

MODELO DE PREDIÇÃO DESENVOLVIDO POR MÁQUINAS DE KERNEL ESPARSO APLICADAS A DADOS MINERALÓGICOS¹

Alessandro Bertolani Oliveira²
Thomas Walter Rauber³

Resumo

Este trabalho tem por objetivo pesquisar a utilização de técnicas da Inteligência Computacional no desenvolvimento de Modelos de Predição no intuito de mensurar suas aplicabilidades em um ambiente industrial. Neste contexto, tais modelos são destinados a inferência de parâmetro de qualidade do produto do processo de Pelotização da Samarco Mineração. Paralelamente, é realizada uma análise comparativa dessas técnicas com a intenção de qualificar os modelos desenvolvidos a partir dos dados mineralógicos de processo. Essas técnicas compreendem a utilização de Máquinas de Kernel Esparsas implementadas pelos algoritmos denominados de Máquina de Vetor de Suporte e Máquina de Vetor de Relevância. A análise comparativa das técnicas é estabelecida por três critérios estatísticos, a saber: Erro estimado por substituição através da raiz do erro quadrático médio (RMS), análise da variância através do coeficiente de determinação (R^2) e a análise residual gráfica dos valores estimados normalizados. Esses critérios se utilizam de decisões heurísticas que são determinadas ao longo do processo de treinamento, validação e teste dos algoritmos de aprendizagem de máquina. Tais decisões consistem em manipular os graus de liberdade dos algoritmos na intenção de alcançar os valores mais otimizados possíveis em relação ao desempenho dos modelos de predição.

Palavras-chave: SVM; RVM; Análise residual.

MODEL PREDICTION DEVELOPED BY SPARSE KERNEL MACHINES APPLIED TO MINERALOGICAL DATA

Abstract

This study aims to investigate the use of Computational Intelligence techniques in the development of prediction models in order to measure their applicability in an industrial environment. In this context, these models are intended to infer product quality parameter of the process of Pelletizing Samarco. In parallel, we provide a comparative analysis of these techniques with the intent to qualify the models developed from the mineralogical data of the process. These techniques include the use of machines Sparse Kernel implemented by algorithms called Support Vector Machine and Relevance Vector Machine. Comparative analysis of the techniques is established by three statistical criteria, namely: Error estimate for replacement through the root mean square error (RMS), analysis of variance through the coefficient of determination (R^2) and residual graphic analysis of the estimated values normalized. These criteria are used in decision heuristics that are determined during the training process, validation and testing of machine learning algorithms. Such decisions are to manipulate the degrees of freedom of the algorithms on the intention to achieve the most optimized possible values of the performance prediction models.

Key words: SVM, RVM; Residual analysis.

¹ Contribuição técnica ao 14º Seminário de Automação de Processos, 6 a 8 de outubro de 2010, Belo Horizonte, MG.

² Mestre em Informática – Samarco Mineração S.A

³ Dr. Sc. em Informática – Universidade Federal do Espírito Santo

1 INTRODUÇÃO

Ao longo dos anos, o setor que cresce significativamente é o industrial. O aumento da população demanda um aumento encadeado nos setores produtivos, principalmente dos produtos industrializados. Com essa visão, o setor industrial tem buscado a melhoria contínua de seus processos e produtos utilizando-se para isso de recursos automatizados.

Neste ambiente automatizado, uma série de variáveis de processos geram sistematicamente uma quantidade significativa de dados e informações. Esse capital deve ser objeto de pesquisa para obtenção de conhecimento pertinente ao domínio do negócio, surgindo assim as técnicas da Inteligência Computacional como ferramentas de investigação.

Diante do exposto, as pessoas responsáveis pela Automação Industrial devem buscar recursos e estruturar um ambiente de pesquisa e desenvolvimento que possa utilizar-se de técnicas da Inteligência Computacional visando à predição das variáveis de processo. Esse ambiente sistêmico englobaria interativamente pesquisas que alinhassem visões do processo do negócio bem como a utilização de mais avançadas técnicas na área de Automação de controle avançado de processo.

2 SOLUÇÕES EM AUTOMAÇÃO PARA MODELOS DE PREDIÇÃO

Segundo Fiske, os trabalhos envolvendo Controle Avançado de Processo (APC) datam da década de 60 e na verdade representavam quaisquer alterações propostas na trilogia – Proporcional-Integral-Derivada (PID) – clássica de controle.⁽¹⁾ Hoje, esses métodos incorporam uma série de técnicas envolvendo supervisão, inferência, multivariáveis, adaptativas, não-lineares e de predição; e ainda, controle *Fuzzy*, sistemas especialistas, redes neurais, estatísticas e modelos robustos; enfim, todos visando otimizações em tempo real.

Categorizando os métodos mencionados por estratégias de controle e níveis de utilização nas indústrias podem descrevê-las como:⁽²⁾

- **CATEGORIA I:** Estratégias de controle convencional
 - Controle manual
 - Controle PID
 - Controle Cascata
- **CATEGORIA II: Controle Avançado:** Estratégias clássicas
 - Compensação de tempo morto (do inglês: *Time Delay Compensation*)
 - Desacoplamento de malhas (do inglês: *Decoupling Control*)
 - Controladores Seletivos (do inglês: *Selective Controllers*)
- **CATEGORIA III:** Controle Avançado: Estratégia com larga aplicação industrial.
 - Controle Preditivo baseado em modelo (do inglês: *Model Predictive Control*)
 - Controle Estatístico de Qualidade (do inglês: *Statistical Quality Control*)
 - Controle Adaptativo (do inglês: *Adaptive Control*)
- **CATEGORIA IV:** Controle Avançado: Técnicas recentes com algumas aplicações industriais.
 - Controle Não-linear (do inglês: *Nonlinear Control*)
 - Controladores baseados em Redes Neurais (do inglês: *Neural Network Controllers*)

- Controle *Fuzzy* (do inglês: *Fuzzy Control*)
- Sistemas Especialistas (do inglês: *Expert Systems*)
- **CATEGORIA V:** Controle Avançado: Estratégias propostas com rara (ou nenhuma) aplicação na indústria.

O objetivo desse trabalho é investigar estratégias que estão classificadas entre as Categorias IV e V supracitadas na obtenção de Modelos de Predição. Esses modelos são sensores inferenciais e perfazem uma etapa anterior ao APC num ambiente de pesquisa e desenvolvimento no contexto da automação industrial.



Figura 1: Incremento de valor com o avanço no controle de processo.

Com isso, as pesquisas de técnicas da Inteligência Computacional alinhadas com técnicas estatísticas tornam-se ferramentas fundamentais neste avançado sistema de controle de processo. Essa evolução dos sistemas de automação é pertinente com a demanda cada vez mais acirrada por produtos competitivos e com qualidade atestada e ratificam os Modelos de Predição com uma das grandes potenciais ferramentas emergentes deste inovador ambiente de monitoramento e controle de plantas industriais.

3 TÉCNICAS DE CONSTRUÇÃO DE MODELOS DE PREDIÇÃO

A idéia de Modelos de Predição é buscar estratégias da Inteligência Computacional que possam resultar justamente em modelos que predizem o comportamento de uma variável de processo por meio de estatísticas. Contudo, essas estratégias formam uma gama de soluções, a ponto de ser categorizadas, conforme citado anteriormente, pelo seu nível de complexidade e aplicabilidade num ambiente industrial real.

Segundo Zhu, um modelo é uma representação dos aspectos essenciais de um sistema (processo), que apresenta conhecimento em uma forma utilizável.⁽³⁾ A

Figura 2 identifica os passos que devem ser adotados na identificação de um modelo.

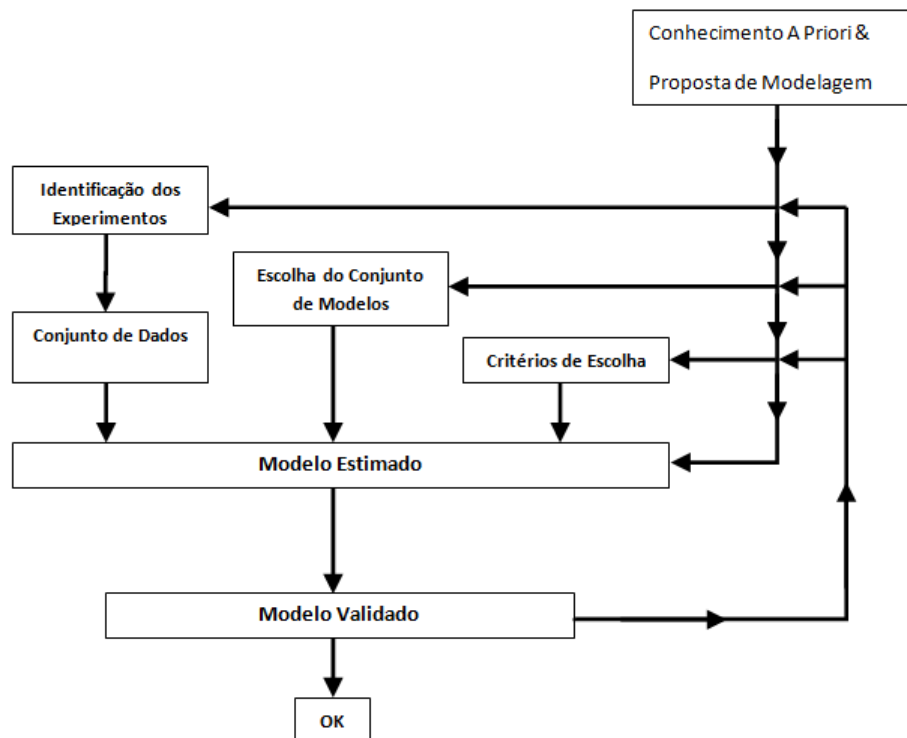


Figura 2: Procedimento de identificação de modelo de predição.

Neste trabalho são adotados os procedimentos de identificação de Modelos de Predição como descritos onde podemos destacar três principais passos a seguir:

- *Formação do Conjunto de Dados:* Consiste na investigação do conhecimento a priori, nas propostas de modelagem, na identificação dos experimentos envolvidos nas variáveis para estabelecer a base de dados utilizada na elaboração dos Modelos de Predição.
- *Escolha do Conjunto de Modelos:* Envolve a pesquisa em relação aos métodos de solução conforme os categorizados anteriormente. Neste ponto de pesquisa, surgem as técnicas da Inteligência Computacional como ferramentas para construção de Modelos de Predição.
- *Critérios de Escolha:* envolve a pesquisa de ferramentas estatísticas que possam analisar o nível de adequação e generalização dos modelos construídos. Neste passo também são estabelecidas uma série de decisões heurísticas pertinentes as pesquisas de caráter empírico.

Desta metodologia, os itens evidenciados serão detalhados nos próximos subtítulos e determinam as principais atividades executadas neste trabalho de pesquisa.

4 O PROCESSO DE PELOTIZAÇÃO E AS VARIÁVEIS DE PROCESSO

Os dados que compõem a base utilizada neste trabalho provêm de um Complexo Industrial de Mineração responsável pela Pelotização do minério de ferro. Esse complexo processo, cujo produto final é a Pelota de minério de ferro foi detalhado por Meyer e é utilizada na Empresa Samarco Mineração S.A – Unidade Ponta Ubu – Anchieta.

Os estágios de processo envolvidos para a produção de pelotas a partir da matéria-prima compreendem:

- 1º Estágio: Preparação da matéria-prima.
- 2º Estágio: Formação das pelotas verdes.
- 3º Estágio: Queima das pelotas verdes.

O resultado final destes estágios, a pelota de minério de ferro é conceituada como sendo “*esferas produzidas a partir do minério de ferro natural e concentrado com diferentes composições químicas e mineralógicas*”.⁽⁴⁾ A Figura 3 ilustra os macros de processo de onde foram extraídas as variáveis utilizadas neste projeto.

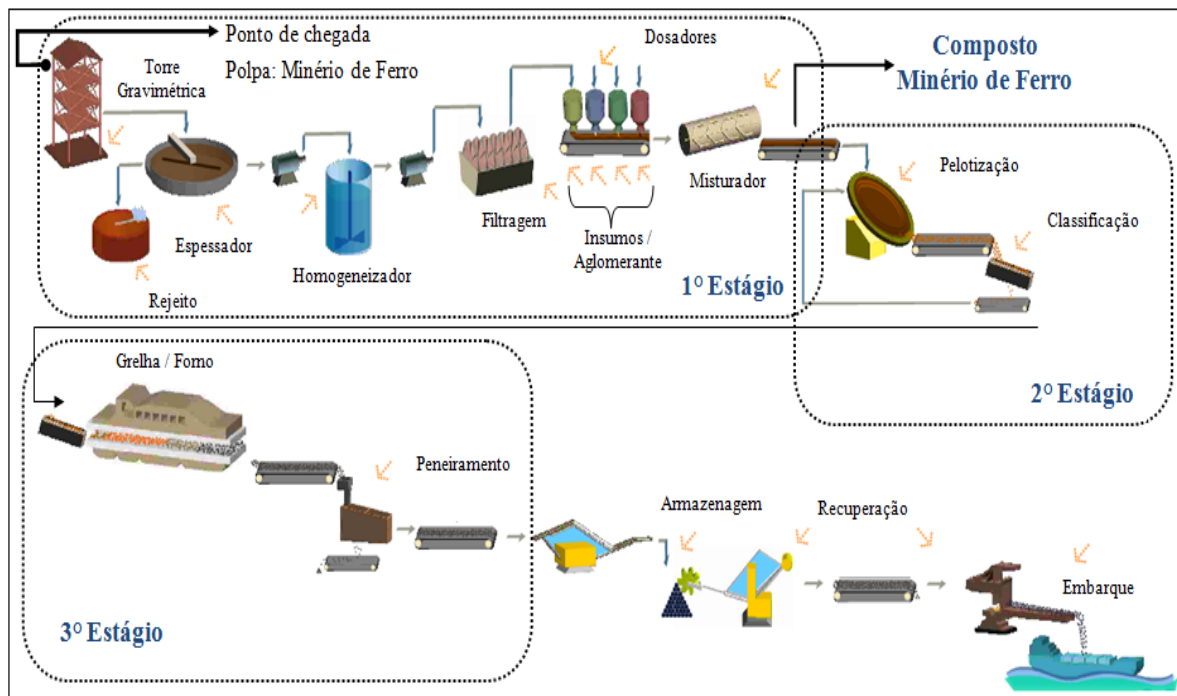


Figura 3: Os estágios do processo de Pelotização.

Os estágios acima mencionados são monitorados e controlados em função de uma série de variáveis de processo. Essas variáveis impactam diretamente em parâmetros de qualidade do produto final; sendo que, um parâmetro em especial atenção dirigida neste trabalho é a *Compressão Mecânica da pelota de minério de ferro a frio*.

Este parâmetro de qualidade é obtido por ensaio de laboratório, conforme norma ISO4700:1996,⁽⁵⁾ ensaio este que resulta numa histerese significativa, decorrente deste teste empírico, entre a análise de seu resultado e possíveis correções nas variáveis de processo em tempo real.

A predição deste parâmetro de qualidade, por estimativa de um modelo estatístico, é justamente o objeto principal deste trabalho. A acurácia deste modelo iria nortear o monitoramento do processo produtivo; sendo que, posteriormente poderiam ser até utilizados no seu controle.

5. A MÁQUINA DE KERNEL ESPARSA

Os conceitos utilizados referentes à Máquina de Kernel Esparsa (*Sparse Kernel Machine*) são extraídos da Teoria da Aprendizagem Computacional (*Computational Learning Theory*).⁽⁶⁾ Segundo Bishop,⁽⁶⁾ essa teoria também denominada de Teoria de Aprendizagem Estatística (*Statistical Learning Theory*) foi inicialmente formulada pela teoria PAC (*Probably Approximately Correct*) na qual a

idéia principal é compreender como um largo conjunto de dados precisa estar ordenado (relacionado) a fim de se obter uma boa generalização.

Neste contexto, existe uma classe de técnicas baseada em Reconhecimento de Padrões em que os pontos de dados treinados ou um subconjunto dos mesmos são mantidos ("Memória") e utilizados na fase de predição; ou seja, fazem parte do próprio Modelo de Predição.

Segundo Bishop,⁽⁶⁾ vários modelos lineares paramétricos (em função dos β) podem ser remodelados em uma análoga representação em que as variáveis independentes X são também baseadas na combinação linear da função *Kernel* evoluída a partir dos pontos de dados treinados.

Com isso, para modelos em que o espaço de características $\phi(X)$ é não-linear, a função de *Kernel* é dada pela relação:

$$\mathcal{K}(X, X') = \phi(X)^T \phi(X')$$

Desta formulação, podemos destacar que o conceito de *Kernel* é uma função simétrica de seus argumentos tal que $\mathcal{K}(X, X') = \mathcal{K}(X', X)$. O objetivo destes Modelos de Predição é explorar algoritmos baseados em *Kernels* não-lineares de forma que predições para as novas amostras dependam somente da função de *Kernel* estabelecida e evoluída a partir do subconjunto dos dados treinados.

Esses algoritmos⁽⁷⁾ baseados em *Kernel* possuem propriedades de soluções "esparsas" (*Sparse*) em decorrência do espaço não-linear de características $\phi(X)$. Uma solução desta em especial é contemplada pela teoria da Máquina de Vetor de Suporte (*Support Vector Machine* – SVM).

Por outro lado, a Máquina de Vetor de Relevância (*Relevance Vector Machine*) para regressão é um modelo de Regressão linear, mas com uma modificação a priori que resulta justamente em soluções "esparsas".⁽⁸⁾ O Modelo de Predição preestabelece uma distribuição condicional dos dados representados pelos valores reais assumidos pela variável dependente t , dada pela equação:

$$p(t|x, w, \beta) = \mathcal{N}(t|y(x), \beta^{-1})$$

Onde:

- a precisão do ruído $\beta = \sigma^{-2}$; sendo este, o inverso da variância;

$$y(x) = \sum_{n=1}^M w_n \phi_n(x) = W^T \phi(x)$$

- o modelo linear
- são funções de base não-lineares: $\phi_n(x)$ que incluem um termo constante "bias" b ;

Complementarmente, a Máquina de Vetor de Relevância ou RVM⁽⁹⁾ é uma técnica Bayesiana de *Kernel* esparso para regressão que herdaram muitas das características da SVM evitando as suas principais limitações.⁽¹⁰⁾ Além disso, possui a propriedade de soluções esparsas, proporcionando um desempenho mais rápido sob uma mesma base de teste e mantendo o poder de generalização dos dados comparável a SVM.

Um exemplo completo mostrado na Figura 4 formula uma comparação direta entre a SVM e a RVM aplicadas a uma mesma base de dados hipotética. Neste exemplo, os principais parâmetros ajustados para ambas as técnicas se tornaram notórias as vantagens obtidas em relação à aplicação otimizada dos vetores de relevância.

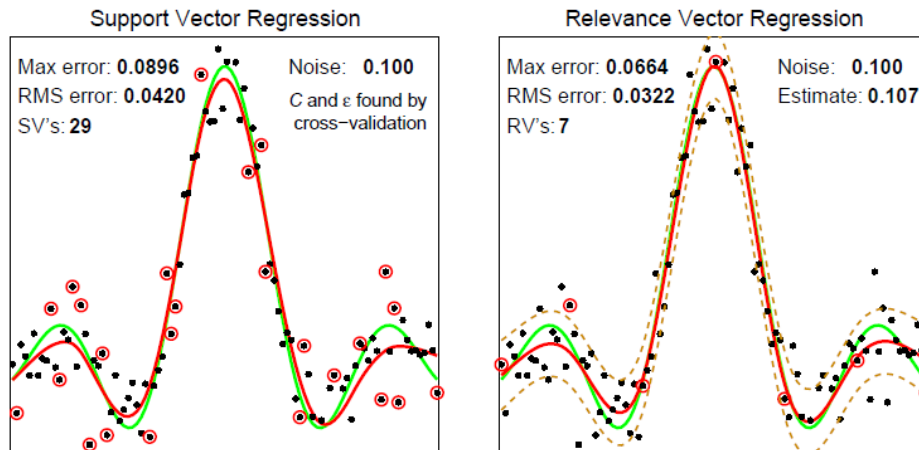


Figura 4: As Máquinas de *Kernel* Esparsos aplicadas a um problema de regressão usando um *Kernel* Gaussiano, o que demonstra algumas das vantagens da técnica Bayesiana.

Com a introdução da técnica e do algoritmo de aprendizagem Bayesiana, a RVM utiliza em seu Modelo de Predição diferenciada ferramenta probabilística não presente nas SVM. Essa característica, reforçando uma das propriedades dos vetores de relevância, torna o modelo uma significativa técnica para resolução de problemas de regressão com conhecimento prévio do domínio do problema; entretanto, envolto em alguns tipos de incertezas em relação principalmente às variáveis (independente e dependente) presentes no processo.

6 CONFIGURAÇÃO DOS EXPERIMENTOS

A base de dados do sistema compreende as variáveis de processo utilizadas em todas as etapas do sistema e na obtenção do Modelo de Predição computacional almejado. As variáveis utilizadas são pertinentes ao monitoramento e controle do parâmetro de qualidade supracitado anteriormente e impactam diretamente nos seus resultados.

A complexidade do processo produtivo resultou nas variáveis descritas conforme distribuição por macro de processo. Os valores das variáveis foram obtidos com uma periodicidade decorrente a cada minuto do processo, ao longo de todo o ano de 2008, o que resultou em aproximadamente sete gigabytes de informação bruta extraída (*Query SQL*) dos bancos de dados do sistema.

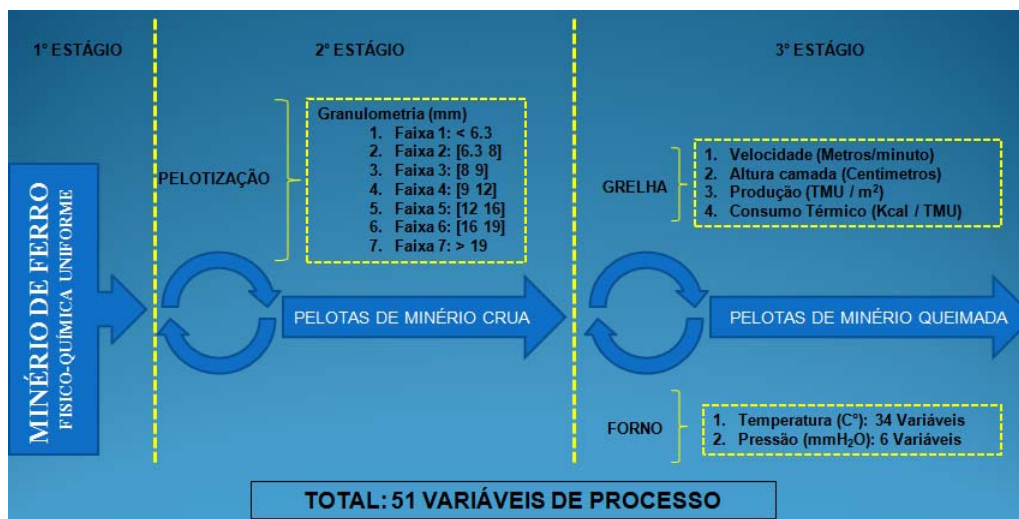


Figura 5: Grupo de variável conceitual extraída por macro de processo.

Contudo, essa informação bruta foi filtrada dos erros decorrentes das etapas de medição, amostragem, armazenamento e consulta nos bancos de dados. Posteriormente, essas características foram reduzidas por decorrência de variáveis colineares resultando em um grupo de 30 variáveis.

Com intuito de aperfeiçoar ainda mais o sistema, foi aplicado um algoritmo de seleção de características (SFS – *Sequential Forward Selection*), com o objetivo de reduzir o número de variáveis (Características) de processo – Dimensionalidade – do sistema e conseqüentemente do Modelo de Predição resultando; enfim, nas bases de dados utilizadas ao longo de todo processo.

Resumidamente, por validação cruzada, as amostras foram dez vezes aleatoriamente redistribuídas nos subconjuntos Treinar, Validar e Testar para as duas bases de dados: a conceitual, com trinta variáveis independentes e a selecionada, com quatro variáveis independentes. Os conjuntos ficam assim distribuídos:

Base conceitual-

- Treinar: [493 amostras por 30 variáveis independentes]
- Validar: [493 amostras por 30 variáveis independentes]
- Testar: [493 amostras por 30 variáveis independentes]

Base selecionada-

- Treinar: [493 amostras por 4 variáveis independentes]
- Validar: [493 amostras por 4 variáveis independentes]
- Testar: [493 amostras por 4 variáveis independentes]

Em todos os casos a variável dependente é única e refere-se ao parâmetro de qualidade do produto que é a compressão mecânica a frio da pelota de minério de ferro detalhada anteriormente.

7 TREINAMENTO, VALIDAÇÃO E TESTES DAS MÁQUINAS DE KERNEL ESPARSAS

A base de dados filtrada e selecionada foi dividida em três subconjuntos denominados como: Treinar, Validar e Testar compondo uma heurística utilizada como meio de verificação e análise de possíveis erros em relação às amostras e ao modelo. O Modelo de Predição e seus possíveis erros foram analisados segundos os critérios, a saber:

- Estimativa de erro: Cálculo da estimativa do erro por substituição por

$$RMS = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (y_i - f(x_i))^2}$$

valores RMS – aplicados aos conjuntos Treinar, Validar e Testar. Lembrando que; os conjuntos Validar e Testar são amostras novas não utilizadas na etapa de treinamento do algoritmo de aprendizagem;

- Adequação do modelo: Esta adequação foi quantificada pelo coeficiente

$$R^2 = \frac{\sum (y_i - \bar{y})^2}{\sum (y_i - \bar{y})^2} = \frac{\text{Variação explicada}}{\text{Variação total}}$$

de determinação:

$$R^2_{\text{Ajustado}} = 1 - \frac{(n-1)}{(n-k-1)} (1 - R^2)$$

. Esse coeficiente determina o quanto o modelo de predição explica da variação do fenômeno em porcentagem da variação total (n : Número de amostras / k : Quantidade de Variáveis de entrada da rede);

- Análise residual: Através da análise gráfica do erro normalizado pelos valores estimado apontam indícios de violações que podem ser cometidas pelo algoritmo.⁽¹¹⁾ As minimizações dessas violações determinam a qualidade do Modelo de Predição desenvolvido pelo algoritmo de aprendizagem de máquina na etapa de treinamento.

Além disso, os parâmetros de ajuste dos algoritmos (grau de liberdade) foram manipulados no intuito de buscar os valores mais otimizados em relação aos três critérios acima mencionados. Os graus de liberdade manipulados possibilitaram determinar características dos Modelos de Predição num mesmo ambiente com dados reais de um processo industrial.

7.1 Resultado Experimental das Técnicas de Regressão

Os Modelos de Predição desenvolvidos pelas Máquinas de Kernel Esparsos apresentaram os seguintes resultados conforme os critérios mencionados:

- os modelos de predição desenvolvidos pela Máquina de Vetores de Suporte (SVM) não apresentaram discrepância de resultados em relação ao erro estimado no que se refere à base conceitual e selecionada; o que não justificaria a utilização do algoritmo de seleção de característica;
- entretanto, em relação ao Critério 2, o coeficiente de determinação para a base selecionada (quatro variáveis), o modelo apresentou resultado mais significativo do que com a base conceitual do problema (trinta variáveis). Tal resultado demonstra a dificuldade da técnica em lidar com o aumento da dimensionalidade;
- os modelos desenvolvidos pela SVM com desempenho mais significativos puderam explicar no máximo 32% da variação do fenômeno;
- os modelos desenvolvidos pela SVM apresentaram extrema heterocedasticidade com a base conceitual e moderada em relação à base selecionada; o que desqualifica os modelos em relação a sua capacidade de predição;
- os baixos resultados dos coeficientes de determinação dos modelos desenvolvidos pela SVM são ratificados pelo range em relação aos valores preditos apresentado nos gráficos da análise residual. Esse range comportou-se dentro de uma faixa de valores mais estreita do que os mesmos critérios

observados nos modelos desenvolvidos pela técnica RVM; o que também, desqualifica sua utilização;

- os modelos de predição desenvolvidos pela RVM apresentaram erro estimado (Critério 1) relativamente baixo com as duas bases de dados (conceitual e selecionada)
- os resultados do coeficiente de determinação para os modelos RVM são mais significativos, atingindo a máxima de 45% de explicação da variação do fenômeno. Esse critério qualifica melhor os modelos desenvolvidos pela Máquina de Vetores Relevantes;
- a faixa dos valores estimados pelos modelos RVM foi próxima dos valores observados empiricamente como universo de discurso da variável dependente; o que também, qualifica os modelos de predição desenvolvidos por esta técnica;
- a análise residual apresentou certa homocedasticidade em relação aos valores estimados o que também qualifica bem os modelos em relação aos da técnica SVM.

Diante de tudo isso, os Modelos de Predição desenvolvidos pela Máquina de Vetores de Relevância, a partir da base de dados conceitual, nas etapas de Treinamento, Validação e Testes confirmam esta técnica como potencial ferramenta nos ambientes de Automação Industrial. Os critérios de qualificação dos Modelos de Predição são também ferramentas fundamentais para serem adotados num ambiente de pesquisa e desenvolvimento Figura 6 na busca da otimização de processos industriais.

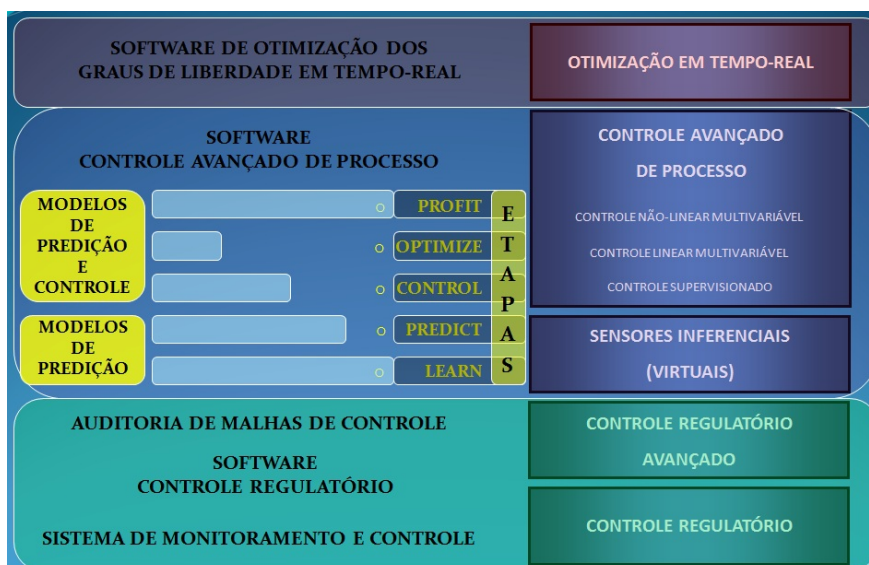


Figura 6: Ambiente de pesquisa e desenvolvimento para elaboração de modelos de predição e controle.

Os resultados apresentados foram analisados e comentados conforme as tabelas e gráficos presentes no Anexo A e B deste trabalho.

REFERÊNCIAS

- 1 FISKE, Tom. *Improving Agility, Performance, and Profitability with MPC: A Decade of Success*. ARC Advisory Group. Dedham, USA. 2006.

- 2 SEBORG, Dale E. *A Perspective on Advanced Strategies for Process Control (Revisited)*. Department of Chemical Engineering, University of California, Santa Barbara. 2000.
- 3 ZHU, Yucui. *Multivariable System Identification for Process Control*. Measurement and Control Group, Department of Electrical Engineering, Eindhoven University of Technology, Netherlands. 2001.
- 4 MEYER, Kurt. *Pelletizing of Iron Ores*. Department of Chemical Engineering. University of Frankfurt. 1980.
- 5 ISO – International Standard: Iron ore pellets – Determination of crushing strength. Reference Number: ISO4700:1996(E).
- 6 BISHOP, Christopher M. *Pattern Recognition and Machine Learning*. Microsoft Research Ltd. Cambridge. U.K. 2007.
- 7 RAKOTOMAMONJY, A. et al. SVM and Kernel Methods Matlab Toolbox. Perception Systèmes et Information, INSA de Rouen, Rouen, France. 2008. Disponível em: <http://asi.insa-rouen.fr/enseignants/~arakotom/toolbox/index.html>. Acesso em: 10 de Agosto de 2009.
- 8 TIPPING, Michael E. *The Relevance Vector Machine*. Microsoft Research Ltd. Cambridge. U.K. 2000.
- 9 BISHOP, C. M. and M. E. TIPPING. *Bayesian regression and classification*. Advances in Learning Theory: Methods, Models and Applications. Amsterdam, 2003.
- 10 TIPPING, Michael E. *Sparse Bayesian learning and the relevance vector machine*. Journal of Machine Learning Research. 2001. Disponível em: <http://www.miketipping.com>. Acesso em: 20 de Maio de 2009.
- 11 HAIR, Joseph F. et al. *Multivariate Data Analysis*. Louisiana State University. 7º edição. 2009.

ANEXO A:

TABELA A-1: Resultado do Modelo de Predição por Máquina de Vetor de Suporte com trinta variáveis independentes

SVM	TREINAR			VALIDAR			TESTAR		
VARIÁVEL: 30									
VALIDAÇÃO CRUZADA	RMS	R ²	R ² _A	RMS	R ²	R ² _A	RMS	R ²	R ² _A
1	39,2312	0,1261	0,0693	40,2187	0,1821	0,1290	39,7646	0,1246	0,0677
2	37,1371	0,0806	0,0208	39,5884	0,0914	0,0324	36,9786	0,0688	0,0084
3	34,7232	0,0206	0,0100	37,7479	0,0350	0,0100	37,0354	0,0076	0,0084
4	37,7268	0,0943	0,0356	37,7941	0,0948	0,0360	38,6024	0,0670	0,0100
5	39,2163	0,1351	0,0790	38,9399	0,1421	0,0864	40,7787	0,1496	0,0064
6	37,7043	0,1072	0,0493	39,6555	0,1144	0,0568	38,5005	0,1072	0,0944
7	36,4287	0,0678	0,0073	38,4551	0,0297	0,0100	36,1017	0,0243	0,0492
8	34,7545	0,0752	0,0152	39,4565	0,0416	0,0100	37,3010	0,0325	0,0100
9	36,3812	0,0505	0,0100	38,3390	0,0171	0,0100	36,0552	0,0568	0,0100
10	37,1487	0,0611	0,0100	37,3160	0,0416	0,0100	36,8647	0,0426	0,0100
MÍNIMO	34,7232	0,0206	0,0073	37,3160	0,0171	0,0100	36,0552	0,0076	0,0064
MÁXIMO	39,2312	0,1351	0,0790	40,2187	0,1821	0,1290	40,7787	0,1496	0,0944
MÉDIA	37,0452	0,0819	0,0307	38,7511	0,0790	0,0391	37,7983	0,0681	0,0275

TABELA A-2: Resultado do Modelo de Predição por Máquina de Vetor de Suporte com quatro variáveis independentes

SVM	TREINAR			VALIDAR			TESTAR		
VARIÁVEL: 4									
VALIDAÇÃO CRUZADA	RMS	R ²	R ² _A	RMS	R ²	R ² _A	RMS	R ²	R ² _A
1	46,5740	0,2806	0,2747	48,3191	0,3260	0,3204	46,7906	0,2841	0,2782
2	42,1527	0,1902	0,1836	43,8331	0,2049	0,1984	40,8027	0,1888	0,1822
3	39,3135	0,1708	0,1640	42,0154	0,1941	0,1875	40,0665	0,1466	0,1396
4	48,7644	0,3135	0,3078	48,3519	0,3197	0,3142	48,2392	0,2952	0,2895
5	44,8515	0,2403	0,2341	43,9533	0,2558	0,2497	45,8941	0,2581	0,2520
6	44,6697	0,2729	0,2669	46,7003	0,2754	0,2695	45,0480	0,2755	0,2696
7	48,0809	0,3198	0,3142	47,5756	0,2797	0,2738	45,2776	0,2927	0,2869
8	36,2563	0,0980	0,0906	40,0730	0,0636	0,0559	37,8583	0,0540	0,0462
9	41,6726	0,2039	0,1973	41,4790	0,1548	0,1479	40,8619	0,2162	0,2098
10	38,7382	0,0960	0,0886	38,0305	0,0840	0,0765	37,4474	0,0826	0,0751
MÍNIMO	36,2563	0,0960	0,0886	38,0305	0,0636	0,0559	37,4474	0,0540	0,0462
MÁXIMO	48,7644	0,3198	0,3142	48,3519	0,3260	0,3204	48,2392	0,2952	0,2895
MÉDIA	43,1074	0,2186	0,2122	44,0331	0,2158	0,2094	42,8286	0,2094	0,2029

TABELA A-3: Resultado do Modelo de Predição por Máquina de Vetor de Relevância com trinta variáveis independentes

RVM	TREINAR			VALIDAR			TESTAR		
VARIÁVEL: 30									
VALIDAÇÃO CRUZADA	RMS	R ²	R ² _A	RMS	R ²	R ² _A	RMS	R ²	R ² _A
1	27,9068	0,4139	0,3759	31,3425	0,3412	0,2984	32,5402	0,3155	0,2710
2	27,6370	0,4035	0,3647	33,9819	0,2443	0,1952	31,7338	0,2780	0,2311
3	28,0092	0,3520	0,3100	33,7411	0,2476	0,1987	32,6025	0,2470	0,1981
4	26,7329	0,4462	0,4103	32,6849	0,2812	0,2346	33,4161	0,2928	0,2469
5	27,2074	0,4409	0,4046	33,3651	0,2664	0,2187	32,1448	0,2946	0,2488
6	26,4928	0,4520	0,4164	31,6040	0,3501	0,3079	32,2094	0,3149	0,2704
7	26,7185	0,4244	0,3871	34,0931	0,2869	0,2406	31,6535	0,3162	0,2718
8	25,6570	0,4127	0,3746	33,4746	0,2917	0,2457	32,9568	0,3100	0,2652
9	27,7701	0,3981	0,3590	32,3155	0,2824	0,2358	30,1608	0,2781	0,2312
10	28,6641	0,3705	0,3297	31,5920	0,2801	0,2334	30,5419	0,3006	0,2552
MÍNIMO	25,6570	0,3520	0,3100	31,3425	0,2443	0,1952	30,1608	0,2470	0,1981
MÁXIMO	28,6641	0,4520	0,4164	34,0931	0,3501	0,3079	33,4161	0,3162	0,2718
MÉDIA	27,2796	0,4114	0,3732	32,8195	0,2872	0,2409	31,9960	0,2948	0,2490

TABELA A-4: Resultado do Modelo de Predição por Máquina de Vetor de Relevância com quatro variáveis independentes

RVM	TREINAR			VALIDAR			TESTAR		
VARIÁVEL: 4									
VALIDAÇÃO CRUZADA	RMS	R ²	R ² _A	RMS	R ²	R ² _A	RMS	R ²	R ² _A
1	35,2293	0,1055	0,0982	34,4048	0,1279	0,1208	35,1142	0,0971	0,0897
2	34,7798	0,0997	0,0923	36,2414	0,1049	0,0976	33,4298	0,1112	0,1039
3	33,7653	0,1033	0,0959	35,6588	0,1000	0,0927	34,7423	0,1013	0,0940
4	35,1377	0,1468	0,1398	34,5781	0,1413	0,1343	33,8636	0,1370	0,1300
5	34,9262	0,1087	0,1014	35,2727	0,1171	0,1098	34,9889	0,1126	0,1054
6	33,8512	0,1389	0,1318	35,9128	0,1315	0,1243	34,6670	0,1398	0,1327
7	33,7298	0,1254	0,1182	36,9204	0,1208	0,1136	34,4512	0,1397	0,1326
8	32,1988	0,1173	0,1101	36,9414	0,1010	0,0936	35,4906	0,1087	0,1014
9	34,0884	0,1321	0,1250	36,0717	0,1161	0,1089	33,6019	0,1262	0,1190
10	35,2363	0,0936	0,0861	34,5964	0,0993	0,0919	34,1908	0,0952	0,0878
MÍNIMO	32,1988	0,0936	0,0861	34,4048	0,0993	0,0919	33,4298	0,0952	0,0878
MÁXIMO	35,2363	0,1468	0,1398	36,9414	0,1413	0,1343	35,4906	0,1398	0,1327
MÉDIA	34,2943	0,1171	0,1099	35,6599	0,1160	0,1088	34,4540	0,1169	0,1097

ANEXO B: ANÁLISE RESIDUAL

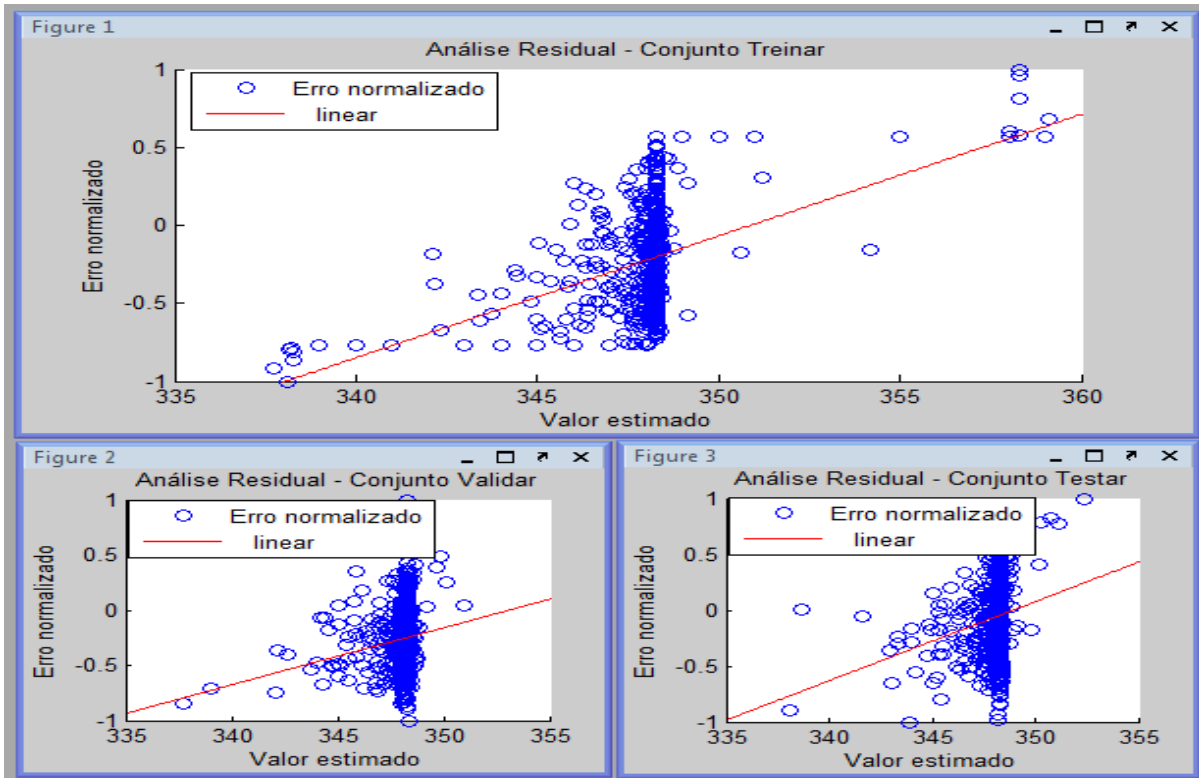


Figura B-1 - Análise Residual para Máquina de Vetores de Suporte com trinta variáveis

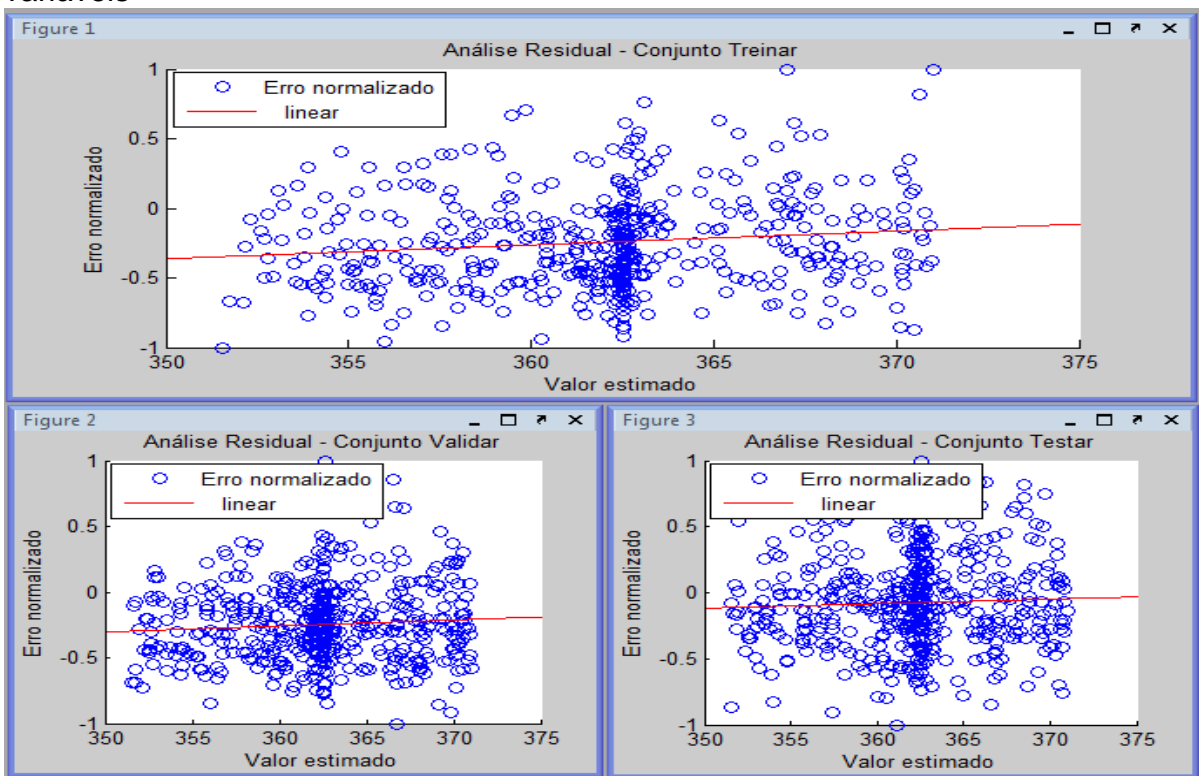


Figura B-2 - Análise Residual para Máquina de Vetores de Suporte com quatro variáveis

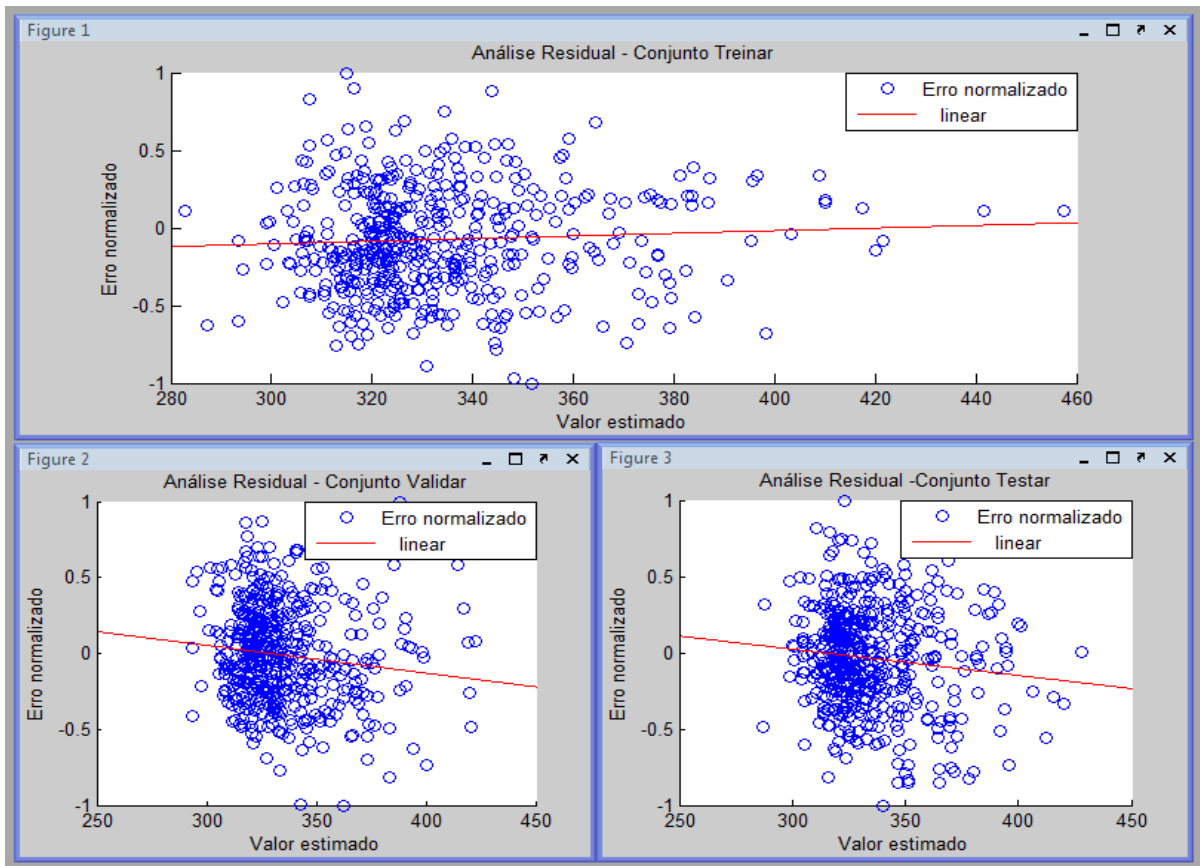


Figura B-3 - Análise Residual para Máquina de Vetores Relevância com trinta variáveis

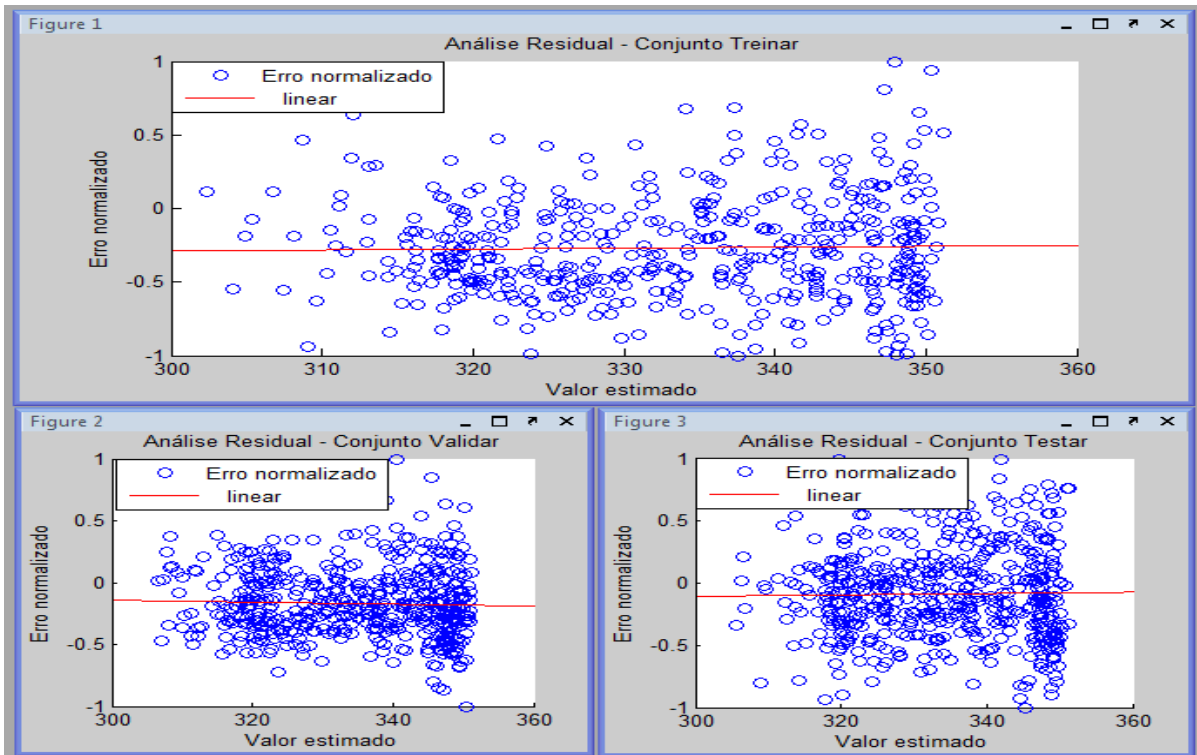


Figura B-4 - Análise Residual para Máquina de Vetores Relevância com quatro variáveis.