.600	0.950	0.850	0.850	0.400	0.900	0.900	0.600	0.950	0.900	0.700	0.950	0.850	0.900			
44	0.736	0.728	0.728	0.728	0.740	0.768	0.720	0.704	0.760	0.728	0.740	0.720	0.740	0.720	0.740	0.752	0.704			
45	0.794	0.807	0.852	0.826	0.838	0.904	0.913	0.878	0.904	0.857	0.829	0.813	0.857	0.834	0.813	0.912	0.881			
46	0.289	0.368	0.553	0.184	0.553	0.474	0.500	0.184	0.447	0.579	0.421	0.447	0.526	0.421	0.421	0.553	0.447			
47	0.822	0.822	0.831	0.822	0.805	0.822	0.831	0.822	0.814	0.831	0.822	0.805	0.822	0.822	0.831	0.822	0.831			
48	0.943	0.995	0.997	0.997	0.992	0.995	0.997	0.995	0.990	0.997	0.997	0.992	0.997	0.997	0.993	0.997	0.995			
49	0.926	0.981	0.944	0.870	0.963	0.981	0.981	0.796	0.981	0.944	0.963	0.944	0.944	0.963	0.963	0.981	0.852			
50	0.920	0.899	0.913	0.901	0.879	0.934	0.935	0.936	0.924	0.901	0.913	0.901	0.894	0.916	0.893	0.936	0.916			
51	0.642	0.796	0.896	0.812	0.812	0.908	1.000	0.762	0.875	0.896	0.812	0.812	0.896	0.812	0.833	1.000	0.762			
52	0.999	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000			
53	0.844	0.978	0.978	0.978	0.978	0.956	0.956	0.978	0.956	0.978	0.978	0.978	0.978	0.956	0.978	0.956	0.956			

Tabela 6.8: Resultados em *datasets* de classificação - out of sample

PUC-Rio - Certificação Digital Nº 1621782/CA

#	SVM-L	RF	RF:BL:SVM-L	RF:BL:SVM	RF:BL:NN	RF:LV:SVM-L	RF:LV:SVM	RF:LV:NN	RF:PV:SVM-L	RF:PV:SVM	RF:PV:NN	XG	XG:BL:SVM-L	XG:BL:SVM	XG:BL:NN	XG:LV:SVM-L	XG:LV:SVM	XG:LV:NN
1	0.290	0.436	0.209	0.466	0.311	0.199	0.459	0.205	0.198	0.463	0.189	0.186	0.149	0.524	0.266	0.145	0.391	0.163
2	0.395	0.385	0.341	0.378	0.372	0.344	0.378	0.361	0.343	0.379	0.359	0.314	0.336	0.349	0.311	0.336	0.335	0.329
3	0.402	0.484	0.397	0.438	0.452	0.401	0.439	0.403	0.401	0.435	0.424	0.357	0.392	0.403	0.364	0.392	0.377	0.367
4	3.911	2.602	2.403	2.554	2.331	2.399	2.494	2.261	2.398	2.538	2.246	2.209	2.381	2.640	2.225	2.388	2.320	2.208
5	262.495	72.838	0.010	1.75e+03	4.706	0.010	1.75e+03	38.648	0.010	1.75e+03	40.878	3.024	0.010	1.76e+03	0.028	0.010	1.76e+03	674.204
6	4.691	1.446	0.009	17.436	0.081	0.009	17.389	0.862	0.009	17.420	1.956	0.431	0.009	17.218	0.030	0.009	17.177	6.270
7	10.216	3.810	1.612	23.544	0.833	1.295	23.134	1.657	1.313	23.393	1.749	1.694	0.964	24.397	0.852	1.079	23.913	1.423
8	1.34e+07	2.66e+06	2.40e+07	3.92e+07	3.99e+06	1.11e+05	3.92e+07	7.92e+05	1.09e+05	3.92e+07	2.13e+05	3.57e+05	2.60e+07	3.92e+07	3.44e+07	3.50e+04	3.92e+07	1.10e+07
9	1.34e+07	2.66e+06	2.40e+07	3.92e+07	3.44e+07	1.11e+05	3.92e+07	6.06e+05	1.09e+05	3.92e+07	1.39e+06	3.59e+05	2.60e+07	3.92e+07	3.44e+07	3.50e+04	3.92e+07	3.57e+07
10	0.357	0.076	0.009	0.731	0.034	0.009	0.545	0.047	0.008	0.623	0.037	0.009	0.733	0.012	0.006	0.438	0.032	
11	128.920	52.153	22.544	526.355	16.874	21.574	525.737	28.335	21.067	526.114	24.561	30.800	24.076	530.152	16.814	26.294	525.256	40.858
12	6.739	3.471	1.733	12.532	1.979	1.631	13.030	1.118	1.641	12.532	1.159	0.622	0.010	16.931	0.017	0.011	16.637	0.062
13	3.08e+04	6.06e+03	1.26e+04	3.39e+04	330.349	120.130	3.39e+04	1.01e+04	123.767	3.39e+04	6.00e+03	661.809	1.27e+04	3.41e+04	229.942	88.935	3.39e+04	1.42e+04
14	8.73e+04	8.63e+03	1.24e+04	8.76e+04	2.92e+03	239.584	8.75e+04	3.33e+03	247.307	8.75e+04	3.76e+03	1.52e+03	1.95e+04	8.77e+04	53.625	0.010	8.75e+04	2.91e+03
15	7.840	5.311	0.705	181.837	0.371	0.458	157.847	0.760	0.451	162.006	0.837	0.098	0.009	206.756	0.025	0.009	165.875	0.085
16	8.734	2.393	2.175	4.254	2.394	2.166	3.818	2.122	2.166	3.999	2.109	2.060	1.942	5.313	1.998	1.938	3.880	1.833
17	0.623	0.497	0.015	0.467	0.361	0.009	0.461	0.190	0.009	0.466	0.150	0.008	0.008	0.456	0.107	0.008	0.210	0.057
18	1.106	0.907	0.778	3.460	0.764	0.778	2.687	0.763	0.778	2.739	0.762	0.760	0.778	3.104	0.803	0.778	2.357	0.760
19	8.52e+09	1.07e+09	8.45e+09	8.50e+09	2.39e+09	0.010	8.50e+09	470.199	0.010	8.50e+09	390.041	6.25e+07	8.48e+09	8.50e+09	7.07e+09	0.010	8.50e+09	1.13e+09
20	2.02e+03	951.846	240.710	3.87e+03	945.409	0.010	3.87e+03	761.708	0.010	3.87e+03	843.597	123.973	285.465	3.88e+03	3.87e+03	0.010	3.88e+03	1.45e+03
21	0.315	0.260	0.038	0.242	0.198	0.021	0.242	0.157	0.021	0.243	0.123	0.071	0.008	0.230	0.057	0.008	0.125	0.087
22	8.81e+06	8.27e+05	7.90e+06	8.82e+06	4.76e+05	2.24e+05	8.82e+06	8.15e+06	2.24e+05	8.82e+06	5.46e+05	8.95e+05	8.32e+06	8.82e+06	1.80e+06	4.72e+03	8.82e+06	8.14e+06
23	9.41e+06	7.08e+05	8.40e+06	9.41e+06	3.48e+05	2.26e+05	9.41e+06	1.12e+06	2.25e+05	9.41e+06	8.34e+06	8.05e+05	8.90e+06	9.41e+06	9.51e+05	4.17e+03	9.41e+06	8.68e+06
24	3.079	2.527	0.591	46.076	0.814	0.061	40.770	0.135	0.061	42.701	0.130	0.007	0.026	49.283	0.026	0.007	38.791	0.060
25	2.88e+04	4.19e+03	1.10e+04	3.13e+04	129.055	71.156	3.15e+04	6.24e+03	72.284	3.14e+04	1.03e+03	485.072	1.20e+04	3.17e+04	39.320	0.010	3.14e+04	1.51e+04
26	0.665	0.405	0.009	0.383	0.194	0.009	0.387	0.134	0.016	0.379	0.123	0.031	0.008	0.451	0.035	0.009	0.455	0.047
27	0.747	0.209	0.026	0.172	0.120	0.031	0.193	0.109	0.042	0.187	0.144	0.200	0.006	0.220	0.040	0.008	0.425	0.030
28	0.641	0.279	0.035	0.208	0.237	0.043	0.209	0.205	0.063	0.208	0.310	0.018	0.006	0.222	0.027	0.007	0.441	0.029
29	0.584	0.268	0.064	0.170	0.207	0.072	0.180	0.183	0.092	0.186	0.260	0.027	0.006	0.073	0.045	0.009	0.286	0.038
30	0.621	0.239	0.034	0.195	0.168	0.040	0.236	0.189	0.044	0.208	0.147	0.021	0.007	0.200	0.066	0.008	0.344	0.035
31	0.775	0.262	0.042	0.188	0.169	0.048	0.211	0.200	0.058	0.209	0.179	0.029	0.006	0.105	0.056	0.008	0.319	0.045
32	0.670	0.258	0.081	0.193	0.206	0.086	0.196	0.261	0.097	0.199	0.270	0.035	0.006	0.065	0.053	0.009	0.197	0.048
33	0.664	0.450	0.076	0.286	0.350	0.088	0.287	0.438	0.106	0.297	0.462	0.046	0.007	0.141	0.046	0.010	0.370	0.050
34	0.482	0.138	0.008	0.268	0.076	0.008	0.263	0.052	0.008	0.256	0.135	0.005	0.008	0.624	0.011	0.006	0.536	0.021
35	0.771	0.249	0.057	0.163	0.173	0.062	0.174	0.166	0.073	0.171	0.178	0.035	0.006	0.099	0.100	0.010	0.342	0.045
36	0.663	0.269	0.077	0.173	0.233	0.084	0.178	0.197	0.093	0.179	0.260	0.029	0.007	0.057	0.055	0.008	0.218	0.045
37	0.599	0.137	0.008	0.352	0.092	0.009	0.346	0.054	0.010	0.319	0.151	0.008	0.007	0.605	0.026	0.006	0.615	0.024
38	0.703	0.453	0.071	0.272	0.255	0.085	0.277	0.340	0.106	0.278	0.288	0.051	0.008	0.133	0.062	0.011	0.349	0.059
39	0.727	0.199	0.013	0.148	0.178	0.015	0.151	0.095	0.028	0.159	0.193	0.019	0.007	0.251	0.043	0.007	0.282	0.036
40	0.767	0.202	0.037	0.135	0.173	0.040	0.135	0.129	0.049	0.141	0.221	0.025	0.006	0.105	0.049	0.008	0.224	0.041
41	0.681	0.465	0.070	0.286	0.317	0.081	0.306	0.245	0.102	0.306	0.442	0.047	0.007	0.148	0.055	0.011	0.388	0.051
42	0.651	0.240	0.057	0.172	0.241	0.061	0.176	0.195	0.068	0.184	0.262	0.033	0.006	0.055	0.072	0.009	0.128	0.046
43	0.544	0.223	0.015	0.195	0.124	0.017	0.220	0.115	0.023	0.195	0.101	0.013	0.007	0.295	0.023	0.007	0.422	0.023
44	0.659	0.209	0.015	0.221	0.143	0.019	0.264	0.164	0.023	0.251	0.229	0.016	0.006	0.340	0.054	0.007	0.377	0.033
45	0.647	0.391	0.009	0.470	0.275	0.009	0.511	0.122	0.009	0.488	0.101	0.012	0.007	0.649	0.018	0.006	0.577	0.020
46	0.828	0.249	0.031	0.214	0.146	0.035	0.255	0.140	0.046	0.247	0.172	0.025	0.006	0.207	0.032	0.008	0.437	0.037
47	0.490	0.211	0.009	0.202	0.122	0.010	0.227	0.092	0.012	0.214	0.210	0.008	0.006	0.404	0.014	0.006	0.406	0.018
48	0.627	0.266	0.101	0.214	0.269	0.105	0.222	0.272	0.112	0.228	0.277	0.035	0.007	0.068	0.103	0.009	0.198	0.054
49	0.726	0.258	0.044	0.194	0.162	0.048	0.244	0.161	0.055	0.230	0.286	0.030	0.006	0.115	0.085	0.008	0.324	0.047
50	0.817	0.247	0.043	0.165	0.175	0.048	0.199	0.157	0.058	0.191	0.183	0.034	0.006	0.100	0.066	0.010	0.321	0.045

PUC-Rio - Certificação Digital Nº 1621782/CA

#	SVM-L	RF	RF:BL:SVM-L	RF:BL:SVM	RF:BL:NN	RF:LV:SVM-L	RF:LV:SVM	RF:LV:NN	RF:PV:SVM-L	RF:PV:SVM	RF:PV:NN	XG	XG:BL:SVM-L	XG:BL:SVM	XG:BL:NN	XG:LV:SVM-L	XG:LV:SVM	XG:LV:NN
51	0.666	0.427	0.067	0.268	0.288	0.080	0.285	0.394	0.105	0.294	0.245	0.049	0.008	0.101	0.051	0.013	0.326	0.060
52	0.809	0.150	0.009	0.501	0.066	0.012	0.561	0.041	0.013	0.548	0.094	0.008	0.007	0.662	0.028	0.006	0.614	0.024
53	0.658	0.279	0.102	0.194	0.231	0.107	0.205	0.222	0.116	0.202	0.300	0.029	0.007	0.056	0.054	0.008	0.206	0.047
54	0.761	0.200	0.017	0.252	0.143	0.021	0.289	0.102	0.026	0.271	0.203	0.022	0.007	0.324	0.044	0.008	0.439	0.043
55	0.704	0.255	0.013	0.309	0.083	0.013	0.339	0.117	0.018	0.336	0.208	0.017	0.007	0.457	0.031	0.007	0.526	0.031
56	0.711	0.228	0.029	0.205	0.162	0.035	0.260	0.170	0.044	0.242	0.254	0.019	0.006	0.245	0.026	0.007	0.405	0.033
57	0.678	0.244	0.029	0.209	0.165	0.033	0.257	0.156	0.040	0.245	0.293	0.025	0.006	0.174	0.038	0.010	0.381	0.044
58	0.751	0.232	0.048	0.154	0.189	0.052	0.165	0.212	0.063	0.163	0.205	0.027	0.006	0.135	0.095	0.008	0.409	0.039
59	0.637	0.271	0.095	0.190	0.220	0.104	0.198	0.267	0.110	0.199	0.297	0.030	0.006	0.067	0.038	0.008	0.279	0.044
60	0.649	0.253	0.009	0.442	0.036	0.009	0.454	0.044	0.009	0.449	0.036	0.007	0.008	0.589	0.007	0.005	0.494	0.013
61	0.596	0.253	0.083	0.177	0.213	0.087	0.179	0.249	0.093	0.186	0.260	0.032	0.006	0.071	0.054	0.009	0.219	0.044
62	0.736	0.271	0.040	0.183	0.181	0.046	0.202	0.193	0.060	0.202	0.315	0.035	0.007	0.100	0.044	0.010	0.296	0.054
63	0.715	0.260	0.009	0.520	0.097	0.009	0.525	0.165	0.009	0.510	0.062	0.010	0.008	0.695	0.029	0.006	0.558	0.024
64	0.579	0.222	0.038	0.170	0.183	0.043	0.168	0.175	0.053	0.173	0.230	0.017	0.006	0.178	0.043	0.007	0.310	0.030
65	0.619	0.218	0.036	0.161	0.165	0.040	0.170	0.218	0.048	0.172	0.231	0.025	0.006	0.151	0.041	0.008	0.274	0.037
66	0.787	0.280	0.052	0.169	0.133	0.054	0.181	0.281	0.062	0.177	0.310	0.034	0.007	0.075	0.089	0.011	0.264	0.054
67	0.675	0.283	0.039	0.192	0.167	0.044	0.202	0.157	0.059	0.202	0.304	0.024	0.007	0.154	0.036	0.008	0.346	0.040
68	0.673	0.405	0.009	0.276	0.238	0.012	0.283	0.271	0.027	0.284	0.236	0.029	0.007	0.288	0.033	0.009	0.422	0.034
69	0.473	0.116	0.009	0.395	0.058	0.009	0.430	0.127	0.009	0.372	0.127	0.004	0.008	0.687	0.003	0.005	0.595	0.013
70	0.746	0.359	0.009	0.350	0.111	0.009	0.348	0.159	0.011	0.343	0.193	0.022	0.007	0.504	0.029	0.008	0.508	0.033
71	0.613	0.262	0.041	0.198	0.165	0.044	0.211	0.119	0.057	0.220	0.317	0.016	0.007	0.236	0.035	0.007	0.441	0.032
72	0.682	0.224	0.043	0.158	0.160	0.049	0.171	0.169	0.055	0.159	0.224	0.018	0.006	0.115	0.033	0.007	0.281	0.036
73	0.678	0.248	0.036	0.192	0.196	0.039	0.195	0.151	0.044	0.195	0.251	0.020	0.007	0.278	0.048	0.008	0.423	0.031
74	0.656	0.214	0.009	0.284	0.161	0.011	0.324	0.146	0.018	0.322	0.147	0.013	0.006	0.477	0.036	0.006	0.508	0.034
75	0.727	0.232	0.025	0.192	0.149	0.034	0.224	0.259	0.049	0.230	0.241	0.022	0.006	0.323	0.034	0.008	0.501	0.042
76	0.717	0.216	0.028	0.188	0.152	0.032	0.227	0.194	0.036	0.208	0.220	0.022	0.006	0.165	0.056	0.007	0.387	0.039
77	0.596	0.207	0.010	0.173	0.164	0.012	0.184	0.204	0.025	0.187	0.222	0.010	0.006	0.378	0.013	0.006	0.399	0.021
78	0.514	0.201	0.008	0.145	0.100	0.008	0.166	0.201	0.010	0.162	0.202	0.005	0.007	0.363	0.026	0.005	0.378	0.020
79	0.629	0.377	0.018	0.306	0.202	0.023	0.325	0.350	0.036	0.314	0.372	0.029	0.007	0.253	0.041	0.009	0.430	0.048
80	0.555	0.376	0.009	0.274	0.167	0.009	0.293	0.333	0.019	0.285	0.214	0.025	0.007	0.308	0.028	0.008	0.428	0.028
81	0.543	0.268	0.009	0.558	0.074	0.008	0.586	0.013	0.009	0.556	0.068	0.005	0.009	0.736	0.014	0.006	0.604	0.007
82	0.593	0.342	0.009	0.362	0.131	0.009	0.376	0.172	0.009	0.370	0.305	0.015	0.007	0.570	0.013	0.006	0.551	0.022
83	0.640	0.406	0.017	0.301	0.198	0.028	0.307	0.369	0.057	0.318	0.198	0.039	0.007	0.279	0.048	0.009	0.397	0.048
84	0.428	0.177	0.008	0.418	0.082	0.009	0.464	0.161	0.009	0.441	0.154	0.009	0.007	0.502	0.021	0.006	0.551	0.019
85	0.684	0.183	0.019	0.170	0.120	0.020	0.178	0.120	0.026	0.167	0.129	0.013	0.007	0.325	0.064	0.007	0.332	0.035
86	0.606	0.227	0.019	0.309	0.149	0.021	0.385	0.090	0.024	0.355	0.083	0.012	0.006	0.432	0.028	0.006	0.418	0.038
87	6.59e+06	1.08e+06	6.90e+06	8.41e+06	8.40e+06	0.010	8.41e+06	496.137	0.010	8.41e+06	0.008	2.40e+05	7.54e+06	8.41e+06	2.55e+06	0.010	8.41e+06	1.50e+05
88	1.35e+03	250.772	168.051	2.55e+03	16.167	21.915	2.51e+03	137.136	21.969	2.50e+03	112.406	3.821	0.013	2.58e+03	0.130	0.010	2.52e+03	85.251
89	63.306	35.884	10.795	77.516	0.590	0.752	78.754	8.168	0.717	78.821	10.198	16.272	3.426	81.809	0.646	0.792	75.315	4.406
90	4.595	2.270	0.730	5.671	0.692	0.345	5.609	0.319	0.351	5.686	0.632	0.847	0.009	6.446	0.114	0.009	5.082	0.066
91	9.577	5.728	0.020	10.840	0.083	0.010	10.675	0.127	0.010	10.801	0.248	1.546	0.010	11.315	0.044	0.010	10.217	0.022
92	225.537	35.398	0.277	199.232	1.139	0.010	198.687	20.921	0.010	199.083	21.180	3.678	0.010	206.530	0.250	0.010	205.759	34.392
93	2.74e+03	881.742	588.550	8.43e+03	796.388	265.675	8.43e+03	2.31e+03	298.385	8.43e+03	1.97e+03	198.785	103.218	8.69e+03	8.96e+03	0.045	8.69e+03	1.96e+03
94	2.47e+03	751.751	195.847	2.37e+03	1.612	1.514	2.34e+03	664.985	2.351	2.36e+03	498.668	80.496	10.969	2.41e+03	0.048	0.010	2.26e+03	573.020
95	3.74e+03	1.42e+03	520.422	9.98e+03	10.436	1.508	9.94e+03	930.595	1.508	9.95e+03	1.79e+03	171.595	326.841	1.00e+04	0.380	0.010	9.96e+03	2.59e+03
96	37.647	28.326	17.112	121.184	8.123	11.489	122.301	21.974	11.458	121.886	29.135	19.718	14.311	138.301	7.467	10.365	135.234	47.905

Tabela 6.9: Resultados em *datasets* de regressão - in sample

PUC-Rio - Certificação Digital Nº 1621782/CA

#	SVM-L	RF	RF:BL:SVM-L	RF:BL:SVM	RF:BL:NN	RF:LV:SVM-L	RF:LV:SVM	RF:LV:NN	RF:PV:SVM-L	RF:PV:SVM	RF:PV:NN	XG	XG:BL:SVM-L	XG:BL:SVM	XG:BL:NN	XG:LV:SVM-L	XG:LV:SVM	XG:LV:NN
1	0.254	0.492	0.293	0.557	0.284	0.296	0.543	0.263	0.294	0.551	0.258	0.257	0.359	0.679	0.257	0.458	0.508	0.286
2	0.418	0.422	0.435	0.417	0.406	0.424	0.417	0.412	0.424	0.418	0.413	0.396	0.449	0.393	0.407	0.454	0.390	0.387
3	0.396	0.462	0.378	0.423	0.433	0.376	0.404	0.423	0.404	0.377	0.406	0.385	0.407	0.406	0.389	0.418	0.395	0.399
4	4.029	2.974	2.775	2.708	2.649	2.777	2.642	2.594	2.775	2.689	2.580	2.646	2.688	2.805	2.681	2.766	2.630	2.646
5	577.455	519.209	540.690	958.667	610.384	540.841	956.571	730.768	538.216	957.645	581.735	433.578	341.726	969.797	468.572	438.587	967.060	669.282
6	7.429	2.037	2.599	25.161	2.456	2.641	25.114	3.452	2.621	25.152	2.891	2.762	3.468	24.541	2.914	3.759	24.516	9.207
7	3.536	4.225	8.070	7.542	9.945	9.994	7.467	6.279	10.063	7.540	8.129	4.621	7.269	8.221	6.556	7.125	8.109	6.715
8	1.24e+07	4.16e+06	2.05e+07	3.42e+07	5.78e+06	6.10e+06	3.42e+07	7.71e+06	6.81e+06	3.42e+07	2.02e+07	4.57e+06	2.35e+07	3.42e+07	3.45e+07	4.91e+06	3.42e+07	9.00e+06
9	1.24e+07	4.16e+06	2.05e+07	3.42e+07	3.45e+07	6.12e+06	3.42e+07	4.23e+06	6.82e+06	3.42e+07	4.95e+06	4.53e+06	2.35e+07	3.42e+07	3.45e+07	4.98e+06	3.42e+07	3.58e+07
10	0.437	0.390	0.353	0.654	0.330	0.379	0.513	0.360	0.362	0.578	0.370	0.349	0.395	0.676	0.375	0.427	0.449	0.376
11	185.189	114.451	93.165	637.857	129.964	155.543	639.735	97.775	154.569	639.154	122.236	119.081	137.166	646.167	105.679	158.179	641.808	119.798
12	8.620	6.598	2.715	15.388	3.002	2.620	16.756	3.724	2.596	16.703	3.710	2.789	3.584	20.946	3.638	6.473	22.716	3.396
13	1.26e+04	6.46e+03	4.53e+03	1.48e+04	4.28e+03	7.20e+03	1.48e+04	9.34e+03	6.99e+03	1.48e+04	7.19e+03	3.13e+03	3.92e+03	1.50e+04	3.30e+03	4.29e+03	1.48e+04	1.49e+04
14	1.01e+05	3.68e+04	3.15e+04	1.01e+05	4.54e+04	3.35e+04	1.01e+05	3.73e+04	3.37e+04	1.01e+05	4.88e+04	2.45e+04	2.64e+04	1.02e+05	1.78e+04	2.45e+04	1.01e+05	6.61e+04
15	20.716	7.354	3.396	191.485	3.437	5.819	167.430	5.538	5.996	172.046	4.214	1.500	0.778	214.914	6.661	2.541	172.152	2.000
16	7.935	2.204	2.753	4.863	2.254	3.020	4.280	2.764	3.021	4.473	2.704	2.666	3.425	6.329	3.111	3.460	4.500	3.419
17	0.645	0.551	0.709	0.556	0.491	0.750	0.553	0.489	0.740	0.555	0.499	0.427	0.480	0.564	0.466	0.523	0.430	0.464
18	0.538	0.585	0.286	2.945	0.584	0.586	2.261	0.580	2.284	0.588	0.582	0.622	0.622	2.861	0.562	0.589	2.371	0.576
19	1.25e+09	1.72e+09	1.24e+09	1.24e+09	3.77e+09	1.66e+09	1.24e+09	8.31e+09	1.55e+09	1.24e+09	6.75e+09	1.49e+09	1.24e+09	1.24e+09	1.00e+09	1.99e+09	1.24e+09	8.72e+09
20	1.78e+03	1.90e+03	1.69e+03	3.53e+03	3.75e+03	1.79e+03	3.53e+03	3.42e+03	1.79e+03	3.53e+03	3.27e+03	1.61e+03	1.66e+03	3.53e+03	3.66e+03	1.69e+03	3.53e+03	3.82e+03
21	0.271	0.246	0.310	0.233	0.413	0.235	0.212	0.222	0.416	0.235	0.224	0.179	0.185	0.227	0.201	0.202	0.183	0.185
22	1.51e+07	2.09e+06	1.34e+07	1.51e+07	1.22e+06	2.48e+06	1.51e+07	1.37e+07	2.44e+06	1.51e+07	1.77e+06	2.09e+06	1.43e+07	1.51e+07	2.73e+06	1.79e+07	1.51e+07	1.37e+07
23	1.51e+07	1.83e+06	1.33e+07	1.51e+07	1.71e+06	1.74e+06	1.51e+07	2.71e+06	1.77e+06	1.51e+07	1.29e+07	2.42e+06	1.43e+07	1.51e+07	3.52e+06	4.97e+07	1.51e+07	1.37e+07
24	1.193	3.335	3.922	42.094	2.409	3.803	37.413	2.294	3.707	38.917	1.700	3.707	7.193	45.333	6.661	4.199	35.821	4.338
25	1.07e+04	6.07e+03	3.48e+03	1.25e+04	2.62e+03	2.78e+03	1.26e+04	8.06e+03	2.35e+03	1.26e+04	3.04e+03	4.98e+03	3.25e+03	1.27e+04	2.44e+03	3.05e+03	1.26e+04	1.52e+04
26	0.875	0.626	0.354	0.659	0.521	0.381	0.640	0.446	0.421	0.642	0.402	0.267	0.213	0.696	0.240	0.340	0.578	0.274
27	0.679	0.341	0.286	0.143	0.278	0.135	0.286	0.210	0.150	0.281	0.259	0.152	0.134	0.296	0.148	0.154	0.467	0.152
28	0.577	0.242	0.165	0.190	0.219	0.168	0.191	0.192	0.148	0.185	0.267	0.081	0.074	0.231	0.068	0.120	0.416	0.085
29	0.617	0.330	0.174	0.230	0.271	0.175	0.242	0.246	0.177	0.250	0.310	0.106	0.073	0.141	0.103	0.132	0.316	0.099
30	0.967	0.308	0.135	0.285	0.208	0.144	0.347	0.222	0.140	0.222	0.182	0.099	0.089	0.382	0.127	0.118	0.662	0.111
31	0.679	0.298	0.129	0.231	0.196	0.129	0.255	0.230	0.130	0.255	0.215	0.080	0.059	0.136	0.086	0.119	0.343	0.090
32	0.638	0.272	0.125	0.222	0.242	0.126	0.227	0.284	0.138	0.228	0.292	0.081	0.055	0.115	0.090	0.106	0.219	0.086
33	0.653	0.382	0.206	0.261	0.310	0.194	0.264	0.371	0.172	0.388	0.128	0.088	0.098	0.189	0.105	0.178	0.356	0.130
34	0.971	0.331	0.221	0.402	0.324	0.210	0.379	0.257	0.187	0.391	0.357	0.218	0.195	0.686	0.210	0.220	0.545	0.227
35	0.897	0.346	0.168	0.263	0.251	0.162	0.285	0.222	0.146	0.276	0.243	0.102	0.078	0.218	0.185	0.143	0.549	0.122
36	0.573	0.280	0.208	0.195	0.241	0.199	0.204	0.219	0.187	0.201	0.275	0.065	0.044	0.094	0.069	0.092	0.260	0.080
37	0.582	0.268	0.208	0.624	0.195	0.217	0.571	0.189	0.233	0.556	0.258	0.141	0.171	0.977	0.186	0.194	0.954	0.153
38	0.665	0.521	0.203	0.342	0.304	0.198	0.337	0.402	0.192	0.341	0.336	0.106	0.080	0.174	0.094	0.141	0.414	0.103
39	0.899	0.390	0.222	0.334	0.381	0.230	0.324	0.229	0.234	0.338	0.404	0.144	0.116	0.414	0.138	0.149	0.403	0.155
40	0.715	0.221	0.165	0.198	0.209	0.154	0.190	0.184	0.145	0.206	0.253	0.095	0.068	0.151	0.109	0.094	0.220	0.104
41	0.709	0.432	0.220	0.303	0.336	0.204	0.317	0.293	0.175	0.314	0.418	0.110	0.074	0.177	0.089	0.142	0.342	0.101
42	0.605	0.257	0.122	0.184	0.255	0.120	0.190	0.067	0.185	0.120	0.284	0.196	0.046	0.087	0.093	0.076	0.154	0.079
43	0.636	0.315	0.140	0.301	0.179	0.156	0.329	0.207	0.161	0.301	0.196	0.115	0.108	0.397	0.105	0.122	0.377	0.151
44	1.171	0.509	0.224	0.672	0.340	0.226	0.775	0.378	0.211	0.750	0.530	0.212	0.200	0.841	0.249	0.207	0.991	0.274
45	0.992	0.403	0.342	0.452	0.471	0.354	0.453	0.416	0.341	0.440	0.362	0.301	0.270	0.637	0.275	0.300	0.437	0.294
46	0.742	0.283	0.150	0.216	0.166	0.148	0.242	0.163	0.137	0.240	0.201	0.088	0.078	0.229	0.077	0.110	0.395	0.090
47	0.936	0.405	0.274	0.416	0.299	0.281	0.430	0.259	0.282	0.422	0.431	0.205	0.189	0.631	0.170	0.204	0.555	0.202
48	0.615	0.280	0.177	0.232	0.291	0.176	0.244	0.289	0.174	0.253	0.302	0.074	0.051	0.121	0.129	0.088	0.220	0.094
49	0.976	0.295	0.124	0.235	0.163	0.126	0.314	0.171	0.115	0.288	0.330	0.086	0.071	0.180	0.118	0.133	0.477	0.095
50	0.790	0.245	0.152	0.185	0.191	0.142	0.222	0.162	0.142	0.216	0.191	0.065	0.051	0.129	0.086	0.106	0.353	0.074

PUC-Rio - Certificação Digital Nº 1621782/CA

#	SVM-L	RF	RF:BL:SVM-L	RF:BL:SVM	RF:BL:NN	RF:LV:SVM-L	RF:LV:SVM	RF:LV:NN	RF:PV:SVM-L	RF:PV:SVM	RF:PV:NN	XG	XG:BL:SVM-L	XG:BL:SVM	XG:BL:NN	XG:LV:SVM-L	XG:LV:SVM	XG:LV:NN
51	0.742	0.555	0.224	0.362	0.370	0.202	0.378	0.494	0.191	0.387	0.317	0.106	0.066	0.173	0.086	0.146	0.450	0.118
52	0.957	0.265	0.102	0.581	0.132	0.113	0.733	0.121	0.105	0.683	0.177	0.117	0.106	0.586	0.108	0.114	0.592	0.123
53	0.614	0.310	0.180	0.276	0.180	0.173	0.253	0.268	0.181	0.250	0.327	0.065	0.047	0.094	0.094	0.075	0.223	0.086
54	0.623	0.283	0.155	0.252	0.244	0.156	0.248	0.211	0.154	0.246	0.261	0.092	0.068	0.321	0.086	0.098	0.416	0.118
55	0.835	0.329	0.252	0.515	0.202	0.268	0.585	0.190	0.260	0.585	0.337	0.151	0.159	0.614	0.168	0.196	0.703	0.196
56	1.305	0.283	0.169	0.333	0.207	0.168	0.333	0.207	0.168	0.333	0.207	0.168	0.333	0.207	0.168	0.333	0.207	0.168
57	0.849	0.317	0.203	0.285	0.252	0.209	0.335	0.267	0.218	0.330	0.378	0.114	0.082	0.233	0.103	0.127	0.374	0.123
58	0.866	0.354	0.159	0.260	0.276	0.166	0.290	0.316	0.160	0.289	0.316	0.131	0.102	0.221	0.145	0.138	0.485	0.127
59	0.828	0.372	0.269	0.260	0.292	0.266	0.383	0.244	0.277	0.425	0.269	0.094	0.065	0.134	0.078	0.126	0.414	0.098
60	1.262	0.888	0.825	1.155	0.827	0.830	1.126	0.879	0.820	1.133	0.828	0.705	0.713	1.473	0.673	0.775	1.265	0.743
61	0.609	0.261	0.174	0.202	0.232	0.178	0.203	0.255	0.168	0.209	0.261	0.103	0.077	0.137	0.097	0.127	0.214	0.105
62	0.784	0.336	0.157	0.234	0.152	0.219	0.252	0.242	0.142	0.254	0.378	0.085	0.057	0.151	0.075	0.116	0.354	0.093
63	0.896	0.713	0.461	0.723	0.618	0.438	0.714	0.721	0.428	0.707	0.491	0.495	0.476	0.785	0.500	0.471	0.610	0.469
64	0.620	0.317	0.187	0.288	0.289	0.186	0.275	0.273	0.186	0.282	0.304	0.148	0.134	0.309	0.144	0.150	0.350	0.143
65	0.465	0.289	0.201	0.219	0.190	0.254	0.178	0.228	0.190	0.228	0.299	0.130	0.100	0.254	0.137	0.192	0.403	0.152
66	0.787	0.391	0.136	0.262	0.201	0.140	0.270	0.373	0.133	0.267	0.389	0.085	0.056	0.109	0.112	0.097	0.298	0.098
67	0.502	0.276	0.185	0.195	0.197	0.171	0.199	0.185	0.161	0.197	0.278	0.087	0.064	0.158	0.098	0.111	0.320	0.101
68	0.766	0.520	0.296	0.401	0.353	0.297	0.403	0.413	0.284	0.410	0.359	0.408	0.140	0.434	0.144	0.202	0.517	0.185
69	0.882	0.449	0.396	0.620	0.469	0.397	0.584	0.369	0.409	0.578	0.397	0.368	0.348	0.704	0.306	0.386	0.612	0.382
70	0.839	0.484	0.341	0.459	0.354	0.325	0.462	0.411	0.321	0.457	0.407	0.276	0.261	0.597	0.255	0.284	0.604	0.287
71	0.769	0.349	0.227	0.204	0.277	0.212	0.204	0.211	0.282	0.393	0.157	0.130	0.275	0.143	0.169	0.304	0.150	
72	0.749	0.306	0.191	0.253	0.248	0.180	0.260	0.260	0.180	0.252	0.310	0.099	0.091	0.226	0.099	0.110	0.334	0.126
73	0.794	0.291	0.142	0.231	0.248	0.143	0.241	0.235	0.135	0.247	0.303	0.115	0.101	0.331	0.111	0.129	0.332	0.118
74	0.691	0.293	0.217	0.345	0.263	0.193	0.392	0.271	0.193	0.399	0.288	0.169	0.173	0.524	0.199	0.191	0.491	0.181
75	0.707	0.332	0.165	0.248	0.176	0.158	0.283	0.345	0.141	0.275	0.314	0.154	0.141	0.361	0.137	0.174	0.411	0.140
76	1.090	0.330	0.163	0.417	0.246	0.172	0.504	0.286	0.178	0.466	0.352	0.134	0.114	0.433	0.174	0.152	0.721	0.171
77	0.749	0.291	0.146	0.267	0.153	0.253	0.162	0.277	0.162	0.276	0.281	0.135	0.123	0.537	0.124	0.139	0.561	0.144
78	0.920	0.270	0.171	0.238	0.168	0.164	0.261	0.324	0.167	0.252	0.335	0.137	0.132	0.419	0.146	0.144	0.327	0.149
79	0.714	0.510	0.319	0.457	0.429	0.301	0.465	0.498	0.302	0.459	0.511	0.187	0.142	0.389	0.160	0.229	0.485	0.209
80	0.897	0.603	0.351	0.521	0.400	0.358	0.530	0.571	0.336	0.523	0.478	0.326	0.282	0.583	0.257	0.347	0.588	0.309
81	1.223	0.847	0.693	0.951	0.776	0.734	0.950	0.772	0.737	0.938	0.807	0.705	0.681	1.016	0.664	0.739	0.811	0.714
82	0.773	0.654	0.385	0.616	0.440	0.431	0.601	0.458	0.462	0.593	0.640	0.393	0.350	0.725	0.345	0.410	0.689	0.384
83	0.779	0.568	0.394	0.503	0.369	0.365	0.495	0.365	0.325	0.517	0.344	0.221	0.162	0.534	0.169	0.232	0.633	0.201
84	0.708	0.547	0.319	1.055	0.367	0.345	1.115	0.473	0.358	1.069	0.455	0.301	0.335	1.193	0.303	0.320	1.237	0.294
85	0.419	0.157	0.121	0.165	0.109	0.121	0.179	0.106	0.114	0.162	0.121	0.081	0.080	0.321	0.112	0.090	0.365	0.100
86	1.034	0.526	0.289	0.596	0.331	0.302	0.706	0.317	0.284	0.674	0.310	0.254	0.229	0.701	0.224	0.258	0.746	0.235
87	3.23e+06	1.23e+06	3.58e+06	4.53e+06	4.65e+06	9.94e+05	4.53e+06	3.65e+06	9.37e+05	4.53e+06	2.04e+06	1.22e+06	3.79e+06	4.53e+06	4.48e+06	8.85e+05	4.53e+06	3.10e+06
88	1.67e+03	456.766	420.107	2.88e+03	104.613	55.896	2.83e+03	433.128	55.006	2.83e+03	332.064	18.750	17.538	2.91e+03	49.354	20.746	2.85e+03	302.370
89	126.142	86.836	121.213	110.921	131.965	154.473	110.639	146.036	153.577	111.010	161.749	110.952	138.855	112.095	138.107	145.082	111.541	136.268
90	4.272	3.525	4.222	6.091	4.787	8.608	6.169	5.014	8.126	6.226	4.488	3.068	3.326	7.037	3.598	3.346	5.864	4.026
91	11.278	12.577	16.882	13.322	22.425	18.246	13.182	19.763	17.307	13.272	21.691	12.385	14.064	13.409	14.237	14.114	13.092	13.471
92	499.816	128.791	170.089	290.755	137.939	168.905	290.241	253.865	170.280	290.557	143.173	230.946	242.309	295.791	221.714	289.051	295.200	169.512
93	2.36e+03	963.114	785.657	8.47e+03	959.883	519.656	8.46e+03	3.37e+03	537.494	8.46e+03	1.81e+03	458.836	357.307	8.66e+03	8.65e+03	360.225	8.66e+03	1.65e+03
94	1.29e+03	938.185	729.747	1.10e+03	1.10e+03	1.09e+03	1.09e+03	1.08e+03	1.04e+03	1.10e+03	1.23e+03	695.886	660.224	1.10e+03	603.626	634.195	1.07e+03	741.955
95	2.30e+03	1.98e+03	2.20e+03	4.45e+03	2.41e+03	2.67e+03	4.45e+03	4.18e+03	2.63e+03	4.45e+03	3.59e+03	2.87e+03	3.08e+03	4.51e+03	3.38e+03	3.43e+03	4.47e+03	4.62e+03
96	41.522	43.470	58.861	159.877	71.514	73.508	161.585	44.786	74.122	160.973	46.000	48.238	57.520	180.666	64.003	66.509	177.244	76.934

Tabela 6.10: Resultados em *datasets* de regressão - out of sample

7

Conclusões e Trabalhos Futuros

Neste trabalho investigamos a abordagem *2PL* para a construção de um novo aprendizado sob árvores de decisão treinadas no conjunto de dados original. Este trabalho propôs a criação de um conjunto de características, *feature construction*, a partir das folhas destas árvores e a aplicação de uma função estimadora nestes novos dados.

A partir dos experimentos, demonstrados no capítulo 6, os algoritmos definidos para o *2PL* com melhores resultados no conjunto de treino apresentam também os melhores resultados no conjunto de teste, *out – of – sample dataset*, avaliados pela acurácia média dos classificadores e pela média de erros entre as tarefas de regressão. Essa consistência de bons resultados foi observada nas diferentes configurações e experimentos realizados, independente do número de árvores do modelo.

Estas observações sugerem que a aplicação desta metodologia de transformação dos dados no conjunto de árvores de decisão, realizada na primeira fase, e a aplicação de uma função estimadora, em especial o SVM linear, permite uma generalização melhor nas estimativas do modelo.

Esperava-se um desempenho melhor do algoritmo de *SVM* não linear, considerando uma flexibilidade maior frente o modelo linear, entretanto isso não foi observado nos experimentos. O mesmo raciocínio seguiu para as redes neurais, experimentos demonstraram que o modelo linear apresentou as melhores estimativas. Considerando que alguns exemplos exigiam um processamento muito elevado para encontrar o estimador, algumas funções ótimas não foram alcançadas nos modelos SVM-R e NN, deixando em aberto a possibilidade de ajustes nos modelos a fim de obter preditores melhores, e por consequência, melhorar as respostas do *2PL*.

Algumas questões ficam sugeridas para trabalhos futuros. Uma delas, em relação ao preditor do *2PL*, é avaliar a geração de novos preditores a partir de múltiplos conjuntos de árvores de decisão, ou seja, combinar em passos de iteração vários *tree ensemble models*. Em outras palavras, aplicar alguma metodologia de *boosting*, por exemplo, no modelo definido, pode melhorar o desempenho do *2PL*? Outra questão em aberto é saber a possibilidade de construir árvores de decisão utilizando outras abordagens. As árvores devem

procurar mais a generalização ou a minimização das funções de perda? Como o algoritmo será seguido por algum outro preditor, esse pode ser o caso.

Referências bibliográficas

- [1] BERTSIMAS, D.; DUNN, J.. **Optimal classification trees**. Machine Learning, 106(7):1039–1082, 2017.
- [2] BISHOP, C. M.. **Pattern Recognition and Machine Learning**. Information science and statistics. Springer, 1st ed. 2006. corr. 2nd printing edition, 2006.
- [3] BREIMAN, L.. **Random Forests**. Machine Learning, 45(1):5–32, 2001.
- [4] BREIMAN, L.. **Bagging predictors**. Machine learning, 24(2):123–140, 1996.
- [5] BREIMAN, L.. **Classification and regression trees**. Routledge, 2017.
- [6] BUITINCK, L.; LOUPPE, G.; BLONDEL, M. ; PEDREGOSA, F.. **API design for machine learning software: experiences from the scikitlearn project**. In: ECML PKDD Workshop: Languages for Data Mining and Machine Learning, p. 108–122, 2013.
- [7] CHEN, T.; GUESTRIN, C.. **XGBoost: A Scalable Tree Boosting System**. In: Proceedings of the 22nd ACM SIGKDD International Conference on Knowledge Discovery and Data Mining, KDD '16, p. 785–794, New York, NY, USA, 2016. Association for Computing Machinery.
- [8] CHIO, C.; FREEMAN, D.. **Machine Learning and Security - Protecting Systems with Data and Algorithms**. O'Reilly Media, 02 2018.
- [9] DIETTERICH, T. G.; OTHERS. **Ensemble learning**. The handBook of brain theory and neural networks, 2:110–125, 2002.
- [10] FREUND, Y.; SCHAPIRE, R. ; ABE, N.. **A short introduction to boosting**. Journal-Japanese Society For Artificial Intelligence, 14(771-780):1612, 1999.
- [11] FRIEDMAN, J. H.. **Multivariate adaptive regression splines**. The annals of statistics, p. 1–67, 1991.
- [12] FRIEDMAN, J. H.. **Greedy Function Approximation: A Gradient Boosting Machine**. In: IMS, 1999.

- [13] JEROME FRIEDMAN, T. H. R. T.. **The Elements of Statistical Learning**. 2001.
- [14] KANTCHELIAN, A.; TYGAR, J. D. ; JOSEPH, A. D.. **Evasion and Hardening of Tree Ensemble Classifiers**. CoRR, abs/1509.07892, 2015.
- [15] KOZAK, J.. **Decision Tree and Ensemble Learning Based on Ant Colony Optimization**. Springer, 2019.
- [16] MISIĆ, V. V.. **Optimization of Tree Ensembles**. 2017.
- [17] NAN, F.; WANG, J. ; SALIGRAMA, V.. **Feature-Budgeted Random Forest**. In: Bach, F.; Blei, D., editors, Proceedings of the 32nd International Conference on Machine Learning, volumen 37 de **Proceedings of Machine Learning Research**, p. 1983–1991, Lille, France, 07-09 Jul 2015. PMLR.
- [18] PATRYK ORZECZOWSKI, W. L. C.; MOORE, J. H.. **Where are we now? A large benchmark study of recent symbolic regression methods**. In: Genetic and Evolutionary Computation Conference (GECCO '18), Kyoto, Japan, 2018. ACM.
- [19] PRETORIUS, A.; BIERMAN, S. ; STEEL, S.. **A bias-variance analysis of ensemble learning for classification**. 12 2016.
- [20] SAFAVIAN, S. R.; LANDGREBE, D.. **A survey of decision tree classifier methodology**. IEEE Transactions on Systems, Man, and Cybernetics, 21(3):660–674, 1991.
- [21] STUART RUSSELL, P. N.. **Artificial Intelligence: A Modern Approach**. Prentice Hall Series in Artificial Intelligence. Prentice Hall, 3rd edition, 2010.
- [22] SUN, X.; REN, X.; MA, S. ; WANG, H.. **MeProp: Sparsified Back Propagation for Accelerated Deep Learning with Reduced Overfitting**. CoRR, abs/1706.06197, 2017.
- [23] USTINOVSKIY, Y.; FEDOROVA, V.; GUSEV, G. ; SERDYUKOV, P.. **Meta-Gradient Boosted Decision Tree Model for Weight and Target Learning**. In: Balcan, M. F.; Weinberger, K. Q., editors, Proceedings of The 33rd International Conference on Machine Learning, volumen 48 de **Proceedings of Machine Learning Research**, p. 2692–2701, New York, New York, USA, 20-22 Jun 2016. PMLR.

- [24] VENS, C.; COSTA, F.. **Random forest based feature induction**. In: 2011 IEEE 11TH INTERNATIONAL CONFERENCE ON DATA MINING, p. 744–753, 2011.

A

Material complementar com configurações de 50, 100 e 500 árvores de decisão

Esta seção define análises complementares, bem como os experimentos realizados nos métodos de conjunto usando as configurações de 50, 100 e 500 árvores. As tabelas mostram os resultados médios obtidos, nos conjuntos de teste, em cada uma dessas parametrizações, ordenadas pelos melhores algoritmos. Resultados individuais de classificação e regressão são apresentados após as médias. A primeira coluna dessas tabelas referem-se aos datasets identificados no capítulo de resultados, em 6.1 e 6.2.

É importante ressaltar que os valores médios representam a acurácia média entre os conjuntos de dados de classificação e a média do erro quadrático entre os exemplos de regressão. Uma observação, nos exemplos com 500 árvores os algoritmos considerados em análise foram reduzidos a um escopo menor, e ainda, alguns exemplos de regressão foram desconsiderados.

#	Average
XG:BL:SVM-L:M	84.765
XG:BL:SVM-L	84.656
RF:EL:SVM-L:M	84.650
RF:BL:SVM-L:M	84.640
RF:BL:SVM-L	84.590
RF	84.089
XG:BL:NN	83.606
RF:BL:NN	83.507
XG:EL:SVM-L:M	83.232
XG:BL:NN:M	83.023
XG	82.903
RF:EL:SVM:M	82.087
RF:BL:SVM:M	82.057
XG:EL:SVM:M	81.848
RF:BL:NN:M	81.349
XG:BL:SVM:M	80.995
RF:EL:NN:M	80.587
XG:EL:NN:M	80.258
RF:BL:SVM	79.865
XG:BL:SVM	78.311

Tabela A.1: Média na classificação - out of sample - 50 árvores

#	No. of winners
XG:BL:SVM-L	23
XG:BL:SVM-L:M	21
RF:BL:NN	18
XG:EL:NN:M	17
RF:EL:SVM-L:M	17
RF:BL:SVM-L	17
RF:BL:SVM-L:M	17
RF:BL:NN:M	17
RF:EL:NN:M	16
RF:EL:SVM:M	15
RF:BL:SVM	15
XG:BL:NN	15
RF	14
RF:BL:SVM:M	14
XG:BL:SVM:M	12
XG	12
XG:BL:NN:M	12
XG:BL:SVM	11
XG:EL:SVM-L:M	11
XG:EL:SVM:M	9

Tabela A.2: Campeões na classificação - out of sample - 50 árvores

PUC-Rio - Certificação Digital Nº 1621782/CA

#	RF	RF:BL:SVM-L	RF:BL:SVM	RF:BL:NN	XG	XG:BL:SVM-L	XG:BL:SVM	XG:BL:NN	RF:BL:SVM:M	RF:BL:SVM-L:M	RF:BL:NN:M	RF:EL:SVM:M	RF:EL:SVM-L:M	RF:EL:NN:M	XG:BL:SVM:M	XG:BL:SVM-L:M	XG:BL:NN:M	XG:EL:SVM:M	XG:EL:SVM-L:M	XG:EL:NN:M
1	1.000	1.000	0.967	1.000	0.833	1.000	0.833	1.000	0.967	1.000	1.000	0.967	1.000	1.000	0.833	1.000	1.000	0.833	0.833	1.000
2	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000									
3	0.834	0.803	0.841	0.917	0.885	0.904	0.911	0.854	0.866	0.803	0.866	0.854	0.803	0.860	0.904	0.860	0.936	0.911	0.911	0.885
4	0.711	0.695	0.706	0.711	0.738	0.706	0.706	0.706	0.706	0.695	0.706	0.706	0.701	0.706	0.706	0.738	0.706	0.706	0.706	0.706
5	0.988	0.988	0.985	0.980	0.980	0.988	0.980	0.985	0.985	0.988	0.980	0.985	0.988	0.980	0.980	0.988	0.968	0.980	0.974	0.977
6	0.972	0.965	0.965	0.951	0.951	0.979	0.951	0.944	0.965	0.965	0.951	0.965	0.951	0.951	0.979	0.937	0.951	0.951	0.951	0.951
7	0.760	0.760	0.740	0.720	0.740	0.640	0.740	0.660	0.740	0.760	0.680	0.740	0.760	0.680	0.740	0.640	0.640	0.740	0.740	0.740
8	0.750	0.722	0.764	0.764	0.736	0.722	0.764	0.722	0.764	0.722	0.736	0.764	0.722	0.764	0.764	0.722	0.722	0.764	0.764	0.764
9	0.981	0.986	0.914	0.972	0.914	0.998	0.907	0.940	0.954	0.986	0.898	0.954	0.986	0.933	0.931	0.988	0.914	0.928	0.984	0.826
10	0.996	0.996	0.994	0.987	0.950	0.986	0.965	0.964	0.994	0.996	0.987	0.994	0.996	0.987	0.965	0.986	0.962	0.966	0.964	0.962
11	0.948	0.941	0.926	0.941	0.941	0.956	0.926	0.956	0.926	0.941	0.948	0.926	0.941	0.941	0.926	0.956	0.948	0.926	0.948	0.926
12	0.963	0.963	0.972	0.954	0.963	0.972	0.963	0.954	0.972	0.963	0.963	0.972	0.963	0.963	0.963	0.972	0.954	0.963	0.954	0.963
13	0.769	0.827	0.769	0.827	0.846	0.904	0.769	0.885	0.769	0.827	0.827	0.769	0.827	0.808	0.769	0.904	0.827	0.885	0.885	0.865
14	0.827	0.821	0.861	0.861	0.827	0.855	0.809	0.861	0.821	0.827	0.861	0.821	0.827	0.832	0.855	0.827	0.809	0.861	0.885	0.844
15	0.778	0.800	0.719	0.770	0.778	0.837	0.733	0.837	0.719	0.800	0.763	0.726	0.800	0.763	0.733	0.837	0.800	0.785	0.785	0.578
16	0.935	0.935	0.924	0.924	0.967	0.967	0.946	0.967	0.935	0.946	0.913	0.924	0.935	0.913	0.946	0.978	0.967	0.946	0.978	0.880
17	0.903	0.911	0.548	0.798	0.758	0.931	0.504	0.790	0.847	0.911	0.371	0.847	0.911	0.431	0.831	0.927	0.738	0.839	0.927	0.734
18	0.515	0.499	0.477	0.439	0.526	0.509	0.477	0.547	0.501	0.439	0.528	0.501	0.439	0.545	0.509	0.496	0.509	0.566	0.528	0.439
19	0.394	0.333	0.485	0.364	0.333	0.273	0.485	0.394	0.394	0.333	0.364	0.394	0.333	0.364	0.394	0.303	0.364	0.455	0.364	0.485
20	0.960	0.960	0.920	0.920	0.920	1.000	0.920	0.920	0.920	0.960	0.920	0.920	0.920	0.960	0.920	1.000	0.920	0.920	0.920	0.920
21	0.636	0.610	0.597	0.636	0.636	0.649	0.597	0.610	0.597	0.610	0.597	0.597	0.610	0.597	0.597	0.649	0.636	0.597	0.597	0.597
22	0.848	0.818	0.606	0.818	0.848	0.818	0.455	0.788	0.818	0.818	0.848	0.788	0.818	0.818	0.848	0.818	0.818	0.758	0.818	0.667
23	0.526	0.513	0.526	0.566	0.539	0.526	0.526	0.553	0.526	0.526	0.526	0.526	0.526	0.526	0.539	0.526	0.539	0.526	0.526	0.579
24	0.868	0.925	0.717	0.830	0.755	0.830	0.566	0.849	0.811	0.906	0.868	0.811	0.906	0.830	0.774	0.868	0.755	0.736	0.868	0.736
25	0.678	0.685	0.685	0.685	0.658	0.644	0.685	0.685	0.685	0.685	0.685	0.685	0.685	0.685	0.685	0.644	0.623	0.644	0.658	0.685
26	0.795	0.769	0.744	0.821	0.769	0.744	0.744	0.744	0.769	0.821	0.744	0.769	0.821	0.744	0.744	0.744	0.718	0.744	0.795	0.744
27	0.932	0.943	0.909	0.920	0.920	0.955	0.920	0.943	0.909	0.943	0.920	0.920	0.943	0.920	0.955	0.920	0.920	0.920	0.920	0.920
28	0.974	0.974	0.974	0.974	0.921	0.921	0.921	0.974	0.974	0.974	0.974	0.974	0.974	0.974	0.921	0.921	0.921	0.921	0.921	0.974
29	0.797	0.788	0.809	0.817	0.813	0.805	0.817	0.822	0.809	0.788	0.809	0.809	0.788	0.809	0.817	0.805	0.822	0.813	0.817	0.822
30	0.839	1.000	0.806	1.000	0.774	1.000	0.742	0.935	0.806	1.000	0.935	0.806	1.000	1.000	0.742	1.000	0.935	0.742	0.742	0.677
31	0.814	0.884	0.535	0.837	0.558	0.674	0.535	0.651	0.535	0.884	0.837	0.535	0.884	0.535	0.535	0.674	0.744	0.535	0.535	0.535
32	0.935	0.968	0.903	0.968	0.935	0.935	0.935	0.935	0.903	0.968	1.000	0.968	0.968	0.935	0.935	0.935	0.935	0.935	0.935	0.935
33	0.938	0.953	0.832	0.893	0.922	0.964	0.924	0.919	0.923	0.952	0.700	0.923	0.952	0.748	0.934	0.962	0.907	0.964	0.907	0.907
34	0.940	0.931	0.945	0.945	0.943	0.938	0.945	0.945	0.945	0.931	0.945	0.945	0.945	0.945	0.938	0.945	0.945	0.942	0.940	0.945
35	0.968	0.965	0.970	0.970	0.970	0.962	0.970	0.970	0.970	0.965	0.970	0.970	0.970	0.970	0.962	0.970	0.970	0.967	0.970	0.970
36	0.918	0.959	0.918	0.918	0.959	0.918	0.898	0.939	0.918	0.959	0.918	0.918	0.959	0.918	0.898	0.918	0.939	0.918	0.918	0.878
37	0.678	0.685	0.685	0.685	0.658	0.644	0.685	0.685	0.685	0.685	0.685	0.685	0.685	0.685	0.644	0.637	0.644	0.658	0.685	0.685
38	0.609	0.652	0.587	0.630	0.587	0.543	0.587	0.565	0.587	0.652	0.609	0.587	0.652	0.587	0.543	0.637	0.543	0.587	0.587	0.587
39	0.886	0.879	0.883	0.875	0.871	0.860	0.886	0.841	0.883	0.879	0.879	0.883	0.879	0.886	0.886	0.860	0.848	0.871	0.875	0.720
40	0.943	0.943	0.887	0.962	0.943	0.962	0.943	0.943	0.962	0.943	0.962	0.943	0.962	0.962	0.943	0.962	0.943	0.943	0.962	0.962
41	0.943	0.920	0.950	0.950	0.950	0.927	0.950	0.950	0.950	0.920	0.950	0.950	0.920	0.950	0.950	0.927	0.950	0.950	0.950	0.950
42	0.917	0.917	0.917	0.917	0.917	0.750	0.917	0.917	0.917	0.917	0.917	0.917	0.917	0.917	0.917	0.917	0.917	0.917	0.917	0.917
43	0.550	0.550	0.550	0.600	0.850	0.800	0.500	0.850	0.550	0.550	0.550	0.550	0.550	0.600	0.500	0.850	0.500	0.600	0.500	0.750
44	0.750	0.750	0.600	0.850	0.850	0.750	0.450	0.800	0.600	0.750	0.850	0.600	0.750	0.800	0.450	0.750	0.850	0.650	0.800	0.850
45	0.732	0.724	0.704	0.704	0.748	0.736	0.708	0.724	0.704	0.724	0.704	0.704	0.724	0.704	0.708	0.736	0.728	0.720	0.748	0.704
46	0.893	0.902	0.830	0.874	0.876	0.906	0.869	0.867	0.890	0.906	0.537	0.889	0.906	0.365	0.872	0.906	0.861	0.874	0.905	0.846
47	0.500	0.526	0.184	0.526	0.447	0.579	0.184	0.447	0.526	0.553	0.447	0.526	0.184	0.447	0.632	0.474	0.526	0.500	0.184	0.184
48	0.822	0.822	0.822	0.822	0.822	0.805	0.822	0.822	0.822	0.822	0.822	0.822	0.822	0.822	0.822	0.805	0.822	0.822	0.822	0.822
49	0.997	0.996	0.994	0.997	0.996	0.997	0.995	0.984	0.994	0.996	0.966	0.994	0.996	0.996	0.997	0.992	0.996	0.996	0.997	0.958
50	0.926	0.926	0.870	0.926	0.963	1.000	0.870	0.944	0.889	0.926	0.926	0.907	0.926	0.926	0.870	0.981	0.981	0.852	0.963	0.944
51	0.937	0.936	0.921	0.922	0.919	0.929	0.919	0.911	0.921	0.936	0.924	0.921	0.936	0.923	0.919	0.929	0.911	0.917	0.915	0.913
52	0.954	0.983	0.812	0.642	0.883	0.992	0.812	0.925	0.812	0.983	0.642	0.921	0.							

#	Average
RF:PV:SVM-L	9366.585
RF	9405.814
RF:LV:SVM-L	9747.692
RF:BL:NN	10070.177
XG:BL:NN	10950.428
XG:LV:NN	11293.207
RF:PV:NN	11333.238
RF:LV:NN	12022.431
XG:BL:SVM-L	12321.998
XG:LV:SVM-L	21223.086
RF:BL:SVM-L	21298.246
XG:BL:SVM	22031.821
XG:LV:SVM	22223.497
RF:LV:SVM	22243.441
RF:PV:SVM	22251.338
RF:BL:SVM	22252.489
XG	41666.241

Tabela A.4: Média na regressão - out of sample - 50 árvores

#	No. of winners
RF	28
RF:PV:SVM-L	22
XG:BL:NN	10
XG:BL:SVM-L	9
XG:LV:NN	7
RF:PV:NN	5
RF:BL:NN	5
RF:LV:NN	3
RF:BL:SVM-L	3
RF:LV:SVM-L	2
XG:LV:SVM-L	1
RF:PV:SVM	1
XG	0
XG:BL:SVM	0
RF:LV:SVM	0
RF:BL:SVM	0
XG:LV:SVM	0

Tabela A.5: Campeões na regressão - out of sample - 50 árvores

#	RF	RF-BL-SVM-L	RF-BL-SVM	RF-BL-NN	RF-LV-SVM-L	RF-LV-SVM	RF-LV-NN	RF-PV-SVM-L	RF-PV-SVM	RF-PV-NN	XG	XG-BL-SVM-L	XG-BL-SVM	XG-BL-NN	XG-LV-SVM-L	XG-LV-SVM	XG-LV-NN
1	0.265	0.341	2.127	2.318	0.350	0.760	0.342	0.328	1.134	0.295	6.371	0.304	0.719	0.376	0.299	0.569	0.342
2	0.427	0.490	0.674	0.470	0.460	0.646	0.474	0.500	0.653	1.141	0.444	0.444	0.438	0.416	0.450	0.422	0.418
3	0.410	0.403	0.806	0.920	0.426	0.478	0.919	0.418	0.551	0.918	1.278	0.404	0.490	0.413	0.414	0.472	0.529
4	2.671	2.706	3.629	2.655	2.771	1.739	2.992	1.777	4.799	2.694	2.969	35.876	2.969	2.615	2.769	2.615	2.683
5	39.303	29.607	87.849	46.198	40.533	PUC-Rio - Certificação Digital Nº 162187/CA	40.533	40.533	40.533	40.533	40.533	40.533	40.533	40.533	40.533	40.533	40.533
6	33.677	49.892	129.568	42.372	47.21	19.247	15.966	15.876	19.599	15.837	25.478	46.601	124.872	37.700	57.376	82.999	46.337
7	11.165	16.589	19.724	15.600	15.160	19.247	15.966	15.876	19.599	15.837	25.478	9.355	16.853	19.147	17.852	15.292	15.992
8	1134.106	1211.786	1457.150	1320.176	1271.163	1455.079	1337.880	1292.879	1456.363	1511.416	4106.115	1008.477	1440.404	1467.091	1661.626	1459.140	1438.767
9	1134.615	1215.430	1457.163	1322.800	1271.048	1455.068	1344.840	1295.122	1456.364	1514.772	4106.115	1008.477	1440.404	1433.952	1661.626	1459.140	1470.151
10	91.861	344.854	629.644	93.686	119.565	622.239	98.744	102.841	627.932	93.525	1086.988	126.570	594.757	197.894	349.660	602.525	139.117
11	188.897	181.952	275.034	234.194	214.115	274.783	188.378	223.815	275.179	202.100	437.570	120.589	251.652	205.932	183.660	252.780	144.225
12	939.532	2678.960	3330.957	972.317	938.208	3332.585	1662.481	922.855	3333.382	1173.175	6849.109	1551.867	3268.656	1323.410	1710.428	3329.195	2349.738
13	800.022	905.763	1019.133	1010.064	815.675	1018.616	124.062	859.120	1019.251	1343.836	2462.279	840.330	1014.709	1248.636	1363.475	1017.363	1204.579
14	210.021	148.862	138.488	245.198	210.673	138.345	214.507	219.018	138.310	241.868	362.152	178.766	138.786	415.018	348.365	138.619	316.574
15	1088.878	1819.397	2292.282	1196.849	1170.354	2283.789	1432.708	1148.163	2291.253	1262.770	4483.964	1134.099	2258.874	849.050	1189.758	2265.174	918.868
16	13.550	14.299	23.525	14.623	15.523	18.605	14.917	14.462	19.679	14.277	47.029	14.082	18.313	13.920	13.984	16.038	13.737
17	519.226	683.379	787.767	502.379	516.298	748.464	812.995	507.368	769.154	660.889	1012.596	490.551	783.079	463.072	503.675	748.571	664.255
18	3.286	3.456	3.490	3.309	3.360	3.471	3.266	3.415	3.477	3.248	4.389	3.663	3.667	3.339	3.688	3.673	3.315
19	190.070	318.350	485.301	291.565	244.583	482.104	233.899	237.011	484.918	232.901	952.864	221.378	475.633	212.641	430.344	477.327	171.135
20	477.899	290.172	294.644	303.977	339.466	294.179	535.194	327.805	294.727	304.552	549.944	331.860	294.614	494.006	445.414	294.325	501.396
21	2411.062	1019.608	1031.900	4774.816	4972.351	11012.092	6633.744	4277.651	11027.701	6704.388	23848.568	6090.975	10393.055	7994.009	15912.391	10990.240	6723.758
22	2746.028	4221.644	5939.379	3135.342	3054.770	5239.336	3054.770	5239.336	3054.770	5239.336	3054.770	5239.336	3054.770	5239.336	3054.770	5239.336	3054.770
23	3158.008	4103.790	2970.686	2906.626	3853.425	4374.756	2928.124	4049.186	3373.646	3032.853	3760.019	3969.019	4090.360	2869.621	3509.170	3820.233	3248.381
24	775.383	1016.917	2522.242	762.051	697.534	2485.259	1316.969	710.480	2518.466	1040.807	3260.350	935.424	2420.197	516.490	412.413	2454.066	870.664
25	501.778	689.483	898.589	623.200	543.588	897.852	429.629	508.657	898.764	373.289	2254.681	541.634	878.663	430.399	611.170	888.960	449.685
26	4541.614	5385.036	5615.599	5238.984	5616.351	10091.658	5075.026	5616.364	5828.447	12280.704	5080.148	5597.533	5852.808	6089.676	5616.002	6476.691	
27	8529.780	18140.408	19415.859	9275.225	9511.304	19418.395	13140.574	8715.457	19415.513	12315.097	34598.641	10557.763	19217.377	9770.486	11823.907	19416.999	9179.090
28	8088.439	19354.782	20705.527	7991.539	8153.952	20708.864	14194.072	7724.051	20708.910	8799.363	36557.031	10652.043	20476.262	9545.484	12020.780	20705.275	8814.996
29	35527.409	87565.288	90424.146	38907.869	38029.831	90428.989	38753.925	37173.980	90429.081	38113.126	155167.660	46892.257	89366.466	35359.670	69824.847	90271.563	44327.863
30	9569.780	18694.643	19948.929	10174.235	9668.490	19951.902	15164.634	9097.280	19951.978	13515.320	38327.386	10728.031	19728.332	10611.075	14542.093	19949.486	9170.504
31	30803.008	84640.099	87791.384	32936.048	31279.866	87796.134	35079.502	30247.544	87796.970	35110.031	136417.321	43422.788	86728.374	34199.498	83682.812	87731.439	35199.682
32	24090.431	70117.602	23749.483	26685.234	80122.852	28973.574	24447.774	80122.928	26689.816	142752.429	35823.094	78987.444	35064.360	96026.402	80120.668	33692.137	
33	55499.262	81896.902	83242.020	59383.532	57219.803	83244.330	59709.016	56677.384	83244.330	61361.063	154128.602	65339.423	82993.581	66570.011	85902.259	83243.148	71114.333
34	582.672	628.675	718.095	677.177	593.571	718.408	627.700	593.571	718.432	823.233	1260.115	601.990	711.979	897.983	870.919	717.841	613.567
35	26564.867	77347.086	80152.305	32238.424	28314.132	80156.865	36001.646	27304.907	80156.952	31304.993	156033.756	38698.481	79437.308	32987.576	116978.558	80153.324	32194.204
36	27457.010	83707.517	86883.754	27076.800	28020.208	86888.513	34734.081	26796.392	86889.221	30114.196	139620.241	42192.460	85969.681	35040.311	95697.790	86707.741	27916.997
37	461.164	636.116	851.299	477.656	452.576	851.334	629.850	461.164	851.337	476.781	1731.967	501.755	836.385	567.783	671.188	846.704	314.970
38	39229.416	78290.934	82532.146	48399.398	38768.145	82532.146	48399.398	38768.145	82532.146	48399.398	79946.094	48351.620	79946.094	48351.620	79946.094	48351.620	79946.094
39	2757.583	4733.188	5318.572	2865.860	2615.697	5318.572	2865.860	2615.697	5318.572	2865.860	2615.697	5318.572	2865.860	2615.697	5318.572	2865.860	2615.697
40	4626.457	19082.151	20730.981	8460.382	8303.458	20732.555	10297.134	7259.556	20734.784	9411.036	39912.553	9138.794	20537.307	9216.418	12004.617	20711.597	7986.970
41	52908.464	82395.216	83989.265	50842.658	52983.724	83992.026	60972.776	49537.533	83992.026	54937.222	162789.407	61045.816	83671.681	49246.660	61669.417	83992.026	56120.330
42	19930.332	85504.946	89218.054	22232.166	23620.507	89221.019	27154.389	21090.420	89224.580	23434.404	146626.600	38440.669	87851.569	20598.753	49357.257	89042.621	24827.569
43	3073.484	4437.282	5001.876	3454.516	2820.546	5001.877	3474.079	2787.621	5003.311	2439.806	8652.711	3658.061	4966.308	3472.456	3334.727	4992.628	3269.766
44	2443.727	4526.958	5068.356	2472.508	2451.715	5069.934	4671.932	2308.777	5070.124	2153.979	10840.395	2996.402	5019.021	2421.734	3117.267	5067.718	2303.047
45	4028.925	5149.477	5322.620	4443.030	4265.957	5323.142	4104.160	4132.131	5323.141	7897.504	12445.525	3945.853	5306.536	4931.048	5494.791	5323.114	5260.549
46	8433.543	19295.173	20724.386	9897.634	8565.410	20726.963	9232.435	8217.167	20727.877	9417.368	40404.816	9532.684	20531.990	8859.650	12217.518	20721.205	8079.529
47	2819.912	4887.020	5354.960	2624.688	3356.449	5356.116	2624.688	3356.449	5356.116	2624.688	3356.449	5356.116	2624.688	3356.449	5356.116	2624.688	3356.449
48	28348.123	81701.957	84826.124	29584.556	29080.280	84831.431	30926.337	27226.176	84831.513	35176.458	154545.073	39582.532	83807.823	31032.787	79406.126	84814.589	32709.989
49	25209.218	82431.376	85397.764	28187.439	25490.562	85402.763	28170.109	25490.562	85402.763	28170.109	25490.562	85402.763	28170.109	25490.562	85402.763	28170.109	25490.562
50	28714.609	80227.381	83199.135	32861.160	30353.463	83203.885	36158.510	28671.906	83204.167	36204.848	157222.423	40409.656	82266.545	37244.497	108607.279	83110.850	33971.692
51	40078.556	76606.864	78590.856	44462.915	43072.594	78594.369	50196.354	40078.556	78594.394	49648.545	167727.896	54931.514	78132.206	42945.158	88624.603	78590.592	55414.457
52	744.271	853.709	1041.434	612.262	554.995	1041.730	853.944	609.337	1042.131	604.085	2215.328	855.633	1037.946	397.489	528.179	1041.517	819.399
53	20090.910	81549.500	84737.586	30140.182	28034.832	84739.900	32192.029										

#	Average
RF:BL:SVM-L:M	84.611
RF:EL:SVM-L:M	84.597
XG:BL:SVM-L:M	84.588
RF:BL:SVM-L	84.472
XG:BL:SVM-L	84.372
RF	84.099
RF:EL:NN:M	83.880
RF:BL:NN:M	83.739
XG:EL:SVM-L:M	83.727
XG:BL:NN	83.618
XG:BL:NN:M	83.412
RF:BL:NN	83.360
XG	83.330
XG:EL:NN:M	81.303
XG:BL:SVM:M	80.603
RF:BL:SVM:M	80.554
RF:EL:SVM:M	80.496
XG:EL:SVM:M	79.885
XG:BL:SVM	76.576
RF:BL:SVM	75.787

Tabela A.7: Média na classificação - out of sample - 100 árvores

#	No. of winners
XG:BL:SVM-L	19
XG:BL:SVM-L:M	17
RF:BL:SVM-L	15
RF:EL:NN:M	14
RF	14
RF:BL:NN:M	14
RF:EL:SVM-L:M	13
RF:BL:SVM-L:M	13
RF:EL:SVM:M	11
XG	11
RF:BL:NN	11
RF:BL:SVM:M	11
XG:BL:SVM:M	10
RF:BL:SVM	10
XG:BL:SVM	9
XG:EL:NN:M	9
XG:EL:SVM-L:M	9
XG:BL:NN	8
XG:EL:SVM:M	7
XG:BL:NN:M	6

Tabela A.8: Campeões na classificação - out of sample - 100 árvores

PUC-Rio - Certificação Digital N° 1621782/CA

#	RF	RF:BL:SVM-L	RF:BL:SVM	RF:BL:NN	XG	XG:BL:SVM-L	XG:BL:SVM	XG:BL:NN	RF:BL:SVM:M	RF:BL:SVM-L:M	RF:BL:NN:M	RF:EL:SVM:M	RF:EL:SVM-L:M	RF:EL:NN:M	XG:BL:SVM:M	XG:BL:SVM-L:M	XG:BL:NN:M	XG:EL:SVM:M	XG:EL:SVM-L:M	XG:EL:NN:M
1	1.000	1.000	0.833	1.000	0.833	1.000	0.833	1.000	0.833	1.000	1.000									
2	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000									
3	0.822	0.790	0.739	0.841	0.911	0.885	0.904	0.904	0.771	0.796	0.892	0.771	0.796	0.898	0.866	0.898	0.885	0.866	0.898	0.885
4	0.695	0.701	0.706	0.706	0.722	0.701	0.706	0.759	0.706	0.701	0.706	0.706	0.706	0.706	0.701	0.706	0.727	0.706	0.706	0.727
5	0.988	0.988	0.983	0.980	0.980	0.994	0.980	0.983	0.983	0.974	0.988	0.988	0.980	0.980	0.994	0.962	0.980	0.980	0.980	0.980
6	0.972	0.965	0.958	0.958	0.951	0.965	0.951	0.951	0.958	0.965	0.951	0.958	0.965	0.958	0.951	0.965	0.951	0.958	0.951	0.951
7	0.700	0.680	0.740	0.680	0.760	0.640	0.740	0.620	0.740	0.680	0.660	0.680	0.680	0.680	0.740	0.660	0.740	0.640	0.680	0.680
8	0.750	0.708	0.764	0.708	0.750	0.708	0.764	0.708	0.764	0.722	0.764	0.764	0.708	0.708	0.764	0.708	0.736	0.764	0.764	0.764
9	0.986	0.988	0.896	0.972	0.914	0.991	0.845	0.935	0.938	0.988	0.919	0.938	0.988	0.928	0.873	0.988	0.940	0.873	0.988	0.900
10	0.996	0.996	0.990	0.987	0.950	0.991	0.962	0.970	0.990	0.996	0.987	0.989	0.996	0.987	0.962	0.991	0.950	0.961	0.971	0.962
11	0.948	0.941	0.926	0.948	0.941	0.948	0.926	0.948	0.926	0.941	0.948	0.926	0.941	0.956	0.926	0.948	0.926	0.956	0.926	0.926
12	0.963	0.963	0.972	0.954	0.963	0.954	0.963	0.954	0.972	0.963	0.954	0.963	0.954	0.963	0.954	0.963	0.954	0.954	0.954	0.954
13	0.769	0.827	0.788	0.827	0.865	0.904	0.788	0.885	0.788	0.827	0.827	0.788	0.827	0.788	0.904	0.827	0.827	0.865	0.865	0.846
14	0.832	0.832	0.867	0.838	0.855	0.832	0.867	0.867	0.867	0.832	0.832	0.832	0.832	0.832	0.867	0.832	0.832	0.850	0.838	0.867
15	0.800	0.830	0.741	0.778	0.778	0.822	0.741	0.778	0.741	0.830	0.778	0.741	0.830	0.778	0.741	0.815	0.815	0.719	0.793	0.785
16	0.935	0.935	0.870	0.924	0.967	0.967	0.859	0.967	0.935	0.924	0.935	0.924	0.935	0.924	0.978	0.935	0.935	0.978	0.935	0.880
17	0.911	0.903	0.069	0.806	0.806	0.940	0.242	0.823	0.827	0.919	0.657	0.827	0.919	0.774	0.831	0.935	0.794	0.839	0.931	0.794
18	0.526	0.509	0.439	0.439	0.534	0.450	0.472	0.537	0.553	0.515	0.439	0.553	0.520	0.439	0.537	0.477	0.550	0.523	0.507	0.482
19	0.333	0.333	0.485	0.364	0.273	0.303	0.485	0.364	0.333	0.333	0.364	0.333	0.333	0.333	0.424	0.364	0.333	0.424	0.364	0.303
20	0.960	0.960	0.920	0.920	0.920	0.880	0.920	0.960	0.920	0.960	0.920	0.920	0.960	0.920	0.920	0.880	0.960	0.920	0.920	0.920
21	0.623	0.584	0.597	0.662	0.636	0.610	0.597	0.649	0.597	0.584	0.597	0.584	0.597	0.662	0.597	0.649	0.597	0.597	0.597	0.597
22	0.788	0.818	0.394	0.818	0.818	0.818	0.394	0.818	0.788	0.818	0.818	0.788	0.818	0.788	0.848	0.818	0.788	0.848	0.788	0.788
23	0.539	0.513	0.526	0.500	0.566	0.526	0.500	0.566	0.526	0.579	0.526	0.526	0.526	0.513	0.526	0.539	0.487	0.539	0.487	0.539
24	0.887	0.906	0.604	0.868	0.792	0.887	0.453	0.774	0.830	0.887	0.868	0.830	0.887	0.868	0.774	0.887	0.755	0.736	0.887	0.736
25	0.671	0.678	0.685	0.685	0.664	0.719	0.685	0.623	0.685	0.678	0.685	0.678	0.685	0.705	0.685	0.719	0.630	0.685	0.671	0.685
26	0.744	0.769	0.744	0.846	0.795	0.769	0.744	0.795	0.744	0.769	0.846	0.744	0.769	0.846	0.744	0.769	0.744	0.744	0.821	0.744
27	0.909	0.943	0.932	0.920	0.932	0.977	0.920	0.932	0.932	0.943	0.932	0.920	0.943	0.920	0.977	0.920	0.932	0.932	0.932	0.920
28	0.974	0.974	0.974	0.974	0.921	0.921	0.921	0.921	0.974	0.974	0.974	0.974	0.974	0.974	0.921	0.921	0.921	0.921	0.921	0.921
29	0.788	0.793	0.714	0.817	0.822	0.805	0.830	0.826	0.714	0.793	0.809	0.718	0.788	0.805	0.830	0.805	0.826	0.817	0.826	0.826
30	0.903	1.000	0.806	0.935	0.806	1.000	0.710	0.968	0.806	1.000	0.935	0.806	1.000	0.935	0.710	1.000	0.968	0.710	0.710	0.710
31	0.860	0.860	0.535	0.535	0.558	0.767	0.535	0.767	0.535	0.860	0.860	0.535	0.860	0.837	0.535	0.767	0.767	0.535	0.605	0.535
32	0.968	0.968	0.871	0.968	0.935	0.935	0.935	0.935	0.871	0.968	1.000	0.968	0.968	0.935	0.935	0.935	0.935	0.935	0.935	0.935
33	0.946	0.957	0.792	0.895	0.932	0.968	0.900	0.915	0.903	0.959	0.866	0.903	0.959	0.897	0.909	0.967	0.915	0.931	0.964	0.927
34	0.942	0.938	0.945	0.938	0.943	0.940	0.945	0.940	0.945	0.938	0.943	0.945	0.938	0.943	0.945	0.940	0.937	0.945	0.942	0.945
35	0.970	0.961	0.970	0.970	0.970	0.962	0.970	0.970	0.970	0.961	0.970	0.970	0.970	0.970	0.962	0.970	0.970	0.970	0.959	0.970
36	0.939	0.959	0.816	0.918	0.939	0.918	0.857	0.918	0.816	0.959	0.918	0.816	0.959	0.918	0.857	0.918	0.898	0.776	0.898	0.898
37	0.671	0.678	0.685	0.699	0.664	0.719	0.685	0.623	0.685	0.671	0.685	0.678	0.685	0.699	0.685	0.719	0.644	0.685	0.671	0.685
38	0.609	0.587	0.587	0.587	0.543	0.543	0.587	0.543	0.587	0.587	0.587	0.587	0.587	0.609	0.587	0.522	0.587	0.522	0.543	0.543
39	0.886	0.867	0.848	0.860	0.871	0.867	0.890	0.845	0.848	0.867	0.879	0.848	0.867	0.860	0.890	0.867	0.848	0.864	0.867	0.879
40	0.962	0.962	0.962	0.962	0.943	0.962	0.943	0.943	0.962	0.943	0.962	0.943	0.962	0.943	0.962	0.943	0.943	0.943	0.962	0.943
41	0.943	0.924	0.950	0.950	0.952	0.927	0.950	0.950	0.924	0.950	0.950	0.924	0.950	0.950	0.927	0.950	0.950	0.935	0.950	0.950
42	0.917	0.917	0.500	0.917	0.917	0.917	0.500	0.917	0.917	0.917	0.917									
43	0.550	0.550	0.400	0.600	0.850	0.650	0.500	0.800	0.400	0.550	0.750	0.400	0.550	0.500	0.600	0.800	0.400	0.600	0.800	0.800
44	0.800	0.850	0.600	0.900	0.900	0.700	0.450	0.800	0.600	0.850	0.900	0.600	0.850	0.900	0.450	0.700	0.800	0.400	0.900	0.900
45	0.732	0.716	0.704	0.704	0.740	0.704	0.704	0.708	0.704	0.716	0.720	0.704	0.716	0.724	0.704	0.736	0.704	0.732	0.704	0.704
46	0.822	0.822	0.822	0.822	0.822	0.805	0.822	0.822	0.822	0.822	0.822	0.822	0.822	0.831	0.822	0.805	0.822	0.822	0.822	0.822
47	0.944	0.944	0.704	0.926	1.000	1.000	0.741	0.963	0.852	0.944	0.944	0.833	0.944	0.926	0.815	1.000	0.963	0.741	0.981	0.963
48	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000									
49	0.978	0.978	0.956	0.956	0.911	0.978	0.933	0.911	0.956	0.978	0.956	0.956	0.978	0.956	0.911	0.978	0.911	0.911	0.956	0.911
50	0.936	0.941	0.908	0.928	0.921	0.931	0.921	0.911	0.908	0.941	0.927	0.908	0.941	0.929	0.921	0.931	0.912	0.919	0.917	0.918
51	0.963	0.983	0.713	0.971	0.892	0.996	0.808	0.950	0.713	0.983	0.946	0.708	0.983	0.967	0.808	0.996	0.950	0.738	0.967	0.642
52	0.892	0.901	0.819	0.881	0.880	0.911	0.866	0.867	0.878	0.904	0.785	0.878	0.904	0.872	0.864	0.910	0.874	0.864	0.908	0.866
53	0.474	0.526	0.184	0.474	0.447	0.553	0.184	0.447	0.553	0.579	0.421	0.553								

#	Average
RF:PV:SVM-L	9120.614
RF	9287.651
RF:LV:SVM-L	9428.282
XG:BL:NN	9524.839
RF:BL:NN	10008.330
XG:BL:SVM-L	10756.448
RF:PV:NN	11686.526
RF:LV:NN	11880.406
XG:LV:NN	12157.668
XG:LV:SVM-L	13249.619
RF:BL:SVM-L	20429.289
XG:BL:SVM	22052.620
XG:LV:SVM	22241.634
RF:LV:SVM	22244.135
RF:PV:SVM	22251.307
RF:BL:SVM	22252.490
XG	22741.264

Tabela A.10: Média na regressão - out of sample - 100 árvores

#	No. of winners
RF	22
RF:PV:SVM-L	19
XG:BL:NN	18
RF:BL:SVM-L	9
XG:LV:NN	8
XG:BL:SVM-L	7
RF:BL:NN	6
XG:LV:SVM-L	2
RF:LV:NN	1
RF:PV:NN	1
RF:LV:SVM-L	1
RF:PV:SVM	1
XG:LV:SVM	1
XG	0
XG:BL:SVM	0
RF:LV:SVM	0
RF:BL:SVM	0

Tabela A.11: Campeões na regressão - out of sample - 100 árvores

#	RF	RF:BL:SV:M-L	RF:BL:SV:M	RF:BL:NN	RF:LV:SV:M-L	RF:LV:SV:M	RF:LV:NN	RF:PV:SV:M-L	RF:PV:SV:M	RF:PV:NN	XG	XG:BL:SV:M-L	XG:BL:SV:M	XG:BL:NN	XG:LV:SV:M-L	XG:LV:SV:M	XG:LV:NN
1	0.263	0.337	2.125	0.289	0.338	0.762	0.334	0.327	1.136	0.290	2.685	0.293	0.782	0.277	0.334	0.511	0.277
2	0.426	0.488	0.615	0.668	0.471	0.458	0.658	0.473	0.499	0.664	0.382	0.445	0.437	0.405	0.451	0.414	0.408
3	0.413	0.403	0.806	0.925	0.426	0.479	0.501	0.418	0.553	0.447	0.752	0.410	0.498	0.438	0.417	0.444	0.414
4	2.665	2.706	3.629	2.660	2.777	2.777	2.777	2.777	2.777	2.777	2.777	2.692	3.037	2.663	2.777	2.599	2.657
5	37.551	27.970	87.861	48.608	44.2	PUC-Rio - Certificação Digital Nº 1621782/CA						33.899	87.703	31.120	47.075	84.448	31.666
6	34.894	43.980	129.548	41.050	44.2							38.778	125.457	56.985	40.730	122.609	37.780
7	11.093	17.337	16.822	16.718	19.248	16.553	16.989	19.600	17.589	13.292	14.276	17.722	19.234	17.722	19.234	17.846	19.074
8	1090.315	1029.556	1457.219	1306.806	1284.485	1454.784	1285.947	1311.554	1456.257	1300.962	2390.534	1112.469	1442.568	1389.422	1471.854	1458.007	1413.234
9	1090.485	1023.370	1457.221	1307.063	1284.710	1454.773	1429.692	1312.731	1456.254	1471.015	2390.912	1112.161	1442.568	1390.548	1470.497	1458.007	1670.783
10	92.149	191.789	629.615	95.032	124.074	622.227	127.578	107.692	627.795	164.204	496.316	99.528	599.106	111.003	187.262	615.958	102.777
11	185.774	153.397	274.952	240.165	274.741	256.934	224.979	275.147	209.829	265.879	118.225	256.415	249.139	209.941	264.972	166.552	
12	908.405	2146.117	3330.942	979.086	943.925	3333.009	1603.033	928.986	3333.430	1379.557	3910.082	1347.574	3281.238	1072.278	1526.828	3331.832	1415.183
13	781.302	830.321	1019.101	1016.823	874.695	1018.645	1329.279	987.327	1019.257	1357.686	1589.127	858.070	1015.426	1223.346	1061.310	1018.589	1356.674
14	210.592	163.871	138.496	245.037	208.127	138.371	201.438	212.873	138.334	221.405	258.941	159.297	138.820	393.138	410.095	138.560	342.752
15	1071.827	1472.264	2292.306	1172.961	1114.182	2285.299	1435.651	1091.688	2291.254	1302.347	2574.265	1028.705	2259.630	820.901	1192.871	2276.612	777.859
16	13.494	14.176	23.529	14.716	15.390	18.562	14.543	14.508	19.691	14.547	26.650	14.017	18.417	13.987	14.093	16.181	14.199
17	513.783	624.951	787.779	522.019	528.389	748.856	934.730	520.620	769.341	576.300	696.266	452.844	782.875	505.448	454.813	761.189	497.249
18	3.299	3.545	3.544	3.332	3.508	3.510	3.321	3.529	3.524	3.328	3.849	3.643	3.637	3.333	3.685	3.630	3.329
19	184.981	241.995	485.285	276.354	232.876	482.145	220.397	236.342	484.952	222.491	572.348	224.628	475.849	221.781	331.278	481.427	147.496
20	281.295	290.795	294.652	319.491	339.027	294.727	457.553	336.912	294.729	392.080	401.489	361.092	294.813	533.453	453.036	294.608	538.494
21	4365.260	9299.411	11031.837	4785.473	4706.695	11012.324	4623.988	4641.266	11027.603	6328.957	13139.765	5247.132	10958.876	5883.332	5857.653	11010.918	5197.504
22	2668.139	3092.948	5992.983	3151.963	2938.786	6042.207	2876.970	3416.674	3388.466	5834.374	5977.464	3276.142	3608.825	4022.296	3615.710	3828.554	2735.427
23	2404.469	2803.130	4103.788	3041.217	2938.098	3884.533	4040.816	2807.029	4045.897	3458.362	2501.799	2634.687	4092.315	3022.296	3615.710	3828.554	2735.427
24	773.192	603.429	2522.163	805.136	692.238	2484.231	1133.932	720.655	2518.058	1098.135	1477.213	738.821	247.216	536.834	409.944	2482.605	528.160
25	517.359	563.679	898.515	495.009	491.797	897.878	567.879	457.179	898.778	442.624	1427.145	497.587	882.000	480.055	617.633	896.393	544.052
26	4532.324	5201.048	5615.597	5093.202	5054.127	5616.358	7840.604	4923.926	5616.364	6413.364	8150.098	5038.920	5598.979	5110.505	5347.924	5616.318	6730.307
27	8353.633	16935.652	19415.905	9447.998	9095.797	19418.408	11083.042	8057.424	19418.513	11321.263	18624.148	9148.635	19233.200	9520.571	8838.947	19418.502	9632.940
28	8037.235	18147.963	20705.586	7490.140	7862.749	20708.878	8294.942	7581.883	20708.910	10406.826	19542.502	9213.144	20498.595	8481.631	9618.961	20708.802	9770.336
29	34165.153	84771.070	90424.115	35905.569	35738.537	90429.048	40675.749	34450.813	90429.081	39908.070	85845.681	41475.882	89699.547	33014.515	44643.593	90429.081	47636.222
30	9270.914	17575.833	19948.971	9852.848	9266.516	19951.917	9856.430	8914.313	19951.980	11429.612	9600.740	19751.338	8595.859	9088.245	19951.976	10125.622	
31	81055.636	81678.239	87791.444	32091.879	29910.698	87796.279	40549.351	29496.887	87796.969	42256.815	71007.734	36780.384	86775.281	31494.064	51168.573	87796.668	46369.648
32	24439.846	74075.974	80117.625	24499.656	25094.847	80122.881	31706.108	23905.550	80122.928	29594.870	70307.094	30586.911	79201.449	30725.369	34093.550	80122.923	32908.087
33	56412.046	80716.216	83242.122	59059.825	56761.451	83244.330	73515.610	56348.008	83244.330	69350.959	93406.277	62974.875	83027.967	56965.036	61678.010	83244.330	64549.094
34	543.188	585.286	718.003	659.152	551.943	718.407	1281.510	561.494	718.427	799.126	787.656	570.192	713.778	690.828	647.725	718.361	766.961
35	26878.049	74640.366	80152.391	33411.571	27929.972	80156.921	30478.475	27128.138	80156.952	35560.080	81039.290	32271.770	79483.554	29357.264	45057.124	80156.904	49595.565
36	26993.267	80667.146	86883.711	25331.781	27177.451	86888.724	30683.110	25953.975	86889.222	30600.082	71371.384	35393.388	86028.117	25850.074	48694.863	86887.843	35447.083
37	454.598	514.722	851.319	489.272	372.474	851.336	477.514	387.390	852.329	589.755	994.810	446.658	839.194	363.963	401.851	551.236	756.908
38	38424.582	38225.501	80252.116	37890.747	37489.484	80255.657	43788.099	36747.607	80255.658	45911.228	59856.790	43887.473	79864.434	46301.807	80255.658	48434.556	35474.427
39	2656437	4237.321	5318.660	2671.788	2496.426	5320.511	3736.200	2497.111	5324.354	6712.570	2800.384	5244.882	2880.340	2710.851	4513.633	4237.321	2011.861
40	6488.612	17596.681	20730.948	8250.733	7263.239	20733.107	9740.839	6728.226	20734.791	8503.962	20026.829	7592.486	20541.030	8537.474	9165.199	20731.322	10678.024
41	51465.369	89093.458	83989.310	49660.120	50701.015	83992.026	58093.261	48555.128	83992.026	61022.383	96170.511	55617.562	83707.657	45383.693	54689.198	83992.026	70489.646
42	19486.690	81865.646	89218.010	21758.370	21537.513	89221.900	26262.331	19631.053	89224.582	27449.950	72831.039	31663.276	87998.163	18962.016	38087.736	89199.008	40340.158
43	3057.819	3963.204	5001.807	3386.240	2742.488	5002.113	3301.375	2718.819	5003.325	3555.466	5348.280	3234.277	4969.353	3360.137	3674.254	5001.795	3727.576
44	2412.897	4104.522	5068.414	2403.370	2288.756	5069.928	3783.136	2627.533	5070.124	2892.992	6187.982	2369.460	5024.563	2302.684	3255.649	5069.773	1967.129
45	3974.540	4995.126	5322.602	4202.566	4204.897	5323.142	5635.016	4292.195	5323.143	6407.556	8001.484	3928.042	5308.424	4558.153	5115.327	5323.141	5238.192
46	8310.453	17498.086	20724.368	10086.206	8297.016	20727.201	9677.926	8196.070	20727.887	9470.949	21788.947	7699.716	20528.169	7251.037	8850.200	20727.512	10869.193
47	2782.793	4473.802	5354.928	2619.417	2572.771	5356.463	6870.446	2636.071	5356.536	5184.807	6347.438	3226.930	5304.201	2886.925	3184.081	5356.417	2357.094
48	2172.855	7880.669	84826.230	31815.446	27038.924	84831.456	40546.660	25992.239	84831.513	27380.764	79474.896	32991.573	83935.109	24611.480	35467.544	84830.989	31908.817
49	25400.897	79509.907	85397.814	29463.921	26620.186	85402.765	36818.415	25798.810	85402.779	30049.500	84381.520	31066.552	84686.283	27282.327	35100.5		

#	Average
XG:BL:SVM-L:M	83.728
RF:BL:SVM-L	83.707
RF:BL:SVM-L:M	83.647
XG:BL:SVM-L	83.544
RF	83.129
XG	82.973

Tabela A.13: Média na classificação - out of sample - 500 árvores

#	No. of winners
XG:BL:SVM-L	15
XG	14
XG:BL:SVM-L:M	14
RF:BL:SVM-L	13
RF:BL:SVM-L:M	12
RF	11

Tabela A.14: Campeões na classificação - out of sample - 500 árvores

#	RF	RF:BL:SVM-L	XG	XG:BL:SVM-L	RF:BL:SVM-L:M	XG:BL:SVM-L:M
1	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000
2	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000
3	0.822	0.783	0.917	0.885	0.796	0.866
4	0.690	0.695	0.727	0.679	0.695	0.679
5	0.988	0.988	0.988	0.994	0.988	0.994
6	0.979	0.951	0.972	0.979	0.951	0.979
7	0.720	0.640	0.740	0.680	0.640	0.680
8	0.750	0.722	0.722	0.736	0.722	0.736
9	0.981	0.988	0.972	0.991	0.988	0.988
10	0.996	0.996	0.982	0.994	0.996	0.994
11	0.948	0.948	0.948	0.956	0.948	0.956
12	0.963	0.963	0.963	0.945	0.963	0.945
13	0.885	0.885	0.904	0.962	0.885	0.962
14	0.838	0.832	0.838	0.803	0.832	0.803
15	0.800	0.822	0.815	0.822	0.822	0.822
16	0.935	0.935	0.978	0.957	0.935	0.978
17	0.911	0.919	0.863	0.960	0.923	0.956
18	0.509	0.512	0.553	0.455	0.512	0.493
19	0.273	0.364	0.303	0.333	0.333	0.364
20	0.960	0.960	0.920	0.880	0.960	0.880
21	0.610	0.597	0.649	0.610	0.597	0.610
22	0.818	0.818	0.758	0.818	0.818	0.818
23	0.526	0.539	0.539	0.513	0.553	0.526
24	0.887	0.906	0.849	0.906	0.887	0.887
25	0.658	0.685	0.678	0.692	0.685	0.692
26	0.744	0.769	0.821	0.821	0.769	0.821
27	0.932	0.943	0.966	0.943	0.943	0.943
28	0.974	0.974	0.974	0.921	0.974	0.921
29	0.801	0.788	0.817	0.755	0.788	0.755
30	0.935	1.000	0.806	1.000	1.000	1.000
31	0.767	0.860	0.651	0.744	0.860	0.744
32	1.000	1.000	0.935	1.000	1.000	1.000

Tabela A.15: Resultados em *datasets* de classificação - out of sample - 500 árvores

#	Average
RF:PV:SVM-L	8241.258
XG	8274.155
XG:BL:SVM-L	8386.829
RF	8511.247
RF:BL:SVM-L	14921.838

Tabela A.16: Média na regressão - out of sample - 500 árvores

#	No. of winners
XG	16
RF:PV:SVM-L	13
RF	8
XG:BL:SVM-L	8
RF:BL:SVM-L	3

Tabela A.17: Campeões na regressão - out of sample - 500 árvores

#	PUC-Rio - Certificação Digital Nº 1621782/CA				XG:BL:SVM-L
1	0.260	0.329	0.317	0.249	0.340
2	0.424	0.488	0.473	0.415	0.445
3	0.413	0.403	0.418	0.406	0.405
4	2.657	2.706	2.702	2.647	2.690
5	41.144	39.072	45.540	40.993	30.978
6	33.866	41.059	41.317	38.220	43.460
7	10.655	17.810	17.303	10.021	15.003
8	1061.714	1228.726	1262.278	1219.519	1544.453
9	1059.652	1228.697	1262.323	1220.635	1552.971
10	90.069	101.306	108.241	94.444	95.894
11	185.316	228.053	222.654	146.536	176.536
12	907.108	919.072	858.342	1093.842	995.374
13	790.627	885.612	866.075	818.931	929.211
14	208.501	223.961	225.177	248.007	289.136
15	984.363	939.832	976.933	1098.591	968.685
16	13.797	14.096	14.419	13.767	13.923
17	499.222	485.089	487.913	434.956	438.114
18	3.271	3.529	3.512	3.268	3.649
19	186.709	219.230	238.151	230.751	234.147
20	299.248	302.154	317.726	364.054	392.794
21	4387.032	5617.175	4577.657	4410.146	4167.657
22	2694.193	2870.325	2928.530	2490.458	2651.706
23	2452.790	2491.106	2963.621	2245.754	2487.053
24	781.397	744.652	729.663	572.284	669.546
25	517.117	442.606	417.912	529.077	470.969
26	4526.620	4740.065	4763.860	4800.550	4456.372
27	7941.046	11072.195	7611.808	7643.059	7915.326
28	8229.611	11921.002	8044.483	8070.641	8305.666
29	34888.723	66181.934	34398.102	36895.322	36642.884
30	8899.974	11788.427	8591.879	8381.092	8498.011
31	30165.594	61971.281	27842.607	28672.013	30584.821
32	24134.727	54648.323	23116.539	23288.317	22919.300
33	55985.830	72438.023	54943.640	56141.001	57009.422
34	531.014	566.550	530.536	576.152	576.819
35	26493.693	56497.706	26629.105	25941.514	26791.883
36	26929.022	60312.660	26090.015	24348.347	26235.562
37	428.602	404.068	391.752	417.584	412.834
38	38084.491	63029.379	36482.902	38231.910	38308.450
39	2739.969	2541.549	2401.208	2672.098	2541.869
40	6483.348	9448.796	6621.425	6555.247	6275.083
41	49502.266	70288.508	46256.286	47272.006	45882.216
42	19035.163	57409.978	18304.769	17995.441	18572.274
43	2971.319	2647.927	2675.338	2806.820	2726.772
44	2326.385	2336.446	2183.285	2473.734	2412.742
45	3907.868	4090.860	3892.934	3866.654	3718.463
46	8151.133	10564.422	7817.916	7562.741	7132.177
47	2563.053	2894.293	2434.736	2661.181	2606.767
48	26408.837	59406.758	24986.076	22558.028	23866.918

Tabela A.18: Resultados em *datasets* de regressão - out of sample - 500 árvores

B

Aspectos estruturais das árvores de decisão

As próximas figuras representam a estrutura das árvores em cada exemplo. Para muitas dessas, o algoritmo de *random forest* gera as árvores com o mesmo número de folhas em cada instância. Por outro lado, o *XGBoost* demonstra uma distribuição mais homogênea entre os números de folhas de cada árvore de decisão.

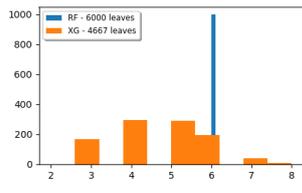


Figura B.1: Connectionist-benchmark

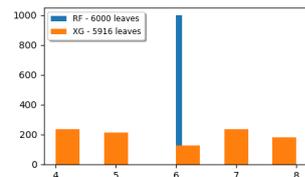


Figura B.2: Chess-king-rook-vs-king-pawn

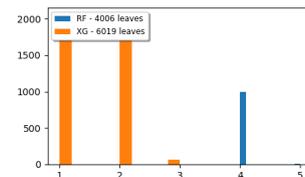


Figura B.3: Soybean-small

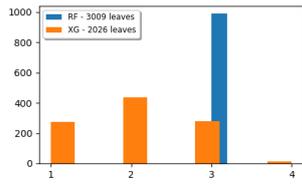


Figura B.4: Acute-inflammations-2

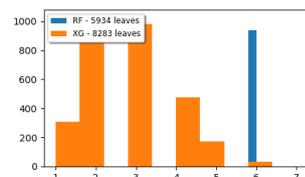


Figura B.5: Wine

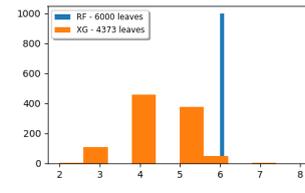


Figura B.6: Monks-problems-1

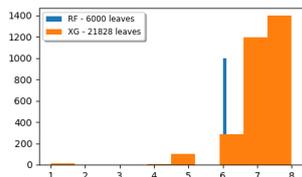


Figura B.7: Balance-scale

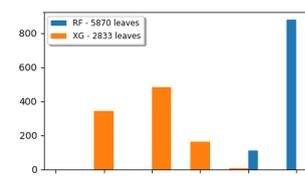


Figura B.8: Spectf-heart

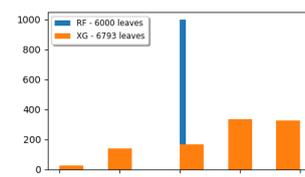


Figura B.9: Spambase

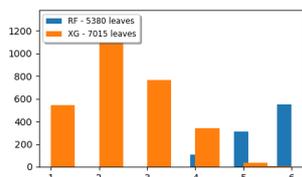


Figura B.10: Iris

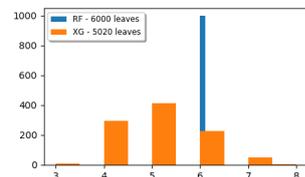


Figura B.11: Breast-cancer-wisconsin-prognostic

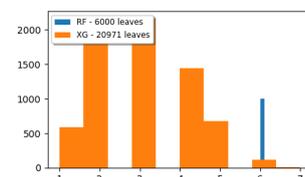


Figura B.12: Image-segmentation

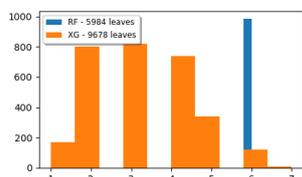


Figura B.13: Seeds

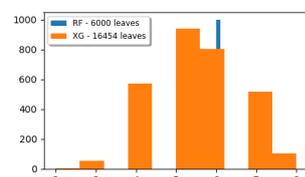


Figura B.14: Echocardiogram

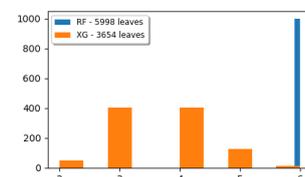


Figura B.15: Hepatitis

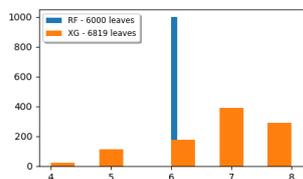


Figura B.16: Blood-transfusion-service-center

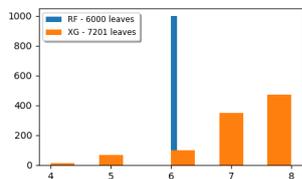


Figura B.17: Seismic-bumps

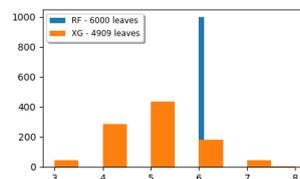


Figura B.18: Ionosphere

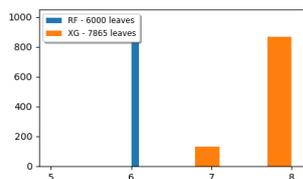


Figura B.19: Tic-tac-toe-endgame

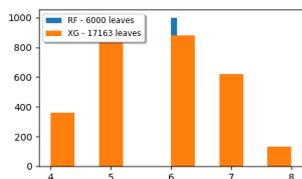


Figura B.20: Teaching-assistant-evaluation

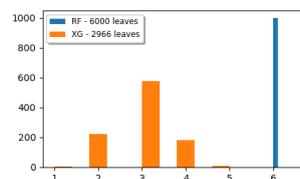


Figura B.21: Spect-heart

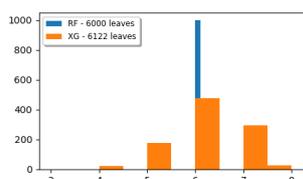


Figura B.22: Monks-problems-2

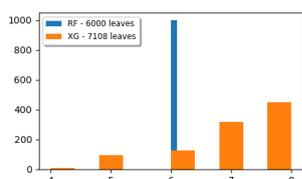


Figura B.23: Ozone-level-detection-eight

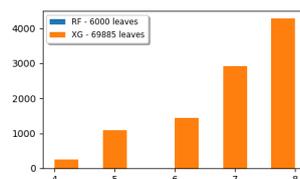


Figura B.24: Optical-recognition-handwritten-digits

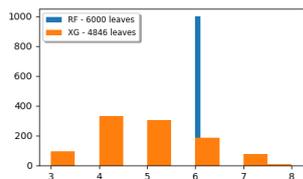


Figura B.25: Climate-model-simulation-crashes

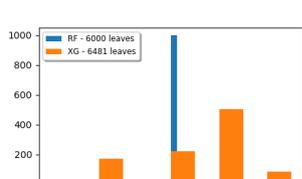


Figura B.26: Banknote-authentication

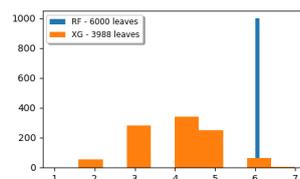


Figura B.27: Congressional-voting-records

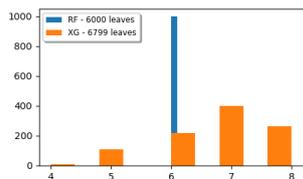


Figura B.28: Credit-approval

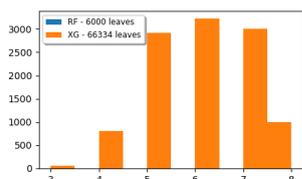


Figura B.29: Connectionist-bench

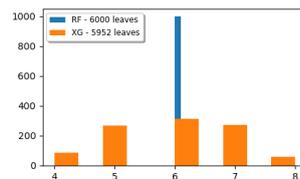


Figura B.30: Haberman-survival

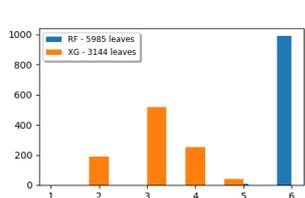


Figura B.31: Monks-problems-3

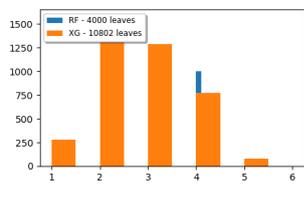


Figura B.32: Wall-following-robot-navigation-2

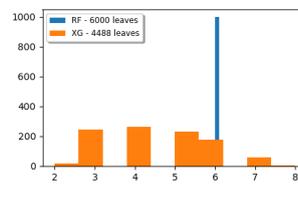


Figura B.33: Breast-cancer-wisconsin-diagnostic

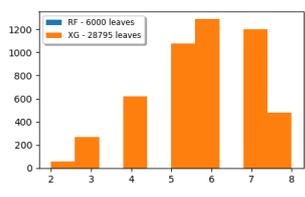


Figura B.34: Heart-disease-Cleveland

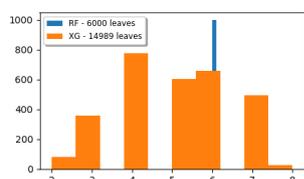


Figura B.35: Hayes-roth

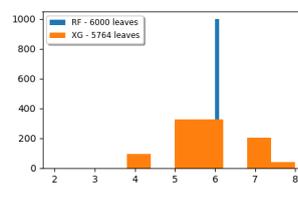


Figura B.36: Thoracic-surgery

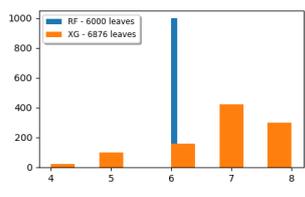


Figura B.37: Mammographic-mass

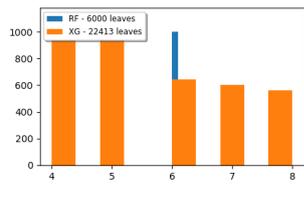


Figura B.38: Car-evaluation

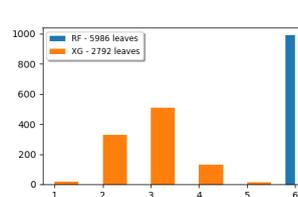


Figura B.39: Fertility

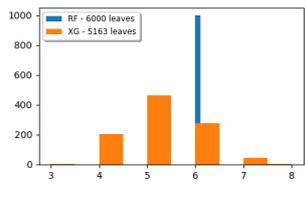


Figura B.40: Planning-relax

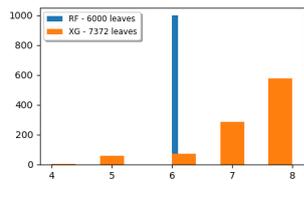


Figura B.41: Statlog-project-German-credit

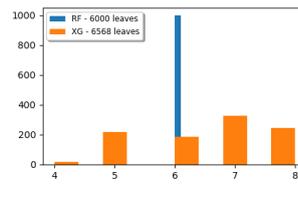


Figura B.42: Cylinder-bands

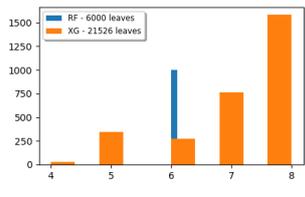


Figura B.43: Contraceptive-method-choice

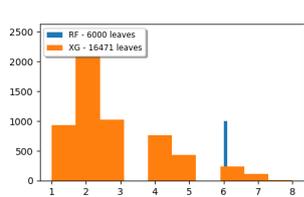


Figura B.44: Dermatology

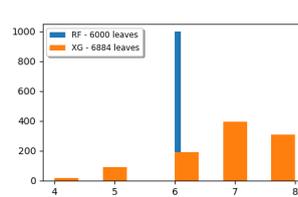


Figura B.45: Indian-liver-patient

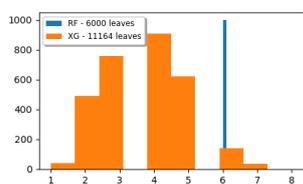


Figura B.46: Thyroid-disease-new-thyroid

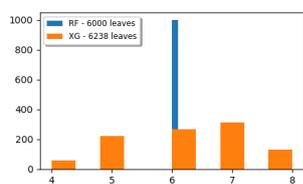


Figura B.47: Ozone-level-detection-one

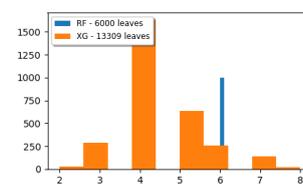


Figura B.48: Thyroid-disease-ann-thyroid

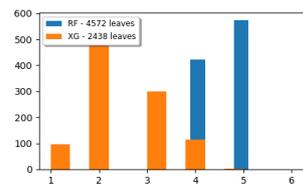


Figura B.49: Acute-inflammations-1

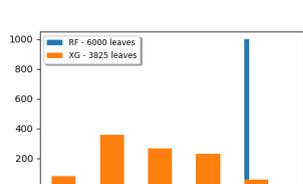


Figura B.50: Parkinsons

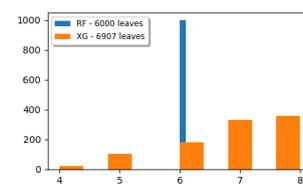


Figura B.51: Qsar-biodegradation

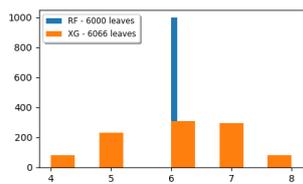


Figura B.52: Breast-cancer

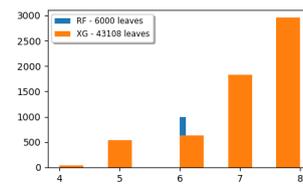


Figura B.53: Statlog-project-landsat-satellite

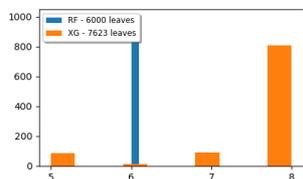


Figura B.54: 593-fri-c1-1000-10

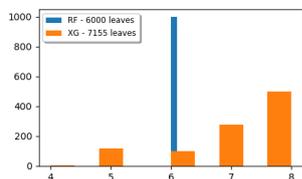


Figura B.55: 695-chatfield-4

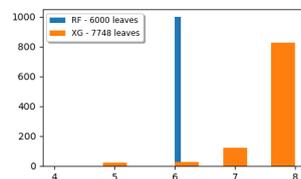


Figura B.56: 637-fri-c1-500-50

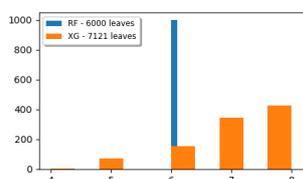


Figura B.57: 621-fri-c0-100-10

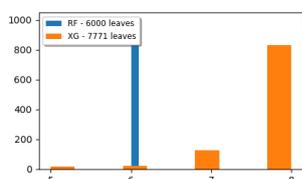


Figura B.58: 649-fri-c0-500-5

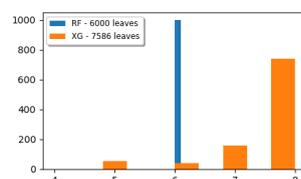


Figura B.59: 628-fri-c3-1000-5

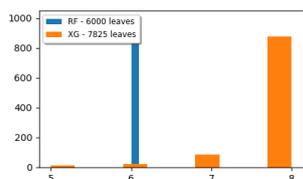


Figura B.60: 590-fri-c0-1000-50

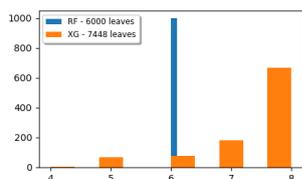


Figura B.61: 584-fri-c4-500-25

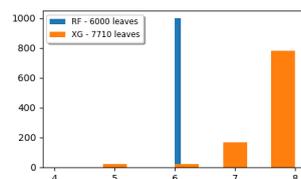


Figura B.62: 604-fri-c4-500-10

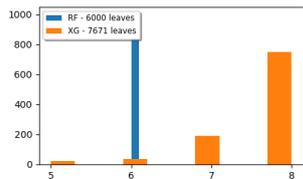


Figura B.63: 647-fri-c1-250-10

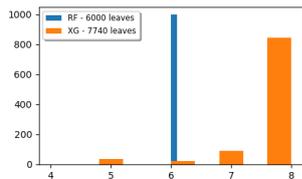


Figura B.64: 589-fri-c2-1000-25

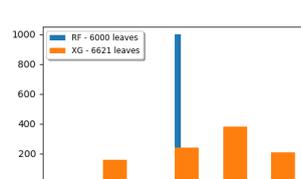


Figura B.65: 561-cpu

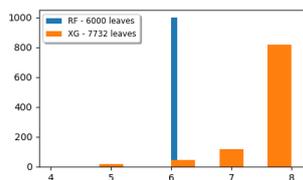


Figura B.66: 650-fri-c0-500-50

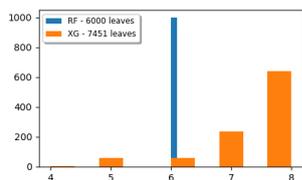


Figura B.67: 579-fri-c0-250-5

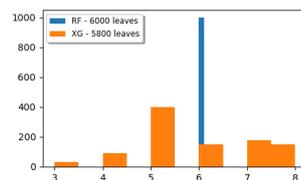


Figura B.68: 195-auto-price

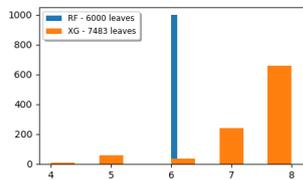


Figura B.69: 601-fri-c1-250-5

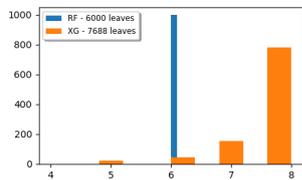


Figura B.70: 641-fri-c1-500-10

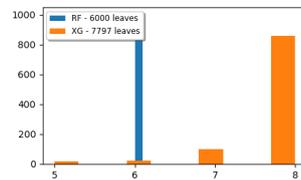


Figura B.71: 618-fri-c3-1000-50

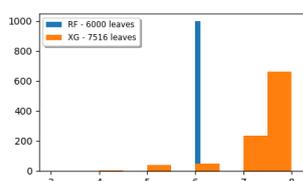


Figura B.72: 522-pm10

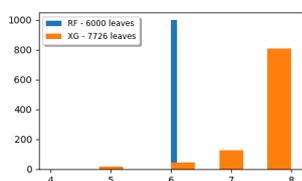


Figura B.73: 612-fri-c1-1000-5

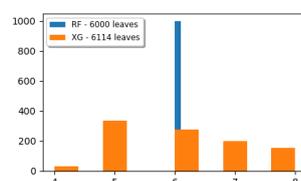


Figura B.74: 210-cloud

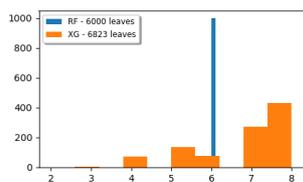


Figura B.75: 665-sleuth-case2002

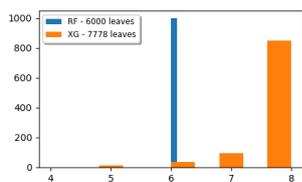


Figura B.76: 622-fri-c2-1000-50

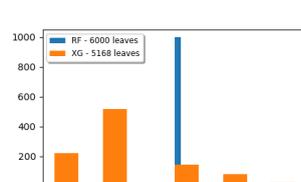


Figura B.77: 560-bodyfat

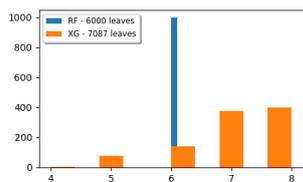


Figura B.78: 594-fri-c2-100-5

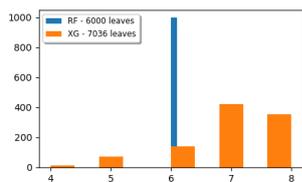


Figura B.79: 663-rabe-266

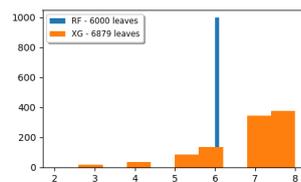


Figura B.80: 485-analcatdata-vehicle

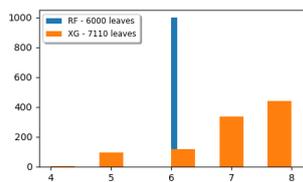


Figura B.81: 613-fri-c3-250-5

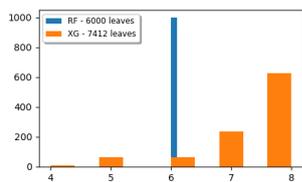


Figura B.82: 648-fri-c1-250-50

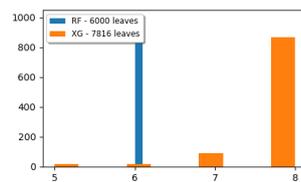


Figura B.83: 595-fri-c0-1000-10

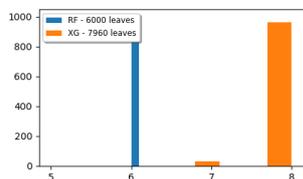


Figura B.84: 557-analcatdata-apneal

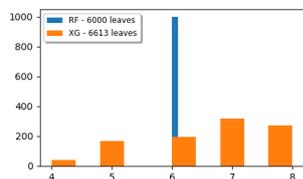


Figura B.85: 634-fri-c2-100-10

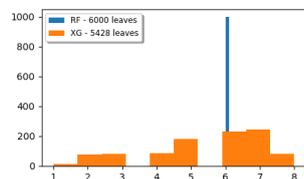


Figura B.86: 192-vineyard

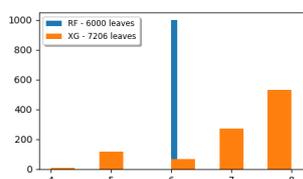


Figura B.87: 617-fri-c3-500-5

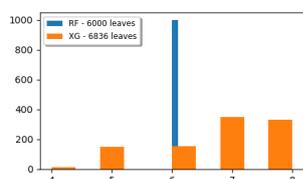


Figura B.88: 591-fri-c1-100-10

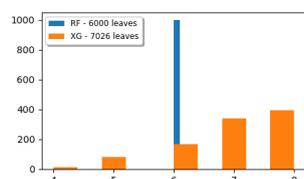


Figura B.89: 651-fri-c0-100-25

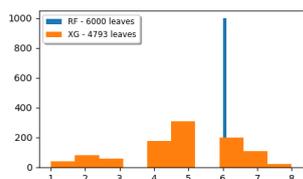


Figura B.90: 1089-USCrime

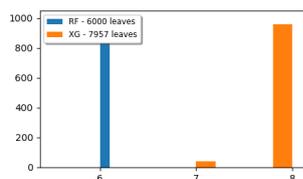


Figura B.91: 229-pwLinear

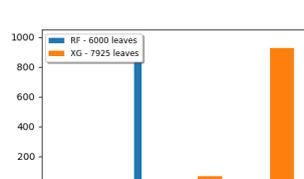


Figura B.92: 1029-LEV

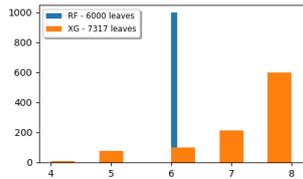


Figura B.93: 645-fri-c3-500-50

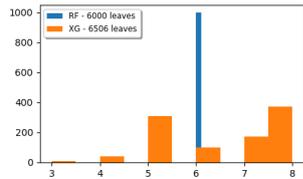


Figura B.94: 666-rmftsa-ladata

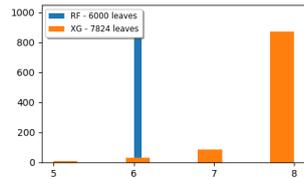


Figura B.95: 620-fri-c1-1000-25

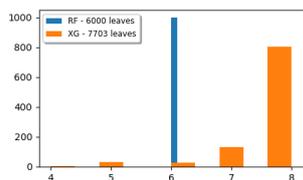


Figura B.96: 633-fri-c0-500-25

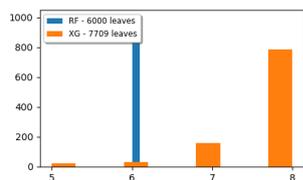


Figura B.97: 643-fri-c2-500-25

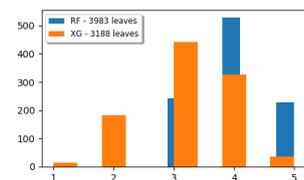


Figura B.98: 523-analcatdata-neavote

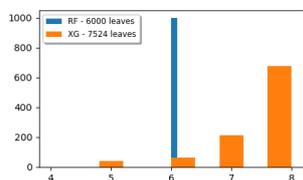


Figura B.99: 603-fri-c0-250-50

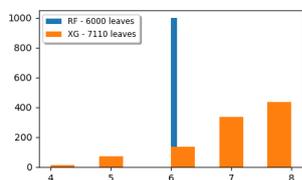


Figura B.100: 656-fri-c1-100-5

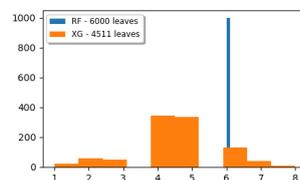


Figura B.101: 659-sleuth-ex1714

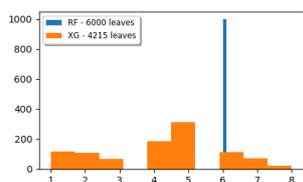


Figura B.102: 1096-FacultySalaries

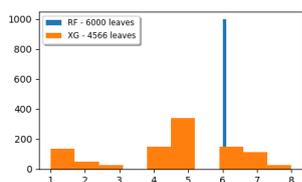


Figura B.103: 542-pollution

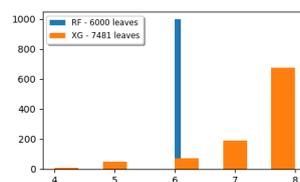


Figura B.104: 616-fri-c4-500-50

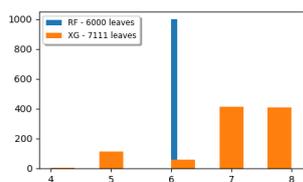


Figura B.105: 230-machine-cpu

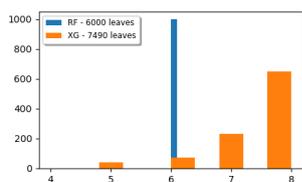


Figura B.106: 635-fri-c0-250-10

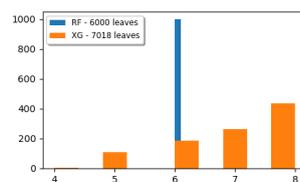


Figura B.107: 658-fri-c3-250-25

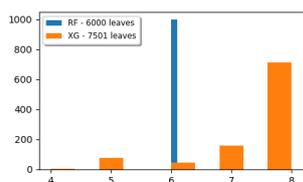


Figura B.108: 608-fri-c3-1000-10

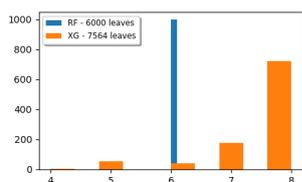


Figura B.109: 623-fri-c4-1000-10

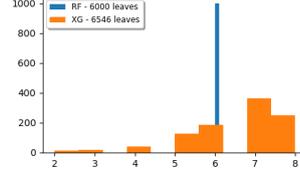


Figura B.110: 678-visualizing-environmental

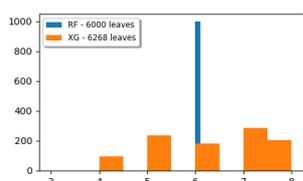


Figura B.111: 1027-ESL

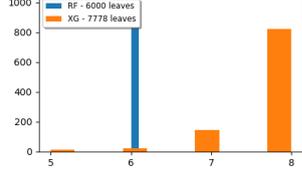


Figura B.112: 586-fri-c3-1000-25

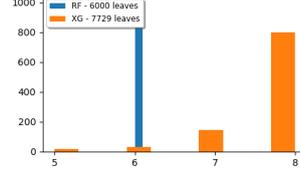


Figura B.113: 599-fri-c2-1000-5

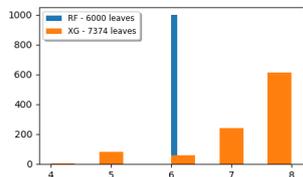


Figura B.114: 657-fri-c2-250-10

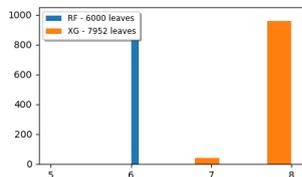


Figura B.115: 556-analcatdata-apnea2

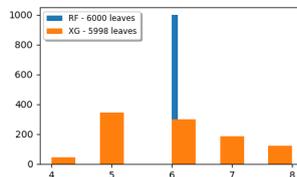


Figura B.116: 505-tecator

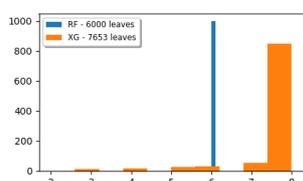


Figura B.117: 1028-SWD

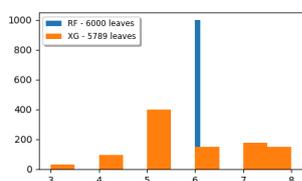


Figura B.118: 207-autoPrice

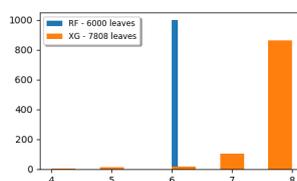


Figura B.119: 609-fri-c0-1000-5

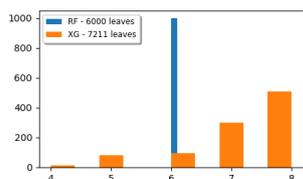


Figura B.120: 602-fri-c3-250-10

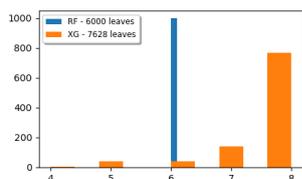


Figura B.121: 607-fri-c4-1000-50

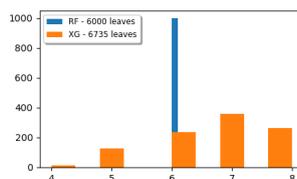


Figura B.122: 611-fri-c3-100-5

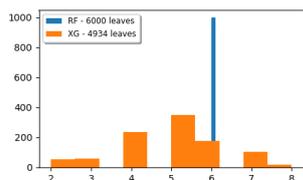


Figura B.123: 228-elusage

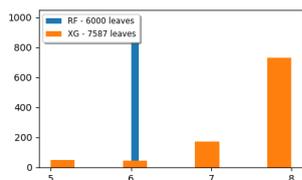


Figura B.124: 626-fri-c2-500-50

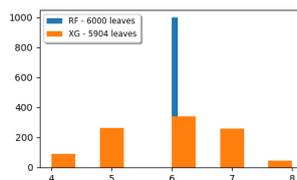


Figura B.125: 527-analcatdata-election2000

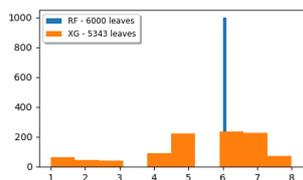


Figura B.126: 687-sleuth-ex1605

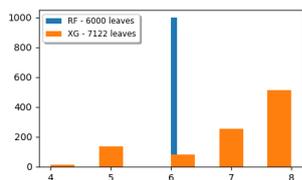


Figura B.127: 596-fri-c2-250-5

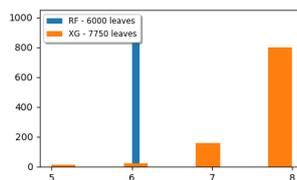


Figura B.128: 597-fri-c2-500-5

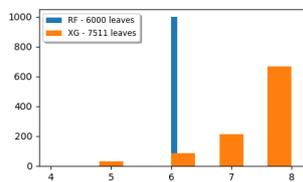


Figura B.129: 653-fri-c0-250-25

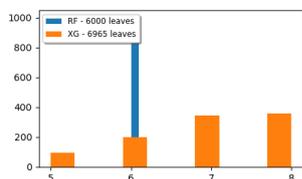


Figura B.130: 1030-ERA

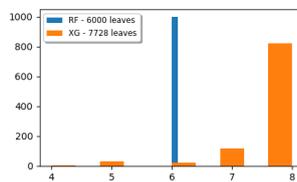


Figura B.131: 606-fri-c2-1000-10

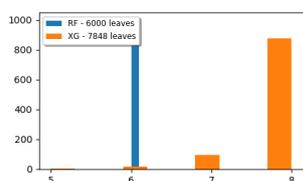


Figura B.132: 598-fri-c0-1000-25

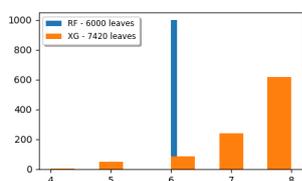


Figura B.133: 646-fri-c3-500-10

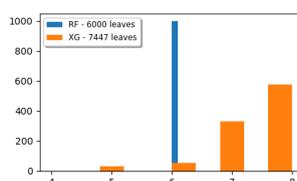


Figura B.134: 519-vinnie

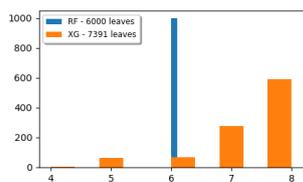


Figura B.135: 615-fri-c4-250-10

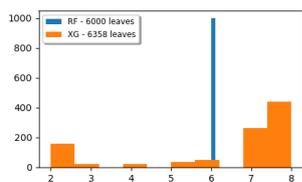


Figura B.136: 712-chscase-geyser1

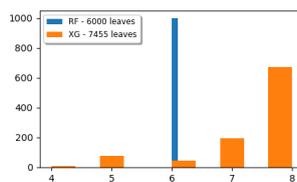


Figura B.137: 605-fri-c2-250-25

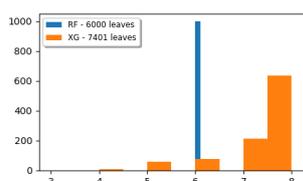


Figura B.138: 547-no2

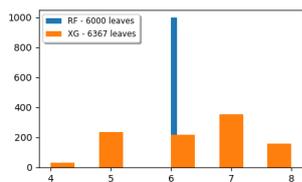


Figura B.139: 706-sleuth-case1202

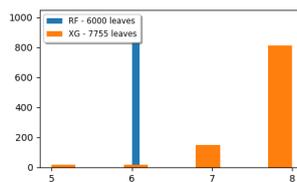


Figura B.140: 582-fri-c1-500-25

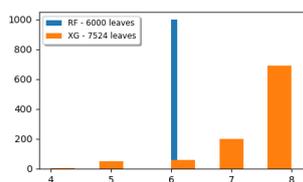


Figura B.141: 581-fri-c3-500-25

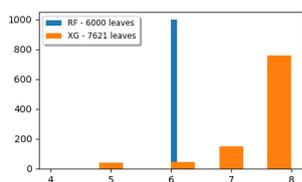


Figura B.142: 627-fri-c2-500-10

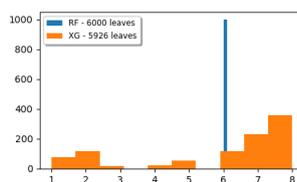


Figura B.143: 690-visualizing-galaxy

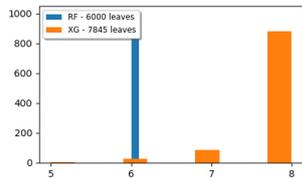


Figura B.144: 583-fri-c1-1000-50

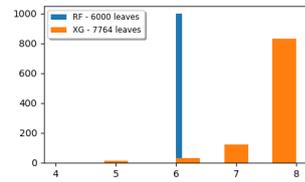


Figura B.145: 592-fri-c4-1000-25

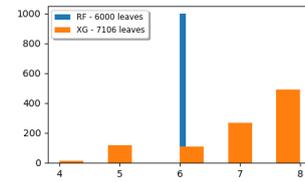


Figura B.146: 644-fri-c4-250-25

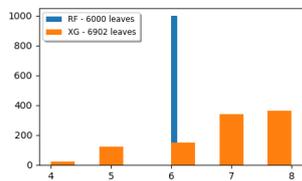


Figura B.147: 624-fri-c0-100-5

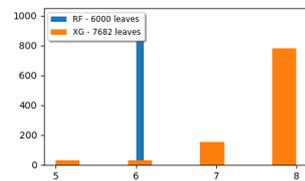


Figura B.148: 654-fri-c0-500-10

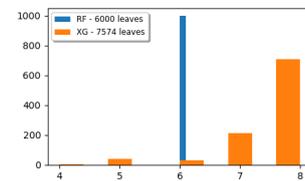


Figura B.149: 631-fri-c1-500-5

C

Visualizações gráficas de y e $f(x)$ nos modelos

Finalmente, apresentam-se algumas visualizações gráficas, da posição dos valores de y e os valores obtidos nos algoritmos, projetados em um espaço de duas dimensões. Cabe ressaltar, essa interpretação só é possível para os valores reais, em tarefas de regressão. Observamos, empiricamente, que os gráficos demonstram uma proximidade entre os valores estimados pelo modelo $2PL$ e os valores reais de y , especialmente na fase de treinamento, sugerindo adequação ao *overfitting*.

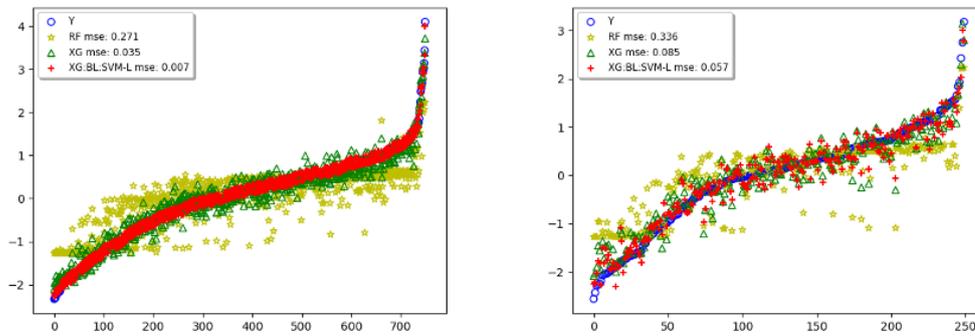


Figura C.1: In Sample x Out of sample - 623-fri-c4-1000-10

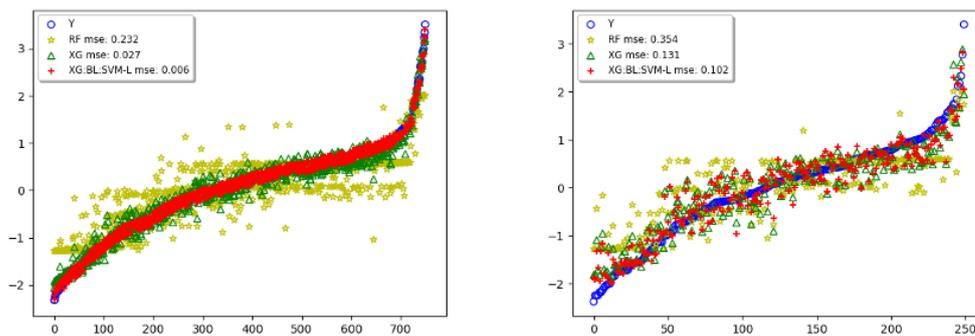


Figura C.2: In Sample x Out of sample - 618-fri-c3-1000-50

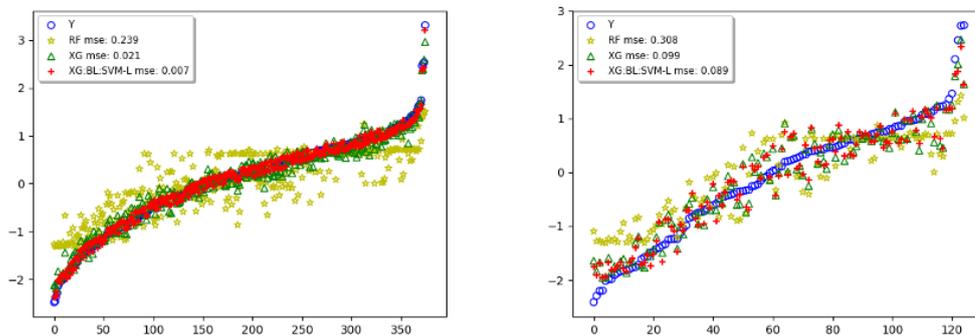


Figura C.3: In Sample x Out of sample - 584-fri-c4-500-25

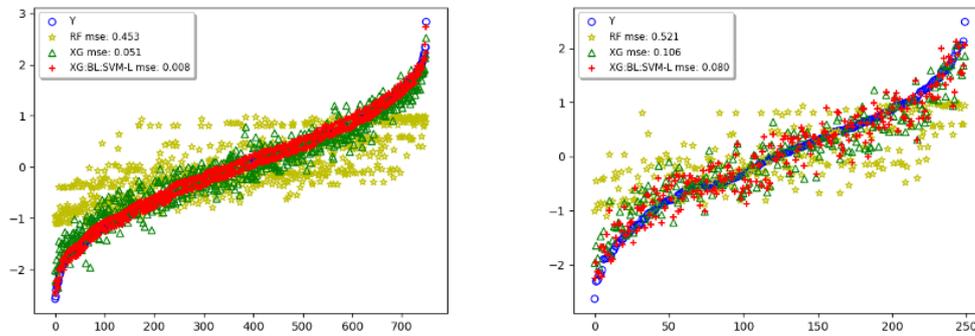


Figura C.4: In Sample x Out of sample - 595-fri-c0-1000-10

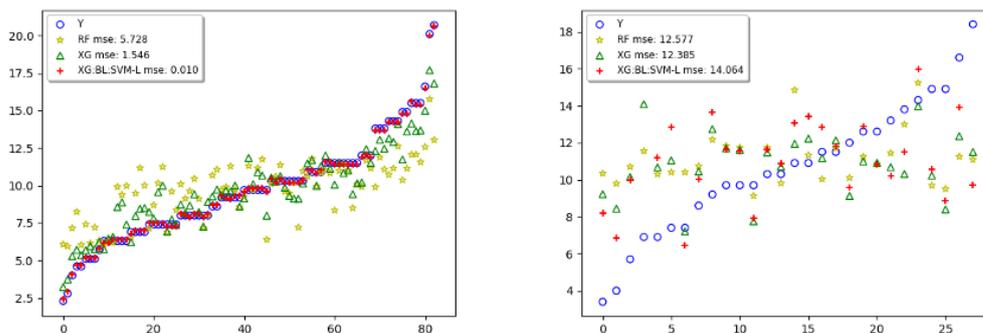


Figura C.5: In Sample x Out of sample - 678-visualizing-environmental

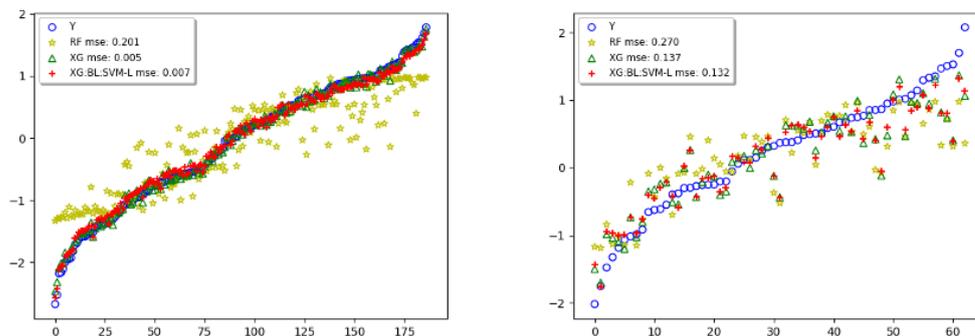


Figura C.6: In Sample x Out of sample - 648-fri-c1-250-50

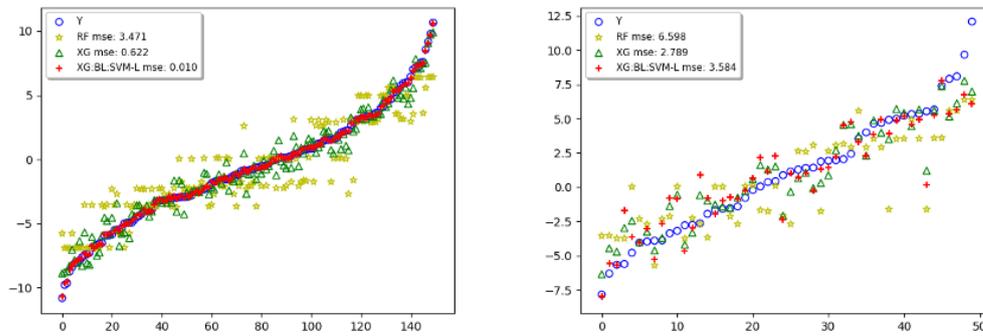


Figura C.7: In Sample x Out of sample - 229-pwLinear

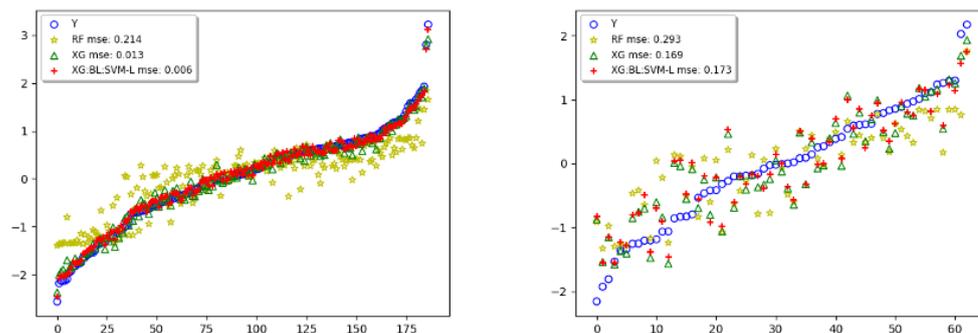


Figura C.8: In Sample x Out of sample - 644-fri-c4-250-25

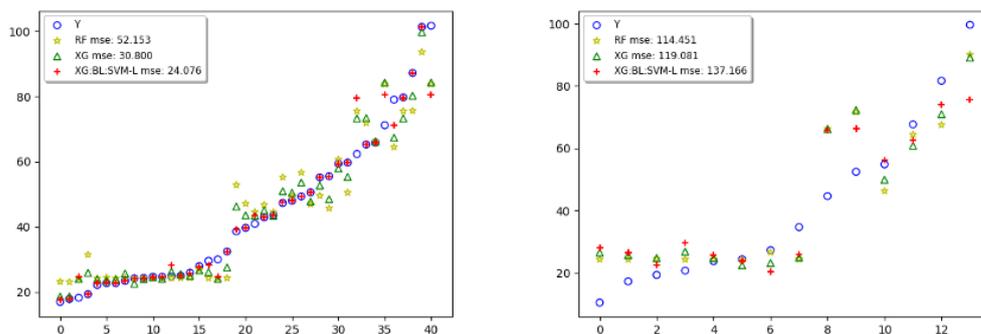


Figura C.9: In Sample x Out of sample - 228-elusage

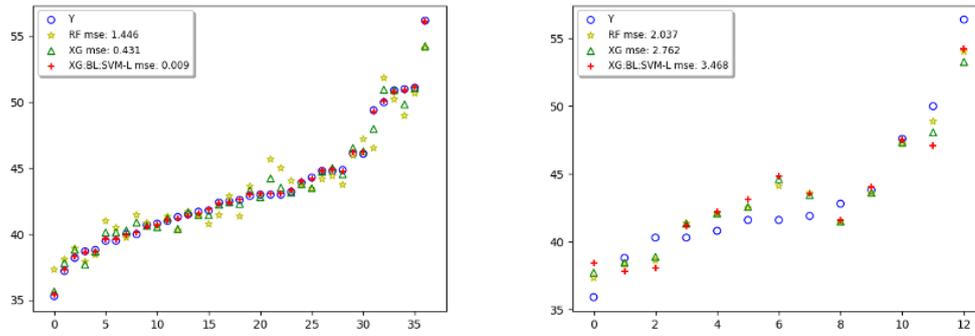


Figura C.10: In Sample x Out of sample - 1096-FacultySalaries

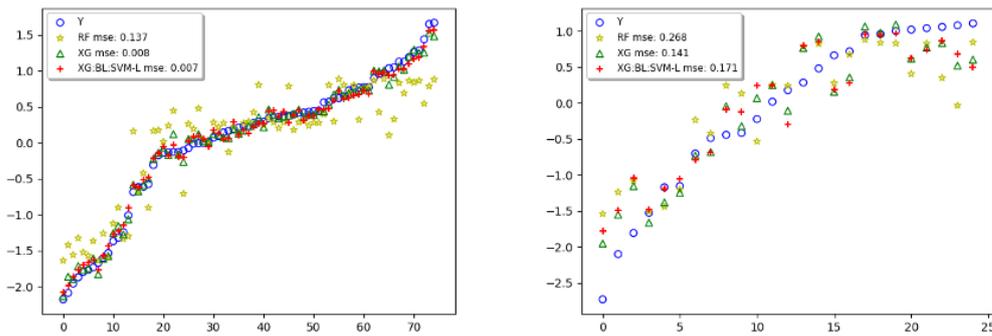


Figura C.11: In Sample x Out of sample - 594-fri-c2-100-5

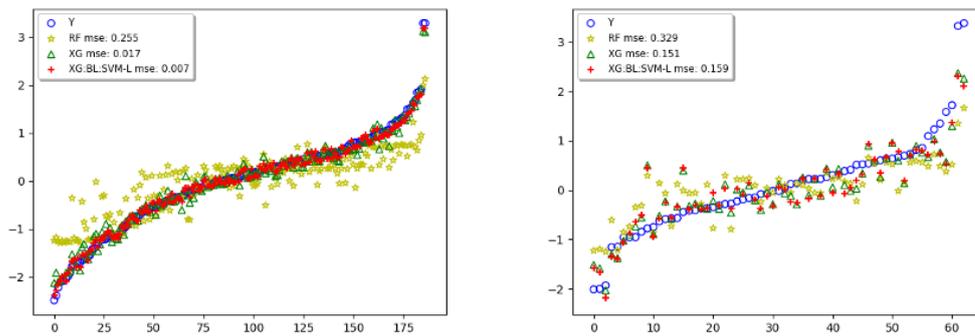


Figura C.12: In Sample x Out of sample - 615-fri-c4-250-10

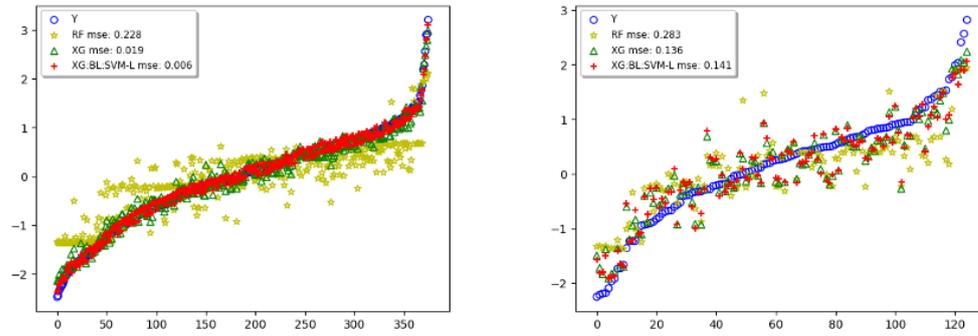


Figura C.13: In Sample x Out of sample - 616-fri-c4-500-50

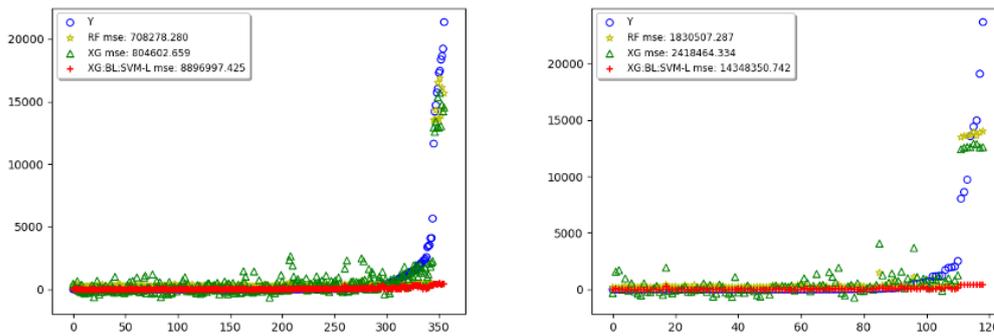


Figura C.14: In Sample x Out of sample - 557-analcatdata-apnea1

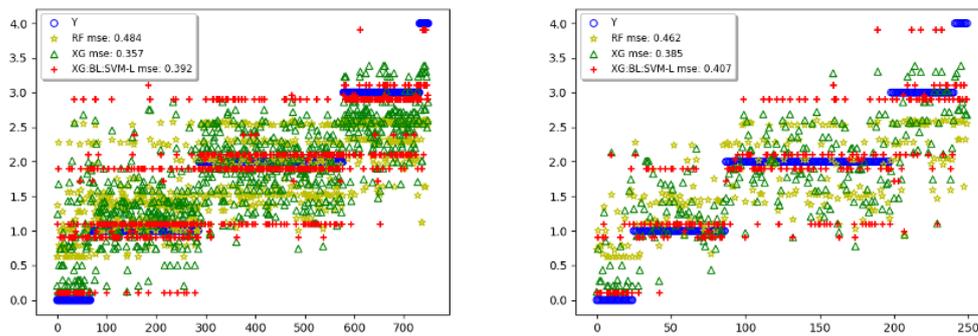


Figura C.15: In Sample x Out of sample - 1029-LEV

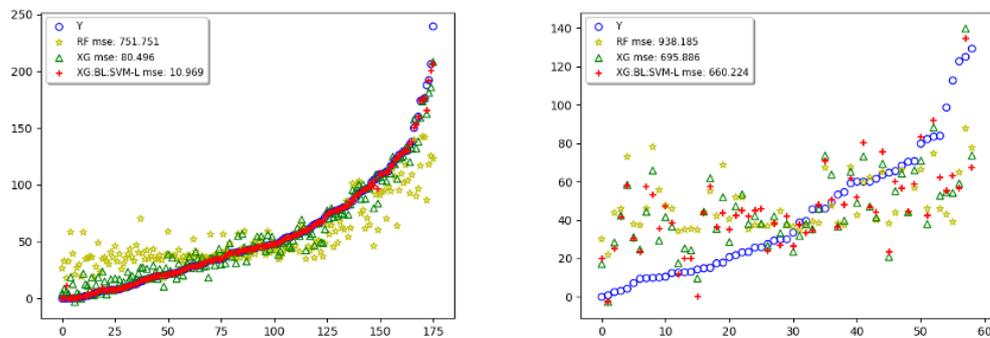


Figura C.16: In Sample x Out of sample - 695-chatfield-4

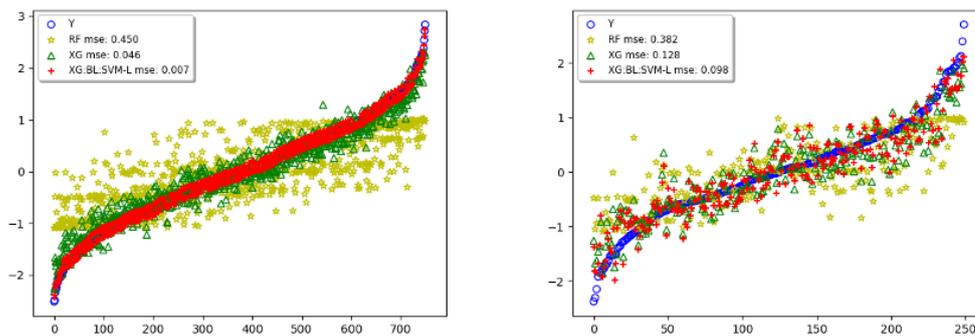


Figura C.17: In Sample x Out of sample - 590-fri-c0-1000-50

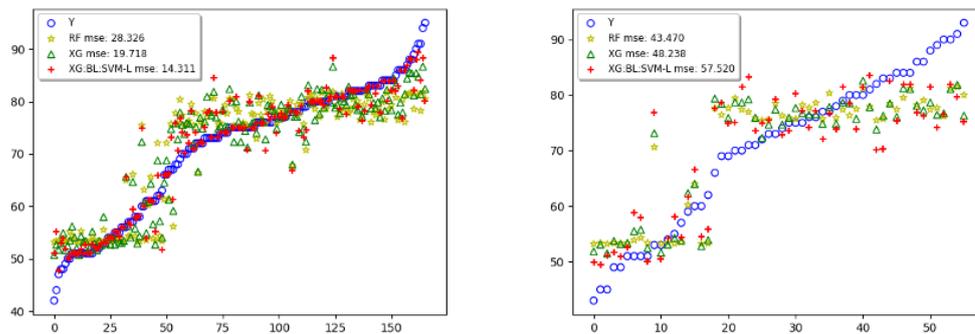


Figura C.18: In Sample x Out of sample - 712-chscase-geyser1

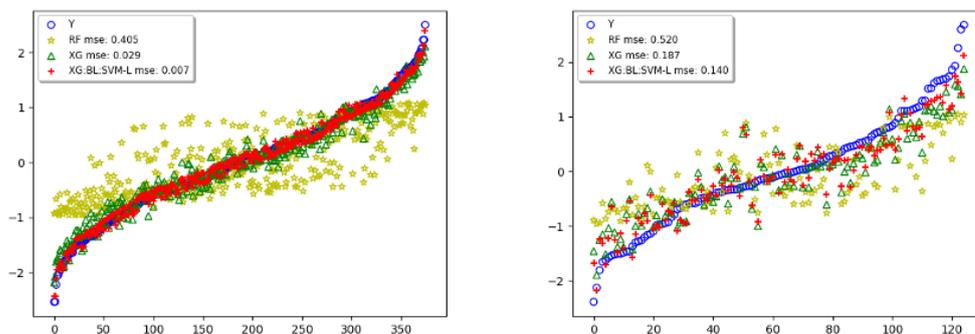


Figura C.19: In Sample x Out of sample - 633-fri-c0-500-25

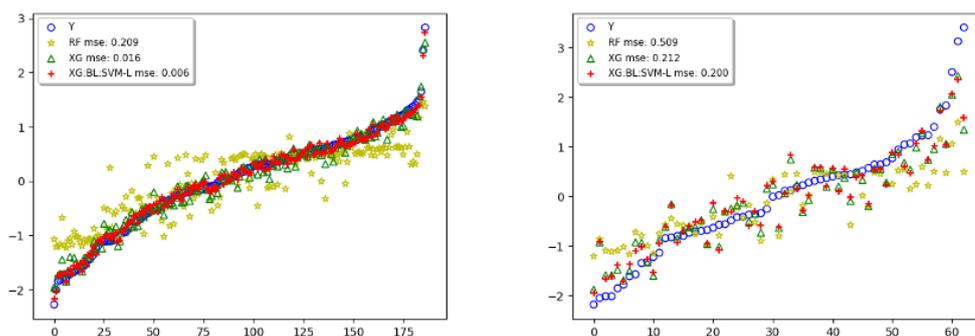


Figura C.20: In Sample x Out of sample - 602-fri-c3-250-10

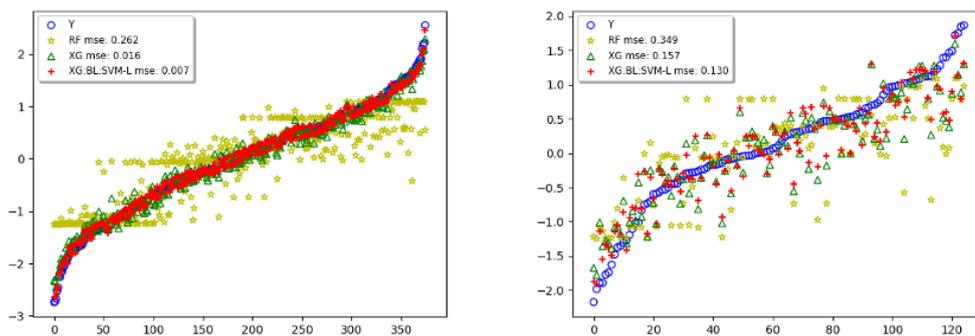


Figura C.21: In Sample x Out of sample - 637-fri-c1-500-50

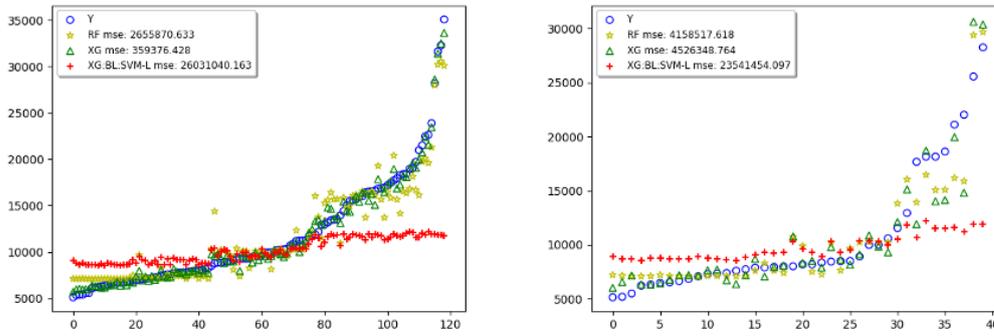


Figura C.22: In Sample x Out of sample - 207-autoPrice

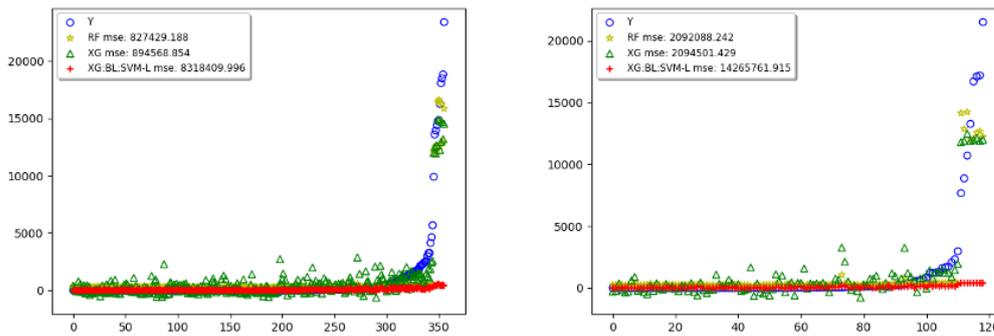


Figura C.23: In Sample x Out of sample - 556-analcatdata-apnea2

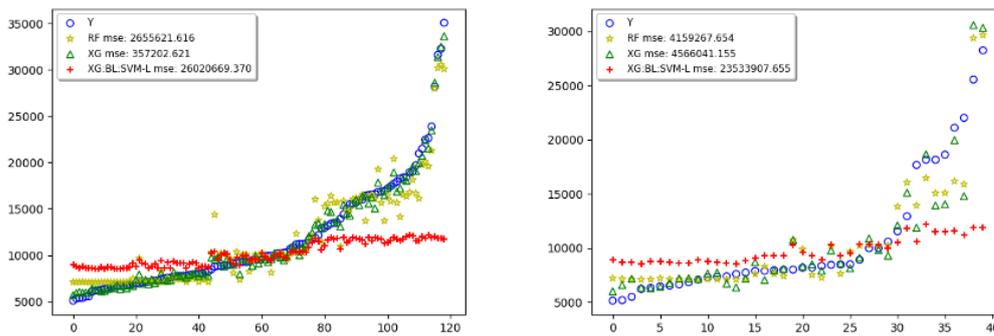


Figura C.24: In Sample x Out of sample - 195-auto-price

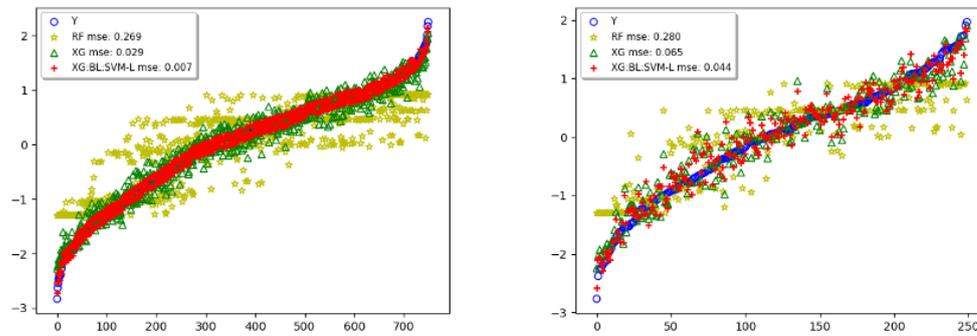


Figura C.25: In Sample x Out of sample - 593-fri-c1-1000-10

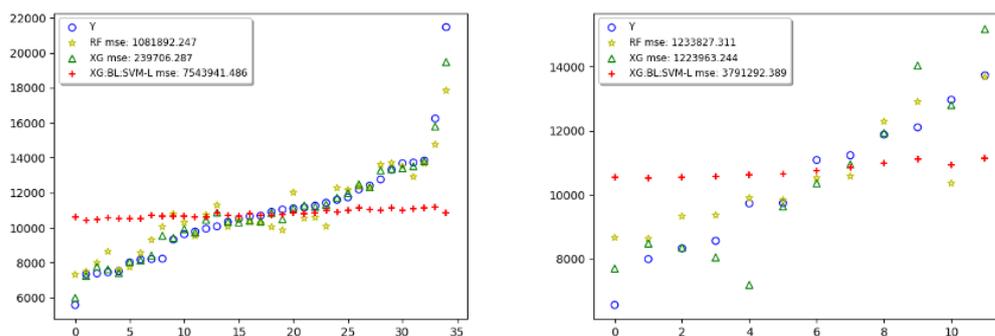


Figura C.26: In Sample x Out of sample - 659-sleuth-ex1714

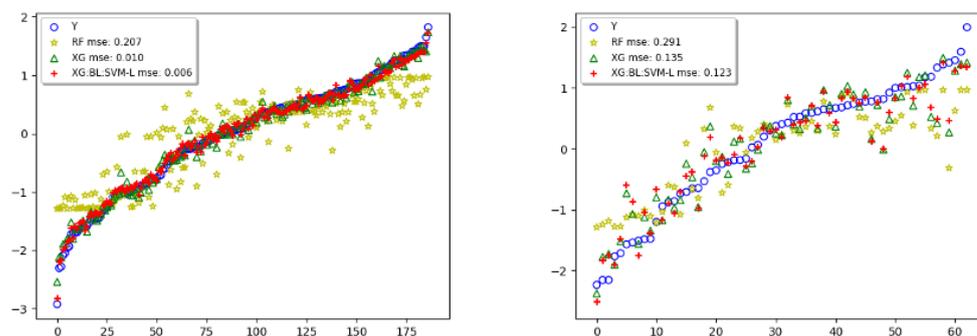


Figura C.27: In Sample x Out of sample - 647-fri-c1-250-10

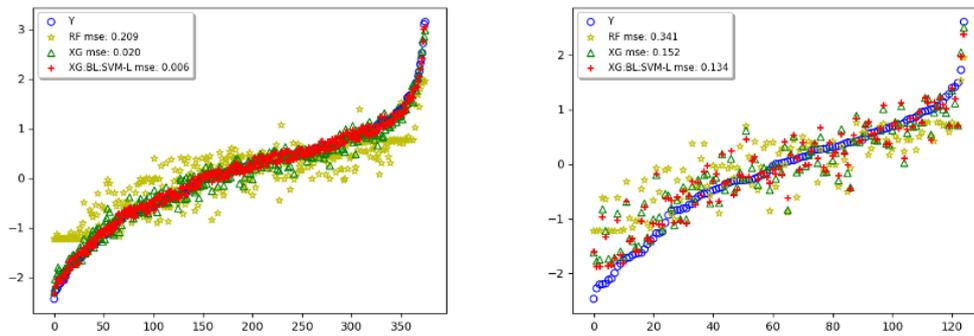


Figura C.28: In Sample x Out of sample - 581-fri-c3-500-25

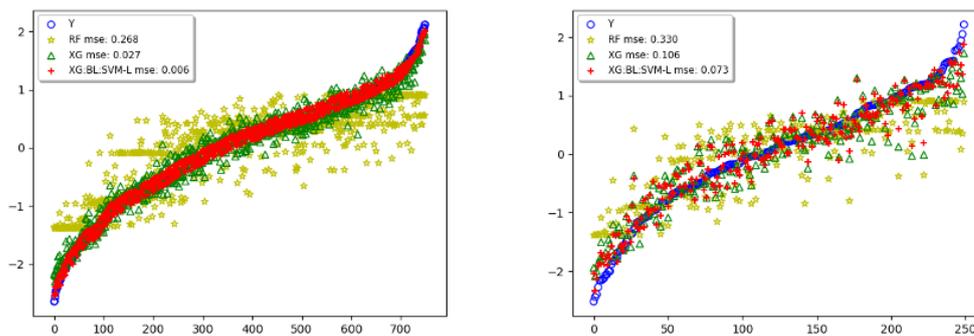


Figura C.29: In Sample x Out of sample - 583-fri-c1-1000-50

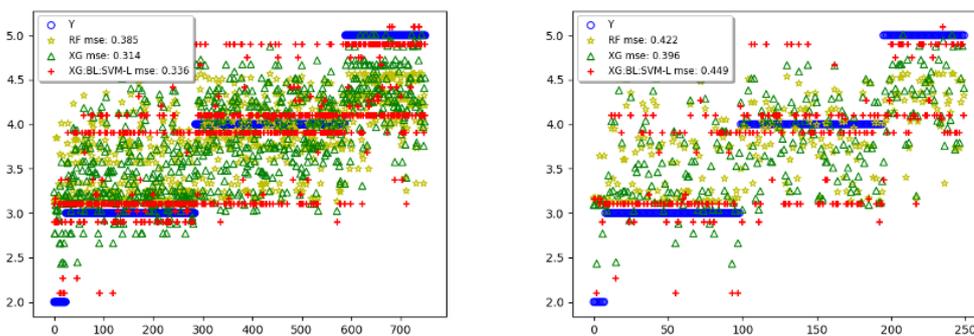


Figura C.30: In Sample x Out of sample - 1028-SWD

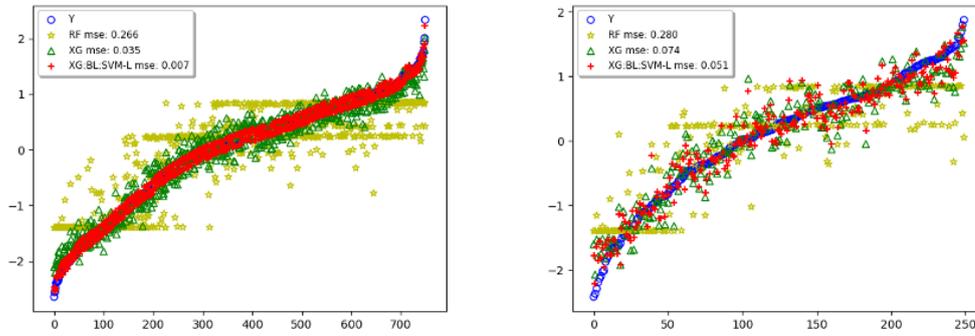


Figura C.31: In Sample x Out of sample - 606-fri-c2-1000-10

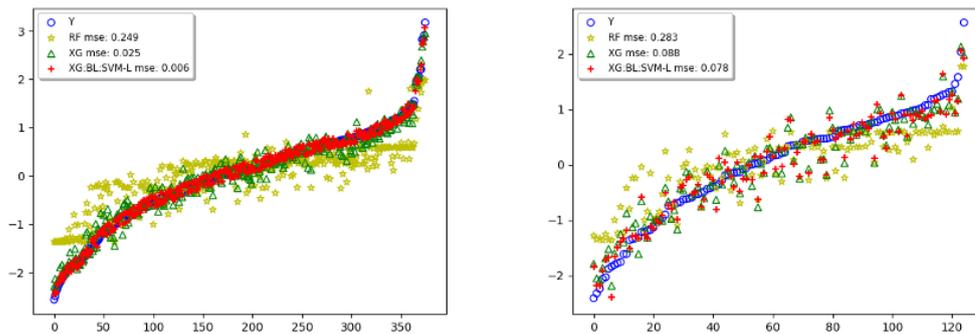


Figura C.32: In Sample x Out of sample - 604-fri-c4-500-10

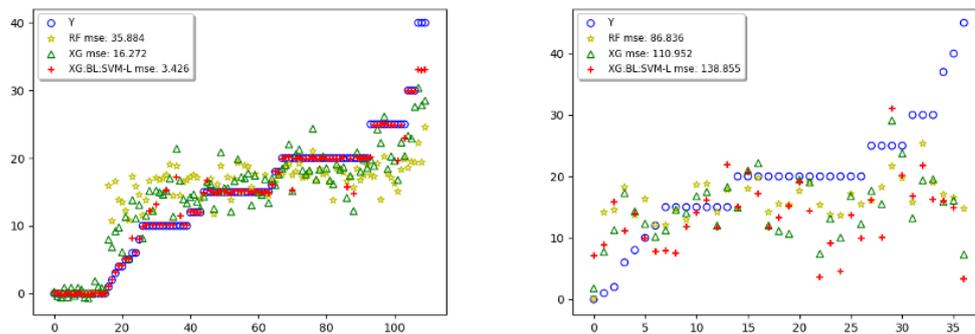


Figura C.33: In Sample x Out of sample - 665-sleuth-case2002

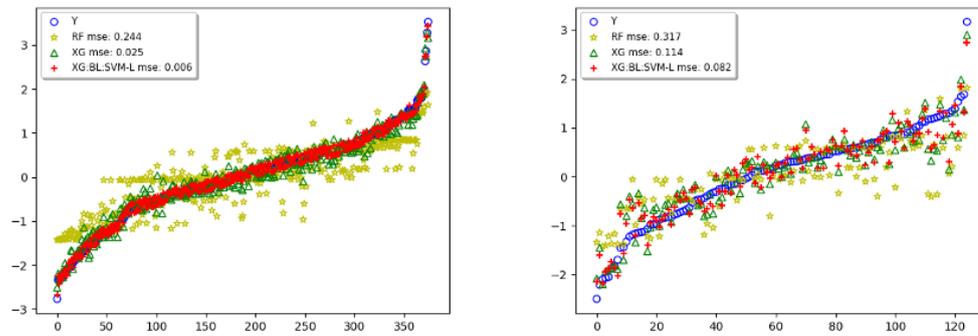


Figura C.34: In Sample x Out of sample - 617-fri-c3-500-5

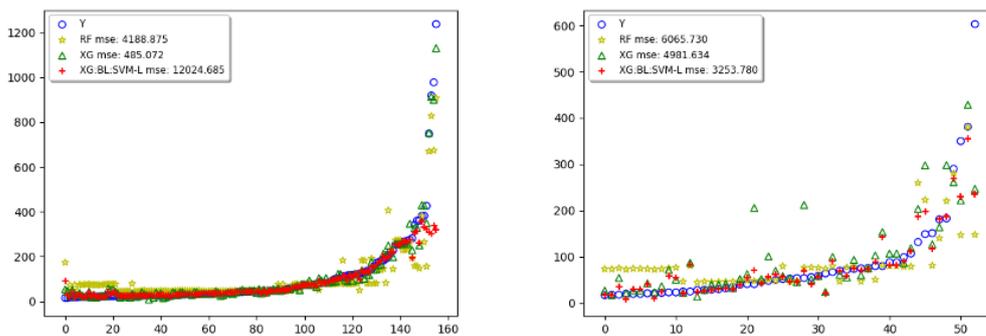


Figura C.35: In Sample x Out of sample - 561-cpu

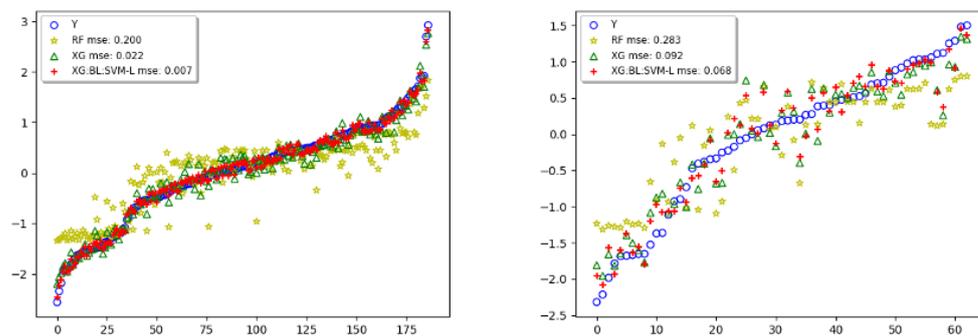


Figura C.36: In Sample x Out of sample - 613-fri-c3-250-5

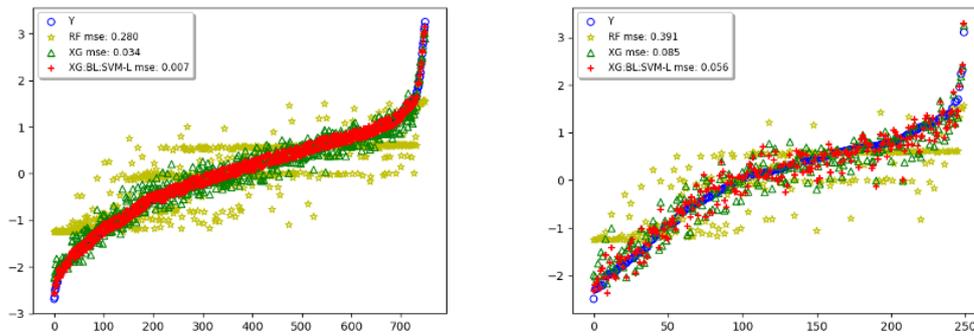


Figura C.37: In Sample x Out of sample - 628-fri-c3-1000-5

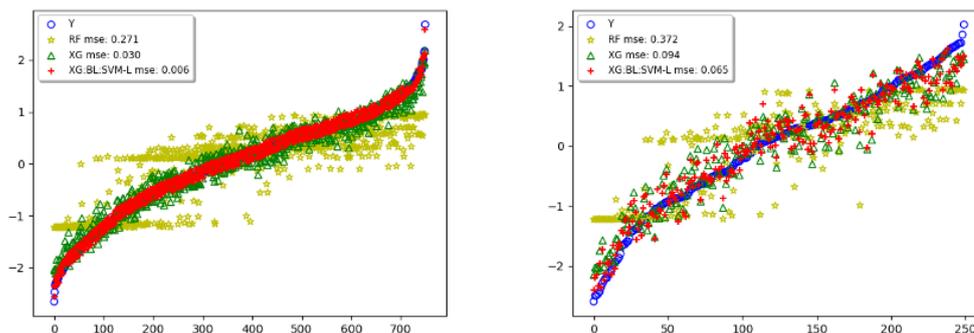


Figura C.38: In Sample x Out of sample - 620-fri-c1-1000-25

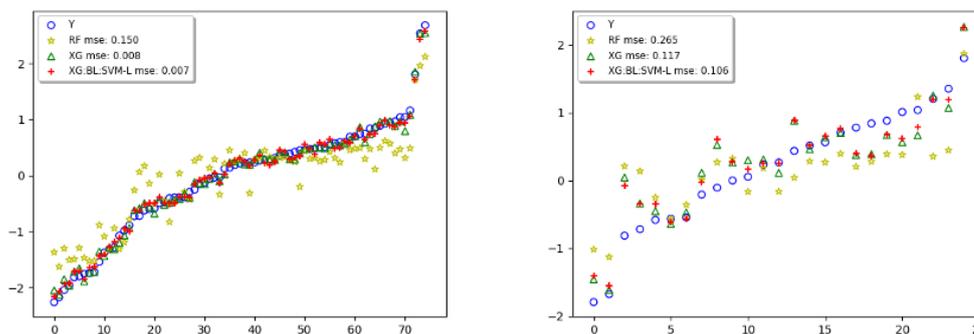


Figura C.39: In Sample x Out of sample - 611-fri-c3-100-5

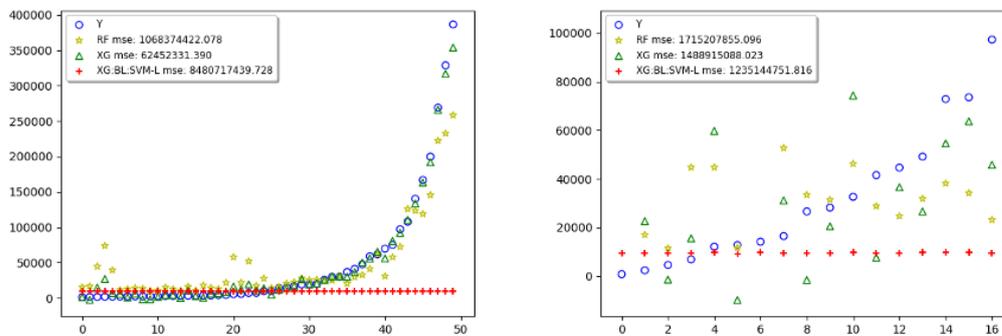


Figura C.40: In Sample x Out of sample - 527-analcatdata-election2000

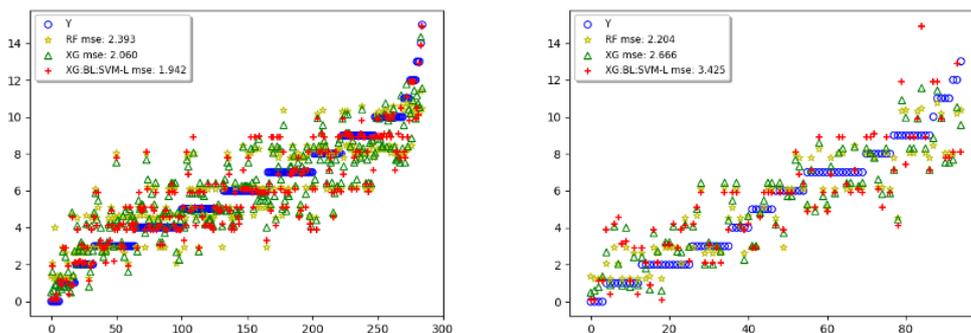


Figura C.41: In Sample x Out of sample - 519-vinnie

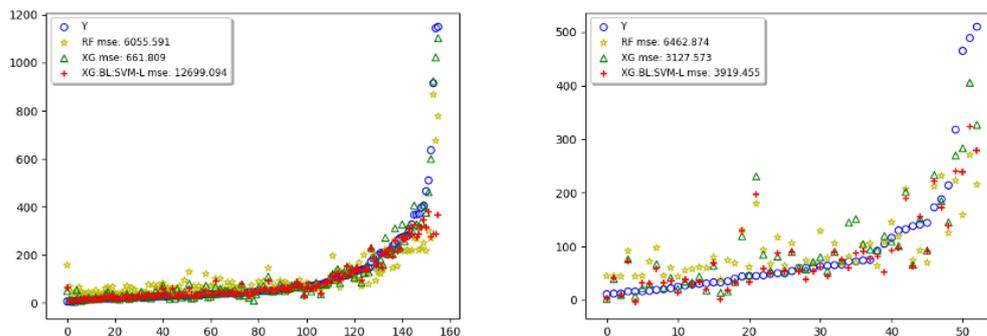


Figura C.42: In Sample x Out of sample - 230-machine-cpu

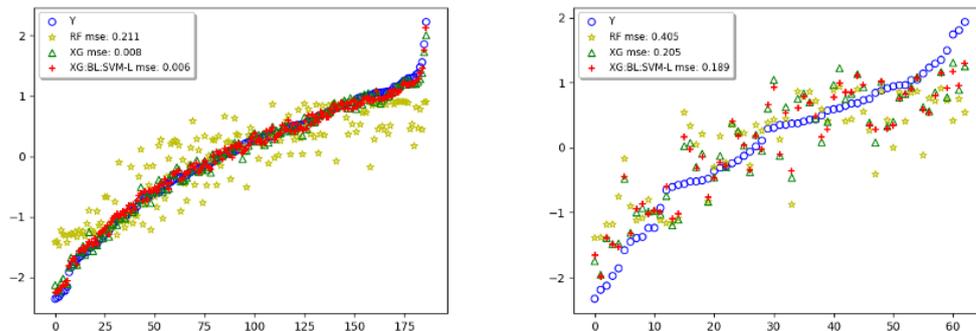


Figura C.43: In Sample x Out of sample - 605-fri-c2-250-25

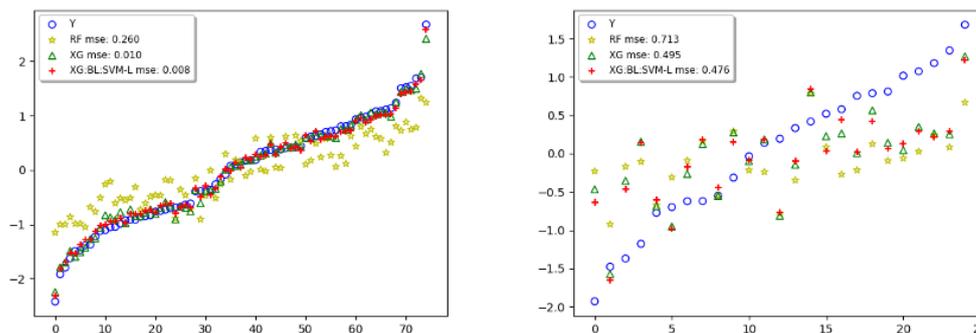


Figura C.44: In Sample x Out of sample - 624-fri-c0-100-5

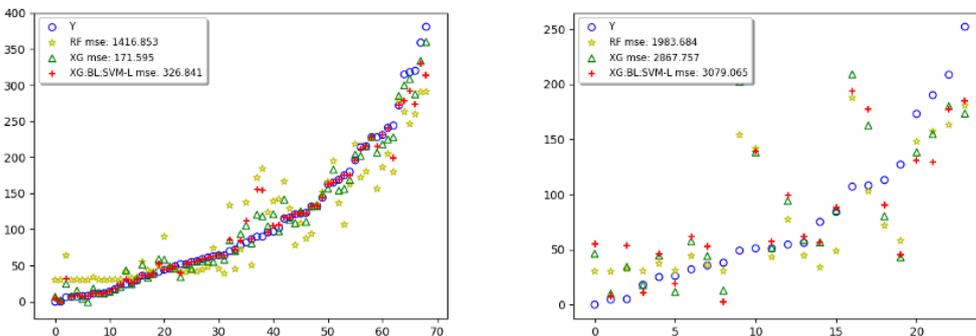


Figura C.45: In Sample x Out of sample - 706-sleuth-case1202

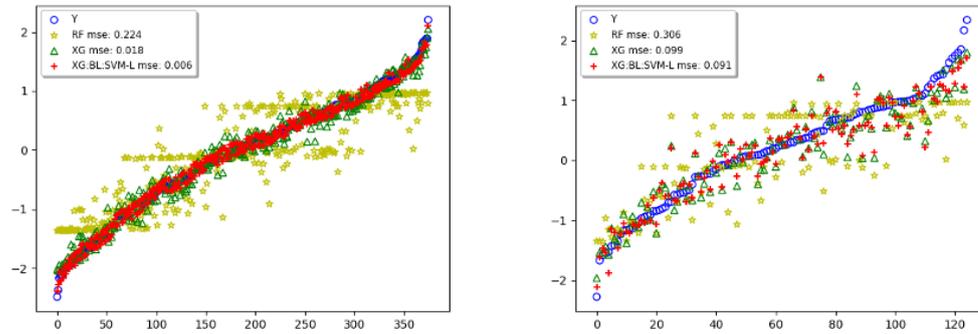


Figura C.46: In Sample x Out of sample - 641-fri-c1-500-10

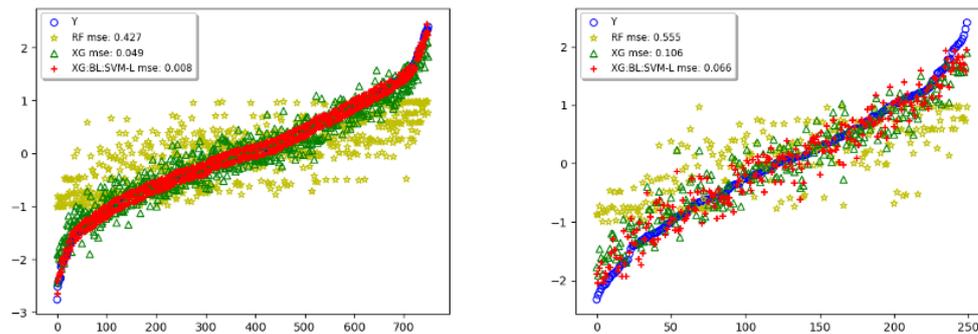


Figura C.47: In Sample x Out of sample - 609-fri-c0-1000-5

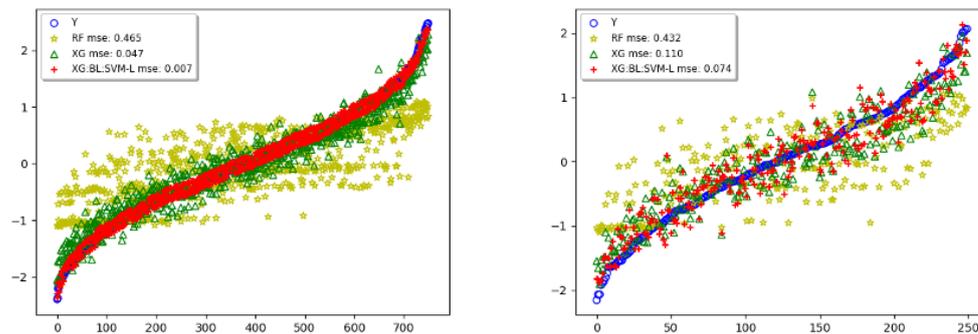


Figura C.48: In Sample x Out of sample - 598-fri-c0-1000-25

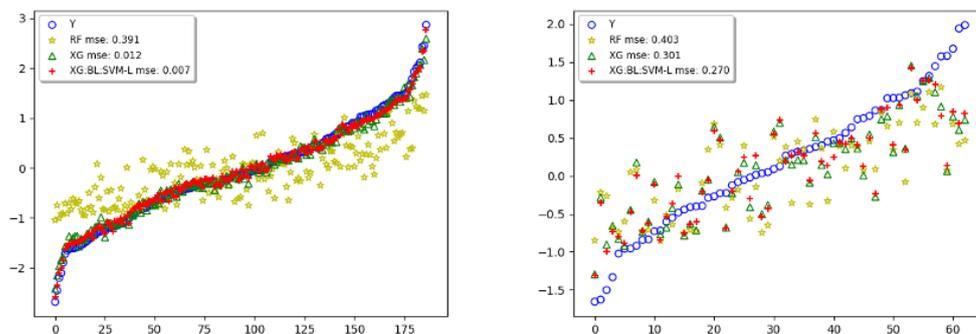


Figura C.49: In Sample x Out of sample - 603-fri-c0-250-50

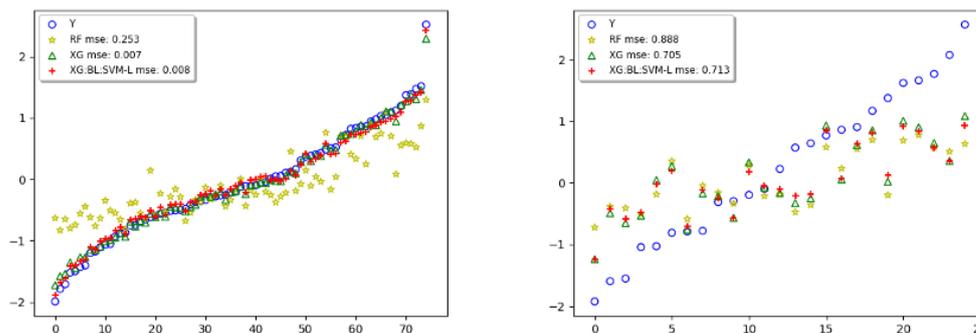


Figura C.50: In Sample x Out of sample - 621-fri-c0-100-10

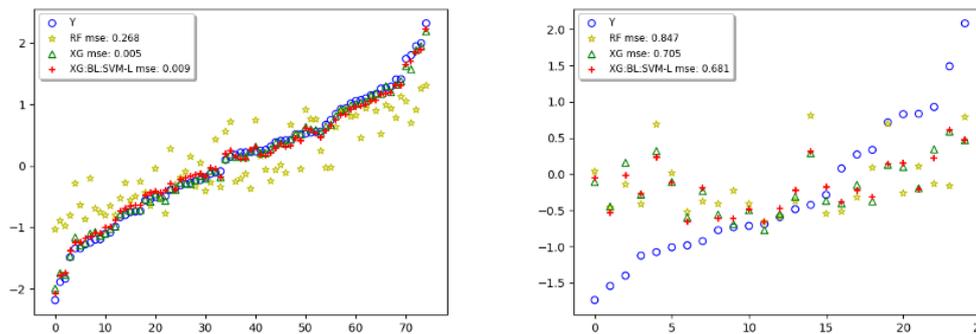


Figura C.51: In Sample x Out of sample - 651-fri-c0-100-25

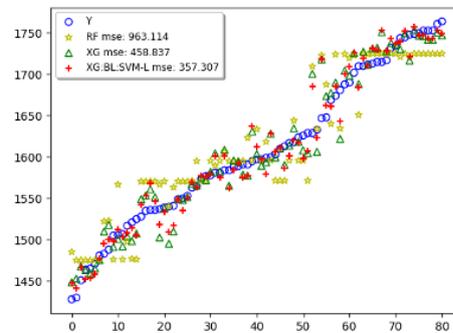
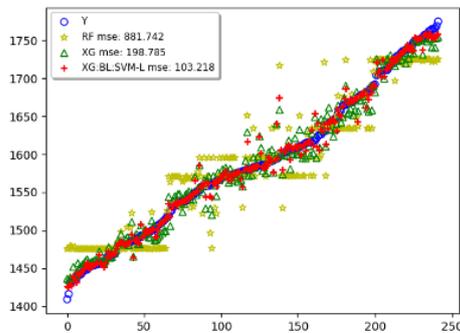


Figura C.52: In Sample x Out of sample - 690-visualizing-galaxy

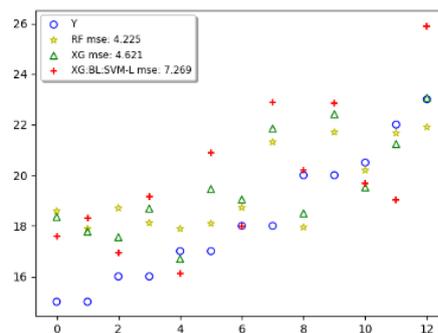
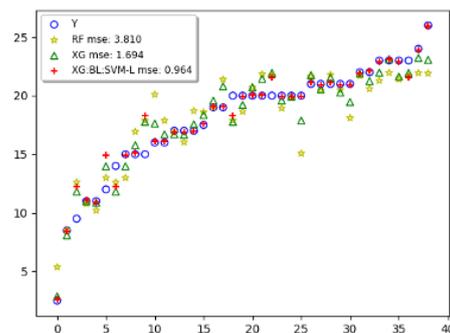


Figura C.53: In Sample x Out of sample - 192-vineyard

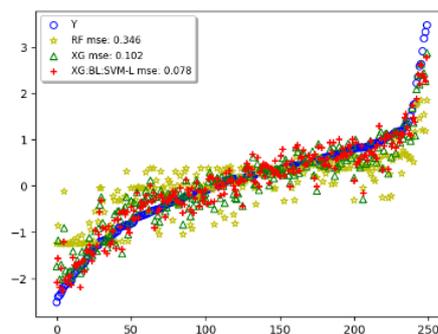
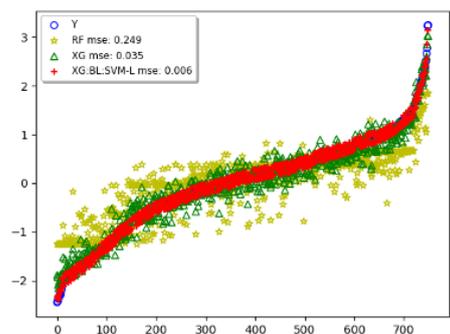


Figura C.54: In Sample x Out of sample - 592-fri-c4-1000-25

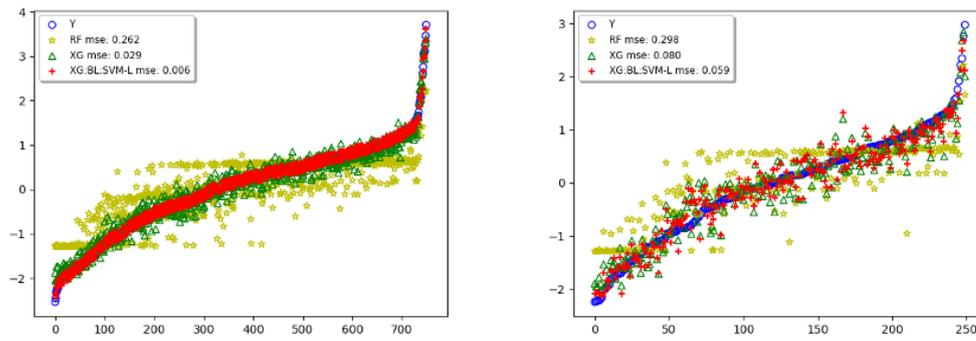


Figura C.55: In Sample x Out of sample - 586-fri-c3-1000-25

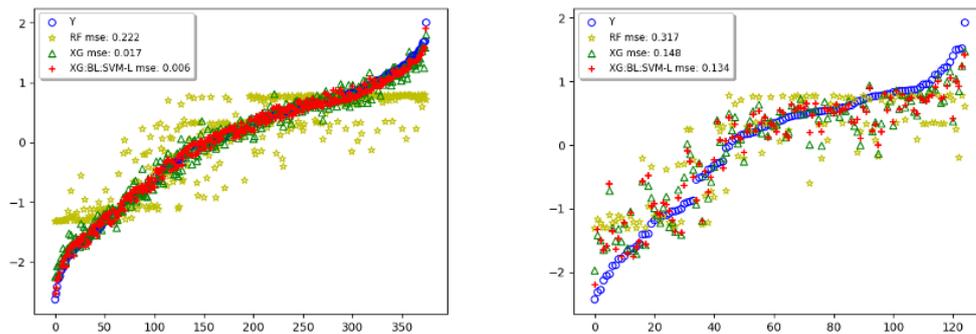


Figura C.56: In Sample x Out of sample - 626-fri-c2-500-50

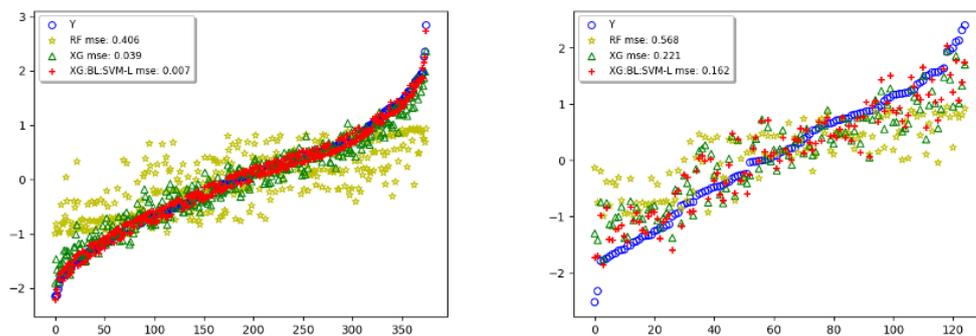


Figura C.57: In Sample x Out of sample - 654-fri-c0-500-10

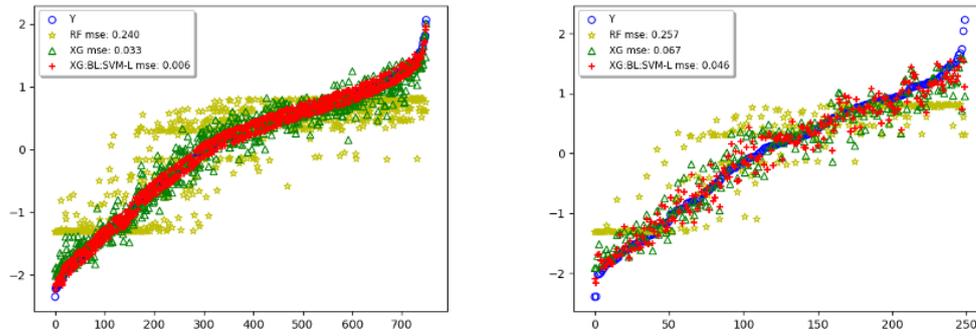


Figura C.58: In Sample x Out of sample - 599-fri-c2-1000-5

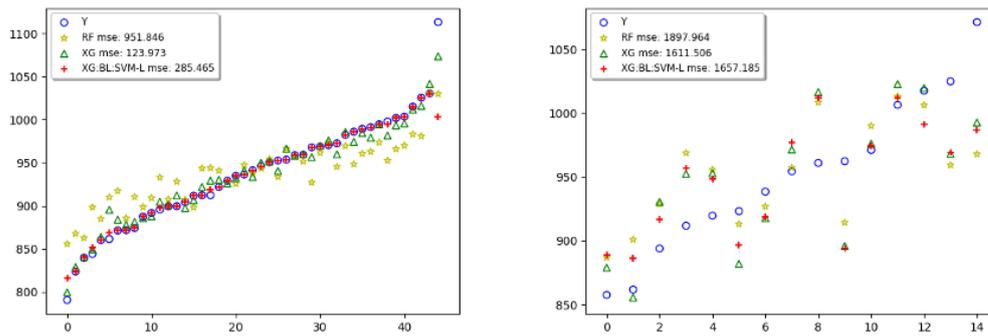


Figura C.59: In Sample x Out of sample - 542-pollution

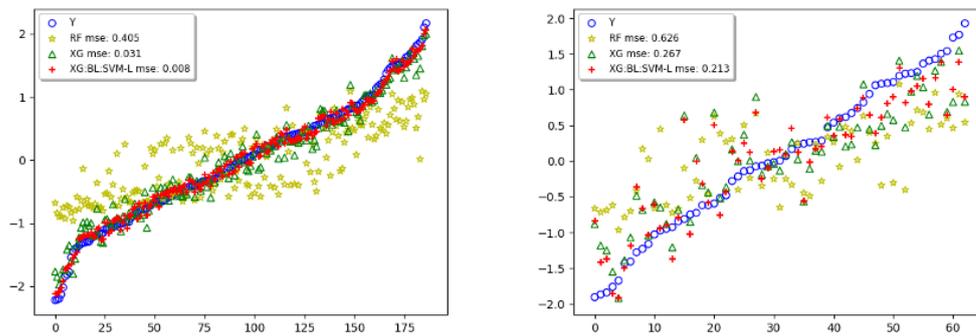


Figura C.60: In Sample x Out of sample - 579-fri-c0-250-5

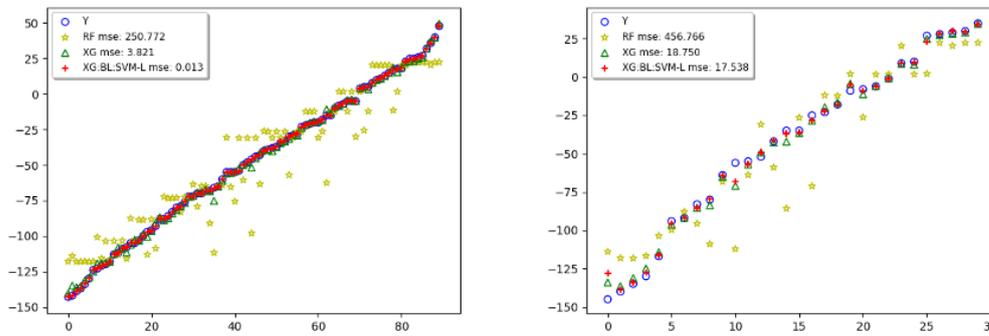


Figura C.61: In Sample x Out of sample - 663-rabe-266

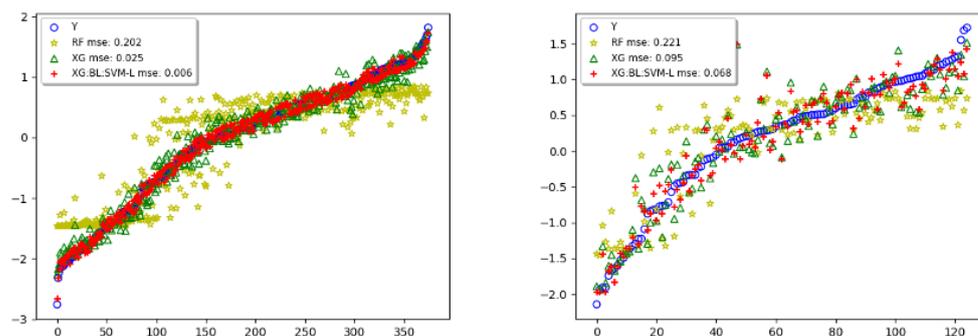


Figura C.62: In Sample x Out of sample - 597-fri-c2-500-5

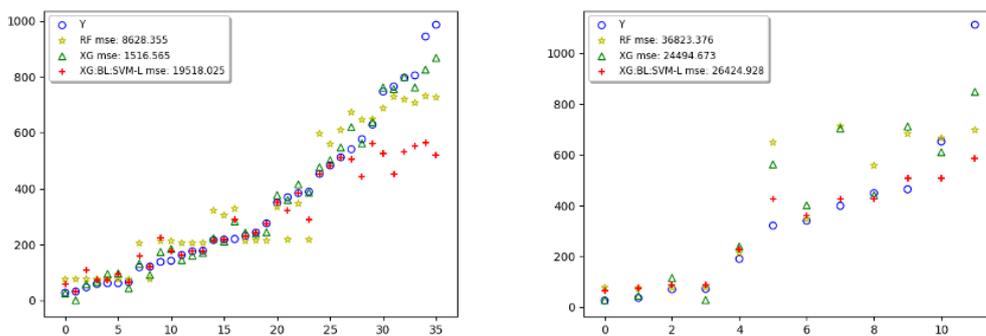


Figura C.63: In Sample x Out of sample - 485-analcatdata-vehicle

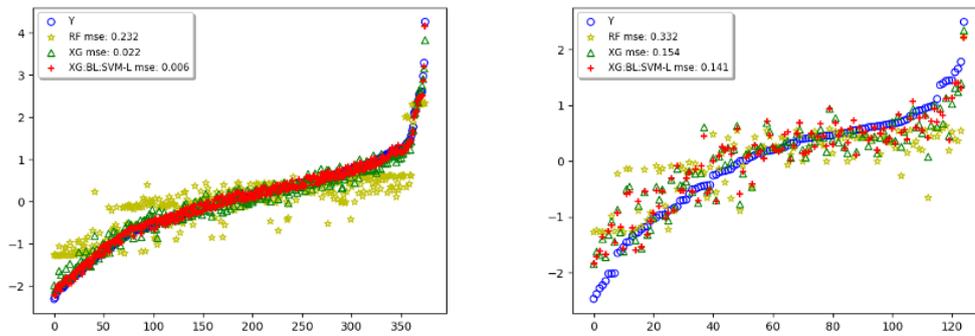


Figura C.64: In Sample x Out of sample - 645-fri-c3-500-50

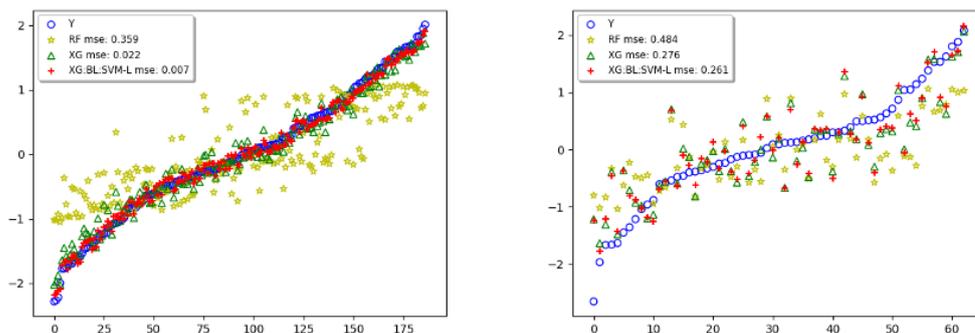


Figura C.65: In Sample x Out of sample - 635-fri-c0-250-10

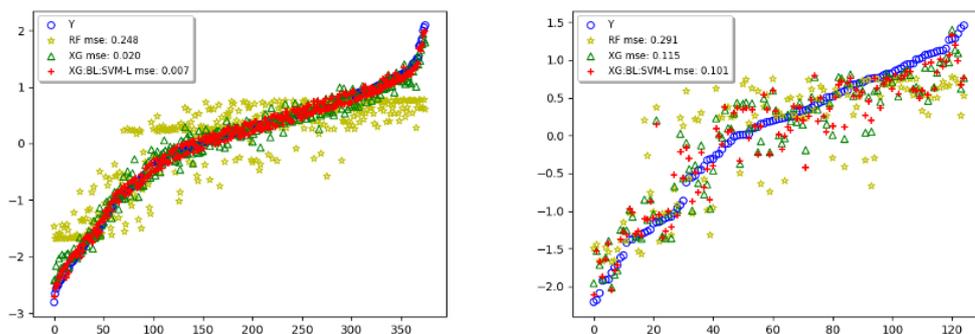


Figura C.66: In Sample x Out of sample - 643-fri-c2-500-25

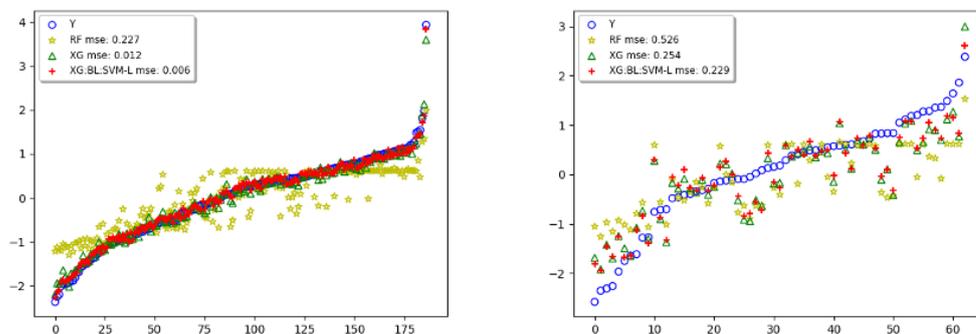


Figura C.67: In Sample x Out of sample - 658-fri-c3-250-25

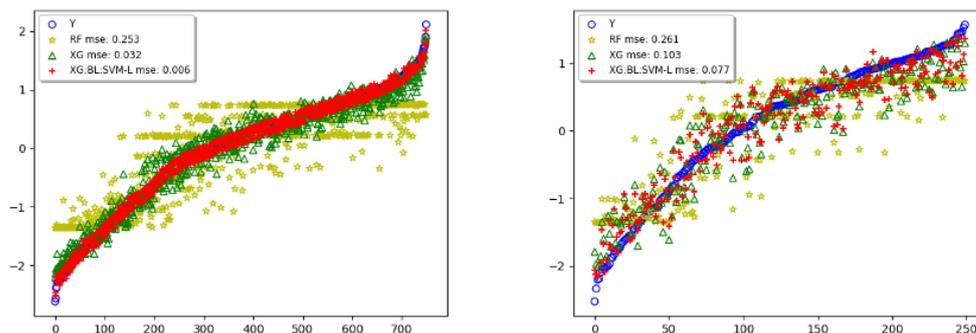


Figura C.68: In Sample x Out of sample - 622-fri-c2-1000-50

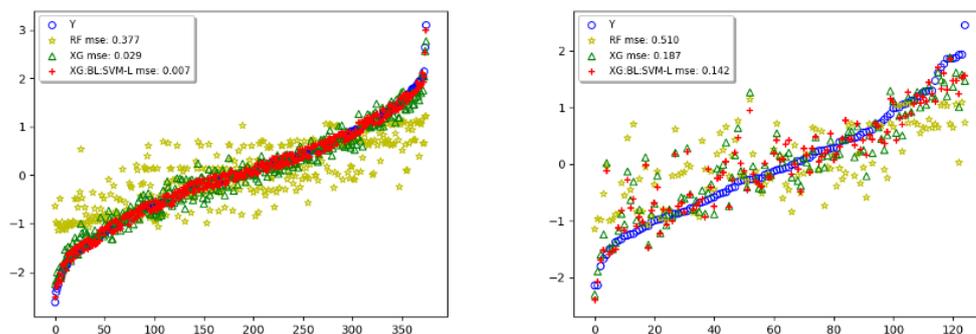


Figura C.69: In Sample x Out of sample - 649-fri-c0-500-5

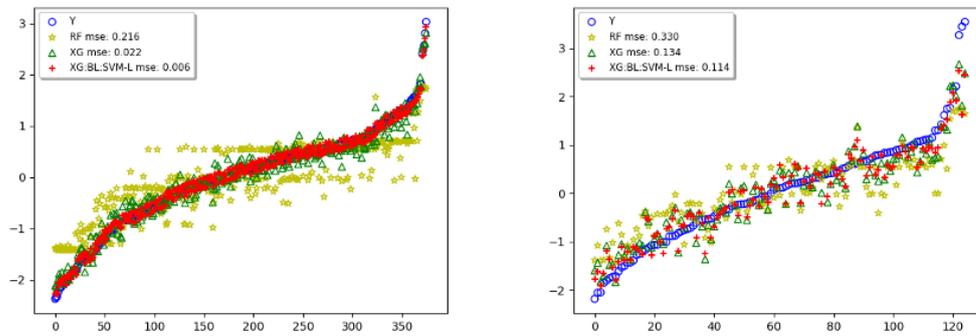


Figura C.70: In Sample x Out of sample - 646-fri-c3-500-10

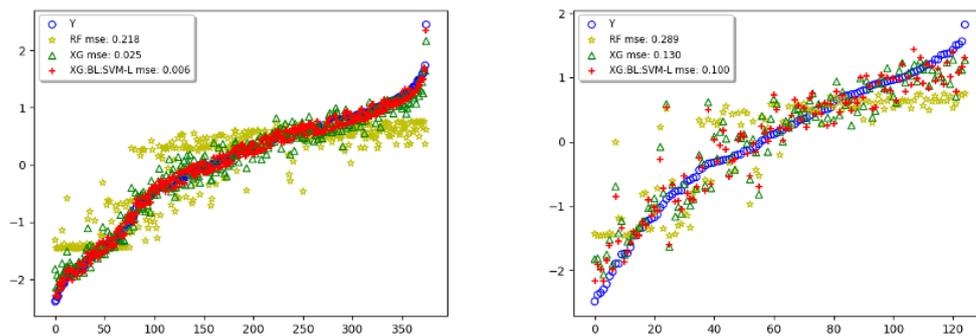


Figura C.71: In Sample x Out of sample - 627-fri-c2-500-10

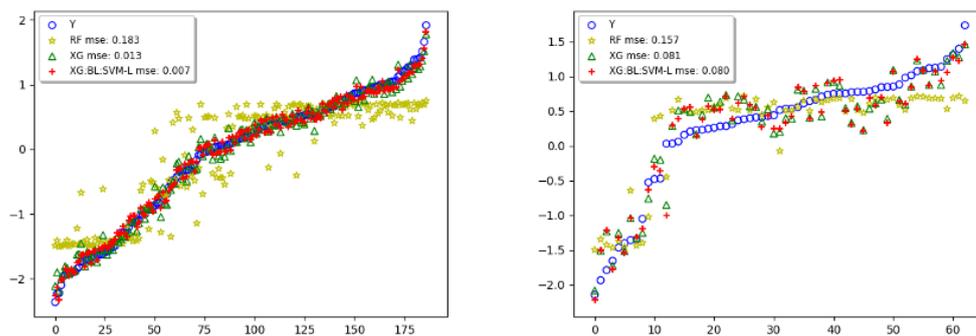


Figura C.72: In Sample x Out of sample - 657-fri-c2-250-10

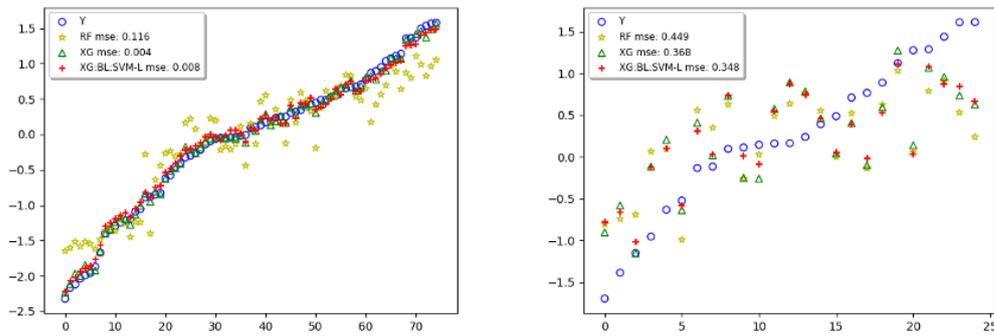


Figura C.73: In Sample x Out of sample - 634-fri-c2-100-10

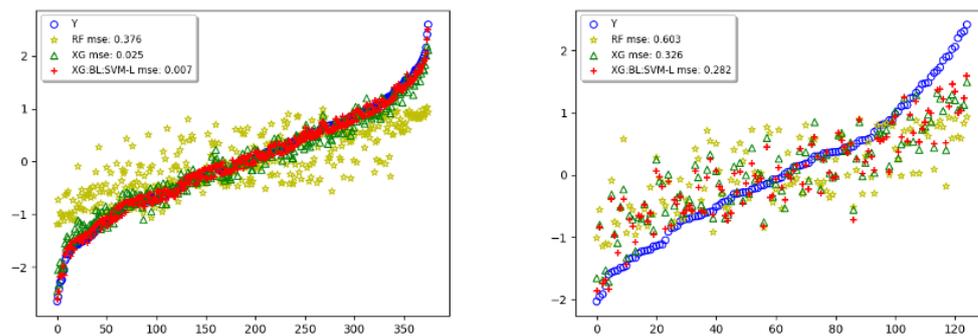


Figura C.74: In Sample x Out of sample - 650-fri-c0-500-50

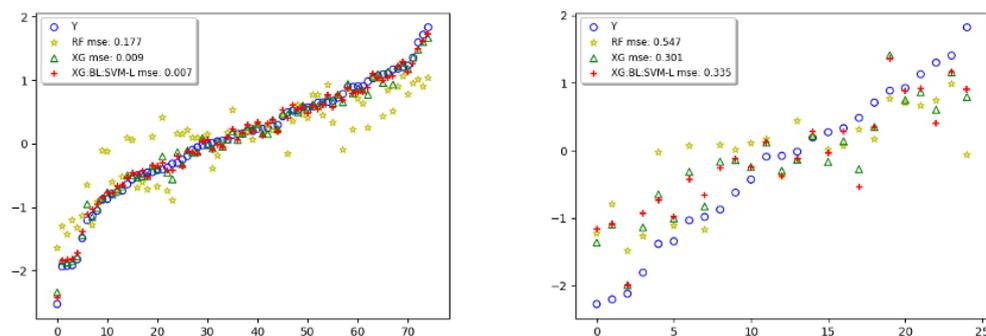


Figura C.75: In Sample x Out of sample - 656-fri-c1-100-5

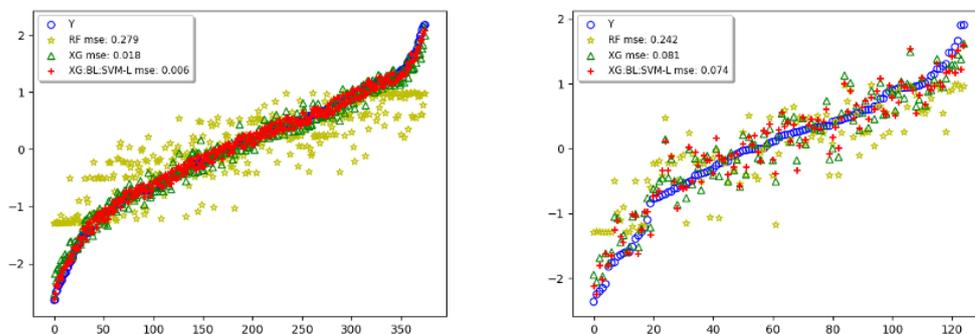


Figura C.76: In Sample x Out of sample - 582-fri-c1-500-25

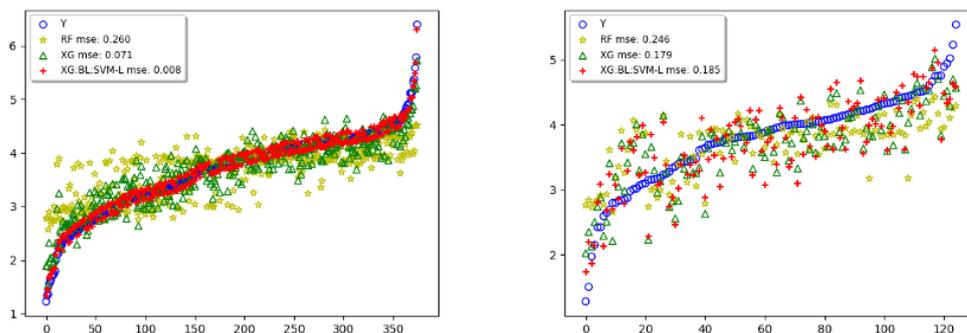


Figura C.77: In Sample x Out of sample - 547-no2

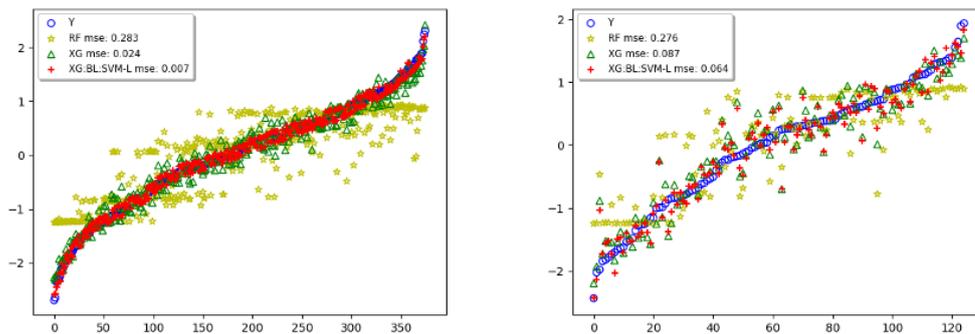


Figura C.78: In Sample x Out of sample - 631-fri-c1-500-5

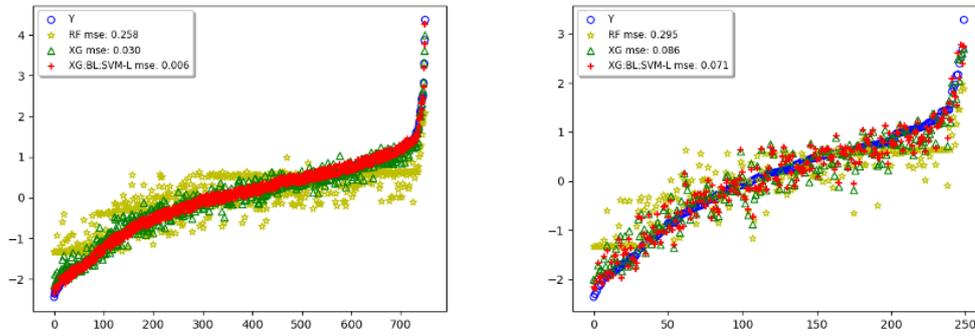


Figura C.79: In Sample x Out of sample - 607-fri-c4-1000-50

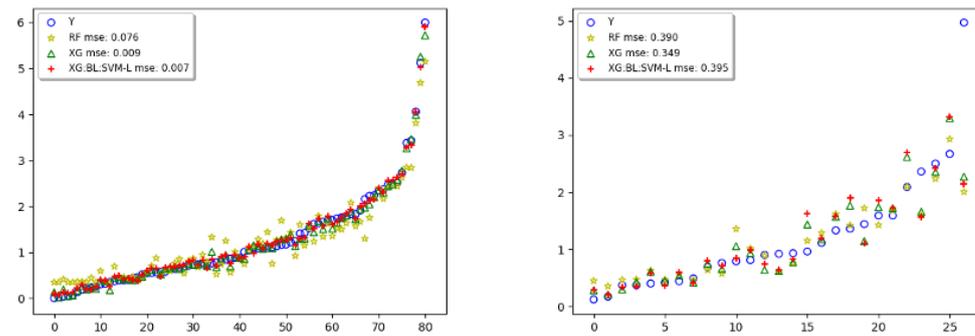


Figura C.80: In Sample x Out of sample - 210-cloud

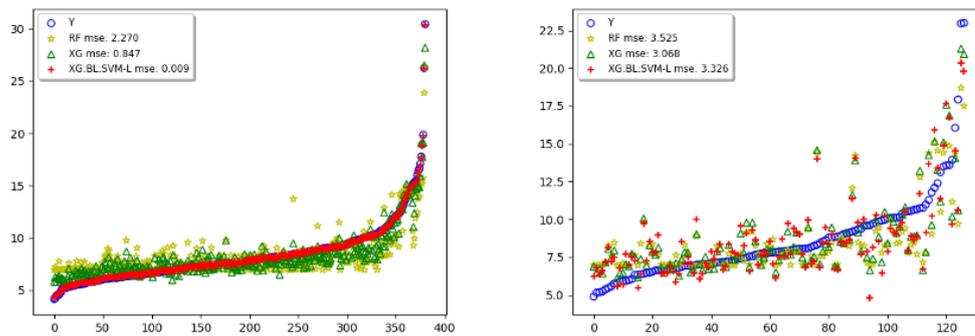


Figura C.81: In Sample x Out of sample - 666-rmftsa-ladata

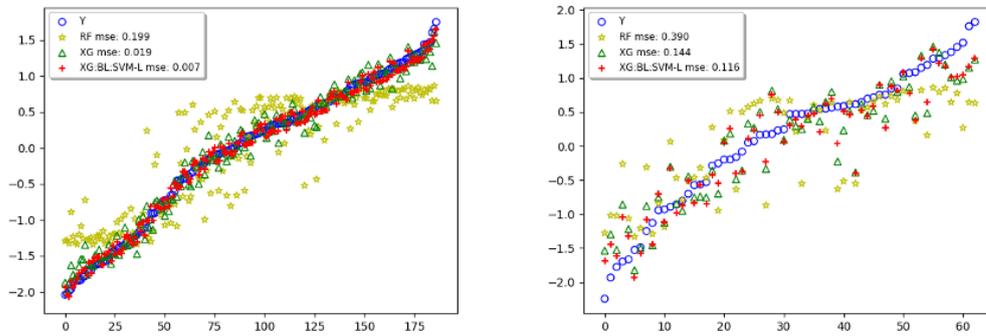


Figura C.82: In Sample x Out of sample - 596-fri-c2-250-5

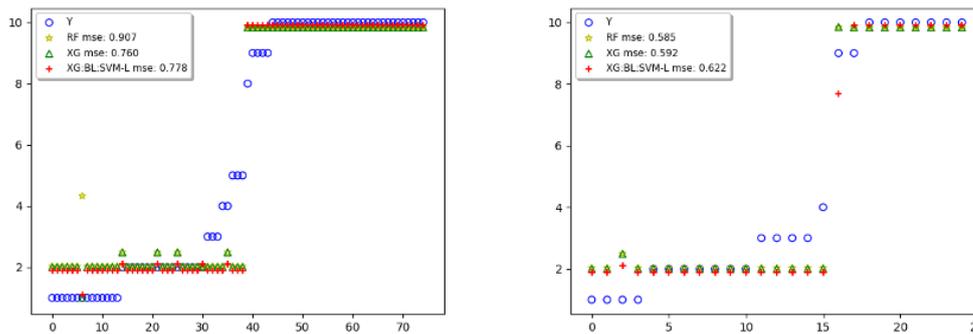


Figura C.83: In Sample x Out of sample - 523-analcatdata-neavote

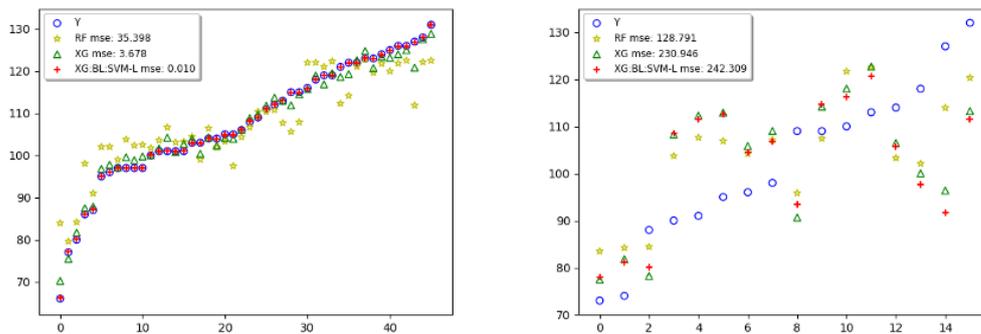


Figura C.84: In Sample x Out of sample - 687-sleuth-ex1605

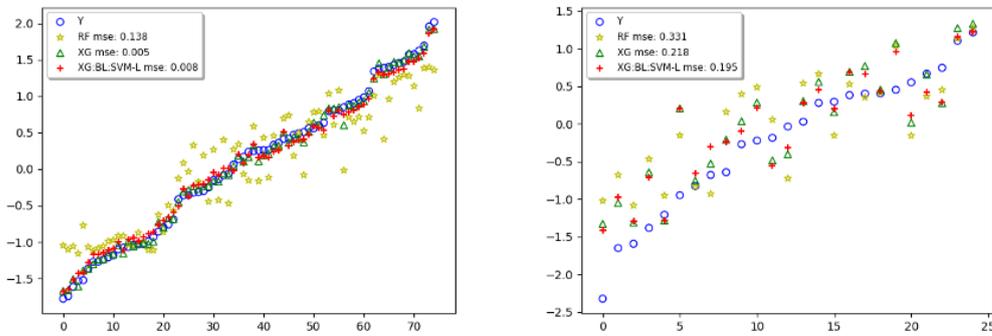


Figura C.85: In Sample x Out of sample - 591-fri-c1-100-10

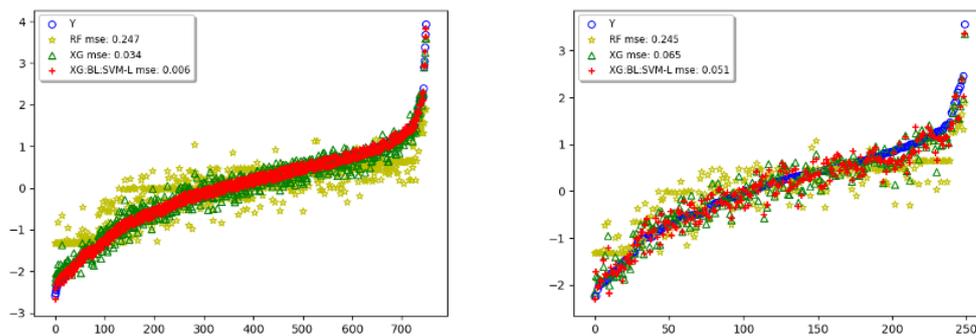


Figura C.86: In Sample x Out of sample - 608-fri-c3-1000-10

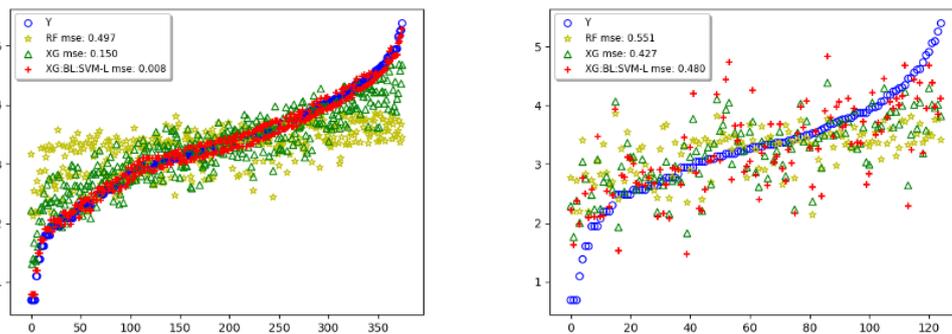


Figura C.87: In Sample x Out of sample - 522-pm10

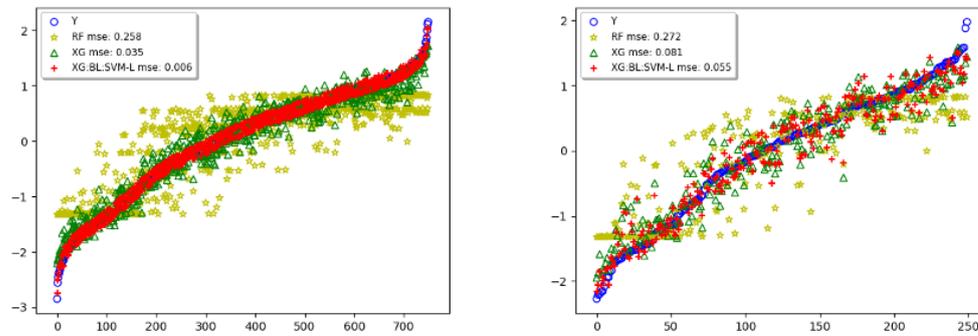


Figura C.88: In Sample x Out of sample - 589-fri-c2-1000-25

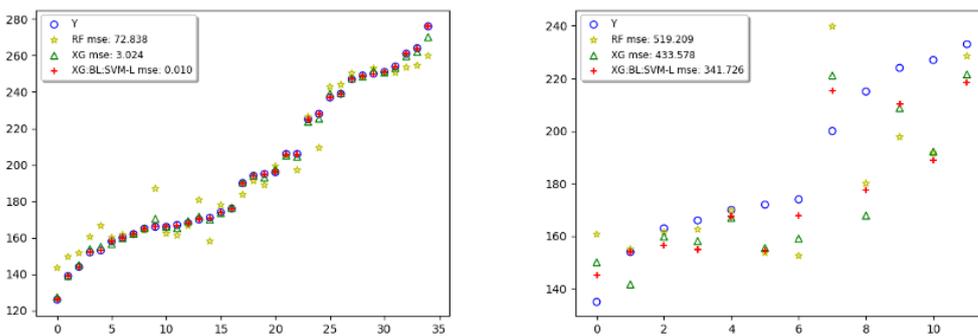


Figura C.89: In Sample x Out of sample - 1089-USCrime

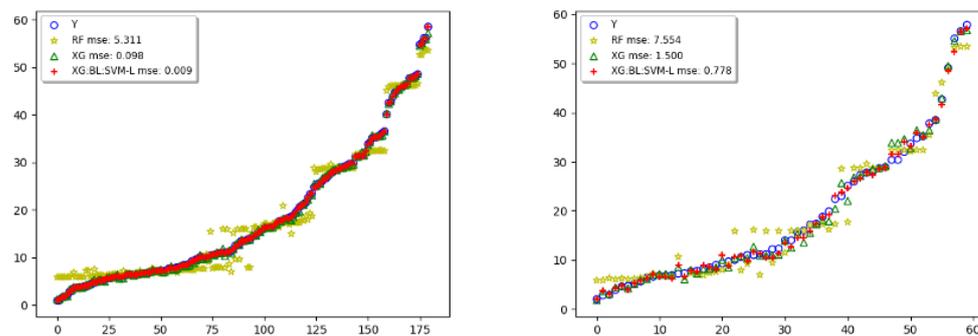


Figura C.90: In Sample x Out of sample - 505-tecator

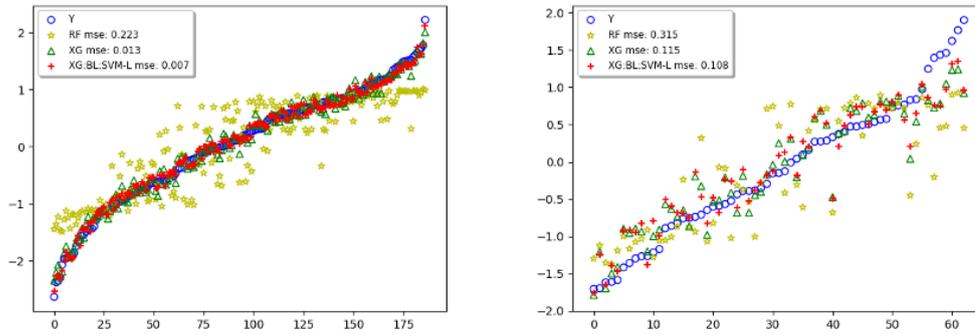


Figura C.91: In Sample x Out of sample - 601-fri-c1-250-5

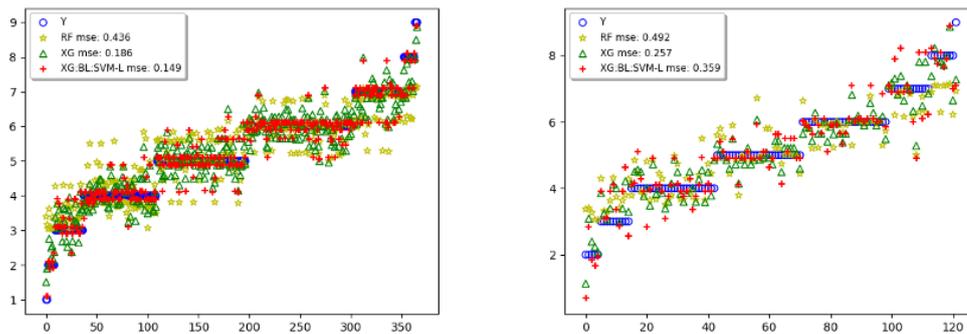


Figura C.92: In Sample x Out of sample - 1027-ESL

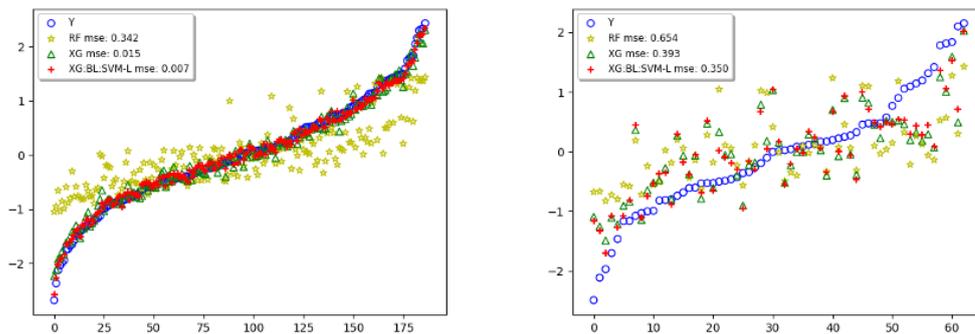


Figura C.93: In Sample x Out of sample - 653-fri-c0-250-25

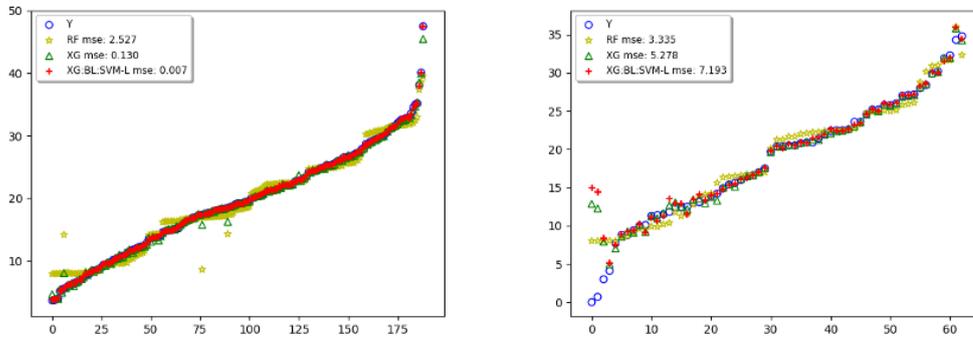


Figura C.94: In Sample x Out of sample - 560-bodyfat

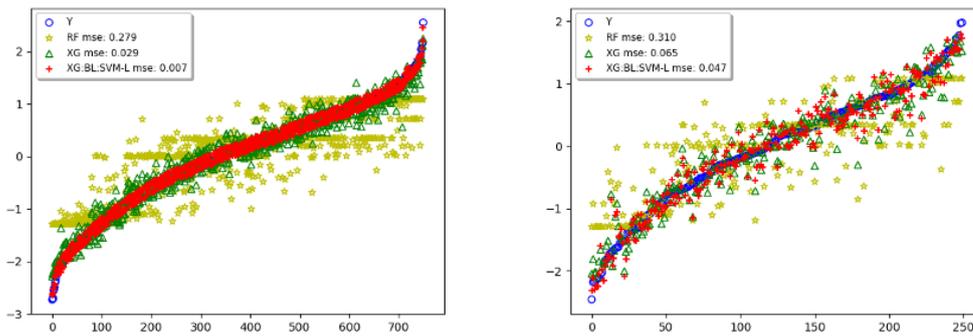


Figura C.95: In Sample x Out of sample - 612-fri-c1-1000-5

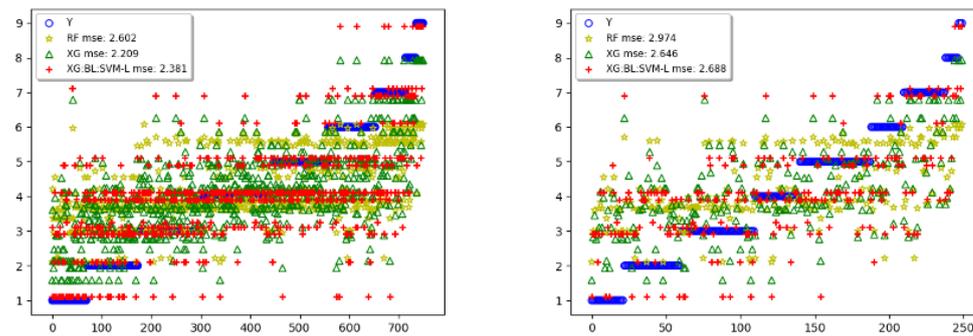


Figura C.96: In Sample x Out of sample - 1030-ERA